



Universidad de Valladolid

Escuela de Ingenierías Industriales
Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica
PROGRAMA DE DOCTORADO EN INGENIERÍA INDUSTRIAL

TESIS DOCTORAL

ESTUDIO EXPERIMENTAL Y MODELADO CFD DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN DE MEZCLAS COMBUSTIBLES DE HIDRÓGENO, METANO Y GAS DE SÍNTESIS EN UNA BOMBA CILÍNDRICA CON ACCESO ÓPTICO

Presentada por: **Alexandra Lisbeth Camaño Camaño** para optar
al grado de
Doctora por la Universidad de Valladolid

Dirigida por:
Dra. Miriam Reyes Serrano
Dr. Francisco V. Tinaut Fluixá

Valladolid, 2021

Estudio experimental y modelado CFD del proceso de combustión de mezclas combustibles de hidrógeno, metano y gas de síntesis en una bomba cilíndrica con acceso óptico

© *Alexandra Lisbeth Camaño Camaño, 2021*

Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica

Escuela de Ingenierías Industriales

Universidad de Valladolid

47011. Valladolid (España)

TESIS DOCTORAL

Estudio experimental y modelado CFD del proceso de combustión de mezclas combustibles de hidrógeno, metano y gas de síntesis en una bomba de combustión cilíndrica con acceso óptico

Presentada por:

Alexandra Lisbeth Camaño Camaño

Dirigida por:

Dra. Miriam Reyes Serrano
Dr. Francisco V. Tinaut Fluixá

TRIBUNAL CALIFICADOR

Presidente:

Secretario:

Vocales:

Suplentes:

Valladolid, 2021

RESUMEN

La presente tesis doctoral se enmarca en la investigación sobre fuentes de energías alternativas, que permitan hacer del mundo de la combustión un entorno más eficiente y amigable con el medio ambiente. El trabajo se ha desarrollado en el Grupo de Investigación *Reconocido Motores y Energías Renovables* de la Universidad de Valladolid. Tiene como objetivo la caracterización de combustibles gaseosos alternativos (metano, hidrógeno, monóxido de carbono y sus mezclas) en una bomba de combustión cilíndrica a volumen constante. Esta bomba cuenta con ventanas de cristal de cuarzo en sus bases, lo que permite registrar imágenes del frente de llama mediante una cámara de alta velocidad, al mismo tiempo que se registra la evolución de la presión.

El estudio del proceso de combustión y en particular la obtención de las velocidades de combustión se puede realizar mediante dos métodos: análisis de la presión registrada por medio de un modelo de dos zonas, y a partir de las imágenes grabadas con la metodología Schlieren, usando un procedimiento automatizado. En paralelo a ello, se han realizado simulaciones CFD que predicen el crecimiento del frente de llama, para tener información adicional a la obtenida en los experimentos. Además, se ha desarrollado una metodología que permite caracterizar el frente de llama, incluyendo la deformación de éste debida al efecto de la geometría cilíndrica de la bomba. Con ello, se posibilita estudiar cómo influye esta deformación del frente sobre el cálculo de la velocidad de combustión y otros parámetros importantes de proceso de combustión.

Los experimentos consisten en la combustión en aire de mezclas H_2-CH_4 e H_2-CO (syngas). Para las mezclas H_2-CH_4 , se ha variado el contenido de H_2 en la mezcla de 0, 20, 50, 80 y 100%, partiendo de condiciones iniciales de presión de 0.1 MPa y temperatura de 300 K, para dosados 0.5, 0.6, 0.7, 0.8 0.9 y 1.0. Para las mezclas hidrógeno-aire con 100% H_2 , se mantuvieron los mismo dosados, pero se realizó también un estudio del efecto de la presión y temperatura iniciales para el dosado 0.7, con presiones iniciales de 0.1, 0.2 y 0.3 MPa, y temperaturas iniciales de 315 y 373 K. Para las mezclas H_2-CO , se realizaron experimentos para ver la influencia del contenido de H_2 en la mezcla con proporciones de 0, 6.7, 25, 50, 80 y 100% H_2 , con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 300K y un barrido de dosados entre 0.5 y 1.0.

De los resultados obtenidos para las mezclas H_2-CH_4 , se constata que, por debajo del 50% de H_2 , la velocidad de combustión laminar se incrementa linealmente respecto a la del metano con el incremento del contenido de H_2 . Sin embargo, para cada dosado la velocidad de combustión laminar aumenta muy fuertemente cuando se supera un contenido de H_2 en la mezcla del orden del 80%. Además, del análisis de las imágenes Schlieren obtenidas, se puede ver que el incremento de hidrógeno en la mezcla favorece el crecimiento de inestabilidades, dando lugar a una llama celular, en concordancia con lo publicado en otros estudios sobre crecimiento de inestabilidades de combustión.

Al igual que las mezclas anteriores, en las mezclas de H_2-CO , se obtuvieron valores de velocidad de combustión laminar que aumentan linealmente con el contenido de hidrógeno y el aumento del dosado. En cuanto al análisis de las imágenes Schlieren, se obtuvo que el incremento del contenido de hidrógeno tiene un efecto desestabilizador en la llama, causando celularidad en la superficie del frente de llama.

Los resultados obtenidos de la velocidad de combustión mediante el método de aumento de presión, para las mezclas de 100% H_2 , 100% CH_4 y las mezclas de H_2-CO , se han comparado con los obtenidos en estudios previos en una bomba esférica, existente en el Laboratorio de Motores. Adicionalmente, se han realizaron comparativas entre las velocidades obtenidas mediante ambos métodos y con otros autores citados en la bibliografía, para validar los resultados obtenidos.

En cuanto a la simulación CFD, es una primera aproximación en ese campo dentro de los trabajos del Grupo de Investigación, cuyo resultado más importante es constatar la deformación del frente de llama, apartándose de la geometría esférica. A partir de un radio del frente de aproximadamente el 60% del radio de la bomba cilíndrica, se pierde la simetría esférica, con crecimiento diferente en las direcciones principales de la bomba cilíndrica (radial y axial). El algoritmo desarrollado permite seguir la evolución de la geometría del frente de llama calculado mediante la simulación CFD, asimilándolo a un pseudoelipsoide de revolución.

Una aportación relevante de la tesis es el cálculo de parámetros teóricos importantes para el estudio de las inestabilidades hidrodinámicas y termodifusivas como lo son: la longitud de Markstein, número de Markstein, número de Lewis, número de Peclet, número de Zel'dovich, y las tasas de crecimiento de inestabilidades.

ABSTRACT

This doctoral thesis is part of the research on alternative energy sources, which allow to make the world of combustion a more efficient and environmentally friendly environment. The work has been carried out in the Research Group Engines and Renewable Energy at the University of Valladolid. The objective is to characterize alternative gaseous fuels (methane, hydrogen, carbon monoxide and their mixtures) in a constant volume cylindrical combustion bomb. This bomb has quartz glass windows in its bases, which allows recording images of the flame front by a high-speed camera, at the same time as the pressure evolution is recorded.

The study of the combustion process and in particular the obtaining of the laminar burning velocity can be carried out by two methods: analysis of the pressure recorded by means of a two-zone diagnostic model, and from the images recorded with the Schlieren methodology, using an automated procedure. In parallel to this, CFD simulations have been carried out that allow predicting the development of the combustion process, to have additional information to that obtained in the experiments. In addition, a new methodology has been developed that allows characterizing the flame front, including its deformation due to the effect of the cylindrical geometry of the bomb. In this way, it is possible to study how this deformation of the flame influences the calculation of the laminar burning velocity and other important parameters of the combustion process.

The experiments consist of in-air combustion of H_2-CH_4 and H_2-CO mixtures (syngas). For the H_2-CH_4 mixtures, experiments are carried out varying the H_2 content in the mixture from 0, 20, 50, 80 and 100% with initial conditions of pressure of 0.1 MPa and temperature of 300 K, for equivalence ratios 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 and 1.0. For the 100% H_2 mixtures, a study was also carried out on the effect of the initial pressure and temperature and experiments were carried out with initial pressures of 0.1, 0.2 and 0.3 MPa and initial temperatures of 315 and 373 K for an equivalence ratio of 0.7. For H_2-CO mixtures, experiments were carried out to see the influence of the H_2 content in the mixture with proportions of 0, 6.7, 25, 50, 80 and 100% H_2 , with initial conditions of 0.1 MPa, 300K and an equivalence ratio sweep of 0.5 and 1.0.

From the results obtained for the H_2-CH_4 mixtures, it can be seen that, below 50% of H_2 , the laminar burning velocity increases linearly with respect to that of methane with the

increase in H₂ content. However, for each equivalence ratio the laminar combustion velocity increases very strongly when an H₂ content of the order of 80% is passed. In addition, from the analysis of the Schlieren images obtained, it can be seen that the increase of hydrogen in the mixture favors the growth of instabilities, resulting in a cellular flame, in accordance with what is published in other studies on growth of combustion instability.

As in the previous mixtures, in the H₂-CO mixtures, the laminar burning velocity values increase linearly with the hydrogen content and the increase of equivalence ratio. Regarding the analysis of the Schlieren images, it was obtained that the increase of hydrogen contents has a destabilizing effect on the flame, causing cellularity on the surface of the flame front.

The results obtained from the laminar burning velocity by means of the pressure increase method, for the mixtures of 100% H₂, 100% CH₄ and the H₂-CO mixtures, were first compared with those obtained in previous studies in a spherical bomb existing in the Engine Laboratory. Additionally, comparisons were made between the velocities obtained by both methods and with other authors cited in the bibliography, to validate the results obtained.

As for the CFD simulation, it is a first approximation in that field within the work of the research group, whose most important result is to verify the deformation of the flame front, moving away from the spherical geometry. From a radius of the front of approximately 60% of the radius of the cylindrical pump, the spherical symmetry is lost, with different growth in the main directions of the cylindrical pump (radial and axial). The developed algorithm allows to follow the evolution of the flame front geometry calculated by the CFD simulation, assimilating it to a revolution pseudoelipsoid.

A relevant contribution of the thesis is the calculation of important theoretical parameters for the study of hydrodynamic and thermodifusive instabilities, such as: Markstein length, Markstein number, Lewis number, Peclet number, Zel'dovich number, and the rates of growth of instabilities.

AGRADECIMIENTOS

Quiero empezar estas líneas agradeciendo primeramente a **Dios** por permitirme la oportunidad de viajar a este país y realizar un grado de estudio superior. A mi familia, por ser ese pilar que siempre está para apoyarme en cada paso de mi vida, tanto en lo profesional como en lo personal. Hoy podemos decir juntos que “lo logramos”.

A mi **madre Angélica**, quien me ha echado de menos cada día fuera de casa, gracias por ser mi mejor fan. A mi hermana/madre **Xiomara**, no existen palabras que puedan expresar lo agradecida que estoy, por estar como bien decimos “pa’ las que sean” para mí, por siempre darme alas y ayudarme a volar y gracias por darme a mi princesa Nayza.

A mis amigos **Katherine, Jorge y Ana Emilia**, por siempre estar presente, por hacer que la distancia que nos separa, casi ni se sienta. Por sostenerme en esos momentos cuando sentía que no podía más.

A mis tutores, **profesora Miriam**, un gracias enorme, por todos los consejos y motivación siempre. **Profesor Tinaut**, mi eterna gratitud por ayudarme y orientarme desde el primer momento que empecé este camino de viajar a España por estudios superiores. Gracias por estar anuentes a cada consulta y duda que tenía (que siempre fueron muchas) a lo largo del desarrollo de la tesis. A ambos gracias, por preocuparse por mi bienestar fuera del entorno de la universidad. Sus consejos, forma de pensar y rigor son algo que me llevo de esta época que me servirán de ejemplo para mi vida laboral.

Al **profesor Andrés Melgar**, gracias por su ayuda con el desarrollo y mejora de los programas de modelo diagnóstico y del algoritmo de seguimiento de frente de llama, por todas esas horas de búsqueda de los errores que no permitían que el programa se ejecutara. A la **profesora Blanca**, por sus consejos tan atinados.

A mis compañeros de laboratorio **Eva, Jorge, Alejandro, Mario, John Jairo y Nicolás** gracias por todos los momentos compartidos haciendo experimentos, siempre con el temor de que explotara el cristal de la bomba, por esos cafés de ejecutivos por los que íbamos siempre y las risas que aliviaban cualquier mal rato con los experimentos.

A mi **familia adoptiva** de este lado del mundo, como les digo yo, gracias por hacerme una más de la casa, **mamá Euni**, gracias por todos los tupperes que me quitaban de encima el tener que cocinar. **Natalia**, gracias por ser esa hermana que me puso la vida en el camino. Gracias por hacerme sentir que de este lado del mundo siempre tendré un lugar donde llegar.

A mis mejores amigos **José, Joselyn y Silvia** por todos los momentos compartidos durante esas largas caminatas de senderismo y noches de desconexión total en la mitad de la montaña lejos del ruido de la ciudad. **Giovanna**, mi eterna compañera de gym y estilista personal, amiga gracias por todo. **Adrián**, cariño, gracias por toda la paciencia que has tenido en estos últimos meses, por estar pendiente de ayudarme en todo momento. A mi **compi de piso Sofía**, gracias por ser esa compañera y amiga incondicional, por toda la comida griega que me diste a probar durante estos 5 años de convivencia. A mis otros amigos conocidos, gracias porque de una u otra forma fueron parte de esta experiencia.

Al gobierno de mi país, Panamá, por el apoyo económico (beca) otorgado. Al Grupo de Investigación Reconocido de Motores y Energías Renovables (GIR – MYER) del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica, por el apoyo económico recibido (beca) en los últimos cinco meses del doctorado.

A todos ellos, ¡muchísimas gracias!

DEDICATORIA

*A mis padres: Angélica y Ortimio,
mis otras madres Xiomara y Damaris
y mi sobrina Nayza*

ÍNDICE GENERAL

1	INTRODUCCIÓN.....	2
1.1	Antecedentes y justificación	2
1.2	Objetivos	7
1.3	Desarrollo del documento	9
2	VELOCIDAD DE COMBUSTIÓN LAMINAR Y OTROS CONCEPTOS ASOCIADOS A LA COMBUSTIÓN.....	13
2.1	Introducción	13
2.2	Velocidad de combustión laminar	14
2.3	Factores que afectan a la velocidad de combustión laminar de las llamas reales.	15
2.3.1	Influencia de la geometría de la llama.....	15
2.3.2	Inestabilidades del frente de llama laminar	21
3	MÉTODOS EXPERIMENTALES PARA EL CÁLCULO DE LA VELOCIDAD DE COMBUSTIÓN LAMINAR.....	36
3.1	Introducción	36
3.2	Técnicas experimentales ópticas de registro y análisis	38
3.2.1	Técnicas ópticas generales.....	39
3.2.2	Técnica de imágenes Schlieren	42
3.3	Métodos experimentales según el tipo de llama.....	43
3.3.1	Llamas estacionarias.....	43
3.3.2	Llamas no estacionarias	44
3.3.3	Métodos con bomba de combustión a volumen constante	44
3.4	Método de análisis de la evolución temporal de la presión en una bomba de combustión a volumen constante	47
3.4.1	Introducción.....	47
3.4.2	Velocidad de combustión laminar – medidas basadas en la evolución de la presión	48
3.5	Método de registro de la evolución temporal del frente de llama en una bomba de combustión a volumen constante	51

3.5.1	Introducción.....	51
3.5.2	Velocidad de combustión laminar – medidas basadas en registro de imágenes del frente de llama mediante fotografía Schlieren.	53
3.5.3	Comparación de los métodos de análisis de presión y de imágenes	56
3.6	Mezclas combustibles consideradas.....	60
3.6.1	Hidrógeno – Metano	61
3.6.2	Gas de síntesis ($H_2 - CO$)	62
4	INSTALACIÓN EXPERIMENTAL. BOMBA DE COMBUSTIÓN CILÍNDRICA CON ACCESO ÓPTICO.....	67
4.1	Introducción	67
4.2	Instalación de la bomba de combustión cilíndrica	67
4.2.1	Cámara de combustión cilíndrica	68
4.2.2	Equipos auxiliares de la bomba de combustión cilíndrica	69
4.3	Metodología experimental utilizada	74
4.3.1	Elección de las mezclas y condiciones iniciales para los ensayos.....	74
4.3.2	Preparación de la mezcla y llenado de la bomba.	75
4.4	Modelo de diagnóstico para el análisis de la evolución de la presión	76
4.5	Procesado de las imágenes Schlieren del frente de llama.....	78
5	SIMULACIÓN CFD DEL DESARROLLO DEL FRENTE DE LLAMA LAMINAR.....	82
5.1	Introducción	82
5.2	Fundamentos matemáticos del modelado CFD	83
5.3	Aplicación del cálculo CFD a la bomba de combustión cilíndrica.....	85
5.3.1	Descripción del modelo CFD	85
5.3.2	Método para ajustar una expresión analítica a la forma del frente de llama considerando su deformación dentro de la cámara cilíndrica	90
6	RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA H_2 EN AIRE.....	96
6.1	Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones.....	97
6.1.1	Efecto del dosado relativo	98
6.1.2	Efecto de la presión inicial	100
6.1.3	Efecto de la temperatura inicial.....	102

6.2	Velocidad de combustión obtenida por el método óptico de imágenes Schlieren	105
6.3	Inestabilidades en el frente de llama.....	107
6.3.1	Transición a celularidad.....	107
6.3.2	Densidad de celularidad.....	111
6.4	Resultados de la dependencia de la celularidad y la densidad celular de las condiciones operativas.....	112
6.4.1	Efecto del dosado relativo.....	112
6.4.2	Efecto de la presión inicial.....	115
6.4.3	Efecto de la temperatura inicial.....	117
6.5	Resultados de la velocidad de combustión laminar.....	120
6.6	Conclusiones sobre los resultados de hidrógeno puro.....	122
7	RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE H₂ - CH₄ EN AIRE.....	126
7.1	Introducción.....	126
7.2	Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones.....	128
7.2.1	Dependencia del contenido de hidrógeno en la mezcla.....	128
7.2.2	Dependencia del dosado relativo de la mezcla.....	133
7.3	Velocidad de combustión obtenida por el método óptico de imágenes Schlieren.....	137
7.3.1	Dependencia del contenido de hidrógeno en la mezcla.....	138
7.3.2	Dependencia del dosado relativo.....	148
7.4	Comparación con los resultados de velocidad de otros autores.....	167
7.5	Estudio de las inestabilidades para mezclas de hidrógeno-metano/aire.....	171
7.5.1	En función del contenido de hidrógeno en la mezcla.....	171
7.5.2	En función del dosado relativo.....	176
7.6	Conclusiones sobre las mezclas de hidrógeno-metano.....	180
8	RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE SYNGAS H₂-CO EN AIRE	184
8.1	Introducción.....	184
8.2	Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones.....	185
8.2.1	Influencia del contenido de H ₂ en el gas de síntesis.....	185

8.2.2	Influencia del dosado.....	187
8.3	Velocidad de combustión obtenida por el método óptico de imágenes Schlieren	190
8.3.1	Influencia del contenido de H ₂ en el gas de síntesis	190
8.3.2	Influencia del dosado.....	198
8.4	Comparación de resultados de la velocidad de combustión laminar	208
8.4.1	Resultados obtenidos por ambos métodos	208
8.4.2	Comparación con resultados de otros autores.....	210
8.5	Conclusiones sobre los resultados de mezclas de Syngas (H ₂ – CO).....	212
9	RESULTADOS DE SIMULACIÓN CFD	216
9.1	Estudios de sensibilidad al tamaño de malla e intervalo de tiempo de cálculo en la combustión de una mezcla combustible de CH ₄ – aire	216
9.2	Modificación de la geometría del frente de llama debida al confinamiento dentro de la cámara cilíndrica.....	221
9.2.1	Resultados relativos al crecimiento del frente de llama.....	222
9.2.2	Resultados relativos a la velocidad de combustión calculada mediante la simulación CFD	230
9.3	Conclusión sobre los resultados de la simulación CFD.....	232
10	CONCLUSIONES Y SUGERENCIAS PARA TRABAJOS FUTUROS.....	235
10.1	Conclusiones.....	235
10.1.1	Conclusiones generales	235
10.1.2	Conclusiones específicas	237
10.2	Principales aportaciones de la Tesis doctoral.....	241
10.3	Sugerencias para trabajos futuros	243
ANEXO I	244
ANEXO II	259
ANEXO III	271
INDICE DE FIGURAS	273
INDICE DE TABLAS	284
BIBLIOGRAFÍA	244

LISTA DE SÍMBOLOS Y ABREVIATURAS

Notación básica

SÍMBOLOS

F_e	Dosado estequiométrico
F_r	Dosado relativo
g	Gravedad [m/s ²]
h	Entalpía por unidad de masa [J/kg]
k	Conductividad térmica [W/K.m]
k	Número de onda transversal [1/m]
Ka	Número de Karlovitz
L_b	Longitud de Markstein [m]
Le	Número de Lewis
L_i	Longitud de escala integral [m]
m	Masa de mezcla [kg]
\dot{m}	Flujo másico [kg/s]
Ma	Número de Markstein
n	Constante de deformación del frente de llama
p	Presión [Pa]
Pe	Número de Peclet
Pr	Número de Prandtl
RO	Radio en dirección radial [m]
r_{cr}	Radio crítico de frente de llama [m]
r_u	Radio del frente de llama [m]
S_l	Velocidad de propagación del frente de llama libre de stretch [m/s]
S_n	Velocidad de propagación del frente de llama [m/s]
t	Tiempo [s]

T_b	Temperatura adiabática de llama [K]
T_{ign}	Temperatura de ignición [K]
T_q	Temperatura de la mezcla quemada [K]
T_{sq}	Temperatura de la mezcla fresca [K]
u_g	Velocidad de expansión de los gases [m/s]
u_l	Velocidad de combustión laminar obtenida de imágenes [m/s]
u_l^p	Velocidad de combustión laminar obtenida de MOD-2Z [m/s]
u_n	Velocidad de combustión con stretch [m/s]
u_{nr}	Velocidad de combustión de los productos quemados [m/s]
v	Volumen de mezcla [m ³]
V_B	Volumen de bomba de combustión [m ³] [lts]
V_{sq}	Velocidad de expansión [m/s]
Z_0	Radio en dirección axial [m]
Ze	Número de Zel'dovich

SUBÍNDICES

b	Zona de quemados
c	Curvatura
cr	Crítico
DL	Darrieus - Landau
f	Condiciones finales
i	Condiciones iniciales
l	Laminar
s	Strain
Sch	Schlieren
u	Zona de no quemados

GRIEGOS

α	Tasa de stretch [1/s]
δ	Espesor de llama [m]
μ	Viscosidad dinámica [kg.m/s]
ν	Viscosidad cinemática [m ² /s]

ρ	Densidad [kg/m ³]
σ	Relación de densidades
φ	Función Generalizada
ϕ	Dosado
ω	Tasa de crecimiento de inestabilidades [1/s]

SIGLAS

CFD	Dinámica de Fluido Computacional
CRR	Combustibles Renovables y Residuales
dFQL	Derivada de la Tasa de Calor Liberada
FMQ	Fracción de masa quemada
GLP	Gas Licuado de Petróleo
GN	Gas Natural
LDV	Laser Doppler Velocimetry
LES	Large Eddy Simulation
LIF	Laser - Induced Fluorescence
LVE	Lewis y von Elbe
MCIA	Motor de Combustión Interna Alternativa
MEC	Motor de Encendido por Compresión
MEP	Motor de Encendido Provocado
MOD-2Z	Modelo diagnóstico de dos zonas
MYER	Motores Térmicos y Energías Renovables
PID	Proporcional, integral y derivativo
PLIF	Planar Laser - Induced Fluorescence
SCFS	Stretch corrected flame speed
UVa	Universidad de Valladolid

CAPITULO 1

Introducción

1.1	Antecedentes y justificación	2
1.2	Objetivos	7
1.3	Desarrollo del documento	9

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes y justificación

El continuo incremento de la demanda energética de la sociedad actual, junto con la escasez de recursos energéticos fomenta la búsqueda de alternativas que cubran esta demanda, garantizando un suministro energético seguro y compatible con la preservación del medio ambiente. Sumado a ello el frenético aumento de la actividad industrial y el transporte, ha desembocado en el crecimiento de la presencia de agentes contaminantes que dañan la salud atmosférica, no dejando lugar al optimismo para la realidad de la situación ambiental actual. De esta forma, las emisiones de NO_x , importante contribuyente al efecto invernadero, smog fotoquímico y lluvia ácida, que proceden en partes iguales del transporte y de la producción de energía, siendo el primero de estos últimos el responsable de las emisiones de CO , un gas altamente tóxico y perjudicial. Asimismo, el aumento de la concentración de CO_2 en la atmósfera asociado a la combustión en motores de automoción está provocando un crecimiento de la temperatura media del planeta **Figura 1.1**.

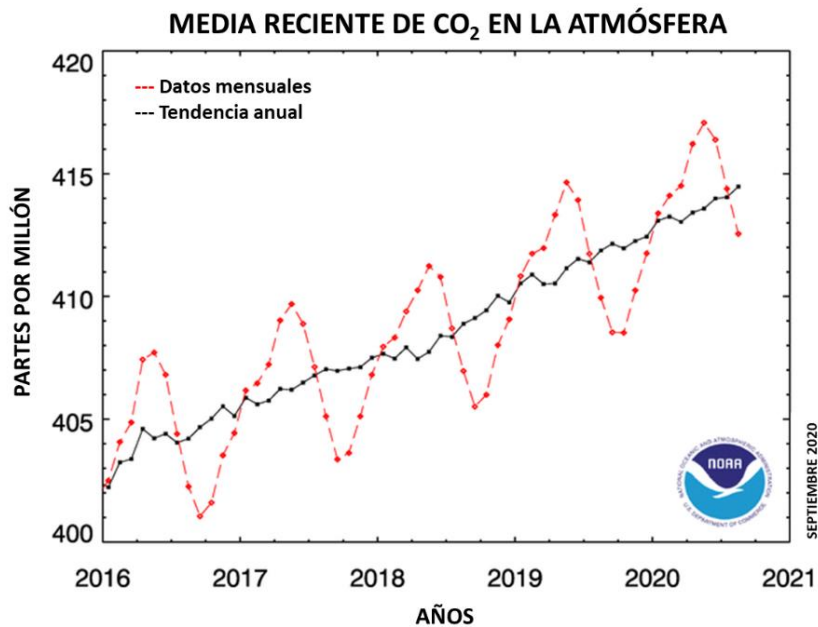


Figura 1.1: Concentración de CO_2 en la atmósfera [1].

En la **Figura 1.2**, se puede observar que es el CO_2 el gas que tiene mayor aportación al aumento de la temperatura de la corteza terrestre con un 65%, seguido por el CH_4 con un 17% y finalmente los NO_x y otros gases con un 6 y 12% respectivamente. De igual

manera se puede ver que desde la era industrial hasta el año 2016, ha sido la producción de CH_4 la que ha tenido un aumento considerable con respecto a los demás gases, mostrando así el camino a seguir si lo que se tiene como objetivo es la disminución de las emisiones contaminantes, para contribuir a que no aumente la contaminación ambiental.

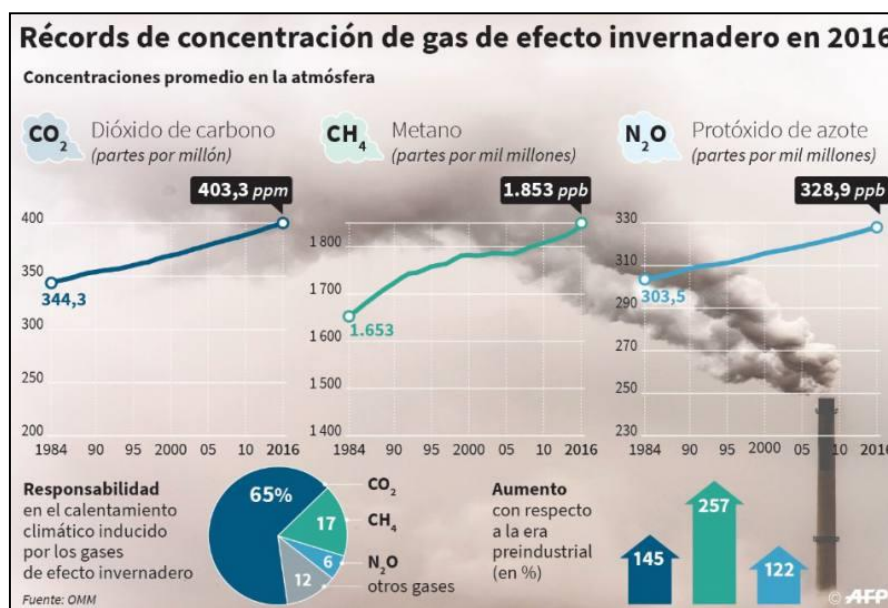


Figura 1.2: Contribución al calentamiento global de los distintos gases de efecto invernadero [2].

Cuando se usan hidrocarburos como combustibles, las emisiones de CO_2 y el consumo de combustible son función de la composición del combustible (sobre todo la relación H/C) así como la eficiencia térmica de los motores utilizados para convertir la energía química del combustible en energía mecánica. Estos motores, generalmente motores térmicos de combustión interna alternativa (MCIA), debido a su alta potencia específica, al empleo de combustibles seguros de alta energía específica fáciles de almacenar y distribuir y al buen rendimiento energético medio frente a solicitudes de carga altamente variables, son un medio sin apenas competencia para solucionar las necesidades de movilidad y transportes actuales [3].

Sin embargo, las reservas limitadas del petróleo del que proceden, así como los problemas de contaminación anteriormente comentados, están llevando a los gobiernos a imponer restricciones cada vez más exigentes en cuanto al uso de combustibles fósiles y sus emisiones con el fin de motivar el desarrollo sostenible (**Figura 1.3** y **Figura 1.4**). Para reducir los niveles de emisiones de los vehículos, existen varios marcos de legislación. Vamos a comparar dos de los más significativos: europeo y estadounidense, estándares

de la regulación de emisiones, prácticamente a nivel global, si bien en este punto existen diferencias entre las posturas adoptadas por los distintos países, como las reflejadas en [4], mientras que la primera defiende la limitación de emisiones de CO_2 , controlando por lo tanto el efecto invernadero, los segundos defienden la calidad del aire en términos de gases generadores de ozono y smog.

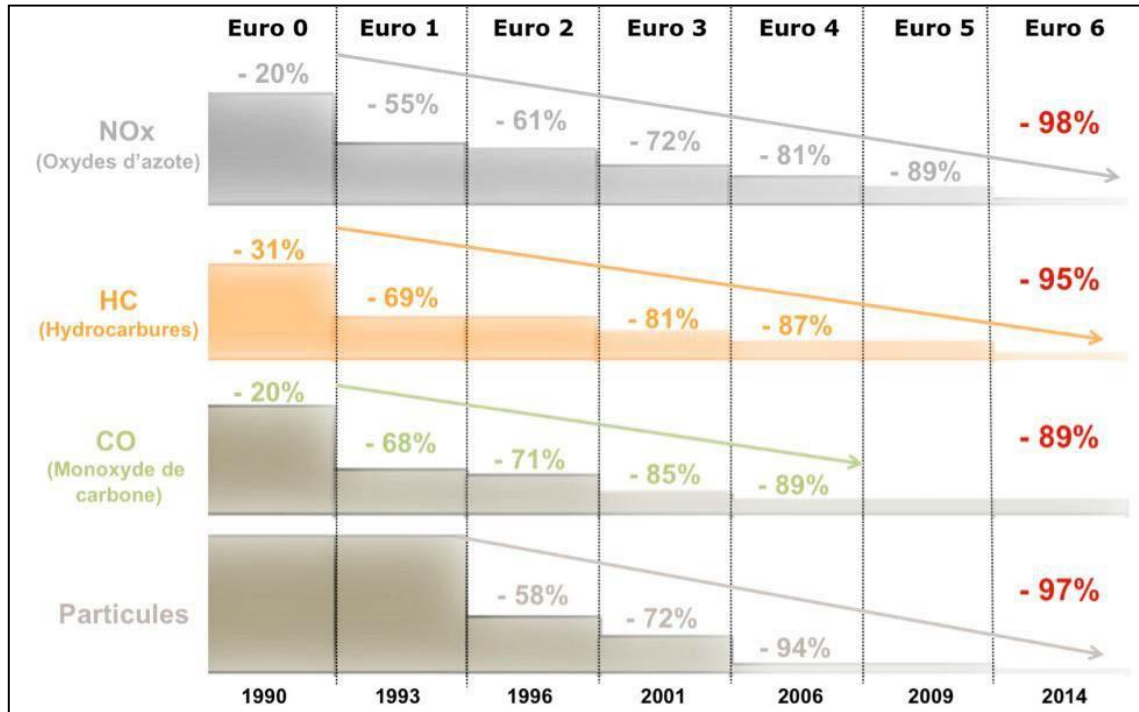


Figura 1.3: Evolución de las leyes reguladoras de la reducción de emisiones contaminantes [4].

La normativa de emisiones va evolucionando a medida que avanza la tecnología, obligando a los fabricantes de vehículos a hacer uso de soluciones tecnológicas para reducir paulatinamente los contaminantes emitidos por sus vehículos.

También el continuo incremento en el precio del crudo está espoleando estas filosofías a fin de satisfacer las demandas de un consumidor que ve decrecer poco a poco su poder adquisitivo. Un ejemplo cercano son los proyectos del Plan Nacional [5,6], que el GIR Motores y Energías Renovable de la Uva ha desarrollado en los últimos años, al amparo de los cuales han sido posibles los trabajos que aquí se muestran, que persiguen los siguientes objetivos:

- Reducción del consumo de combustible, mejorando la eficiencia de los motores tal y como se ha dicho anteriormente.

- Reducción de la dependencia de los combustibles fósiles mediante el estudio de combustibles alternativos.
- Reducción del impacto medioambiental
 - Reducción de las emisiones gaseosas contaminantes
 - Reducción de las emisiones de partículas
 - Reducción del impacto acústico

Límites de emisiones por contaminante en la Unión Europea (g/km)						
Tipo	Fecha	CO	HC	HC+NOx	NOx	PM (ppm)
Diésel						
Euro I	Julio de 1992	2,72 (3,16)	-	0,97 (1,13)	-	0,14 (0,18)
Euro II	Enero de 1996	1,0	-	0,7	-	0,08
Euro III	Enero de 2000	0,64	-	0,56	0,50	0,05
Euro IV	Enero de 2005	0,50	-	0,30	0,25	0,025
Euro V	Septiembre de 2009	0,50	-	0,23	0,18	0,005
Euro VI	Septiembre de 2014	0,50	-	0,17	0,08	0,005
Gasolina						
Euro I	Julio de 1992	2,72 (3,16)	-	0,97 (1,13)	-	-
Euro II	Enero de 1996	2,2	-	0,5	-	-
Euro III	Enero de 2000	2,30	0,20	-	0,15	-
Euro IV	Enero de 2005	1,0	0,10	-	0,08	-
Euro V	Septiembre de 2009	1,0	0,10	-	0,06	0,005 ^b
Euro VI	Septiembre de 2014	1,0	0,10	-	0,06	0,005

* Antes de Euro V turismos > 2500 kg estaban clasificados en la categoría Vehículo industrial ligero N1 - I
 Tabla en g/km salvo PM (partículas) en partes por millón (PPM)

Límites de contaminantes en Estados Unidos (g/millas)					
Diésel y gasolina	NOx	NMOG (HC)	CO	PM	HCHO Formaldehidos
Tier 2 Bin 5	0.05 (g/mi)	0.075 (g/mi)	3.4 (g/mi)	-	0.015 (g/mi)
	0,031 (g/km)	0,047 (g/km)	2,113 (g/km)	-	0,0093 (g/km)

Figura 1.4: Límite de emisiones contaminantes para motor diésel y gasolina [4].

Es precisamente el segundo punto de los anteriormente citados sobre el que se han centrado los primeros estudios destinados a corregir la tendencia contaminante actual. De esta forma, se han llevado a cabo investigaciones en torno a la posibilidad de incorporar combustibles alternativos en el ámbito de los motores de combustión interna alternativos. Por citar algunos ejemplos en este punto, se han desarrollado distintos ensayos con gas natural y metano [7–18], etanol [19–23], metanol [24–27], propano [28–

33] y con hidrógeno [34–41]. Este último, el hidrógeno, ha suscitado el interés de múltiples grupos de investigación en su afán por conseguir un combustible que, al no contener átomos de carbono en su molécula, mostraría unas emisiones nulas en cuanto a CO_2 se refiere, explotando al mismo tiempo su condición de vector energético [3].

Como bien expone Yusaf et al [41], el H_2 posee propiedades únicas tales como un amplio rango de inflamabilidad, pequeña distancia de apagado, alta velocidad de llama y temperatura de encendido. Esto permite al H_2 presentar una buena ignición a dosados tanto ricos como pobres. Una de las desventajas de los motores alimentados con H_2 es que puede haber una reducción de potencia con respecto a los motores que utilizan combustibles convencionales, si bien se podría obtener la misma potencia de salida utilizando sobrealimentación. Esto es debido a la naturaleza gaseosa del H_2 que desplaza el aire en la cámara de combustión. El otro problema es que, debido a la alta temperatura de llama del H_2 , cuando el motor opera a dosado estequiométrico puede producir más emisiones de NO_x si se compara con las obtenidas en el mismo motor usando un combustible hidrocarbonado. De cualquier modo, las principales barreras que existen hoy en día para el uso del H_2 como combustible en motores de combustión interna alternativos, además de la adecuada adaptación de los motores actuales para ser alimentados con H_2 , son la implementación de la infraestructura en las estaciones de repostaje, así como su almacenaje a bordo con el fin de obtener una autonomía competitiva penalizada por su baja densidad energética.

Una vez exploradas las posibles vías para la obtención de un combustible más limpio, y amigable al ambiente, se ha optado igualmente por canalizar las investigaciones hacia estudios de nuevas tecnologías y conceptos de combustión que intentan aprovechar las ventajas de los motores actuales mejorando así sus posibles deficiencias.

Por lo antes expuesto se puede ver claramente la necesidad de conocer el comportamiento y las características de un combustible que satisfaga los requisitos para ser aplicado a las nuevas tecnologías y conceptos de combustión, especialmente en lo relativo a su velocidad de combustión, el cuál es un concepto muy importante para el diseño, análisis, y funcionamiento de motores de combustión interna ya que afecta la tasa de combustión en el motor y, por lo tanto a su eficiencia y emisiones [42]. En el Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Universidad de Valladolid,

y dentro del Grupo de Investigación Reconocido *Motores Térmicos y Energías Renovables*, se han venido caracterizando extensamente las velocidades de combustión de mezclas de combustible-aire para diferentes condiciones de temperatura y presión ambiente [43–45]. En la última década los estudios se han extendido a condiciones de temperatura y presión elevadas, es decir a condiciones cercanas a las alcanzadas en un motor [46,47].

Los estudios mencionados han dado lugar a diversas publicaciones así como varias Tesis Doctorales realizadas [3,45,48]. Estos trabajos sientan las bases y antecedentes que llevan a profundizar aún más en los estudios de la velocidad de combustión, hasta llegar a identificar los fenómenos que causan inestabilidad e influyen directamente en ella, como lo es la celularidad y las tasas de stretch (estiramiento de las llamas) entre otras.

Así pues, la presente Tesis Doctoral forma parte las líneas de investigación del *Grupo de Investigación Reconocido Motores y Energías Renovables* (GIR-MYER) del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Universidad de Valladolid, las cuales consideran el uso de combustibles alternativos a los convencionales en motores térmicos y se estudia la modificación y regulación de dichos motores necesaria para la adaptación a estos combustibles.

1.2 Objetivos

El **objetivo principal** de esta Tesis Doctoral es el desarrollo, mediante experimentos y simulación numérica, de una metodología robusta y generalizada que permita caracterizar el proceso de combustión de mezclas de combustibles alternativos, en una cámara de combustión a volumen constante, en condiciones termodinámicas (presión, temperatura, dosado) similares a las de un MEP, para así caracterizar y analizar el comportamiento de las distintas variables que participan en el proceso y su posterior validación con estudios experimentales existentes.

Para llegar a finalidad el objetivo principal se han planteado los siguientes **objetivos específicos**.

- Llevar a cabo una **amplia revisión bibliográfica** con el fin de comprender y profundizar en los **conceptos teóricos** sobre el proceso de combustión y la

combustión laminar de mezclas combustibles, así como sobre las **técnicas experimentales** propuestas por otros investigadores.

- **Caracterización experimental** de los procesos de combustión en bomba de combustión a volumen constante, considerando:
 - Selección de las mezclas de combustible – aire a estudiar.
 - Establecimiento de las condiciones iniciales de las mezclas combustible-aire en base a las condiciones termodinámicas propias de un MEP, así como las condiciones de fronteras que rigen el proceso.
 - Puesta a punto de la metodología para la realización de los procesos de combustión en la bomba cilíndrica con acceso óptico, registro de imágenes del frente de llama y de la evolución de la presión durante el desarrollo de la combustión.
 - Realización de los ensayos experimentales de las diferentes mezclas en el banco de pruebas de bomba de combustión a volumen constante, utilizando el método de llenado por presiones parciales.
- **Caracterización complementaria mediante la simulación con CFD:**
 - Selección del código de simulación CFD a utilizar.
 - Obtención de la geometría para la simulación CFD y mallado acoplado tanto a la geometría real como al proceso a estudiar.
 - Desarrollo de un procedimiento que represente el encendido real de la mezcla.
- Desarrollo y puesta a punto de una **metodología para el procesamiento de imágenes Schlieren** de la evolución del frente de llama, orientada a la obtención de parámetros cuantificadores del proceso de combustión: velocidades, distorsión del frente de llama, celularidad, etc.
- Análisis de los **resultados del proceso de combustión** tanto para los ensayos experimentales como de las simulaciones con CFD, para obtener la velocidad de

combustión laminar y demás variables que participan en el proceso, utilizando el método de evolución de presión y avance del frente de llama (imágenes).

- **Validación de los diferentes resultados** con información experimental o calculada publicada por otros autores.

1.3 Desarrollo del documento

En este apartado se hace un breve resumen del contenido de cada capítulo. En el **primer capítulo** se presentan los antecedentes y justificación, que llevo a la realización de esta Tesis doctoral, así como los objetivos planteados para el desarrollo de la misma.

En el **segundo capítulo** se hace un recorrido teórico de los distintos conceptos sobre los procesos de combustión de mezclas combustibles, centrándose en la velocidad de combustión laminar, que es el parámetro por estudiar en las diferentes mezclas combustibles realizadas. Se presentan los diferentes factores que afectan a la velocidad de combustión, como lo son la geometría y las inestabilidades del frente de llama.

En el **tercer capítulo** se exponen los diferentes de métodos experimentales para el cálculo de la velocidad de combustión, como lo son: las técnicas experimentales ópticas, enfocándose en la técnica de imágenes Schlieren mediante la evolución del frente de llama y la técnica experimental según el tipo de llama, basado en el método de la bomba de combustión a volumen constante, mediante la evolución temporal de la presión. Sumado a ello se presentan trabajos de estudios similares por otros autores con las mezclas combustibles consideradas en la presente Tesis.

En el **cuarto capítulo** se detalla la instalación experimental en la que se llevó a cabo los diferentes experimentos de las mezclas combustibles. Se explica, además, la metodología experimental de cómo se elaboran las mezclas para cada experimento.

En el **quinto capítulo** se presenta una metodología pionera para la simulación CFD del proceso de combustión para el estudio del desarrollo del frente de llama. En el mismo se detalla paso a paso el procedimiento para el seguimiento del frente de llama mediante un algoritmo desarrollado, para el cálculo de la deformación del frente de llama debido a la geometría cilíndrica de la bomba de combustión a volumen contante.

En los **capítulos seis, siete y ocho** se presentan los resultados obtenidos para las mezclas de H₂ puro, mezclas de metano/hidrógeno y mezclas de gas de síntesis (H₂-CO). En los mismos se presenta un estudio paramétrico de dosado, presión y temperatura. Se presenta la comparativa de la velocidad de combustión obtenida por medio de los dos métodos experimentales utilizados: técnica Schlieren y evolución de la presión. Además de los resultados con otros autores de la bibliografía. Aunado a ello se presentan los números adimensionales que definen las diferentes inestabilidades que presenta el frente de llama debido a la presencia del contenido de hidrógeno en la mezcla y la celularidad que pueden llegar a desarrollar.

En el **capítulo nueve** se presentan los primeros resultados obtenidos con el algoritmo desarrollado para el seguimiento de la deformación del frente de llama debido a la geometría cilíndrica de la bomba de combustión. Sumado a ello, la velocidad de combustión laminar tomando en cuenta la deformación de dicho frente de llama.

Finalmente, en el **décimo capítulo** se recopilan las conclusiones arrojadas de los anteriores capítulos, así como sugerencias de futuros trabajos a realizar en posteriores investigaciones y los principales aportes de la presente Tesis doctoral.

Los **anexos** presentados recogen: **el primero**, el desarrollo de la ecuación 50 acerca de las presiones finales. **El segundo** las matrices de las imágenes del frente de llama de los experimentos para las diferentes condiciones iniciales de presión, temperatura y dosado para las mezclas de H₂/CH₄, ya que, en la presentación de los resultados, se mostraron matrices de imágenes de experimentos con condiciones puntuales para la representación del frente de llama. Y en **el tercero** se presenta la documentación que permite verificar la aceptación y publicación de los artículos científicos, presentaciones en congresos producto del desarrollo de la presente Tesis.

CAPÍTULO 2

Velocidad de combustión laminar y otros conceptos asociados a la combustión

2.1	Introducción.....	13
2.2	Velocidad de combustión laminar	14
2.3	Factores que afectan a la velocidad de combustión laminar de las llamas reales.	15
2.3.1	Influencia de la geometría de la llama.....	15
2.3.2	Inestabilidades del frente de llama laminar	21

2 VELOCIDAD DE COMBUSTIÓN LAMINAR Y OTROS CONCEPTOS ASOCIADOS A LA COMBUSTIÓN

2.1 Introducción

La **velocidad de combustión** es una de las principales propiedades a estudiar de un combustible, ya que determina el funcionamiento en los dispositivos de combustión y en particular afecta fuertemente al comportamiento de un motor de combustión interna (MCI). La velocidad de combustión laminar u_l unidimensional es una propiedad intrínseca de una mezcla combustible-aire. Heywood et al. [49] la define como la velocidad relativa y perpendicular al frente de llama, con la que el gas sin quemar entra en el frente de llama y se transforma en productos bajo condiciones de flujo laminar. La misma depende de las características fisicoquímicas y de la cinética química, que a su vez es función de la estructura molecular del combustible, así como de la presión y temperatura, (Figura 2.1).

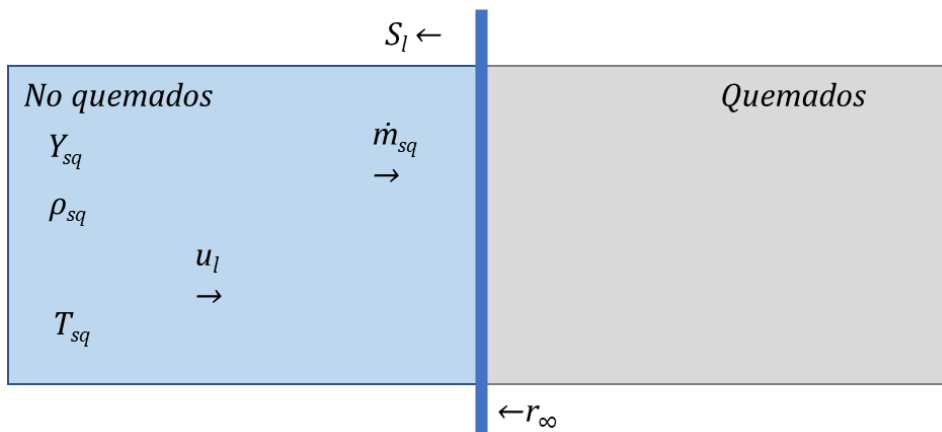


Figura 2.1: Velocidad de combustión laminar ideal [50].

Una **llama laminar perfectamente unidimensional** es imposible de alcanzar desde el punto de vista experimental, debido a uno o varios de los siguientes factores: *la llama no es adiabática, el frente de llama no es plano, no es liso y no es estable, ni tampoco estacionario* (por ejemplo, se expande hacia afuera). La expansión, en la que la superficie del frente de llama crece con el tiempo, genera alargamiento, más conocido por el término en inglés *stretch*. Debido a los factores enumerados por los que el frente de llama se ve afectado, es necesario considerar la componente normal de la velocidad de propagación del frente de llama, en la dirección normal a dicho frente y con un módulo que es la intensidad de la velocidad relativa respecto de la mezcla no quemada [50].

Las llamas pueden ser *difusivas*, si el combustible y oxidante se mezclan en el mismo punto en que ocurre la combustión, o *premezcladas*, si ya se introducen en forma de mezcla homogénea. A su vez, en función del régimen de flujo, las llamas pueden ser *laminares* o *turbulentas*. Una última clasificación que se refiere a la estructura de la llama y a su modo de propagación en el tiempo, ésta puede ser *estacionaria* o *no-estacionaria* [51].

2.2 Velocidad de combustión laminar

Como se ha venido comentando, la velocidad de combustión aparece durante el proceso de combustión como consecuencia de la evolución de la presión y la temperatura debido a la transformación de la mezcla fresca (sin quemar) en productos quemados. Desde un primer punto de vista se podría considerar como la velocidad con la que el frente de llama unidimensional (discontinuidad espacial de temperaturas y especies químicas entre la zona de mezcla sin quemar y la quemada), progresa respecto a la mezcla fresca.

Hinton et al. [52] definen la **velocidad (velocity) de combustión laminar** como la velocidad (speed) de propagación de la llama en un proceso adiabático sin alargamiento (stretch) relativa a la mezcla no quemada en el seno de la cual se está propagando. De esta forma, diferencian respecto a la velocidad de llama (flame speed), o más propiamente, velocidad del frente de llama, que se puede ver incrementada por el proceso de expansión de los gases quemados. La velocidad de combustión laminar se considera una propiedad fundamental de la propagación de la llama de una mezcla de combustible-aire, que es dependiente de la temperatura, presión, relación combustible/aire de la mezcla y la presencia de componentes inertes.

En resumen, la velocidad de combustión laminar y su dependencia con la presión, temperatura, composición de la mezcla, tasa de stretch e inestabilidades y el hecho de que es una propiedad fisicoquímica de dicha mezcla, da una medida de su difusividad, reactividad y exotermicidad. Por ello es importante determinar la velocidad de combustión en las condiciones de presión, temperatura, y relación combustible/aire de operación de un motor, lo cual puede conseguirse por medio de ensayos experimentales y simulaciones numéricas, de resultados deducidos por extrapolación o mecanismos de reacción. Las diferentes técnicas de estudios se exponen en posteriores secciones.

Algunos autores como Kuo [53], clasifican las distintas **teorías** sobre el **estudio de la llama ideal unidimensional**, basado en el efecto dominante durante la combustión. Estas teorías son: *térmicas*, donde se asume que el fenómeno dominante en la combustión es la difusión de calor, desarrollo de Mallard y Le Châtelier, teoría de Damköhler, teoría de Bartolomé, teoría de Emmons, Harr y Strong, teoría de Bechert; *las difusivas*, si es la difusión de la masa el fenómeno dominante, teoría de Tanford y Pease, teoría de Van Tiggelen, teoría de Manson, teoría de Gaydon y Wolfhard; y las teorías *globales o integrales*, que consideran ambas teorías en el proceso, teoría de Lewis y von Elbe, teoría de Zel'dovich, Frank-Kamenetsky y Semenov, teoría de Boys y Corner, teoría de Hirschfelder y Curtis, teoría de von Karman y Penner.

2.3 Factores que afectan a la velocidad de combustión laminar de las llamas reales.

Este apartado se centra en los factores que afectan directamente a la velocidad de combustión, considerando como referencia una *llama laminar unidimensional*. El estudio de ésta es un requisito básico para entender a profundidad el proceso de combustión turbulenta en motores, puesto que supone la base del proceso en ausencia del efecto intensificador de la turbulencia, para el modelado de la combustión.

2.3.1 Influencia de la geometría de la llama

2.3.1.1 Velocidad de frente de llama

La **velocidad de propagación del frente de llama**, S_n , se puede determinar directamente a partir de las mediciones del radio de frente de llama en función del tiempo:

$$S_n = \frac{dr_u}{dt} \quad [1]$$

En donde r_u es el **radio del frente de llama**. Bradley et al. [54], en sus estudios de propagación de llama esférica, mostraron que existe una relación del mismo con el radio de frente de llama observado por las fotografías de Schlieren, r_{sch} , dado por la siguiente expresión:

$$r_u = r_{sch} + 1.95\delta_l \left(\frac{\rho_u}{\rho_b}\right)^{0.5} \quad [2]$$

En donde: ρ_u y ρ_b , es la densidad de los gases no quemados y de los gases quemados en una temperatura de llama adiabática; δ_l , es el **espesor de llama laminar**, dado por la siguiente expresión:

$$\delta_l = \frac{\nu}{u_l} \quad [3]$$

Donde: ν , es la viscosidad cinemática de la mezcla no quemada y u_l es la velocidad de combustión laminar sin stretch.

2.3.1.2 Tasa de stretch. Influencia sobre la llama y la velocidad de combustión

La velocidad de combustión laminar en un proceso real no estacionario se ve afectada por el efecto del **stretch** o estiramiento del frente de llama, asociado al propio crecimiento del radio de una llama no estacionaria. Como se ve más adelante en este apartado, este efecto se puede cuantificar introduciendo la longitud de Markstein, para relacionar la velocidad afectada por stretch (por ejemplo, determinada experimentalmente) con la velocidad libre de stretch (que se puede comparar con las obtenidas por otros métodos experimentales o de cálculo, puesto que sería una característica de la mezcla).

Se puede considerar que el efecto de *stretch* proviene de la curvatura y la deformación del frente de llama. El concepto de *stretch* de llama fue introducido primeramente por Karlovitz et al. [55], y ha sido bien documentado desde entonces. Por ejemplo, Palm-Leis [56] identificó el efecto del *stretch* sobre la velocidad de la llama.

La tasa temporal global de *stretch* (*stretch rate*) se define como la derivada logarítmica de la superficie del frente de llama, A , que equivale a la derivada de la superficie de un elemento infinitesimal dividido por la propia superficie [57], con la siguiente *expresión 4*.

$$\alpha = \frac{d \ln A}{dt} = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad [4]$$

Para el caso de una llama esférica, esa expresión se convierte en:

$$\alpha = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = \frac{1}{4\pi * r_{sq}^2} \frac{d(4\pi * r_{sq}^2)}{dt} = \frac{2}{r_{sq}} \frac{dr_{sq}}{dt} = \frac{2}{r_{sq}} S_n \quad [5]$$

Como se deduce de la expresión anterior, el *stretch* afecta a las velocidades de combustión fundamentalmente para radios pequeños, antes de que se desarrollen otras inestabilidades de llama.

El ***stretch por curvatura***, α_c , se origina como consecuencia de la existencia de un espesor de llama finito. El espesor finito de llama, junto con la forma esférica de la misma, hace que la superficie exterior de la llama sea ligeramente mayor que el de la superficie interna. El ***stretch aerodinámico o por strain***, α_s , está relacionado también con la geometría de la llama, y las tensiones producidas en la misma. La curvatura de la llama hace inevitable la presencia de componentes de velocidad tangencial en sus fronteras. El crecimiento de la llama reduce el grado de curvatura local a lo largo de la superficie de la llama.

Bradley [58] atribuye la gran dispersión en los datos de velocidad de combustión en parte debido a la atención insuficiente que se presta a los efectos del *stretch*. Además, cuantificó las contribuciones de la **tasa de *stretch por strain***, α_s , (asociado a la velocidad de expansión de los gases quemados u_g) y **por curvatura**, α_c , (asociado a la velocidad de combustión laminar stretched u_n) sobre la tasa *total de stretch*:

$$\alpha_s = 2 \frac{u_g}{r_{sq}} \quad [6]$$

$$\alpha_c = 2 \frac{u_n}{r_{sq}} \quad [7]$$

$$S_n = u_g + u_n \quad [8]$$

De las expresiones [5] y [8] se deduce que la tasa de stretch total α es igual a la suma del stretch por strain α_s más el stretch por curvatura α_c .

Hinton et al. [61] revisaron los trabajos de otros autores, indicando que Andrews y Bradley [59] pusieron de manifiesto que más allá de un radio de llama de 50 mm el efecto de *stretch* es despreciable, y esto se cumpliría con la mayoría de las medidas durante la fase de aumento de presión de la combustión, pero obviamente no durante la fase de presión constante, que es aquella en la que los métodos ópticos de imagen se aplican. Sin embargo, se requiere una cuantificación más precisa de las tasas de *stretch* para permitir que se obtengan valores suficientemente precisos de la *velocidad de combustión*, y puede

ser necesario reconsiderar la suposición de efectos despreciables del *stretch* en el método de aumento de la presión [60]. Esto es particularmente cierto en el caso de combustión en recipientes pequeños, donde el aumento de presión comenzará con radios más pequeños para los cuales las tasas de *stretch* son muy altas.

Los efectos del *stretch* sobre la velocidad de la llama y, por lo tanto, el **método de extrapolación para obtener velocidades de llama descontando el efecto del stretch** (*un-stretched*), han recibido mucha atención en estudios recientes. Kelley y Law [61] sugirieron una relación no lineal, que posteriormente ha sido revisada. Chen [62] utilizó un estudio de modelado para comparar los métodos de extrapolación y descubrió que había discrepancia cuando el número de Lewis se desvía de la unidad. Tahtouh et al. [63] y Halter et al. [64] también investigaron los efectos de las técnicas de extrapolación sobre las velocidades de combustión determinadas y las longitudes de gas quemado de Markstein, y señalaron que la inexactitud introducida por la extrapolación lineal puede reducirse con una reducción metódica en el número de puntos de datos incluidos en la extrapolación, aunque naturalmente, reducir el número de puntos hará que sea más difícil obtener un ajuste confiable.

La extrapolación lineal todavía se usa ampliamente [65]. Un artículo reciente de Xiouris et al. [66] utiliza modelos numéricos para justificar una relación lineal entre la tasa de *stretch* y la velocidad de combustión. Una nueva técnica fue desarrollada por Varea et al. [67] para determinar la velocidad de combustión directamente desde la definición de la velocidad de la llama en relación con el gas no quemado delante del frente de la llama.

Las técnicas que involucran la imagen de la propagación del frente de la llama a presión constante son populares, ya que permiten un estudio detallado de la propagación, y los efectos del *stretch* pueden determinarse y explicarse con mayor precisión al realizar mediciones de la velocidad de combustión.

2.3.1.3 Variables relevantes libres de *stretch*

Las variables asociadas a la tasa de combustión *sin stretch* pueden obtenerse a partir de las medidas basadas en las fotografías de Schlieren como se mencionó

anteriormente basándose en la metodología propuesta por Bradley y colaboradores [58], tras descontar los efectos de la *tasa de stretch*. A partir de la definición de la tasa de *stretch de la llama* (expresión 4), se puede ver que, según crece el radio medio del frente de llama, la tasa de *stretch* global se aproxima a cero asintóticamente [3]. Por consiguiente, los términos *sin stretch* vienen dados por los correspondientes términos *con stretch* a una *tasa de stretch* igual a cero.

Clavin [68] y Chen et al. [69] investigaron el efecto del *stretch* en un recipiente a volumen constante y presentaron una velocidad de llama corregida sin *stretch* (SCFS, stretch corrected flame speed). Utilizaron una relación lineal entre la **velocidad de combustión con stretch**, S_n , y la **velocidad de combustión sin stretch**, S_l , a través de la **longitud de Markstein**, L_b , de los gases no quemado y la **tasa de stretch**, α :

$$S_n = S_l - L_b \alpha \quad [9]$$

De esta forma, la *velocidad de llama sin stretch*, S_l , se obtiene al extrapolar el valor de S_n para $\alpha=0$, en la gráfica de S_n frente a α .

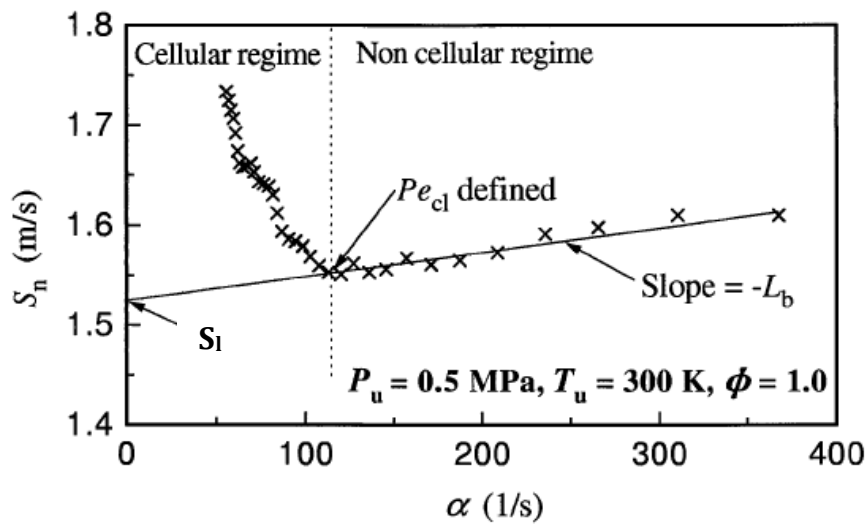


Figura 2.2: Medidas de velocidad de llama a diferentes tasas de stretch [43].

En la *Figura 2.2*, puede verse que, la *longitud de Markstein* es la pendiente de la línea de regresión de los resultados experimentales de S_n frente al *stretch*, pudiendo ser positiva o negativa. Debido a ello, el *stretch* puede tener un carácter potenciador o retardador de la velocidad de llama frente al valor de la velocidad de llama *sin stretch*, por lo que se considera que la L_b es una medida de la respuesta de la llama al *stretch*.

Teniendo en cuenta que las diferencias entre las velocidades de combustión *con stretch* y *sin stretch* son de orden cero, Clavin [68], derivó una expresión para determinar el efecto de las *tasas de stretch* en la *velocidad de combustión* derivadas del método de aumento de presión. Además, encontró que cuando el incremento de presión estaba por debajo de un 20%, el efecto de stretch en la velocidad de combustión era mayor del 10%. Lo cual requiere entonces una corrección de la velocidad de combustión utilizando los valores de la longitud de Markstein de los gases no quemados, ecuación [6], obtenidos de las mediciones de presión constante.

Marshall et al. [70] estudiaron la posibilidad de incluir un término de corrección de *stretch* en la correlación, pero resultó difícil ya que la longitud de Markstein es una función del dosado [43], la presión y en menor medida de la temperatura [58], por lo que se asumió la suposición de efecto de *stretch* despreciable.

Bradley et al. [54] caracterizaron las contribuciones de la curvatura y strain sobre la velocidad de combustión con stretch utilizando una serie de longitudes de Markstein, que permiten obtener los correspondientes valores sin stretch.

$$u_l - u_n = L_c \alpha_c + L_s \alpha_s \quad [10]$$

$$u_l - u_{nr} = L_{cr} \alpha_c + L_{sr} \alpha_s \quad [11]$$

Donde L_c y L_s son las **longitudes de Markstein asociadas a la curvatura y al strain**, respectivamente para u_n (velocidad de combustión laminar con stretch, asociada a la desaparición de mezcla sin quemar por englobamiento en el frente de llama y posterior combustión), u_{nr} (velocidad de combustión asociada a la generación de productos quemados) y u_l es la velocidad de combustión laminar sin stretch (ver expresión [17]).

La longitud de Markstein se puede comparar con el **espesor de llama característico** δ_l [71] [72], de modo que se puede definir un **número de Markstein**, M_a , adimensional:

$$M_a = \frac{L_b}{\delta_l} \quad [12]$$

Como u_n es generalmente mucho mayor que S_l , α_c puede ser despreciada. Así el efecto del stretch sobre u_n y u_{nr} viene dado aproximadamente por:

$$u_l - u_n \approx L_s \alpha_s \quad [13]$$

$$u_l - u_{nr} \approx L_{sr} \alpha_s \quad [14]$$

La tasa de stretch α también puede adimensionalizarse mediante la inversa de un tiempo característico del frente de llama (u_l/δ_l), para obtener el **número de Karlovitz**, Ka , con la siguiente expresión:

$$Ka = \frac{\alpha}{\left(\frac{u_l}{\delta_l}\right)} \quad [15]$$

De forma que, según [3], la relación entre la velocidades de llama con stretch S_n y sin stretch S_l se puede expresar como sigue:

$$\frac{S_n}{S_l} = 1 - Ma * Ka \quad [16]$$

Finalmente la **velocidad de combustión laminar sin stretch** u_l , se obtiene a partir de S_l y de la relación de densidades usando la siguiente expresión [43] [48]:

$$u_l = S_l \frac{\rho_b}{\rho_u} \quad [17]$$

Hay que señalar que, dado que la relación de densidades que aparece en la expresión (17) en los procesos de combustión es mucho menor que la unidad, se tiene que $u_l \ll S_l$.

2.3.2 Inestabilidades del frente de llama laminar

Cuando una llama laminar se ve sometida a alguna perturbación, ya sean por su movimiento sobre un cuerpo sólido, por pulsos de presión u oscilaciones acústicas, aparecen en su superficie deformaciones o arrugas (*cracks*), que pueden crecer o decrecer en su desarrollo. Cuando el radio de llama es suficientemente grande, el crecimiento de las inestabilidades es generalizado [48]. Dichas inestabilidades tienen una implicación importante en este trabajo puesto que modifican la velocidad de combustión aparente de un frente de llama. Existe un valor crítico del **número de Peclet**, definido como la relación entre el radio de la llama y su espesor $P_e = r/\delta_l$, que caracteriza dicho crecimiento de las

inestabilidades. En esta sección se hace una breve revisión de las principales inestabilidades de una llama laminar.

Se pueden distinguir tres tipos distintos de causas o fenómenos responsables de estas inestabilidades, los cuales se explicarán brevemente en los siguientes apartados. Algunos de estos fenómenos además de generar una inestabilidad pueden también ser un estabilizador sobre el frente de llama, entendiéndose entonces que la estabilidad o inestabilidad de la llama viene determinada por el efecto global de los tres tipos.

2.3.2.1 *Inestabilidad por fuerzas volumétricas*

Las **inestabilidades por fuerzas volumétricas** son aquellas que se generan cuando se tiene un fluido más denso situado encima de otro fluido menos denso. Esta inestabilidad, se conoce también como inestabilidad de **tipo Rayleigh-Taylor**, según Kull [73]. De esta forma, se considera el frente de llama como una discontinuidad de densidad y la gravedad como fuerza volumétrica. En el caso de una llama que se propaga hacia arriba, se tiene la masa sin quemar, de mayor densidad, sobre la masa quemada, de menor densidad, constituyendo un sistema inestable.

Mediante consideraciones dimensionales, Williams [74] estimó que, bajo estas condiciones, si V_{sq} y V_q son las velocidades de la interfase respecto a la masa sin quemar y masa quemada respectivamente, se tiene que la longitud de onda de dicha inestabilidad es del orden de $V_{sq} * V_q / g$, y el tiempo de crecimiento del orden de $[V_{sq} * V_q]^{1/2} / g$, donde g es la aceleración de la gravedad. El valor típico de longitud de onda se estima en unos pocos centímetros y el tiempo de crecimiento en centésimas de segundo, el cual disminuye a medida que la velocidad de combustión decrece.

Por el contrario, la facilidad con la que se pueden conseguir llamas estables cuando el fluido más ligero se sitúa sobre el más pesado, como es el caso de las llamas que se propagan hacia abajo, o las llamas estabilizadas en un quemador vertical con la dirección del flujo hacia arriba, es atribuida, en parte, a una influencia estabilizadora de las fuerzas de volumen.

Las fuerzas volumétricas, como la gravedad, también puede influir en el proceso de combustión debido al efecto de la convección natural sobre el transporte de calor y de reactivos en las inmediaciones del frente de llama, Ronney [75].

Las configuraciones de llama que resulten estables desde el punto de vista de las fuerzas volumétricas, como por ejemplo una llama propagándose hacia abajo, también muestran un efecto estabilizador ante la aparición de perturbaciones de origen hidrodinámico de gran longitud de onda, Williams [74].

2.3.2.2 Inestabilidades de origen hidrodinámico

Este tipo de **inestabilidad de origen hidrodinámico** también se conoce como inestabilidad de **Darrieus y Landau** (DL) [76], quienes hicieron los primeros análisis de estabilidad para un frente de llama plano. Despreciando los efectos de las fuerzas de volumen, y considerando el frente de llama como una superficie sin estructura ni espesor, es decir, como una discontinuidad de densidad, que se propaga de forma normal a sí misma, a una velocidad constante e igual a la velocidad de combustión laminar, S_L , respecto a la mezcla sin quemar, se puede concluir que un frente de llama plano es inestable ante perturbaciones de cualquier longitud de onda. La **causa de esta inestabilidad reside en la expansión térmica** que sufren los gases al atravesar el frente de llama, provocando una reducción importante en las densidades, cuantificada por la relación de densidades entre la mezcla sin quemar y los gases quemados (ver más abajo).

Una perturbación de un frente de llama plano, con amplitud inicial A_0 experimenta un crecimiento exponencial de su amplitud con el tiempo dando:

$$A(t) = A_0 e^{\omega t} \quad [18]$$

La **tasa de crecimiento ω de las inestabilidades** (1/s) se puede expresar de acuerdo a Matalon [76], en primera aproximación y despreciando efectos de orden superior, como:

$$\omega = S_L * k * \omega_{DL} \quad [19]$$

Siendo

$$\omega_{DL} \equiv \frac{-\sigma + \sqrt{\sigma^3 + \sigma^2 - \sigma}}{\sigma + 1} \quad [20]$$

Donde: ω es la tasa de crecimiento de las inestabilidades (1/s), **k el número de onda** (inversa de la longitud de onda, $2\pi/\lambda$) y $\sigma = \rho_u/\rho_b$, **la relación de densidad** de la mezcla sin quemar respecto a la quemada o parámetro de expansión térmica.

Reconsiderado la estabilidad lineal de una llama plana Pelce et al. [77], Matalon et al. [78] y Frankel et al. [79] obtuvieron una corrección del resultado de la tasa de crecimiento de Darrieus Landau (DL) de forma que aparece el papel de la difusión en la estabilidad de la llama:

$$\omega = S_l k \omega_{DL} - S_l l_f [B_1 + \beta(Le_{eff} - 1)B_2 + PrB_3] k^2 \quad [21]$$

Aquí Pr es el número de Prandtl y los coeficientes B_1, B_2, B_3 , que dependen únicamente de σ , son todos positivos. Los tres términos que se multiplican por l_f corresponden a difusión térmica, molecular y viscosa, respectivamente. La difusión térmica, que tiende a suavizar las diferencias de temperatura, siempre tiene una influencia estabilizadora. Debido al gran cambio de viscosidad a través de la llama, la difusión viscosa también tiene una influencia estabilizadora. Por otro lado, el efecto de la difusión molecular depende de la composición de la mezcla o del número de Lewis efectivo de la mezcla Le_{eff} .

Para **reacciones exotérmicas**, donde se produce una reducción de la densidad, $\sigma > 1$, la tasa de crecimiento $\omega_{DL} > 0$, y el desarrollo de las inestabilidades dependerá del número de onda, pero, lo que determina el crecimiento de las inestabilidades es el signo del segundo término de la ecuación 21. Como puede deducirse de la expresión [20], ω se incrementa con el incremento de la relación de densidades mientras que se reduce cuando $\sigma \rightarrow 1$. Además el decrecimiento del espesor de llama [80] conduce también a una aumento de la velocidad de combustión y en consecuencia de ω (expresión [19]), sin tener en cuenta el término difusivo.

En la llama que se muestra en la **Figura 2.3**, se asume que dicha llama se propaga a la velocidad de llama laminar, S_l . A medida que los reactivos sin quemar se aproximan al frente de llama convexo, estos divergen ligeramente y, como consecuencia de ello, se produce un ensanchamiento del flujo de corriente que lo ralentiza. Como la velocidad de

la llama ha de permanecer constante, se va a originar automáticamente un desequilibrio dinámico, ya que la velocidad local de los reactivos, u , es menor que la velocidad de llama laminar en ese segmento. Esto hace que se acentúe aún más la protrusión de dicho segmento. Se puede concluir que el segmento cóncavo acentúa su retroceso hacia el gas quemado y la llama es inestable de acuerdo con el mecanismo hidrodinámico.

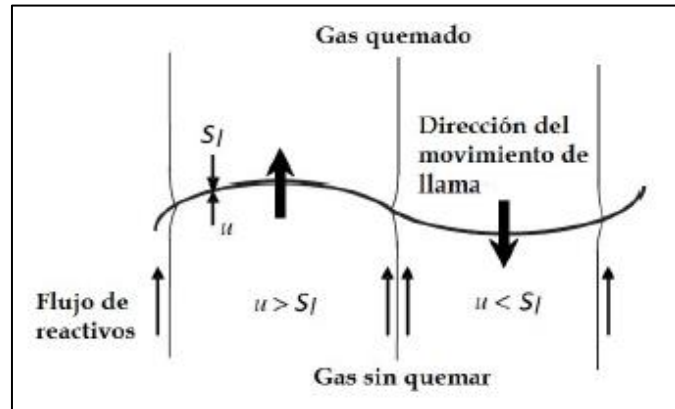


Figura 2.3: Inestabilidad hidrodinámica, Adaptada [3]

De esta forma, Darrieus y Landau llegaron a la conclusión de que no podía existir un frente de llama liso, en contradicción con resultados experimentales que prueban la existencia de frentes de llama estables (Zel'dovich [81]). Su análisis, además, indica que cuanto menor es la longitud de onda de la perturbación más rápido es su crecimiento.

A medida que la longitud de onda de la perturbación se aproxima al tamaño del espesor del frente de llama, la hipótesis de considerar un frente de llama como una discontinuidad de densidad, sin estructura, pierde su validez. Para perturbaciones de un tamaño de hasta 100 veces el espesor de la llama, los efectos térmico y difusivo dentro de la estructura de la llama pueden hacer variar su la velocidad en función de la forma que posea y del campo fluido local. Por otro lado, como indican Bychkov et al. [82], la curvatura de los frentes de llama esféricos utilizados en muchos experimentos también jugaría un papel importante para estabilizar perturbaciones de pequeña longitud de onda de origen hidrodinámico.

2.3.2.3 Inestabilidades termo-difusivas

En este apartado se describe el tipo de **inestabilidades termo-difusivas**, pero de antemano se anticipa que las mismas muchas veces pueden tener una influencia

estabilizadora, y evitan la aparición de inestabilidades de baja longitud de onda, justificando la obtención de frentes estables en la práctica [82].

La inestabilidad inducida debido a alteraciones hidrodinámicas puede equilibrarse o reforzarse aún más si cabe por fenómenos termo-difusivos. El número adimensional encargado de caracterizar la tendencia difusiva de un fluido es el **número de Lewis Le del reactivo en defecto**: $Le = \alpha_{mezcla} / D_{defecto}$ donde α_{mezcla} es la difusividad térmica de la mezcla combustible-aire y $D_{defecto}$ es la difusividad másica del reactivo en defecto (combustible o aire, dependiendo de si la mezcla es pobre o rica, y también de las respectivas difusividades).

El número de Lewis Le junto con la longitud de Markstein L_b caracterizan las inestabilidades termo-difusivas, de tal forma que éstas progresan si $Le < 1$ y $L_b < 0$. También puede aparecer el fenómeno de difusión preferencial cuando las difusividades másicas del reactivo en defecto y en exceso son distintas.

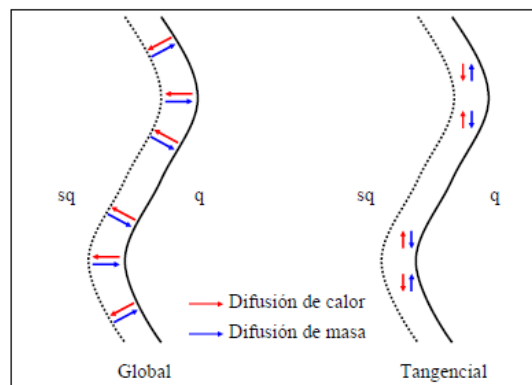


Figura 2.4: Inestabilidad termo - difusiva. Adaptada de [48]

Para mostrar la idea del mecanismo de esta inestabilidad se considera la **Figura 2.4** donde se muestra un frente de llama con una perturbación. En la parte donde la llama se adelanta respecto al sentido de avance de llama, se forma una región donde se concentra el reactivo en defecto (por flujo difusivo convergente) y desde donde se dispersa calor (por flujo calorífico divergente por conducción hacia la mezcla fresca) Bradley et al. [82]. La presencia de reactivo extra favorece la combustión y la dispersión de calor se opone a ello, ya que hace que la temperatura local de combustión disminuya. Todo esto implica que la calidad de la combustión local depende de la relación entre las difusividades másica y térmica.

Para $Le > 1$, la pérdida de calor predomina sobre la concentración del reactivo. La mayor pérdida de calor respecto a la zona de inflexión tiende a aplanar la llama y restaurar por tanto la estabilidad. Para el frente de llama retrasado respecto al sentido de avance de llama **Figura 2.4**, el razonamiento es el opuesto. La concentración del reactivo en la depresión del frente de llama es baja mientras que la temperatura local es alta. La pérdida de calor a los lados hace que la temperatura en el centro de la depresión sea muy alta, con lo que la combustión en este punto se hace aún más intensa. Por consiguiente, el centro de la depresión tiende a avanzar para continuar en su posición inalterada. Con un razonamiento análogo se puede demostrar que las llamas con $Le < 1$ son inestables. Las perturbaciones que se producen debido a este mecanismo tienen un tamaño que suele ser de un orden mayor que el espesor del frente de llama, **Figura 2.5**.

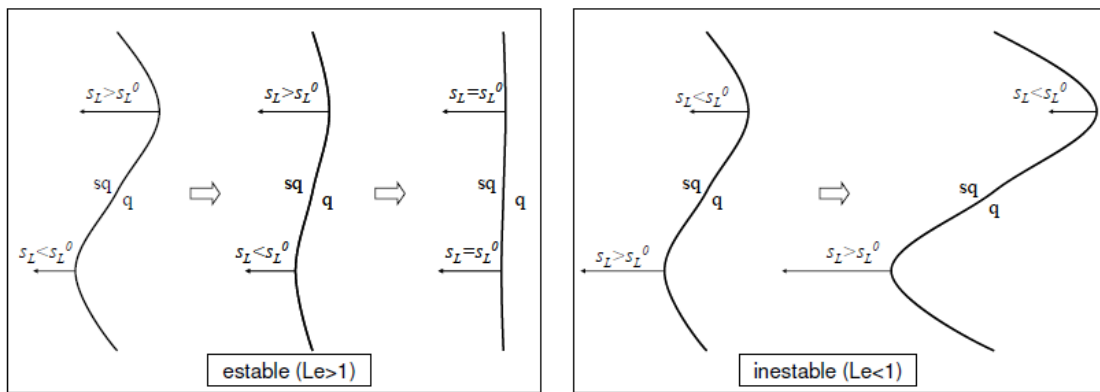


Figura 2.5: Perturbación del frente de llama como consecuencia de los efectos termo – difusivos en función del número de Le [50].

El radio en el cual el **frente de llama se convierte en celular** se conoce como **radio crítico**, r_{cr} , y corresponde al valor del **número de Peclet crítico**, Pe_{cr} , (radio crítico dividido entre el espesor de llama). La determinación del radio crítico de llama se basa principalmente en una combinación de observaciones fotográficas de la formación de pequeñas grietas sobre la superficie de la llama (aparición de celularidad) junto con la determinación gráfica del punto donde la celularidad comienza a hacer acto de presencia. A partir de ese momento la superficie de llama se incrementa rápidamente conduciendo a una aceleración de la tasa de combustión en el frente de llama. Dicho punto, determinado gráficamente, se define como el punto de la curva de la velocidad del frente de llama frente al radio de llama medio donde la velocidad de la llama aparente (basada en la superficie lisa del frente de llama) comienza a acelerarse a mayor ritmo.

Para los *hidrocarburos cuya difusividad es mayor que la del oxígeno* (el otro reactivo participante en la reacción de combustión) como por ejemplo el nheptano el número de Lewis es menor que uno, $Le_{eff} < 1$, y la longitud de Markstein es menor que cero, $Lb < 0$, y por tanto se está en condiciones de inestabilidad termo-difusiva cuando los dosados sean pobres, viéndose incrementada la velocidad del frente de llama, S_n , respecto a la velocidad de combustión por efecto del stretch de llama. Por el contrario, cuando los dosados sean ricos, se está en condiciones de $Le_{eff} > 1$ y $Lb > 0$, es decir condiciones de estabilidad, viéndose reducida la velocidad de llama por el stretch. Sin embargo, para el caso de *combustibles con difusividades menores a la del oxígeno*, como por el ejemplo el hidrógeno y el metano, el comportamiento es justamente el contrario que el expuesto anteriormente, es decir, será a dosados pobres cuando el número de Lewis adopta valores mayores que la unidad y la longitud de Markstein se hace negativa, y por tanto la llama se hace inestable desde el punto de vista termo-difusivo y justamente al contrario a dosados ricos [82] [83] [84].

En cuanto al efecto de aumentos de presión y temperatura, estudios realizados por Gong et al. [80] muestran en sus experimentos con combustibles de alto octanaje que **un aumento de la presión favorece la aparición de la celularidad**, ya que actúa disminuyendo el valor de la longitud de Markstein, y por ende directo sobre la inestabilidad termo-difusiva, además disminuye el espesor de llama y mantiene prácticamente constante la relación de densidades, actuando de esta forma sobre la inestabilidad hidrodinámica. Por su parte, el aumento de la *temperatura inicial* provoca un decrecimiento de la relación de densidades y del espesor de llama, suponiendo el primero a su vez un decrecimiento de la inestabilidad hidrodinámica y un aumento el segundo.

Verhelst et al. [85] en experimentos con mezclas de hidrógeno-aire comprobaron que la longitud de Markstein apenas se ve influenciada por la variación de la temperatura inicial, por tanto, ésta apenas tiene influencia sobre las inestabilidades termo-difusivas. Por ello, la inestabilidad del frente de llama es insensible a la temperatura inicial bajo los efectos combinados de las inestabilidades hidrodinámicas y termo-difusivas.

Con el incremento del dosado relativo, se puede observar gradualmente el desarrollo de la estructura celular a medida que la llama se propaga y a medida que la tasa

de stretch disminuye, la cual se produce cuando aumenta el radio de llama y ya no es suficiente para retener la aparición de la celularidad. Con lo que el inicio de la celularidad queda sujeto al estudio de la interrelación de las inestabilidades hidrodinámicas con la relación inestabilidades termo-difusivas – stretch.

Cabe considerar que existe un **mecanismo adicional**, de carácter **puramente térmico**, que **tiende a dar un carácter estable a la llama**. En base a las consideraciones anteriores, para una mezcla con $Le = 1$, puesto que existe un equilibrio entre ambas difusividades, $\alpha = D_{def}$, la temperatura debería ser la misma en todos los puntos del frente de llama de la *Figura 2.4*. Sin embargo, en la zona convexa se tiene que la masa sin quemar, rodeada de masa quemada, sufre un calentamiento mayor que el que tendría en un frente de llama plano y, por lo tanto, presenta una temperatura mayor y se quema con mayor velocidad. Puesto que el comportamiento contrario ocurre en la zona cóncava, este fenómeno tiende a alisar el frente de llama [82].

Por otro lado, si se tiene una mezcla binaria donde $D_{exc} \neq D_{def}$, se produce un efecto adicional llamado **difusión preferencial de los reactivos**. Considerando de nuevo una perturbación como la mostrada en la *Figura 2.4*, el reactivo con menor difusividad accede con más facilidad al interior de la región convexa que el reactivo con mayor difusividad que se dispersa en mayor grado hacia el exterior. Por lo tanto, en el interior de la región convexa se dispone de una concentración mayor del reactivo de menor difusividad, y en la región cóncava se dispone de una concentración mayor del reactivo de mayor difusividad, dando lugar en la perturbación a variaciones locales del dosado y por lo tanto de la velocidad de combustión [76].

Por ejemplo, se considera una mezcla rica $F_r > 1$, formada por dos componentes, combustible (reactivo en exceso) y oxígeno (reactivo en defecto). Se va a suponer que la difusividad del combustible es mayor que la del oxígeno y que el máximo de velocidad de combustión para ese combustible se corresponde con el dosado estequiométrico. En la zona convexa (cóncava), como $D_{combustible} > D_{oxígeno}$, el combustible se difunde preferentemente, más que el oxígeno, hacia el exterior (interior), quedando en el interior de la zona una mezcla menos (más) rica que la original lo que conlleva un aumento (disminución) de la velocidad de combustión y un alisamiento de la región. Si se estudia ahora el caso de la misma composición binaria, pero en una mezcla pobre $F_r < 1$,

entonces, el reactivo en defecto es el combustible y el reactivo en exceso el oxígeno. El combustible se difundirá de nuevo preferentemente hacia el exterior (interior) en la región convexa (cóncava), por lo que en la zona central de esta región se quema una mezcla más (menos) pobre que la original. La velocidad de combustión disminuye (aumenta) y la perturbación crece con el resultado de un frente de llama inestable [86].

Cuando los fenómenos térmicos y difusivos no tienen un carácter estabilizador no pueden contrarrestar la inestabilidad de tipo hidrodinámico en perturbaciones de pequeña longitud de onda y, entonces, no es posible obtener llamas adiabáticas estables [82].

2.3.2.4 Frente de llama celular

Como ya se indicado, como consecuencia de la aparición y crecimiento de inestabilidades, en determinadas condiciones el frente de llama deja de ser liso, y puede adoptar una forma más o menos rugosa. El grado de rugosidad puede variar desde la simple aparición de grietas en la superficie del frente hasta el estado que se conoce como **llama celular** (*cellular flame*), donde la superficie del frente de llama está formada por una sucesión de celdillas o células. Habitualmente, el estudio de este fenómeno se realiza mediante frentes de llama esféricos.

En experimentos, se ha observado que **el frente de llama celular se produce desde el comienzo de la combustión con mucha facilidad en mezclas inestables desde el punto de vista termo-difusivo**. Por ejemplo, Palm-Leis y Strehlow [56] en sus experimentos a presión ambiente con mezclas de propano con aire, obtuvieron frentes de llama prácticamente lisos para mezclas pobres. Sin embargo, observaron cómo aparecían celdas, de forma espontánea, en el frente de llama de mezclas ricas. Por otro lado, Groff [87] realizó ensayos a alta presión, también con mezclas pobres de propano - aire (estables desde el punto de vista térmico-difusivo), pero en esta ocasión sí que se observaron frentes de llama celulares. Por lo tanto, el mecanismo responsable del frente celular en este caso no podía ser de origen térmico-difusivo, sino que debía ser producido por inestabilidades de origen hidrodinámico.

Por la misma línea de estudios respecto al efecto de la celularidad, Markstein [88], demostró la presencia de tales inestabilidades en las llamas usando llamas de propano que se queman en tubos. En el caso de llamas esféricas en expansión, Manton et al. [89] mostraron la formación espontánea de células. Al-Shahrany et al. [90] resumen de manera completa las causas hidrodinámicas y termoacústicas de las inestabilidades en los recipientes cerrados que pueden distorsionar el frente de llama esférico liso.

Cuando se desarrollan estas inestabilidades, se aprecia un aumento en la velocidad aparente de la llama como resultado del aumento del área frontal de la llama. Dado que los modelos de combustión de volumen constante utilizados se basan en un frente de llama esférico liso, esto conduce a un cálculo incorrecto de la velocidad de combustión.

El **inicio de la celularidad en llamas de expansión esférica** ilustra más claramente la distinción entre las inestabilidades termo-difusivas e hidrodinámicas. Cuando una mezcla combustible se enciende centralmente, se desarrolla una llama esférica que se propaga hacia afuera. Debido a la naturaleza inestable del estado básico, el análisis de estabilidad no es sencillo. Primero, las perturbaciones gobiernan las ecuaciones que contienen coeficientes dependientes del tiempo y, por lo tanto, no admiten soluciones de modo normal con crecimiento exponencial. Además, la noción de estabilidad/inestabilidad debe definirse con precisión. Debido a que la llama se está expandiendo, solo se puede hablar de la tasa de crecimiento instantánea, lo que refleja la tendencia del frente de la llama hacia la estabilidad o la inestabilidad en un momento dado [76]. Si en un instante dado aparece una perturbación, pero la llama crece aún más rápido, la perturbación parece decaer en relación con la llama, lo que implica estabilidad. La inestabilidad se produce cuando la perturbación crece a un ritmo más rápido que el ritmo de crecimiento de la llama. Si bajo ciertas condiciones la llama es momentáneamente inestable en todo momento $t > t_c$, se produce una inestabilidad y puede ser observada en un experimento en un tiempo mayor que t_c .

Istratov y Librovich [91] consideraron un modelo de inestabilidad DL con una corrección al modelo de Markstein. Más tarde Bechtold y Matalon [92], basándose en el modelo hidrodinámico, dieron una descripción teórica del inicio de la inestabilidad en una llama en expansión esférica, incorporaron efectos hidrodinámicos y termo-difusivos de una manera más sistemática. Más recientemente, los resultados se generalizaron para

permitir coeficientes de transporte dependientes de la temperatura y un rango más amplio de relaciones de equivalencia o dosados, Addabbo et al. [93].

Así, de acuerdo con una descripción hidrodinámica [76], la tasa de crecimiento de las inestabilidades en llamas esféricas se puede expresar como:

$$\frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = \frac{\dot{R}}{R} \left\{ \tilde{\omega}_{DL} - \frac{l_f}{R} [\tilde{B}_1 + \beta (Le_{eff} - 1) \tilde{B}_2 + Pr \tilde{B}_3] \right\} \quad [22]$$

Este resultado es válido para $R > R_0$, donde R_0 es el radio de llama inicial, que se supone es mayor que la longitud de difusión l_f . El primer término $\tilde{\omega}_{DL}$ representa el efecto desestabilizador de la expansión térmica, mientras que los que multiplican a l_f representan, respectivamente, las influencias de la difusión térmica, molecular y viscosa. Los coeficientes $\tilde{\omega}_{DL}$ y $\tilde{B}_1, \tilde{B}_2, \tilde{B}_3$ depende solo de la relación de densidades σ y del número de onda n y, con la excepción de bajos valores de n , son todos positivos. Pr es el número de Prandtl, β el número de Zel'dovich, y Le_{eff} el número de Lewis efectivo de la mezcla.

El lado derecho de la ecuación [22] es positivo, cuando $Le_{eff} < Le_{eff}^* (\cong 1.0)$, y entonces la amplitud crece en el tiempo para todos los valores de n comenzando en $t = 0$. En este caso, la inestabilidad, que debe haberse desarrollado cuando el radio de la llama era más pequeño que el radio inicial R_0 , es de naturaleza termo-difusiva. De hecho, se observó que las llamas que se expandían esféricamente en mezclas ricas de hidrocarburos-aire o pobres de hidrógeno-aire, se caracterizaban por un número de Lewis suficientemente menor que uno, y adquirían una apariencia celular poco después de la ignición [89], [56].

Por otro lado, cuando $Le_{eff} > Le_{eff}^*$, el lado derecho de la ecuación [22] para un n dado cambia de signo solo cuando la llama alcanza el tamaño crítico $R = R_c$. Por lo tanto, la amplitud decae inicialmente, alcanza un mínimo en el tiempo $t = t_c$ correspondiente a R_c , y luego aumenta indefinidamente en el tiempo. Durante las primeras etapas de propagación, la inestabilidad hidrodinámica se suprime debido a la gran curvatura del frente que tiene un efecto estabilizador, y dado que para números altos de Lewis la difusión molecular ejerce influencias estabilizadoras en las perturbaciones de longitud de onda corta, se produce una llama lisa (estable). Observaron que, en las mezclas pobres de hidrocarburos-aire o ricas en hidrógeno-aire, la llama en expansión permaneció lisa durante las primeras etapas de propagación, pero adquirió una apariencia celular una vez

que alcanzó un tamaño crítico [28]. En este caso, la inestabilidad es de naturaleza hidrodinámica, desencadenada por los efectos de expansión térmica.

Una de las conclusiones de estos estudios es que las **llamas con $Le < Le^*$** (donde Le^* es un valor ligeramente inferior a la unidad) **se muestran inestables desde el punto de vista térmico-difusivo y presentan un frente de llama celular desde el principio.** Por el contrario, el carácter estable desde el punto de vista térmico-difusivo de las mezclas con $Le > Le^*$, contrarresta el efecto de la inestabilidad hidrodinámica. El resultado del balance de estos dos efectos determina si el frente de llama es liso o celular.

CAPÍTULO 3

Métodos experimentales para el cálculo de la velocidad de combustión laminar

3.1	Introducción	36
3.2	Técnicas experimentales ópticas de registro y análisis	38
3.2.1	Técnicas ópticas generales.....	39
3.2.2	Técnica de imágenes Schlieren	42
3.3	Métodos experimentales según el tipo de llama.....	43
3.3.1	Llamas estacionarias.....	43
3.3.2	Llamas no estacionarias	44
3.3.3	Métodos con bomba de combustión a volumen constante	44
3.4	Método de análisis de la evolución temporal de la presión en una bomba de combustión a volumen constante	47
3.4.1	Introducción.....	47
3.4.2	Velocidad de combustión laminar – medidas basadas en la evolución de la presión.....	48
3.5	Método de registro de la evolución temporal del frente de llama en una bomba de combustión a volumen constante	51
3.5.1	Introducción.....	51
3.5.2	Velocidad de combustión laminar – medidas basadas en registro de imágenes del frente de llama mediante fotografía Schlieren.	53
3.5.3	Comparación de los métodos de análisis de presión y de imágenes	56
3.6	Mezclas combustibles consideradas.....	60
3.6.1	Hidrógeno – Metano	61
3.6.2	Gas de síntesis (H ₂ – CO)	62

3 MÉTODOS EXPERIMENTALES PARA EL CÁLCULO DE LA VELOCIDAD DE COMBUSTIÓN LAMINAR

3.1 Introducción

Desde hace muchos años se vienen realizando estudios a cerca del comportamiento que tiene la velocidad de combustión dentro de la cámara de combustión, para distintas mezclas de aire-combustible, dosado y condiciones de operación. Para ello se han desarrollado históricamente técnicas que permiten analizar de manera más extensa dicho comportamiento. Una bomba de combustión a volumen constante es de común uso ya que ofrece dos distintos métodos para determinar la velocidad de combustión: imagen de propagación del frente de llama en condiciones de presión cuasi constante, o medidas del aumento de presión combinadas con un modelo de combustión a volumen constante [60]. Fiock et al. [94] fueron pioneros, en 1948, en el uso de imágenes de frentes de llama dentro de un recipiente esférico solido por medio de un delgado anillo de vidrio cilíndrico montado entre las dos mitades del recipiente. Combinó en sus análisis el radio medido por imágenes del frente de llama con las medidas de aumento de presión y un modelo de combustión a volumen constante para determinar la velocidad de combustión, (basado sobre la consideración que el cambio de volumen de la una cáscara de gas no quemado de pequeño espesor) y por lo tanto, se considera como una medición de aumento de presión con imágenes necesarias para determinar el radio de llama a medida que aumenta la presión, en lugar de para el análisis de presión constante.

Lewis y von Elbe [95] fueron los primeros en obtener la velocidad de combustión solo de las medidas de presión, mediante el uso de una superposición lineal entre la fracción de masa quemada y el aumento de presión, para estimar el radio de la llama durante la combustión. Metghalchi y Keck [96], desarrollaron un modelo posterior basado en la tasa de masa quemada, e introdujeron un modelo numérico de dos zonas en el cual el gas dentro del recipiente es dividido en zona quemada y no quemada separadas por un delgado frente de llama, y las ecuaciones de conservación de energía y volumen son resueltas numéricamente. Hill y Hung [97] y Elia et al. [98] ambos extendieron el análisis de Metghalchi y Keck [96] para incluir múltiples zonas dentro del a región de gas quemado, para permitir que el gradiente de temperatura dentro de esta zona pueda ser modelado más preciso. No obstante, según resumen de Saeed y Stone [99], el acuerdo

entre estos dos modelos es generalmente pobre, incitando al desarrollo de modelos computacionales de multi-zona más rigurosos. En su modelo la masa dentro del recipiente es inicialmente dividida en un número de zonas, el cual puede ser igual al radio o igual a la masa. Luego cada zona se divide más en un número de elementos de cascara. Las ecuaciones de conservación de volumen y energía interna son resueltas como ecuaciones diferenciales de primer orden de la presión y la temperatura de gas no quemado en el recipiente.

Posterior a ello, Ferguson [100] formuló un enfoque con un programa derivado del programa de simulación multi-zona de un motor de encendido por chispa de [101]. Este modelo permitió la determinación de la velocidad de combustión del registro de presión en el rango de presiones y temperaturas encontradas durante la combustión; se presentaron diferencias en la velocidad de combustión de hasta 10% cuando se compararon los valores de velocidad de combustión derivados del modelo multi-zona, con la suposición de Lewis y von Elbe de que la fracción de masa quemada es proporcional al aumento de presión [95].

Una ventaja de la técnica de bomba a volumen constante incluye la posibilidad de obtener datos sobre un rango de incremento de presión y temperatura, como también la característica de obtener un gran número de puntos de resultados de un solo experimento. Algunos autores describen la técnica a volumen constante como la más versátil y precisa de los métodos de propagación de la llama [102].

Las instalaciones para medir la velocidad de combustión laminar pueden ser clasificadas en dos categorías: **volumen constante** y **presión constante** [3]. La diferencia clave entre ambas categorías son los rangos de presión y temperaturas que se pueden alcanzar en los experimentos. Los **métodos a presión constante** utilizan principalmente presión atmosférica y temperaturas aproximadamente constantes, mientras que los **métodos a volumen constante** pueden medir velocidades de combustión bajo un amplio rango de presiones y temperaturas [103].

Otro criterio de clasificación para los métodos de medida de velocidad de combustión laminar es distinguir si la llama permanece estacionaria o bien si el frente de llama se desplaza respecto a un sistema de referencia fijo, es decir que dichas técnicas están divididas en dos métodos: llamas **estacionarias** y **no-estacionarias**, las cuales se

explican en profundidad en los siguientes puntos. En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**, se presentan los métodos más sobresalientes para el cálculo de la velocidad de combustión los cuales son ampliados en ítems posteriores.

Tabla 3.1: Métodos para la determinación de la velocidad de combustión. Adaptada de [3].

	Método del quemador de Bunsen	
	<hr/>	
	Método del quemador de llama plana	
Llamas estacionarias		Flujos opuestos
	Método de estancamiento	<hr/>
		Flujos contra pared
	<hr/>	
	Método del tubo transparente	
	<hr/>	
Llamas no-estacionarias	Método de la burbuja de jabón	
	<hr/>	
	Método de la bomba de combustión a volumen constante	

3.2 Técnicas experimentales ópticas de registro y análisis

Se pueden utilizar diversas técnicas ópticas para el registro y análisis de la información relativa a los frentes de llama. Un primer grupo de técnicas son aquellas que, sin formar imagen, sí registran la radiación electromagnética producida durante la combustión a través de dispositivos que permiten su cuantificación. Las principales técnicas sin imagen utilizadas son: la basada en la detección de radiación emitida espontáneamente por moléculas excitadas cuando vuelven a su estado fundamental, mejor conocido como quimioluminiscencia [104,105]. Otra técnica es la de excitación de algunas moléculas con una fuente de radiación externa generalmente láser, en la cual se detecta entonces la radiación producida por las emisiones estimuladas y se conoce tanto la frecuencia de estimulación como la de emisión y una última técnica es la de combinar la luz proveniente de diferentes receptores para obtener imágenes de mayor resolución, es conocida como interferometría.

Otro grupo de **técnicas ópticas** son las que sí **generan imagen**, como las aplicadas en esta Tesis. A continuación, se describe brevemente las técnicas ópticas más utilizadas y, se hace un amplio énfasis o explicación sobre la técnica utilizada en este estudio.

3.2.1 Técnicas ópticas generales

3.2.1.1 Técnica de fotografía directa

Esta técnica consiste en el registro de toda la intensidad lumínica emitida por la llama sin la utilización de ningún tipo de filtro, mediante una cámara de alta velocidad. Es una técnica muy simple que detecta la intensidad a lo largo de la línea de observación.

3.2.1.2 Técnica de fotografía de sombras (*Shadowgraph*)

Es una técnica óptica muy sencilla basada en la fotografía de sombras, como lo son las sombras que se proyectan sobre la pared cuando hacemos algún movimiento. Consiste en la desviación de los rayos de luz cuando sufren una refracción al variar el índice de refracción del medio que atraviesa el haz. Se utiliza para detectar no uniformidades en medios transparentes como el aire, agua, etc.

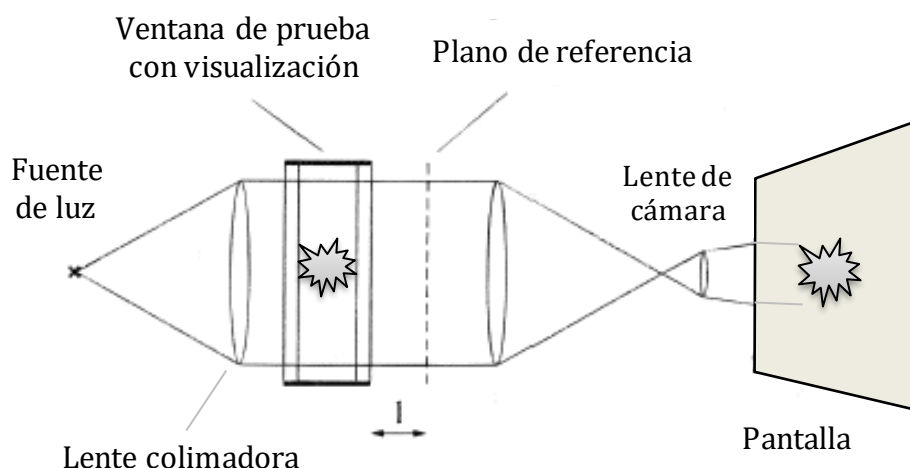


Figura 3.1: Principio físico de funcionamiento de la técnica óptica *Shadowgraph*.

3.2.1.3 Técnica de emisión de una llama

Esta técnica se clasifica en dos grupos: la *emisión continua* que es debida a la radiación de las partículas, por ejemplo, las partículas de hollín que se generan tras la combustión. Y la *emisión discreta* que se da debido a las bandas espectrales y a las

transiciones electrónicas producidas entre diferentes estados energéticos en moléculas excitadas, denominada quimioluminiscencia.

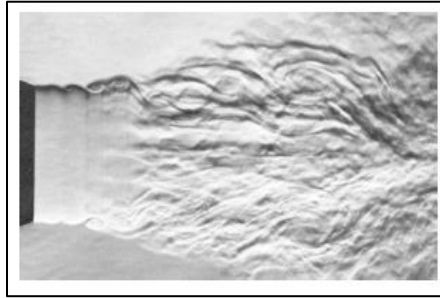


Figura 3.2: Fotografía de una emisión de una llama de propano.

3.2.1.4 Técnicas con láser LIF y PLIF

La técnica denominada *Laser Induced Fluorescence* (LIF) es una técnica espectroscópica que se utiliza para estudiar la estructura de las moléculas, detectar las especies, medir concentración de combustibles y visualizar flujos. Esta técnica puede resumirse en dos pasos, primero la absorción de un fotón por una molécula y después la emisión espontánea de otro fotón a una longitud de onda diferente, fluorescencia.

Por otro lado, se conoce como *Planar Laser-Induced Fluorescence* (PLIF) la técnica LIF cuando se aplica en dos dimensiones, es decir en el plano, por lo tanto, los procesos físicos en que se rige son los mismos, la absorción y emisión de radiación.

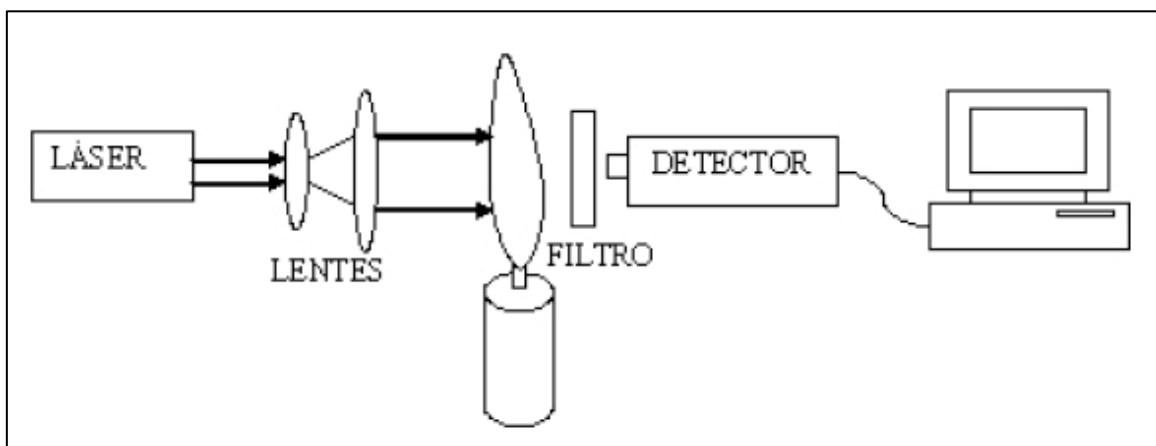


Figura 3.3: Esquema de un equipo óptico con la técnica LIF - PLIF.

La principal diferencia entre las técnicas LIF y PLIF es que con la primera se obtiene información de cada punto de la llama y/o el sistema a analizar, y con la segunda

se obtiene información de un plano, es decir, el sistema a analizar se divide en planos, y se obtienen imágenes en dos dimensiones.

3.2.1.5 Técnica de velocimetría de imagen de partículas PIV

PIV es un método no intrusivo de visualización de flujo, funciona a través de la iluminación de partículas suspendidas en el fluido, estas partículas siguen el flujo del fluido y, como tal, pueden usarse para estudiar las propiedades del flujo, así como su estructura. El PIV no rastrea cada partícula individualmente, sino que se rastrea el movimiento masivo de partículas dentro de un área de interrogación.

La evaluación de la adquisición de imágenes se basa en la ecuación elemental en la que la distancia expresa la traza del desplazamiento de partículas arrastradas en la corriente de fluido a la vez y, la posición deseada de las partículas se registra con la mayor precisión posible. Es importante que la posición de las partículas no haya cambiado durante la iluminación. Es decir, la luz debe tener corta duración, por lo tanto, la luz láser es discontinua. Es necesario registrar dos veces de la posición de la partícula. El primer registro captura la posición inicial de la partícula y el segundo registro captura su posición final.

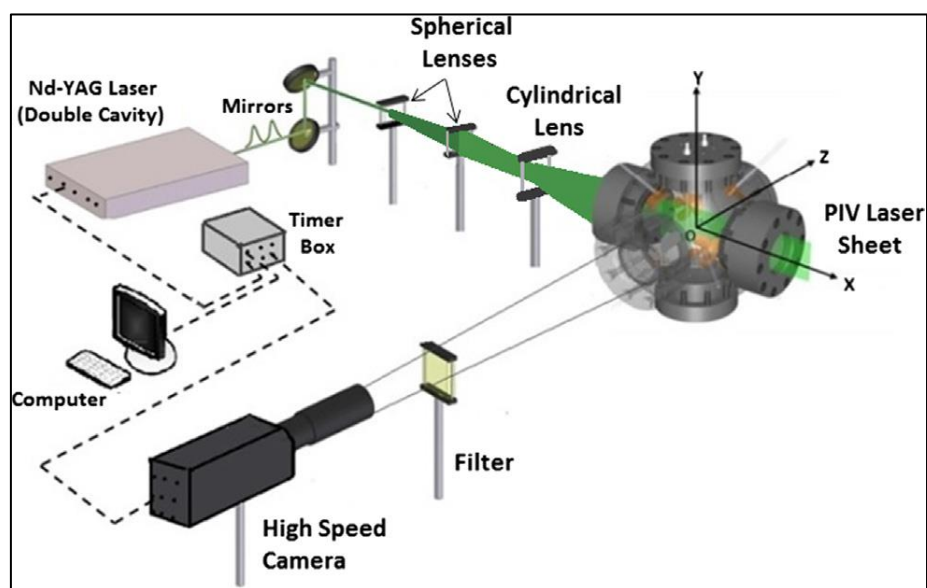


Figura 3.4: Esquema de un equipo óptico para la técnica PIV [106].

3.2.2 Técnica de imágenes Schlieren

La técnica de imágenes Schlieren permite obtener información más detallada de la llama, como la posición y orientación de las inhomogeneidades de la llama. La principal mejora que ofrece esta técnica es que elimina la luz de fondo detectada a través de la inclusión en el esquema óptico de un filtro espacial, que típicamente consiste en un borde afilado o cuchilla que elimina esta radiación [104]. Por lo tanto, en la pantalla de detección sólo se observan los rayos de luz desviados al atravesar el medio. Al eliminar toda la luz de fondo la imagen detectada permite la apreciación de más detalles del objeto, ver **Figura 3.5**. Respecto a una técnica de imagen de sombras, sin obturador, que recoge la intensidad de luz que atraviesa el medio a analizar, y que en consecuencia depende de la densidad del mismo, la técnica Schlieren genera imágenes cuya intensidad depende del gradiente de la densidad, proporcionando una información más adecuada del proceso.

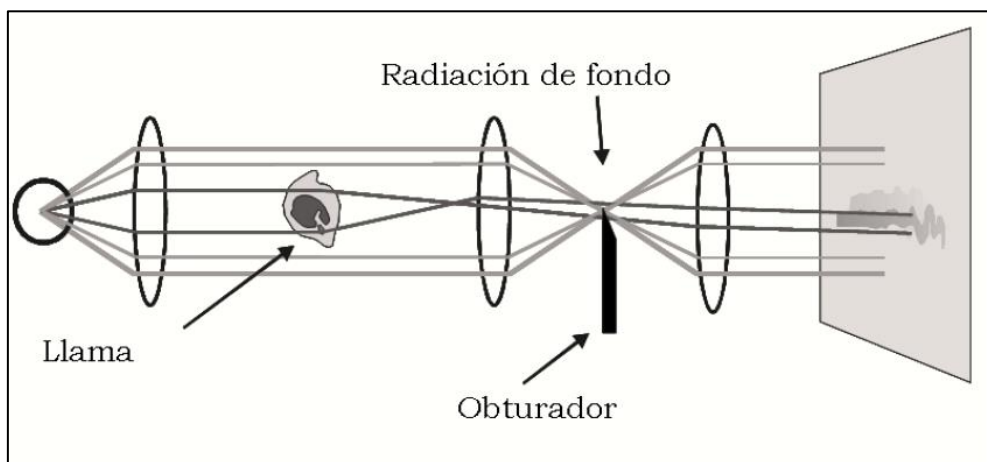


Figura 3.5: Principio físico de funcionamiento de la técnica Schlieren [104].

La técnica Schlieren ha sido ampliamente usada para múltiples propósitos en el entorno de la combustión como se puede observar en la bibliografía revisada. Oppenheim y Kuhl [107] estudiaron con técnica Schlieren el desarrollo de la llama en un recipiente cerrado enfocando su estudio a la transmisión de calor a las paredes de este recipiente durante el proceso de combustión. Atzler y Lawes [108] caracterizaron la velocidad de combustión de aerosoles y construyeron una cámara de combustión, deduciendo, que la velocidad de combustión de aerosoles es mayor que la de las correspondientes mezclas gaseosas monofásicas. Bradley et al. [109] estudiaron las inestabilidades y la formación de estructuras celulares durante las explosiones esféricas gaseosas usando luz natural y fotografía de alta velocidad, utilizando conceptos que marcan el comienzo de las

inestabilidades además de utilizar la teoría de estabilidad lineal de Bechtold y Matalon [92].

Continuando con los trabajos realizados, Haq et al. [110] estudiaron las llamas laminares y turbulentas y ampliaron los conceptos de crack, estudiando sus formas, que son las perturbaciones precursoras de la celularidad. Por su parte Agrawal [111] obtuvo una relación para la velocidad de combustión a partir de la velocidad de llama dividida por un coeficiente de expansión.

Por otro lado, Gabano et al. [112] utilizaron esta forma de capturar la evolución de las llamas para hacer un estudio del autoencendido, de las oscilaciones acústicas y del knock. Manton et al. [113] utilizaron las técnicas Schlieren y registros de presión para estudiar llamas de metano, propano y etileno. Singer y von Elbe [114] estudiaron la propagación de llamas de metano-aire. Y para finalizar, nuevamente Bradley et al. [115] estudiaron la problemática de las velocidades de combustión turbulenta.

3.3 Métodos experimentales según el tipo de llama

3.3.1 Llamas estacionarias

En este tipo de métodos, una corriente continua de gas premezclado fluye hacia una llama estacionaria a una velocidad igual a la velocidad de combustión [60]. El principal inconveniente de este método es que es difícil conseguir una llama plana en un espacio libre, por lo que se necesita idear un sistema que proporcione estabilidad a la llama. Un ejemplo es el de hacer fluir el gas de forma ascendente por el interior del tubo, de tal manera que el espacio anular a la salida de éste que separa el frente de llama del borde del quemador proporcione una fuente de encendido y fije la llama al quemador. Estos métodos finalmente acaban por distorsionar la llama, de manera que nunca se tendrá una llama completamente unidimensional.

Entre los principales métodos de llama estacionaria se pueden mencionar: el **método de quemador de Bunsen**, que es el método más antiguo para estudiar la velocidad de combustión; el **método de la trayectoria de partículas**, el mismo es un caso particular del quemador de Bunsen para poder calcular la velocidad de una forma más precisa, empleando una tobera modelada aerodinámicamente; el **método del quemador**

de llama plana, el cual corrige la principal dificultad del método del quemador de bunsen de identificar la superficie de la llama, el mismo consta de un quemador refrigerado por agua conformado en bronce poroso; el **método de estancamiento de llama o stagnation flame** parte de la creación de una llama estabilizada estancada, ya sea enfrentando dos flujos divergentes opuestos, o proyectando el flujo contra una pared.

3.3.2 Llamas no estacionarias

En estos métodos de medida la llama se propaga a través de la mezcla inicialmente en reposo, después de que salta la chispa y se enciende la mezcla, avanzando la llama con una velocidad respecto a la del sistema de referencia fijo.

Entre los principales métodos de este tipo de llamas tenemos: **método del tubo transparente**, es uno de los primeros métodos que se emplearon, el mismo consta de un tubo horizontal transparente con uno de sus extremos abiertos y el otro cerrado; **método de la burbuja de jabón**, se usa una mezcla homogénea de combustible para inflar una burbuja de jabón alrededor de un par de electrodos; y el **método de la bomba de combustión a volumen constante**, el cual es explicado ampliamente en el ítem siguiente. Es importante resaltar que los otros métodos no han sido explicados en detalle, ya que no se han utilizado en el desarrollo del trabajo.

3.3.3 Métodos con bomba de combustión a volumen constante

Los métodos de combustión en una bomba a volumen constante se consideran versátiles y exactos [102]. Las bombas pueden tener o no acceso óptico para grabar imágenes, pero siempre es posible registrar la evolución de la presión. El desarrollo inicial de esta técnica se debe a Lewis y von Elbe [116,117]. Posteriormente, Grumer et al. [118] obtuvieron una fórmula más exacta para obtener la fracción de masa quemada a partir de la presión. Para ello, realizaron experimentos de hidrógeno a dosados ricos, teniendo en cuenta la falta de esfericidad y el arrugamiento del frente de llama.

Este método consiste en el encendido de una mezcla de combustible premezclado en el interior de una cámara de volumen constante, capaz de soportar el aumento de presión que genera la combustión [3]. Normalmente, se emplea una única chispa de ignición que se sitúa en el centro geométrico de la cámara de combustión. El encendido

puntual de la mezcla origina un frente de llama que, despreciando el efecto de gravedad, se puede suponer esférico y concéntrico con la chispa de ignición y la geometría.

A medida que la llama avanza hacia afuera englobando mezcla fresca, la expansión de los gases quemados provoca un aumento progresivo de presión y de temperatura durante el proceso. Es decir, que las condiciones de presión y temperatura de la mezcla fresca que se quema en el frente de llama son distintas en cada instante de la combustión [48] debido a la compresión. Esta se supone isentrópica, una vez que se comprueba que las diferencias en la concentración y en las difusividades entre los distintos componentes de la mezcla no son demasiado grandes. Además, la transmisión de calor de la mezcla fresca a las paredes se puede considerar despreciable, ya que la temperatura inicial de ambos coincide y el tiempo de duración del proceso de combustión es relativamente corto.

Se pueden obtener de esta manera los efectos de la temperatura y presión en la velocidad de combustión en un amplio rango a partir de un solo experimento. Restringiéndose a los datos cuando el tamaño de la llama no es muy grande, se puede considerar que la presión y temperatura de la mezcla fresca que entra en el frente de llama son las del estado inicial [3]. Esto es importante porque los métodos de diagnóstico de la combustión basados en registrar las imágenes de crecimiento de frente de llama requieren que el aumento de presión sea pequeño (del orden del 10% como máximo). Por el contrario, los métodos de diagnóstico basados en el crecimiento de la presión se basan en considerar dicho crecimiento para obtener las velocidades de combustión.

El incremento de la temperatura origina que la velocidad de la llama crezca continuamente desde el centro de encendido de la mezcla hasta la pared. Cabe destacar que la velocidad con la que se propaga este frente de llama esférico no coincide con la velocidad de combustión laminar. Se tiene, por tanto, la siguiente relación entre la **velocidad de avance de frente de llama, S_n** , la **velocidad de los gases sin quemar** justo delante del frente de llama o **velocidad de arrastre o expansión, V_a** , y la **velocidad de combustión laminar, u_l** .

$$S_n = u_l + V_a \quad [23]$$

Dahoe [119] describe más detalladamente este movimiento de los gases. De esta forma, si se mide simultáneamente la evolución temporal del radio del frente de llama esférico de los gases quemados en los primeros instantes de la combustión en los que la presión y por tanto la temperatura de la mezcla fresca apenas aumenta y se puede considerar constante. Esta etapa de la combustión se denomina periodo de pre-presión. Al igual que el radio, se mide la evolución temporal de la presión en la bomba durante toda la combustión, y se puede determinar la velocidad de combustión laminar, mediante un modelo diagnóstico para cada instante del proceso y mediante una técnica de diagnóstico óptico.

Existen pocos estudios en los que se utilicen recipientes de combustión de volumen constante y que hayan utilizado tanto la técnica de imagen de frente de llama como las técnicas de aumento de presión. Groff [87] realizó un estudio de las llamas de propano-aire en un recipiente de combustión de volumen constante y utilizó la técnica de imagen para obtener velocidades de llama cuando el aumento de presión era demasiado pequeño para las mediciones de presión, y midió el aumento de presión junto con un modelo de dos zonas para determinar velocidades de combustión posteriores.

Sin embargo, la comparación de los dos métodos no fue posible ya que las condiciones para las cuales se determinaron las velocidades de combustión no eran equivalentes. Además, los valores de la velocidad de combustión obtenidos a partir de las imágenes del frente de la llama se encontraron multiplicando la velocidad de la llama directamente por la relación de densidad, aunque posteriormente se demostró [58] que esto daba como resultado valores incorrectos a menos que se utilice un valor de la velocidad de llama sin stretch.

Farrell et al. [120] utilizaron ambos métodos para determinar las velocidades de combustión de una amplia gama de combustibles a temperaturas y presiones elevadas, y encontraron que los resultados de las mediciones de presión eran sistemáticamente más altos que los del método de imagen de frente de llama. Se sugirió que esto podría deberse al hecho de que la medición de la presión registra la evolución del gas quemado en lugar de la propagación del frente de llama al gas no quemado [58], o que su método para extrapolar las mediciones de la velocidad de combustión para las condiciones iniciales contenían algún error sistemático. Un estudio reciente que incluye mediciones de ambas

técnicas Xiouris et al. [66], que ha realizado comparaciones indirectas entre las dos técnicas por medio de modelos, pero los experimentos utilizaron diferentes recipientes. Por lo tanto, un estudio para conciliar los dos métodos y hacer comparaciones directas es de interés.

Iglesias [3], [46] presentó en su tesis doctoral resultados obtenidos con los métodos de registro de quimioluminiscencia en una bomba de combustión esférica, analizando también la presión durante el proceso. Obtuvo acuerdos razonables de las velocidades de combustión laminar, considerando de forma detallada las definiciones adecuadas de las velocidades que se pueden obtener con cada método de análisis.

En los apartados 3.4 y 3.5, se explica detalladamente como se han utilizado estos dos métodos para el desarrollo de la presente tesis.

3.4 Método de análisis de la evolución temporal de la presión en una bomba de combustión a volumen constante

3.4.1 Introducción

Como se explicó anteriormente, una ventaja a menudo citada del método de aumento de presión es la amplia gama de datos recopilados, que pueden ajustarse a una correlación para su uso directo en modelos de combustión y simulaciones de motores. El trabajo de Lindström et al. [121] demostró como, la incorporación de una correlación de velocidad de combustión en un sistema de motor redujo drásticamente el número de variables de entrada requeridas.

Las correlaciones para la velocidad de combustión encontradas en la literatura se basan comúnmente en una función polinómica del dosado, multiplicada por funciones en forma de potencias de la temperatura y la presión. Las primeras versiones de tales correlaciones Lewis y Von Elbe [95] son en forma de un polinomio de segundo orden de dosado relativo y valores constantes de exponentes de presión y temperatura. Los polinomios de orden superior se han utilizado para representar el efecto del dosado relativo, hasta el cuarto orden por Stone et al. [122].

Metghalchi y Keck [25] en un trabajo pionero introdujeron una dependencia lineal de los exponentes de presión y temperatura con el dosado. Se ha identificado que el efecto

de la temperatura sobre las velocidades de combustión es de particular importancia con respecto a una serie de problemas, incluida, en cierta medida, la pre-ignición en los motores de encendido por chispa [123]. Un estudio sobre la dependencia de la temperatura de llama de etanol-aire por Konnov et al. [23] ha mostrado una función de segundo orden del dosado como exponente en el término de temperatura en una relación de potencia simple. Marshall et al. [124] sugirieron la autodependencia del exponente de temperatura con respecto a la temperatura, pero no se encontró que fuera significativo.

Existen métodos basados en la medición de la evolución de la presión, $p(t)$, en el interior de la bomba, una vez que la llama ha crecido hasta un tamaño lo suficientemente grande como para que la variación de presión sea significativa. La relación entre la presión y la velocidad de combustión no es directa, y para ello resulta necesario aplicar un modelo como el que se verá en el siguiente ítem, en el que se propone un modelo de n zonas (en este caso dos zonas) para la combustión, planteando las ecuaciones energéticas y principios termodinámicos correspondientes y calcular la velocidad de combustión a partir de la presión.

3.4.2 Velocidad de combustión laminar – medidas basadas en la evolución de la presión

3.4.2.1 Modelo de diagnóstico de dos zonas

La evolución temporal de la presión registrada durante la combustión, junto a la composición y la masa de los gases que forman la mezcla, son las principales entradas del **modelo de diagnóstico de dos zonas** [104][125], el cual se basa en la división de la cámara de combustión en dos zonas esféricas y concéntricas, mezcla fresca y gases quemados. A través de este modelo se obtienen numerosos parámetros característicos del proceso de combustión, como la temperatura de la mezcla fresca (T_{sq}), la evolución de la masa de los quemados (m_q, FMQ) y la velocidad de combustión laminar (u_l^p) [48], [104], [125]]. Este método, que se describe a continuación, está suficientemente contrastado y proporciona valores que se consideran correctos para las variables de salida. En el apartado siguiente se describe un método simplificado de obtención de la velocidad de combustión también a partir de la presión, pero con la ventaja de un muy reducido coste de cálculo.

Las principales **hipótesis del modelo de diagnóstico de dos zonas** son las siguientes:

1. El volumen interior de la bomba de combustión se divide en **dos zonas**: zona de mezcla fresca o sin quemar (identificada con el subíndice sq) formada por la mezcla antes de producirse la combustión que inicialmente está en reposo, y la zona de quemados (identificada con el subíndice q) que está compuesta por los productos resultantes del proceso de combustión.
2. En cada una de las zonas se considera **uniformes la temperatura, composición química y resto de propiedades intensivas**. La composición de la zona fresca se supone que no cambia en el tiempo. La composición de la zona quemada evoluciona como resultado de aplicar el equilibrio químico a los productos de combustión en las condiciones termodinámicas (presión y temperatura) existentes en cada instante.
3. La **presión es uniforme e igual en ambas zonas**. Esto es consecuencia de considerar la combustión como una deflagración [48].
4. La **ecuación de los gases ideales se utiliza como ecuación térmica de estado** para cada zona. Se conserva la masa total y el volumen de gas en la bomba.
5. La **transmisión de calor** se realiza entre la mezcla contenida dentro de la bomba de combustión y las paredes que la limitan, pero no entre las dos zonas.
6. Se considera **un único flujo másico** que se corresponde con el flujo ligado al proceso de combustión que trasiega masa desde la zona fresca hasta la zona quemada, se denomina flujo de combustión y se denota por $\dot{m}_{sq \rightarrow q}$.
7. Se supone que el **frente de llama** es una superficie esférica, lisa y delgada que tiene por centro la posición de la bujía y está limitada por las paredes de la cámara de combustión.

Las **ocho principales variables del modelo** son las temperaturas, masas y volúmenes en ambas zonas, el flujo másico de la zona fresca a la quemada como consecuencia de la combustión, y la presión que se supone la misma en ambas zonas. La resolución del problema está basada en las siguientes **ecuaciones**:

- Ecuación de **conservación de la masa**: $\frac{dmq}{dt} = -\frac{dmsq}{dt}$
- Ecuación de **conservación de la energía**, en cada zona: $\frac{dU}{dt} = Q + W + He - Hs$
- Ecuación de **estado**, en cada zona: $P \cdot V = m \cdot R \cdot T$
- Ecuación de restricción del volumen. $\frac{dVq}{dt} = -\frac{dVsq}{dt}$

La presión se mide experimentalmente y se considera la octava entrada del modelo. Bajo esta condición el modelo tiene una única solución. Como **resultados** se obtienen las temperaturas en ambas zonas, T_{sq} y T_q , la velocidad de combustión, u_l^p , y la fracción de calor liberado (FQL), para unas condiciones iniciales de temperatura, presión y dosado dadas. La velocidad de combustión u_l^p se obtiene a partir de la tasa de quemado, directamente relacionada con la evolución de la presión, mediante la siguiente expresión.

$$u_l^p = \frac{\dot{m}_{sq \rightarrow q}}{\frac{P}{R_{sq} \cdot T_{sq}} A_f} = \frac{\dot{m}_{sq \rightarrow q}}{\rho_{sq} A_f} \quad [24]$$

3.4.2.2 Método simplificado de Lewis y von Elbe

Este método es el resultado de un trabajo pionero realizado por los doctores Lewis y von Elbe [95] (LVE) para el cálculo de las velocidades de combustión en una cámara de combustión esférica a volumen constante de forma más simplificada. Las entradas de este modelo son las medidas de presión durante el cálculo numérico, así como sus derivadas y las presiones tanto finales como iniciales [3] [126] [95].

Este método está basado en las siguientes hipótesis [126]:

- Antes del encendido de la mezcla, el gas sin quemar tiene una composición y una temperatura uniforme.
- La llama es lisa (no celular) y se propaga de forma esférica hacia las paredes de la cámara de combustión.
- El espesor del frente de llama es despreciable.
- La zona de masa quemada está en equilibrio termodinámico y químico local. Los gases sin quemar son comprimidos isoentrópicamente.

- No hay pérdida de calor entre los gases quemados y sin quemar, ni hacia las paredes de la cámara de combustión (combustión adiabática).
- El aumento de presión durante la combustión es igual en toda la cámara.

Este método se basa en la hipótesis de que en cada instante la fracción de aumento de presión frente al aumento total es proporcional a la fracción de masa quemada.

$$\frac{m_q}{m_{sq}+m_q} = Y_q = \frac{p-p_0}{p_f-p_0} \quad [25]$$

Donde p es la presión de la bomba en un instante dado, p_0 es la presión inicial previa al encendido y p_f es la presión final de los productos basada en la combustión adiabática a volumen constante. La velocidad de combustión laminar se obtiene de forma directa en este método como:

$$u_{lq} = \frac{R \left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{1}{\gamma_{sq}}} \frac{dp}{dt}}{3(p_f-p_0) \left[1 - \left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{1}{\gamma_{sq}}} \left(\frac{p_f-p}{p-p_0}\right)\right]^{\frac{2}{3}}} \quad [26]$$

En la expresión se puede ver que la velocidad de combustión es proporcional a la derivada temporal de la presión. Como se ha planteado en la introducción, la velocidad de combustión a partir de medidas basadas en la presión no tiene en cuenta los efectos del espesor de la llama y la tasa de *stretch* resultante. En la práctica, el frente de llama de una llama laminar incorpora un espesor de llama típicamente menor que 0.1 mm , siendo el valor exacto dependiente del tipo de combustible quemado, así como de la estequiometría y de las condiciones iniciales de la mezcla.

3.5 Método de registro de la evolución temporal del frente de llama en una bomba de combustión a volumen constante

3.5.1 Introducción

La velocidad de combustión también puede obtenerse a partir del análisis de las de imágenes sucesivas del frente de llama. En la *Figura 3.6* se puede ver una sucesión de imágenes del frente de llama de una combustión de metano en aire, partiendo de unas

condiciones iniciales de 0.1 MPa y 300 K, con un dosado estequiométrico. En dicho experimento se puede observar en las imágenes que la llama progresa de una forma casi esférica, es decir que tiene un comportamiento totalmente laminar, ya que no presenta grietas o inestabilidades. Simultáneamente se puede ver la evolución de la presión durante el proceso. Hay que señalar que para un radio de llama de 45 mm (próximo al máximo con posibilidad de obtener imágenes a través de las bases transparentes de la bomba), la presión sólo ha aumentado un 13% en relación al aumento total. Esto es importante, porque entre las hipótesis del método se encuentra una que supone que la presión no difiere significativamente del valor inicial.

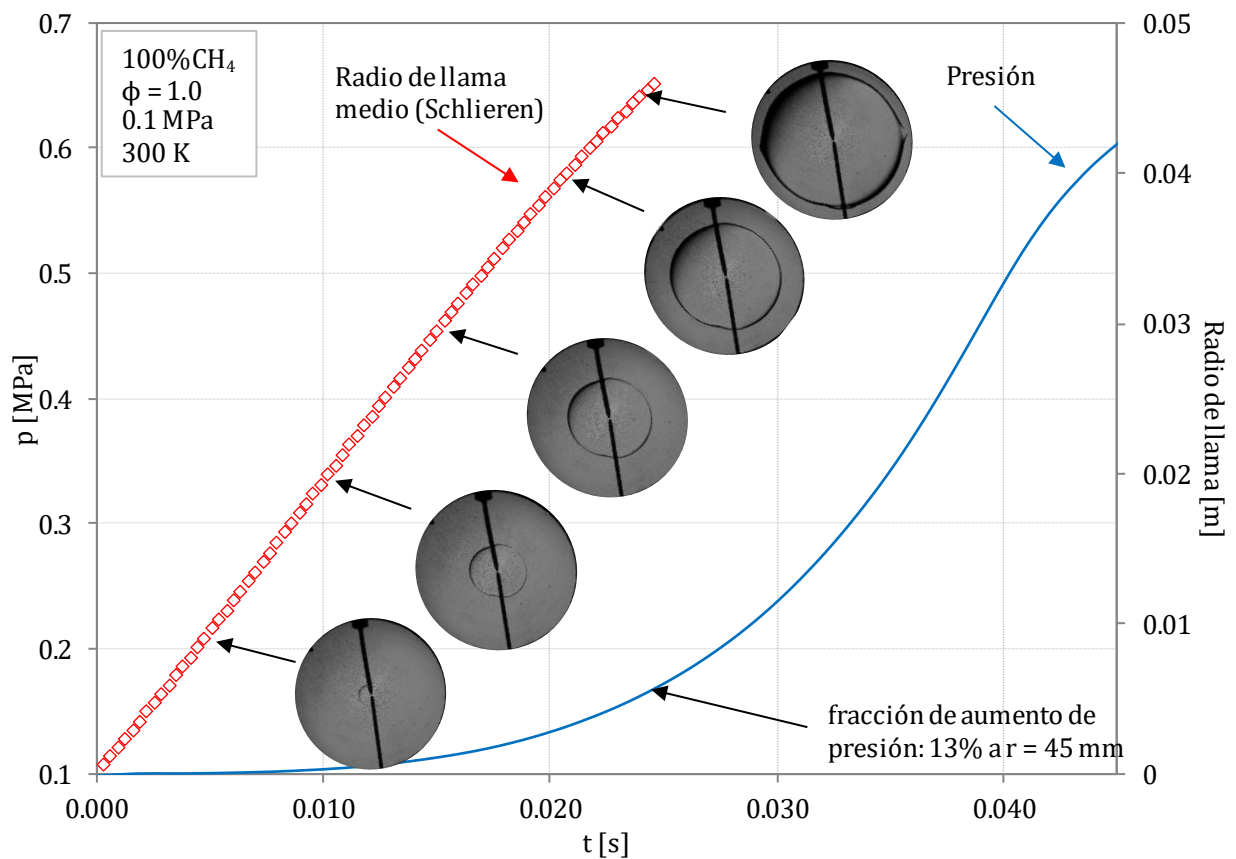


Figura 3.6: Relación entre el incremento de presión y las imágenes Schlieren.

Esta técnica ha ganado mucha atención recientemente, ya que permite identificar los efectos de la ignición y el estiramiento de la llama de una manera que no es posible sin acceso óptico. Una de las dificultades de la aplicación de este método es poder determinar adecuadamente las longitudes de Markstein, para relacionar las velocidades de combustión con y sin stretch.

3.5.2 Velocidad de combustión laminar – medidas basadas en registro de imágenes del frente de llama mediante fotografía Schlieren.

La fotografía Schlieren se utiliza para obtener imágenes del frente de la llama, ya que se considera que ofrece la mejor representación de la posición del frente de la llama [127], puesto que los niveles de intensidad de la imagen corresponden al gradiente de la densidad del flujo (en vez de al propio valor de la densidad) Bradley et al. relacionan el radio de Schlieren con el radio del frente frío en su estudio computacional [54]. Este radio de Schlieren se utiliza para determinar la velocidad de la llama como la tasa de cambio del radio de la llama. Debido a los pequeños radios de la llama durante las etapas iniciales de propagación a presión constante, las tasas de estiramiento de la llama son grandes. Dowdy et al. [128] utilizaron una relación lineal entre la velocidad de la llama y la velocidad de estiramiento para definir una longitud de Markstein, que es independiente de si el estiramiento se debe a la curvatura o al esfuerzo. Esto permite una extrapolación a condiciones de estiramiento cero y la determinación de una velocidad de llama sin estirar. La multiplicación por la relación de densidad de gases quemados y no quemados produce la *velocidad de combustión laminar* en esas condiciones de temperatura y presión, la cual fue explicada en ítems anteriores.

El crecimiento del frente de la llama, determinado a partir de imágenes Schlieren, permite determinar la evolución temporal del radio de llama y a partir del mismo la velocidad del frente S_n afectada por el stretch. El análisis de la tasa de stretch y la estimación de las longitudes de Markstein se utilizan para obtener las velocidades de combustión sin *stretch*. Las hipótesis asociadas al análisis de las imágenes Schlieren son las siguientes:

1. Las llamas se **propagan esféricamente** hacia las paredes de la bomba de combustión.
2. El **encendido** ocurre a una temperatura de encendido única, T_{ign} , que es próxima a la temperatura adiabática de llama, T_b .
3. **No hay pérdida de calor** hacia las paredes de la cámara.
4. La **mezcla fresca** delante del frente de la llama se encuentra a una **temperatura uniforme**, T_{sq} .

5. Los **gases quemados** en el volumen limitado por el frente de llama tienen una **temperatura uniforme, T_b** , igual a la temperatura adiabática de llama a $p = p_0$ constante.
6. Todos los **reactivos** que entran en el frente de llama **se convierten en productos**.

Como consecuencia de estas hipótesis, las técnicas basadas en registro de imágenes sólo se pueden emplear en los primeros instantes de la combustión, en los que puede suponerse como un proceso en condiciones adiabáticas, con presión y temperatura constantes.

Para calcular la velocidad de combustión utilizando las medidas basadas en el registro de radio por medio de la técnica Schlieren, entran en contexto varios parámetros importantes como son: la velocidad de frente de llama, la tasa de stretch, las longitudes de Markstein, la velocidad laminar sin stretch, el espesor de llama entre otros, los cuales fueron ampliamente descritos en el *capítulo 2*. Sumado a estos parámetros se definen otras relaciones que son fundamentales.

Velocidad de combustión con stretch u_n , la cual viene dada por la velocidad de llama y la relación de densidades, como una función de la tasa de stretch α .

$$u_n = \varphi \left[S_n \frac{\rho_b}{\rho_u} \right] \quad [27]$$

En donde: φ una función generalizada, Bradley et al. [54], que depende del espesor de llama, δ_l , el radio de llama, r_w y la relación de densidades, $\frac{\rho_u}{\rho_b}$, con la siguiente expresión:

$$\varphi = 1 + 1.2 \left[\frac{\delta_l}{r_w} \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} \right)^{2.2} \right] - 0.15 \left[\frac{\delta_l}{r_w} \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} \right)^{2.2} \right]^2 \quad [28]$$

Ya en el apartado 2.3.1.3 se indicó que existen **dos posibles definiciones para la velocidad de combustión laminar** presentadas por Bradley et al. [54].

La **primera** se basa en la velocidad con la que entra la mezcla fresca en el frente de llama (es decir, la **tasa de desaparición de mezcla fresca**) y se puede determinar mediante la técnica óptica de Schlieren del frente de llama de los no quemados, con la siguiente expresión:

$$u_n = \frac{1}{\rho_u} \left(\frac{\dot{m}_u}{A} \right) \quad [29]$$

La **segunda** definición se basa en la **tasa de producción de gases quemados** que ya han experimentado la combustión, es decir los productos. Esta velocidad puede determinarse mediante la técnica de aumento de presión y se conoce también como velocidad de combustión másica y tiene la siguiente expresión:

$$u_{nr} = \frac{1}{\rho_b} \left(\frac{\dot{m}_b}{A} \right) \quad [30]$$

Bradley et al. [54] presentaron la expresión que relaciona estas dos definiciones de velocidad de combustión:

$$u_{nr} = \frac{\rho_b}{\rho_u - \rho_b} (S_n - u_n) \quad [31]$$

En las tres últimas expresiones, A , corresponde al área de frente de llama en el lado de los no quemados, ρ_b y ρ_u , son las densidades de los quemados y los no quemados.

En estas velocidades, el efecto del espesor de llama es evidente para valores de radio de llama pequeños, ya que según crece la llama (disminuye el stretch), y las dos velocidades definidas se aproximan al valor de la velocidad de combustión laminar sin stretch, u_l .

Recientemente, Bradley et al. [106], presentaron otra expresión que relaciona las velocidades de combustión con y sin stretch. En el mismo se muestra que u_n , no es única, sino que depende de otros factores y solo en las últimas etapas se convierte en una verdadera velocidad de combustión, y tiene la siguiente expresión:

$$u_l - u_n = L_u \alpha \quad [32]$$

Donde, L_u , es una longitud de Markstein y representa la pendiente de la curva $u_n - \alpha$. Sin embargo, la misma carece de la consistencia de una verdadera longitud de Markstein y no se intenta presentarla o evaluar sus dos componentes (curvatura y estiramiento).

3.5.3 Comparación de los métodos de análisis de presión y de imágenes

A continuación, se presenta en la **Tabla 3.2** un resumen de todas las expresiones para el cálculo de la velocidad de combustión por medio de los dos métodos, así como los parámetros que son relevantes en el estudio.

La **Figura 3.7** presenta un resumen esquemático de cómo se relacionan las dos técnicas de análisis de los resultados experimentales, tanto a partir de la evolución temporal de la presión como de la evolución temporal de la secuencia de imágenes y en consecuencia del radio del frente de llama en cada experimento.

Tabla 3.2: Tabla resumen de variables relevantes para el cálculo de la velocidad de combustión.

Técnica	Expresión	Nombre
Análisis de la presión	$u_l^p = \frac{\dot{m}_q}{\rho_u A_f u}$	Velocidad de combustión laminar
Evolución del radio	$S_n = \frac{dr_u}{dt}$	Velocidad de llama
	$r_u = r_{sch} + 1.95 \delta_l \left(\frac{\rho_u}{\rho_b}\right)^{0.5}$	Radio de llama
	$\delta_l = \frac{\vartheta_u}{u_l}$	Espesor de llama laminar
	$\vartheta_u = \frac{\mu}{\rho_u}$	Viscosidad cinemática de la mezcla sin quemar
	$\alpha = S_n \left(\frac{2}{r_u}\right)$	Tasa de stretch
	$S_l - S_n = L_b \alpha$	Relación lineal entre la velocidad de llama y la tasa de stretch, con $S_l @ \alpha = 0$
	$u_l = \frac{\rho_b}{\rho_u} S_l$	Velocidad de combustión laminar sin stretch
	$u_n = S \left[S_n \left(\frac{\rho_b}{\rho_u}\right) \right]$	Velocidad de combustión laminar con stretch

	$\varphi = 1 + 1.2 \left[\frac{\delta_l (\rho_u)}{r_u (\rho_b)} \right]^{2.2} - 0.15 \left[\frac{\delta_l (\rho_u)}{r_u (\rho_b)} \right]^{2.2}^2$	Función generalizada
	$u_{nr} = \frac{\rho_b}{\rho_b - \rho_u} (u_n - S_n)$	Velocidad de combustión másica con stretch
	$\alpha_c = 2 \frac{u_n}{r_u}$	Stretch debido a la curvatura
	$\alpha_s = 2 \frac{u_g}{r_u}$	Stretch debido a la tensión aerodinámica del campo de flujo
Evolución del radio	$u_g = S_n - u_n$	Velocidad de gas
	$u_l - u_n = L_c \alpha_c + L_s \alpha_s$	Relación de longitudes de Markstein asociadas a la curvatura y al strain, para u_n
	$u_l - u_{nr} = L_{cr} \alpha_c + L_{sr} \alpha_s$	Relación de longitudes de Markstein asociadas a la curvatura y al strain, para u_{nr}
	$\sigma = \frac{\rho_u}{\rho_b} > 1$	Coefficiente de expansión térmica
	$Pe = \frac{r_c}{\delta_l}$	Número de Peclet
	$Pe = E_a \frac{(T_b - T_u)}{RT_b^2}$	Número de Zel'dovich
	$Le = \frac{\alpha_{mezcla}}{D_{reactivo}} = \frac{k}{\rho_u C_p D_{reac}}$	Número de Lewis
	$Ma = \frac{L_b}{\delta_l}$	Número de Markstein
	$Ka = \alpha \frac{\delta_l}{u_l}$	Número de Karlovitz

	$\omega = S_l k \omega_{DL}$ $\omega_{DL} = \frac{-\sigma + \sqrt{\sigma^3 + \sigma^2 - \sigma}}{\sigma + 1}$	Tasa de crecimiento de inestabilidades de Darrieus - Landau
	$l_i = \frac{D_{th}}{S_l}$	Longitud de escala integral
	$Pr = \frac{\vartheta}{\alpha} = \frac{\mu C_p}{\lambda}$	Número de Prandtl

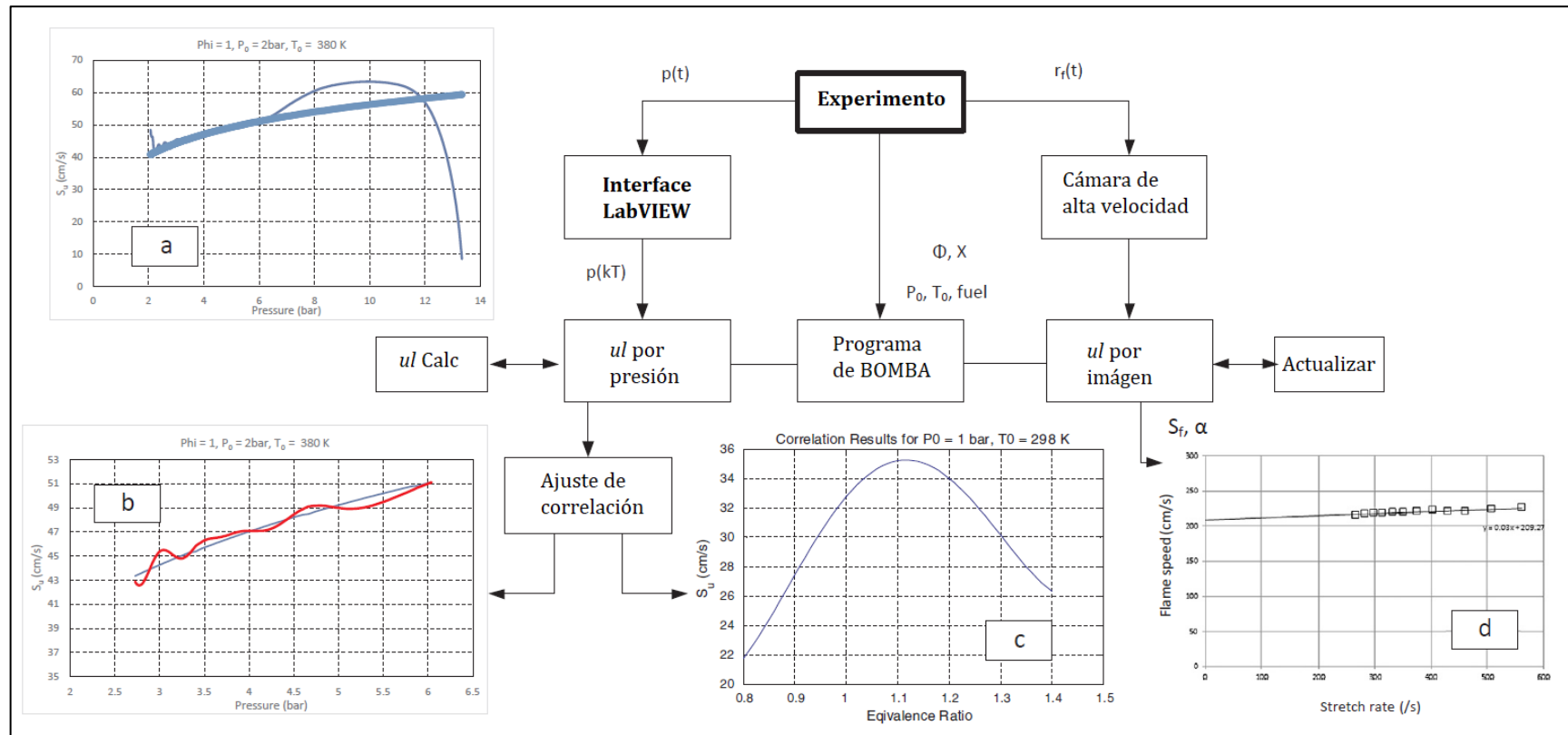


Figura 3.7: Diagrama esquemático de los procedimientos de análisis de datos para ambas técnicas. (a) velocidad de combustión calculada a medida que aumenta la presión, (b) ajuste de la correlación global a los datos seleccionados de un solo experimento, (c) gráfico de muestra de la correlación resultante y (d) extrapolación de la velocidad de la llama a cero stretch desde la imagen de la llama. Adaptada de [60].

3.6 Mezclas combustibles consideradas

Los combustibles fósiles son la base de la industria moderna, siendo también ampliamente utilizados en todos los ámbitos de la vida, lo que los convierte en un elemento vital de la economía mundial. Sin embargo, el tipo limitado de recursos de combustibles fósiles conduce a su agotamiento, el aumento de los precios del petróleo y a la dependencia energética de los países productores. Sumado a ello, el impacto negativo de su combustión en el medio ambiente y la salud de las personas. Todo esto en conjunto hace necesario buscar nuevas energías limpias, así como mejorar la eficiencia de los procesos de combustión. Una de las soluciones a los problemas anteriores es el desarrollo de combustibles alternativos y biocombustibles, producidos a través de diferentes procesos a partir de la biomasa, que cobran cada vez más importancia.

Los combustibles gaseosos tienen ventajas sobre los líquidos y sólidos, ya que las emisiones contaminantes se pueden controlar más fácilmente, lográndose mayores eficiencias. Tienen una alta relación hidrógeno/ carbono, por lo que producen bajas emisiones de carbono, como CO o CO₂ [129]. Una desventaja del estado gaseoso de los combustibles es que la densidad de energía por unidad de volumen, o unidad de masa ya que esta, es menor que la de los combustibles líquidos, lo que implica que el sistema de almacenamiento requiere más espacio, y este en los automóviles es más limitado, y por ende una disminución de la autonomía del propio vehículo.

Los combustibles gaseosos más utilizados son el gas natural (GN) y el gas licuado de petróleo (GLP). Y los combustibles gaseosos alternativos más interesantes, por ser de origen renovable y/ o residual (Combustibles Renovables y Residuales, CRR), son el hidrógeno (H₂), el biogás (CH₄ - CO₂), el CH₄ - H₂ y el gas de síntesis (H₂ - CO).

Las mezclas en estudio en esta Tesis Doctoral son mezclas H₂-CH₄ en diversas proporciones y las mezclas representativas de syngas (H₂-CO, también en diversas proporciones). En los siguientes apartados, se presentan resultados de otros trabajos similares que se han realizado con estas mezclas para el estudio de la velocidad de combustión, por medio de diferentes métodos.

3.6.1 Hidrógeno – Metano

Muchas investigaciones anteriores sobre las velocidades de combustión se han centrado en las llamas de metano – aire [43,44,54,130,131] y/o las llamas de hidrógeno–aire [15,132–134]. Liao et al. [8] midieron la velocidad de combustión laminar del gas natural basándose en el patrón esférico de la llama observando que la velocidad de combustión laminar del gas natural era cercana a la del metano. Recientemente, otros estudios experimentales se han enfocado en medir de la velocidad de combustión laminar para las llamas de metano – hidrógeno/aire [130,135–137]. Scholte & Vaags [138] fueron los pioneros en medir la velocidad de esta mezcla mediante el método del quemador de tubo. Liu et al. [139] y Huang et al. [140] realizaron estudios experimentales más extensos sobre una amplia gama de dosados relativos y fracción/ contenido de hidrógeno en llamas de metano–hidrógeno/aire y estudiaron las características de la llama laminar de las llamas de gas natural–hidrógeno–aire y la influencia de la velocidad de estiramiento en la llama.

Hu et al. [141] desarrollaron un estudio del efecto de la adición de hidrógeno sobre la velocidad de combustión laminar del metano y la estructura de la llama para las condiciones ambientales. Ilbas et al. [40] estudiaron las velocidades de combustión laminar de mezclas de hidrógeno–aire e hidrógeno–metano/aire a presión y temperatura atmosféricas para dosados variables en una bomba a volumen constante, y su trabajo reveló el aumento en la velocidad de combustión y la ampliación de los límites de inflamabilidad por la adición de hidrógeno. Hu et al. [142] llevaron a cabo un estudio experimental y numérico sobre las llamas pobres de metano–hidrógeno–aire a presiones y temperaturas elevadas. Bradley et al. [143] desarrollaron leyes de mezcla para la velocidad de combustión laminar y la longitud de Markstein para mezclas de CH₄/aire y H₂/aire. Changwei et al. [144] obtuvieron valores de velocidades de combustión de metano/hidrógeno/aire a partir de simulaciones en diversas condiciones mediante el código PREMIX utilizando diferentes mecanismos. Nilsson et al. [145] estudiaron el efecto de la adición de hidrógeno sobre las velocidades de combustión laminar del metano y las mezclas de metano con etano y propano.

Mandilas et al. [146] advirtieron que una fracción molar de hidrógeno en el combustible metano–hidrógeno duplicaba la velocidad de combustión laminar en el límite de inflamabilidad pobre del metano. Halter et al. [137] repararon que la longitud de Markstein disminuye con el aumento de la concentración de hidrógeno en el combustible

binario. Los resultados de los estudios numéricos de Sankaran & Im [147] sobre llamas de propagación esférica de combustible binario de hidrógeno–metano mostraron una variación no monótona de la longitud de Markstein del gas quemado, ya que la fracción de hidrógeno en el combustible binario varió de 0 a 1.0 para un dosado de 0.6. Sugirieron que la variación no monótona se debía a los efectos en competencia de la disminución no lineal del número de Zel'dovich y el número de Lewis con el aumento de la concentración de hidrógeno en el combustible. Una variación no monótona similar de la longitud de Markstein del gas quemado del combustible binario en dosados de 0.8, 1.0 y 1.2 se informó en los estudios numéricos de Chen [148]. Sin embargo, no se ha prestado mucha atención a esta tendencia no monótona en el número de Markstein de llamas de hidrógeno–metano–aire y la evidencia experimental del fenómeno es escasa. Okafor et al. [149] estudiaron experimentalmente llamas de hidrógeno–metano–aire de propagación esférica para examinar la velocidad de combustión laminar y el número de Markstein de las llamas a medida que la fracción de hidrógeno en el combustible binario se varió de 0 a 1.0. Además, simularon llamas laminares premezcladas unidimensionales de las mezclas y se compararon los resultados experimentales con los resultados de la simulación.

Los estudios se pueden clasificar en dos categorías. Uno es desde el punto de vista de la mejora de la llama de metano mediante la adición de hidrógeno y otro desde el punto de vista de la inhibición de la llama de hidrógeno mediante la adición de metano. Yu et al. [130] estudiaron las características de la velocidad de combustión laminar de las llamas de metano–hidrógeno/aire con la suposición de que las cantidades pequeñas de hidrógeno en la mezcla se consumían por completo y encontraron una correlación lineal entre la velocidad de combustión laminar y la fracción de hidrógeno. Law & Kwon [136] estudiaron el potencial de la adición de hidrocarburos para suprimir los peligros de explosión y encontraron que una cantidad pequeña o moderada de adición de metano podría reducir notablemente las velocidades de combustión laminar y suprimiría la propensión a la aparición de inestabilidad térmica difusiva y celular hidrodinámica en llamas de hidrógeno – aire.

3.6.2 Gas de síntesis ($H_2 - CO$)

Diversos autores han estudiado el comportamiento del gas de síntesis en los motores de combustión interna y han comprobado que con un aumento de la

concentración de H_2 y una disminución de CO se obtiene una mayor eficiencia térmica del motor, así como una disminución de las emisiones de NO_x y HC [150] [151].

Autores como Lee et al. [152], Bouvet et al. [153], Dong et al. [154], Fu et al. [155], y Sun et al. [156] investigaron la velocidad de combustión laminar de las llamas de gas de síntesis para mezclas con diferentes proporciones de H_2 - CO bajo condiciones atmosféricas. Todos ellos informaron que la velocidad de combustión aumenta a medida que aumenta la proporción de hidrógeno en la mezcla.

Hassan et al. [157], estudiaron los efectos positivos de la tasa de stretch de la llama sobre las velocidades de combustión laminar de las mezclas de H_2/CO - aire para las llamas esféricas que se propagan hacia el exterior con concentraciones de H_2 en la mezcla que oscilan entre el 3 y el 50% (en volumen), en una cámara esférica con ventanas. Natarajan et al. [158], investigaron las velocidades de llama laminar de mezclas de combustibles pobres de $H_2/CO/CO_2$ (gas de síntesis) utilizando imágenes del área de la llama en una llama Bunsen cónica y basándose en mediciones del perfil de velocidad en una llama estancada unidimensional, comparando resultados con predicciones numéricas.

Singh et al. [159] midieron las velocidades de llamas laminares de mezclas premezcladas de gas de síntesis-aire utilizando una configuración de llama de expansión esférica para diferentes dosados de combustible/ aire (0.6 - 3.0), contenido de H_2 y temperaturas iniciales. El efecto de la fracción de hidrógeno sobre las inestabilidades inherentes a la llama y sobre la propagación de la auto-aceleración la estudiaron Jiang et al. [160].

Algunos trabajos han investigado la velocidad de combustión del gas de síntesis (H_2 - CO) en condiciones de altas presiones (hasta 2 MPa) y temperatura (300 y 700 K), destacando los de Sun et al. [156], Krejci et al. [161], y Kéromnès et al. [162]. En estos estudios, el O_2 es diluido en He reemplazado el aire (N_2 y O_2) como oxidante, en una relación de proporción de 1: 7. De esta forma, es posible reducir la alta celularidad de las llamas, debido a las altas presiones, y así poder medir fácilmente la velocidad de combustión. Estos estudios muestran que la velocidad de combustión disminuye cuando aumenta la presión de la mezcla y la temperatura de precalentamiento de la mezcla aumenta sustancialmente la velocidad de la llama.

También existen investigaciones que analizan la influencia de la energía de ignición sobre la velocidad de combustión laminar, enfocadas en encontrar el radio crítico de la llama, es decir, el radio desde el cual la propagación de la llama no se ve afectada por la energía de la chispa. Bradley et al. [54] y Huang et al. [140] observaron que la energía de ignición no influye en la velocidad de combustión para radios de llama mayores de 6mm. Teniendo en cuenta los efectos de la tasa de stretch de la llama, también hay estudios sobre la longitud de Markstein, que representa la sensibilidad de la llama a la velocidad de estiramiento. Bouvet et al. [153] resumieron datos sobre la longitud de Markstein para mezclas de gas de síntesis y aire, a presión atmosférica, de varios grupos de investigación. Mostraron cómo la longitud de Markstein disminuye a medida que se agregan presión, temperatura o diluyentes (CO_2 , N_2) a la mezcla, lo que hace que la llama sea más inestable, en cualquier caso.

CAPÍTULO 4

Instalación experimental. Bomba de combustión cilíndrica con acceso óptico

4.1	Introducción	67
4.2	Instalación de la bomba de combustión cilíndrica	67
4.2.1	Cámara de combustión cilíndrica	68
4.2.2	Equipos auxiliares de la bomba de combustión cilíndrica	69
4.3	Metodología experimental utilizada	74
4.3.1	Elección de las mezclas y condiciones iniciales para los ensayos	74
4.3.2	Preparación de la mezcla y llenado de la bomba.	75
4.4	Modelo de diagnóstico para el análisis de la evolución de la presión	76
4.5	Procesado de las imágenes Schlieren del frente de llama	78

4 INSTALACIÓN EXPERIMENTAL. BOMBA DE COMBUSTIÓN CILÍNDRICA CON ACCESO ÓPTICO

4.1 Introducción

En este capítulo se describe la instalación experimental con la que se ha trabajado para realizar esta tesis. Dicha instalación consiste en una bomba de combustión cilíndrica de volumen constante, que permite la determinación de la velocidad de combustión laminar de mezclas gaseosas mediante los dos métodos descrito en el capítulo anterior: a partir del análisis de la evolución temporal de la presión y a partir del análisis de las imágenes de la evolución temporal de imágenes Schlieren del frente de llama. La instalación se ubica en el laboratorio de investigación del Grupo de Investigación Reconocido *Motores Térmicos y Energías Renovables*, en el Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Universidad de Valladolid.

Esta instalación permite experimentar con mezclas gaseosas formadas por combustibles como CH_4 , H_2 , CO , diluyente como N_2 , CO_2 , y aire, con distintos dosados y con la posibilidad de fijar las condiciones iniciales de presión y temperatura, a fin de obtener su velocidad de combustión en amplios rangos de presión y temperatura. La combustión se inicia mediante una chispa eléctrica que se hace saltar en el punto central de la bomba. Los detalles de la bomba de combustión cilíndrica con acceso óptico y una serie de sistemas auxiliares se describen en los apartados siguientes.

4.2 Instalación de la bomba de combustión cilíndrica

La instalación de la bomba de del grupo *MYER* de la Universidad de Valladolid en donde se han llevado a cabo los experimentos de combustión con mezclas combustibles de $\text{CH}_4\text{-H}_2/\text{aire}$ y $\text{CO-H}_2/\text{aire}$ ha sido desglosada ampliamente en varios trabajos presentados anteriormente [163] [164] [165].

En la **Figura 4.2** se pueden ver los elementos principales de la misma. A continuación, se detallarán de forma breve sus componentes más importantes con el fin de complementar mejor el trabajo realizado.

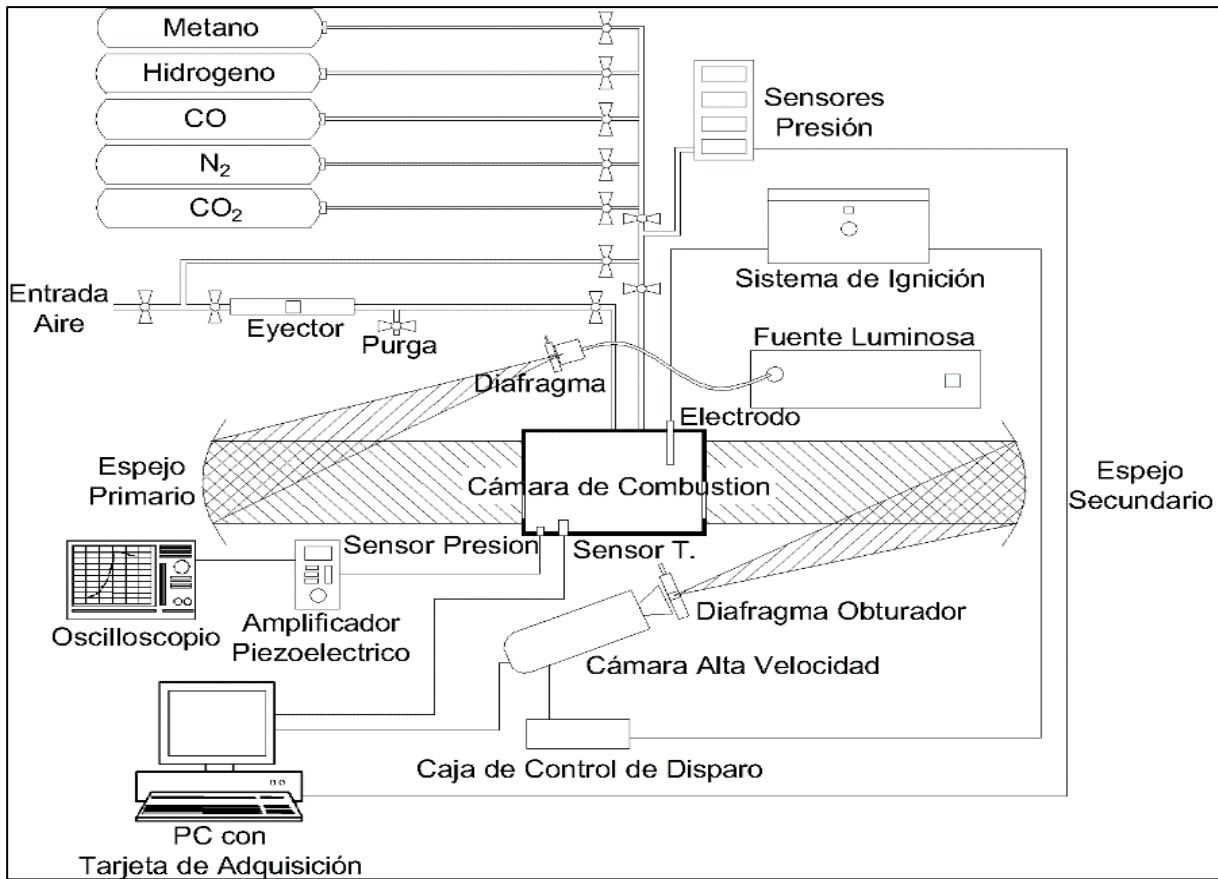


Figura 4.1: Esquema completo de la instalación experimental.

4.2.1 Cámara de combustión cilíndrica

Este elemento es la parte central de la instalación y alrededor de la que gira el resto de los componentes. Es una **cámara de combustión cilíndrica de combustión a volumen constante, con acceso óptico a través de las bases del cilindro**, como se puede ver en la *Figura 4.2*. La cámara está construida en acero inoxidable. Tiene una geometría como su nombre lo indica, cilíndrica, con una longitud de *135 mm* y un diámetro de *114.3 mm*, los cuales determinan un volumen interior de trabajo de *1.385 litros*. Consta además con dos ventanas transparentes con cristales de silicio fundido (fused silica), ubicados en las caras planas de los extremos. El sellado se hace por medio de unas juntas tóricas de vitón colocadas alrededor de la cara externa de cada ventana. Las juntas han sido diseñadas para adaptarse a variaciones en las dimensiones de alojamiento debido a la expansión térmica

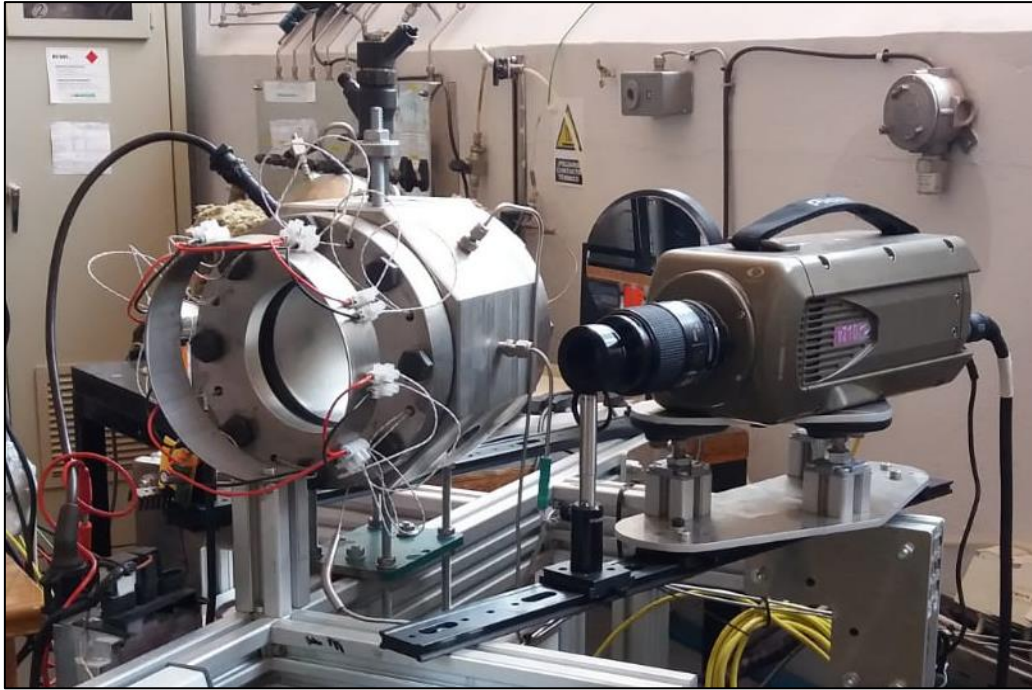


Figura 4.2: Bomba de combustión cilíndrica y cámara de alta velocidad.

El encendido de la mezcla se realiza por medio de dos electrodos ubicados en el centro geométrico de la bomba. Esto origina un frente de llama que se expande inicialmente de forma esférica, pero que a medida que el frente avanza, se alarga más en la dirección axial, achatándose en la dirección radial, efecto causado por la forma cilíndrica de la bomba. El diseño de la bomba permite trabajar con condiciones de hasta 20 bar de presión y 600K de temperatura. La limitación de la presión viene dada por la resistencia mecánica de las ventanas transparentes, mientras que la de temperatura viene dada por las juntas elásticas de dichas ventanas. A continuación, se describen los equipos auxiliares más relevantes en la instalación.

4.2.2 Equipos auxiliares de la bomba de combustión cilíndrica

- **Medidor de presión:** La presión en el interior de la bomba se mide tanto durante la etapa de preparación de la mezcla, como durante la posterior etapa de combustión de la mezcla. La medida de la presión durante la etapa de síntesis de la mezcla de componentes gaseosos se realiza con sensores de presión absoluta piezo-resistivos, tipo Druck PTX-1400, alimentados con una fuente de 16 V. Se dispone de cuatro sensores piezo-resistivos para bajas, medias, y altas presiones, siendo sus rangos de medida desde 0 bar hasta 1 bar, 4 bar, 10 bar y 20 bar respectivamente. Estos

transductores presentan una incertidumbre máxima (típica) de 0.25% (0.15%) sobre su fondo de escala, por tanto, al realizar una medida se prefiere emplear el sensor de rango más bajo posible con el fin de tener una incertidumbre menor en la misma. La presión máxima que resiste cada sensor sin deteriorarse es el doble de su fondo de escala, por lo que no están ubicados directamente en la bomba, donde estarían expuestos a las altas presiones que se alcanzan en una combustión, sino en un ramal del conducto de entrada de ésta, que durante la combustión se aísla de la bomba cerrando la válvula de alta presión del conducto de entrada. Además, los dos captadores de menor fondo de escala disponen de sendas válvulas de cierre para protegerlos en el caso de que durante la síntesis de una mezcla se rebase su presión límite respectiva, *Figura 4.3*.



Figura 4.3: Sensores de presión para la síntesis de la mezcla.

Para el registro de la rápida evolución de la presión frente al tiempo que tiene lugar en el interior de la bomba durante una combustión se emplea un transductor de presión piezoeléctrico, modelo Kistler 7063. Tiene un rango de medida de 0 a 250 bar, una incertidumbre de 0.5% sobre el fondo de escala, soporta una temperatura de trabajo que se sitúa en el rango 150 a 350 K. La señal del captador piezo-eléctrico se acondiciona con un amplificador de señal modelo Kistler 5007. Este sensor va roscado directamente en la tapa de la bomba, *Figura 4.4*

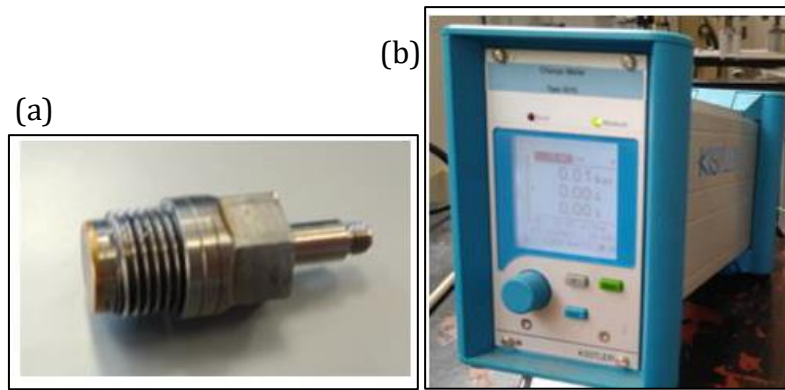


Figura 4.4: (a) Transductor piezoeléctrico y (b) amplificador Kistler.

- **Medidor y controlador de temperatura:** Al igual que la presión, la temperatura inicial tiene que ser controlada y monitorizada en el interior de la bomba en la etapa de síntesis de la mezcla, ya que esto garantiza que el experimento se realiza a las condiciones iniciales establecidas. La temperatura es controlada por medio de un PID, que envía la señal a un conjunto de resistencias colocadas en un extremo de la bomba, para alcanzar las temperaturas requeridas para cada experimento, **Figura 4.5**.

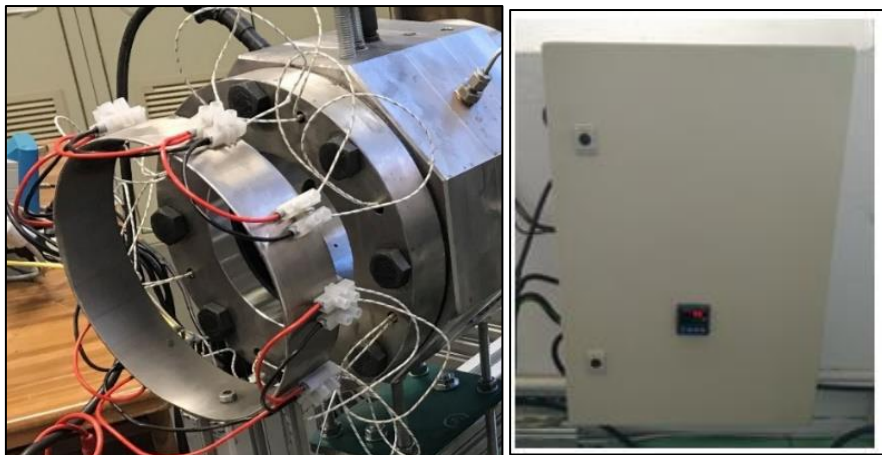


Figura 4.5: Resistencias alrededor de la bomba (izquierda). Controlador PID (derecha).

- **Adquisición de datos:** La señal del sensor de presión piezoeléctrico se registra en un osciloscopio modelo YOKOGAWA DL708E con módulos de adquisición 701853 HR que permite adquirir la señal a 100 kHz con una resolución de 16 bits, **Figura 4.6**. La adquisición de la presión en el interior de la bomba frente al tiempo durante una combustión se inicializa de forma automática y simultánea con el salto de la chispa de encendido. Para ello se utiliza un circuito electrónico que proporciona una señal que se emplea como trigger o disparador de la adquisición. Se ha desarrollado una

aplicación, programada en lenguaje C, para extraer los datos (curva de presión) directamente del osciloscopio y procesar los mismos.

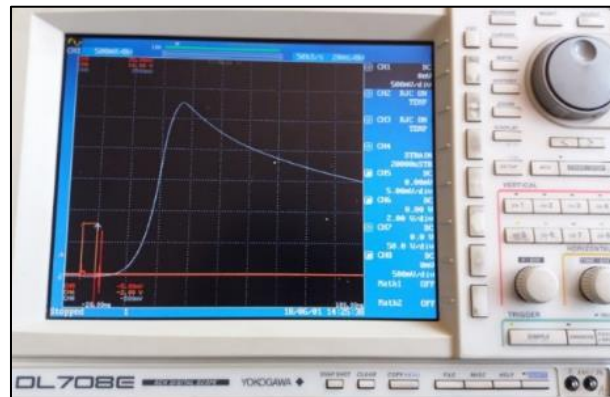


Figura 4.6: Osciloscopio YOKOGAWA.

- **Sistema de encendido:** El encendido de la mezcla se realiza mediante el salto de una chispa en el centro geométrico de la cámara de combustión, *Figura 4.7*. Para generar la chispa se emplea un sistema basado en una bobina de encendido, alimentada por una fuente de 12 V, con la que se genera una alta diferencia de voltaje entre dos electrodos. La bobina de encendido utilizada es transistorizada, usada en automoción, donde en un circuito basado en un transistor hace la función de interruptor para la bobina. La alimentación del circuito del transistor se acciona mediante un interruptor externo con el que se controla el encendido en la bomba.

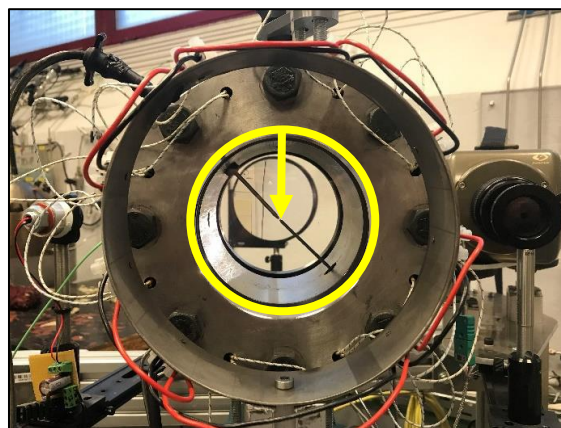


Figura 4.7: Centro geométrico de la cámara de combustión.

El encendido centrado en la cámara cilíndrica se logra mediante dos electrodos en forma de varilla. El electrodo de tierra es una varilla de 3 mm de diámetro que está roscada en el punto inferior de la cámara y se eleva verticalmente justo hasta el centro de la bomba. Como electrodo positivo se emplea una bujía NGK, modelo BKR6EK o

PLFR5A, de automoción, a la que se ha alargado el electrodo positivo de la propia bujía acoplando una varilla roscada de 3 mm de diámetro como se muestra en el esquema de la **Figura 4.8**. A la bujía se le quita la parte final de la rosca y el final del recubrimiento cerámico de su electrodo positivo. Posteriormente se mecaniza una rosca en la parte accesible del electrodo positivo y se le acopla la varilla mediante un conector. Un casquillo cerámico recubre la unión para evitar que la chispa salte hacia la bomba en vez de hacia el electrodo negativo.

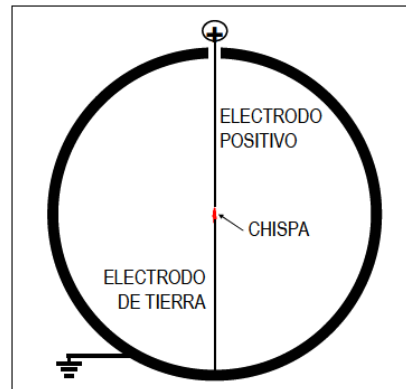


Figura 4.8: Sistema de electrodos.

- **Cámara de alta velocidad:** El sistema de iluminación está constituido por una fuente luminosa y un diafragma que limita el haz de luz que refleja el espejo hacia la cámara de combustión. Mediante una cámara de alta velocidad CMOS se puede grabar todo el proceso de la combustión y posteriormente procesar las imágenes. La videocámara es una **Phantom v210** a **7000 fps**, con una resolución máxima de **1280 x 800** y una velocidad de captura máxima de **300000 fps**. Consta además de un sensor formado por una matriz de células fotovoltaicas que permite captar las imágenes, **Figura 4.9**. En la **Figura 4.10**, se muestran las especificaciones del diodo utilizado para generar el haz de luz. Finalmente, la instalación incluye un diafragma obturador que permite generar el efecto Schlieren en las imágenes grabadas por la cámara de alta velocidad.



Figura 4.9: Videocámara y Diodo LED.



Figura 4.10: Diodo emisor de luz.

4.3 Metodología experimental utilizada

Una vez descrita la instalación experimental en los apartados anteriores, se presenta a continuación la metodología para la realización de los experimentos. La decisión de los parámetros de cada experimento, el llenado de la bomba y la adquisición de los datos es algo que requiere de un orden y control para conocer lo que se está haciendo y entender los resultados que se obtendrán del análisis.

4.3.1 Elección de las mezclas y condiciones iniciales para los ensayos

En primer lugar, antes de comenzar a utilizar la instalación, es necesario establecer los siguientes valores: porcentaje de cada combustible en la mezcla, dosado, temperatura y presión iniciales de cada experimento a realizar y representarlos en una tabla para tener la trazabilidad de todos los datos que se obtienen de la bomba y poder compararlos y establecer conclusiones.

En este trabajo parte de los experimentos fueron realizados con mezclas de hidrógeno–metano/aire, y basándose en la bibliografía e investigaciones realizadas por otros autores, se ha decidido llevar a cabo mezclas con un porcentaje de hidrógeno (H_2) en metano (CH_4) de 0%, 20%, 50%, 80% y 100%. De esta forma se pueden comparar los resultados obtenidos y determinar en qué casos se obtiene el metano dominante de la combustión y en qué otros el hidrógeno. También es importante resaltar que se realizaron experimentos de mezclas de 100% CH_4 a dosado estequiométrico y condiciones ambientales de presión y temperatura, para comprobar la repetitividad de los experimentos.

Por otro lado, se ha realizado un barrido de dosado relativo $\phi = 0.5-1.0$. Se eligieron estos valores, ya que dosados inferiores presentaban dificultad en el encendido, sobre

todo cuando se trataba de combustiones de metano puro. Mientras que para dosados superiores al estequiométrico ($\phi > 1$), no resulta ventajoso a la hora de utilizar hidrógeno, ya que, uno de los objetivos que se buscan con este trabajo, es el posible ahorro de combustible si se utiliza en motores de combustión interna para aplicaciones en automoción.

Teóricamente, la bomba permite presiones máximas de *20 bares*, pero en experimentos realizados previamente, se ha observado que las mezclas de hidrógeno son tan rápidas, que producen un incremento muy elevado de la presión en muy poco tiempo (pressure rise), por lo que causaban daños en los cristales de la bomba, llegando incluso a su rotura. Por este motivo, se decidió realizar un barrido de presiones iniciales de *1 a 3 bares*. Debido a la compresión producida por el avance del frente de llama en el interior de la bomba de combustión, la presión y la temperatura de la zona fresca aumentan, alcanzándose presiones, en algunos casos, de casi *20 bares*. Por último, se ha comprobado que pequeños incrementos de temperatura no tienen un efecto claro sobre la combustión, por lo que se ha decidido tomar dos valores de la temperatura inicial: *40°C* y *100°C*. Combinando todos los parámetros comentados se obtienen un total de *55 experimentos*.

Los experimentos con mezclas de monóxido de carbono-hidrógeno se realizaron para porcentajes de H₂ en CO de *6.7%, 25%, 50%, 80% y 100%*, con el mismo rango de barrido de dosado, presiones y temperaturas que los experimentos con H₂ - CH₄.

4.3.2 Preparación de la mezcla y llenado de la bomba.

La elaboración de la mezcla en la cámara de combustión consta de tres fases principales: una primera etapa de preparación y limpieza, una segunda de preparación de la mezcla en el interior de la bomba de combustión y una tercera etapa de reposo y homogeneización de la mezcla [48]. El llenado de la bomba para la preparación de la mezcla se hace mediante un método basado en la ley de presiones parciales de Dalton. Para los combustibles gaseosos, el combustible y el aire se agregan de forma secuencial, de acuerdo con las presiones parciales calculadas requeridas para cada componente [163].

En la **primera etapa** es imprescindible realizar un venteo, el cual consiste en dejar pasar aire a través de la bomba para que se arrastre cualquier residuo de combustiones anteriores que haya podido quedar atrapado en el interior y actúe como inerte reduciendo

la temperatura en la bomba a la hora de la combustión. Seguido a ello, se llena la bomba con aire limpio hasta 5 bar y luego se descarga a presión atmosférica. Para minimizar aún más los residuales, se realiza el vacío dentro de la bomba de hasta $0.08 - 0.09 \text{ bares}$. Tras este proceso, la bomba puede llenarse con el combustible y aire correspondiente hasta las presiones adecuadas.

En la **segunda etapa**, se introducen los gases combustibles mediante una línea de gases independiente, a través de la válvula de entrada. Seguido se añade aire seco desde una toma de aire ambiente hasta la presión inicial deseada para preparar la mezcla. La presión de la mezcla inicial se controla con los sensores piezo-resistivos descritos anteriormente. Como se ha indicado, el llenado de la bomba se realiza mediante el método de las presiones parciales de cada combustible. Una vez la mezcla está la mezcla dentro de la bomba, se cierra la válvula de salida y es necesario un tiempo de reposo. Esto constituye la **tercera etapa**, que lleva alrededor de 4 minutos y es constante para todos los experimentos. El objetivo de esta tercera etapa es que la mezcla de combustible y aire sea homogénea antes del salto de la chispa entre los electrodos y así asegurar la repetitividad de los experimentos.

Finalmente, antes de proceder al salto de la chispa, es adecuado revisar que todos los aparatos de adquisición y procesamiento de datos funcionan correctamente: osciloscopio, amplificador y registro del vídeo de la combustión mediante el ordenador.

Cabe destacar que el procedimiento que desarrolla esta metodología es más extenso, ya que conlleva un juego de apertura y cierre de válvulas adecuado.

4.4 Modelo de diagnóstico para el análisis de la evolución de la presión

El modelo de diagnóstico de dos zonas que constituye la herramienta utilizada para la determinación de la velocidad de combustión laminar a partir de la evolución de la presión durante la combustión es una adaptación a la geometría esférica y de volumen constante de la bomba del modelo diagnóstico de dos zonas desarrollado inicialmente por Horrillo [125]. Posteriormente Iglesias [3] en su tesis doctoral presentó una modificación en MATLAB. En este trabajo se utilizó la versión más actual del mismo, realizada por

Melgar [166], la cual incluye los cálculos de difusividades, conductividades, tasas de crecimiento de inestabilidad, números de Lewis entre otros.

El modelo de diagnóstico tiene como entrada el registro experimental de la evolución temporal de la presión durante una combustión en la bomba, a partir de la cual se determina la forma en que se libera la energía como consecuencia de la combustión. El modelo se implementa en el lenguaje de programación en C++, el cual permite obtener variables fundamentales del proceso de combustión partiendo de una interpretación cuasi-dimensional de la geometría del frente de llama, que permite determinar la posición de cada una de las zonas en cada momento de las dos zonas (zona de quemados y zona de sin quemados), **Figura 4.11.** Entre estas variables de salida se encuentra la fracción de masa quemada FQM, que depende únicamente de la coordenada temporal, así como las temperaturas, el radio del frente de llama, y el volumen y la composición de zona de gases quemados y de mezcla sin quemar.

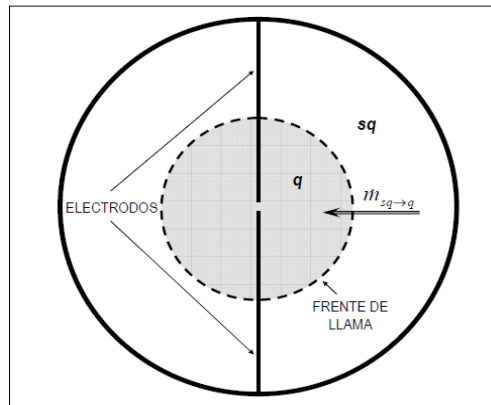


Figura 4.11: Evolución del frente de llama de la zona de quemados a la zona de no quemados, [48].

Este tipo de modelos se caracterizan por: A. Rapidez de ejecución, pudiéndose realizar en tiempos razonables estudios paramétricos que permitan identificar los puntos de mejor funcionamiento. B. Alimentan submodelos que permiten obtener resultados de gran interés para la puesta a punto y diseño de motores: emisiones de NO_x, CO, HC y CO₂, tendencia a la detonación, temperaturas de escape, prestaciones, etc. C. Permiten cuantificar los efectos que producen cambios en los parámetros de operación y diseño. D. Son adaptables a diferentes geometrías de la cámara de combustión[3]. Se debe de tener siempre presente que el modelo de diagnóstico es una herramienta para obtener resultados adicionales de los experimentos realizados en la cámara de combustión.

En las tesis doctorales realizadas por Reyes [104], Lafuente [48] e Iglesias [3], se detalla ampliamente y paso a paso el desarrollo del modelo de dos zonas y su respectiva programación en MATLAB. Es importante resaltar que la actual tesis se ha realizado una modificación al modelo diagnóstico, para tener en cuenta la deformación del frente de llama, que en vez de esférica se deforma a una geometría determinada por la forma cilíndrica de la cámara, como se explica en el capítulo siguiente.

4.5 Procesado de las imágenes Schlieren del frente de llama

Durante el proceso de combustión, se registran las imágenes Schlieren del desarrollo del frente de llama, captadas por la cámara de alta velocidad que tiene el sistema. Como resultado de todo el proceso, se obtiene como salida un vídeo en formatos *CINE* y *AVI*, los que pueden ser analizados mediante diversos algoritmos con un programa desarrollado en *MATLAB*, que permite determinar la evolución del radio del frente de llama en función del tiempo, lo que sirve para calcular los parámetros comentados anteriormente: *velocidad de combustión laminar por el método óptico* y *tasa de stretch*.

Estos resultados posteriormente se utilizan para hacer un estudio de la morfología de la llama **Figura 4.12**, calculándose otras variables adicionales importantes como la velocidad del frente de llama y la tasa de stretch. También se determinan de forma numérica, a partir de las condiciones termodinámicas y la composición, números adimensionales tales como Lewis, Prandtl, Schmidt entre otros, los cuales permiten caracterizar las inestabilidades de la llama e identificar el carácter de las mismas (inestabilidades viscosas, hidrodinámicas, termo-difusivas y molecular). En el trabajo presentado por Tinaut et al. [165], se detalla paso a paso lo que realiza el programa para obtener los resultados. En este documento solo se presenta el diagrama de flujo seguido para el procesamiento gráfico de las imágenes, **Figura 4.12**.

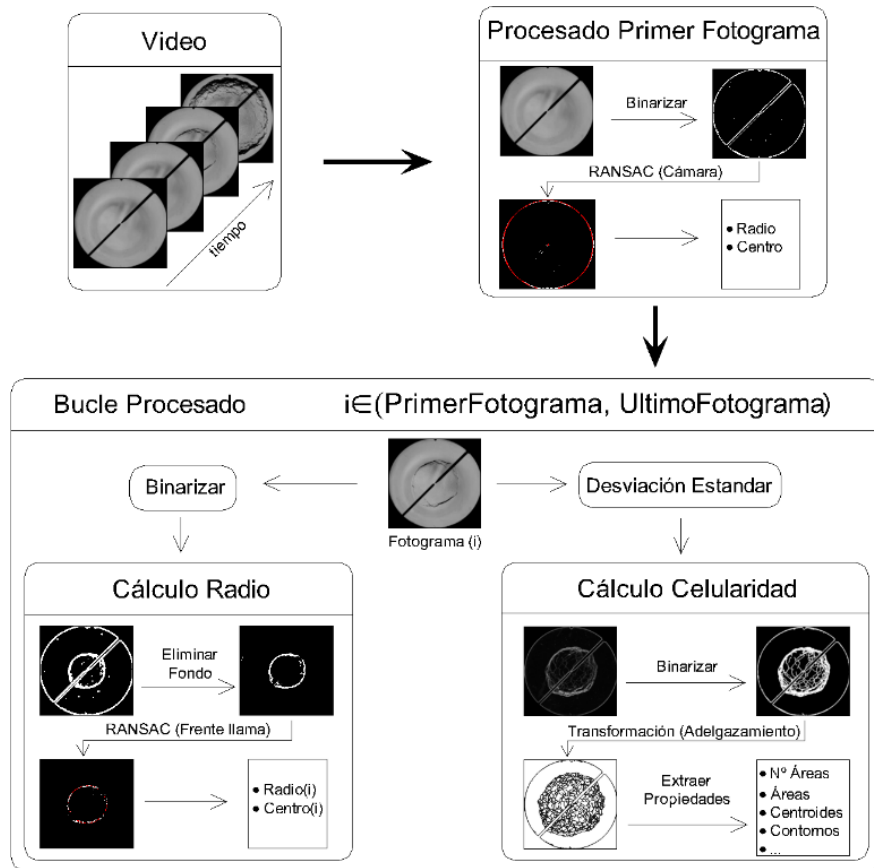


Figura 4.12: Esquema general del procesamiento gráfico y de imágenes [165].

Como ejemplo ilustrativo, se muestra en la Figura 4.13 los resultados del mismo experimento mostrado en la Figura 3.6, con las imágenes del desarrollo del frente de llama y la presión, pero eliminando la dependencia temporal de la presión y representándola frente al valor del radio del frente de llama, todo ello como resultado de la aplicación de los algoritmos desarrollados.

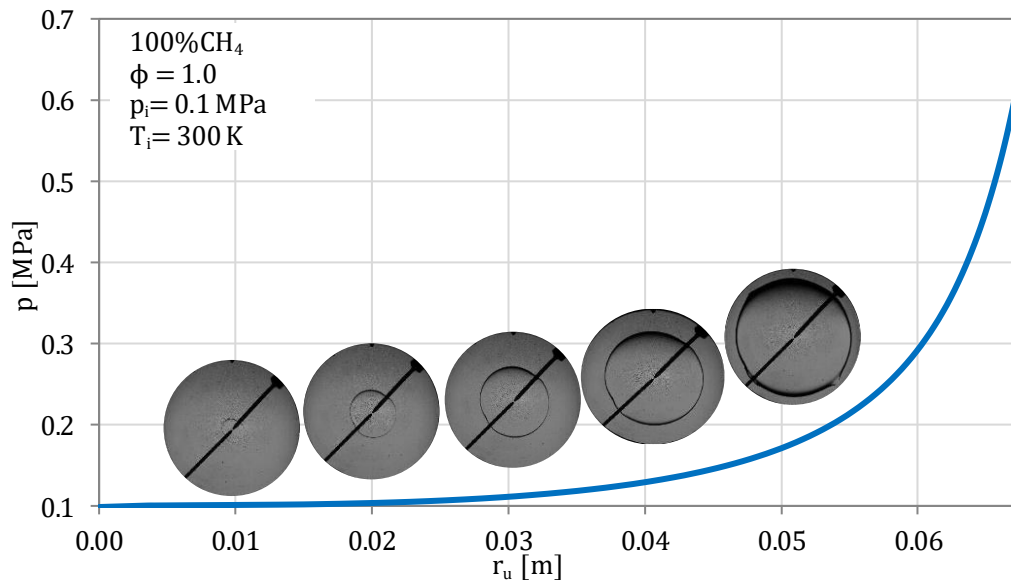


Figura 4.13: Evolución de la presión a lo largo del radio de la bomba e imágenes de la llama.

CAPÍTULO 5

Simulación CFD del desarrollo del frente de llama laminar

5.1	Introducción	82
5.2	Fundamentos matemáticos del modelado CFD	83
5.3	Aplicación del cálculo CFD a la bomba de combustión cilíndrica	85
5.3.1	Descripción del modelo CFD	85
5.3.2	Método para ajustar una expresión analítica a la forma del frente de llama considerando su deformación dentro de la cámara cilíndrica	90

5 SIMULACIÓN CFD DEL DESARROLLO DEL FRENTE DE LLAMA LAMINAR

5.1 Introducción

La técnica CFD (Computational Fluid Dynamics) comenzó a desarrollarse en los años 60 en la industria aeroespacial, y desde entonces ha crecido fuertemente convirtiéndose a partir de los 80 en una herramienta vital para muchas industrias, donde la predicción del flujo de fluidos es importante. En los años 90 se expandió de forma significativa a distintas aplicaciones y procesos industriales en los que interviene la transferencia de calor, las reacciones químicas, los flujos bifásicos, los cambios de fase, la transferencia de masa y los esfuerzos al interactuar con sólidos. En la actualidad, se ha extendido a muchas más ramas de la industria, tales como: la química, la aeroespacial, la estructural, a las predicciones de movimiento de aire, al análisis de fenómenos termoflúidicos, y, en el ámbito medio ambiental: a los cálculos de contaminación ambiental, fenómenos pluviales, vertidos de ríos y suelos entre otros.

El modelado de un proceso de combustión por medio de CFD es una herramienta numérica que permite resolver numéricamente las ecuaciones de conservación, con la misma finalidad que un ensayo experimental. La principal ventaja de la simulación CFD es que permite obtener información detallada y con resolución espacial y temporal de los fenómenos de transporte de un fluido, a través de la resolución de las ecuaciones de *Navier – Stokes*. Estas últimas son un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento del fluido y que, acopladas con los balances de *masa, energía y modelos de turbulencia*, aplicados al dominio de cálculo, permiten obtener los valores de la *presión, temperatura, velocidad y concentración de especies* en cualquier punto de la geometría, así como información de variables relevantes, que en un cálculo experimental sería más difícil de cuantificar u observar. De igual manera según el *software* utilizado, se pueden proporcionar resultados visuales durante el desarrollo de la combustión que permite comprobar si el modelo en marcha se encamina a lo que se espera.

Los principales inconvenientes derivan de que se requieren una elevada potencia de cálculo, además de que no siempre se dispone de los submodelos adecuados (por ejemplo, de cinética química) para el problema concreto a resolver.

5.2 Fundamentos matemáticos del modelado CFD

Como se ha indicado, mediante CFD se calcula numéricamente el movimiento de los fluidos, basándose en las ecuaciones de Navier-Stokes. El ingeniero francés Claude Navier y el matemático irlandés George Stokes, desarrollaron de forma independiente el modelo que predice el movimiento de los fluidos hace más de un siglo y medio [167]. Estas ecuaciones derivan directamente de las leyes del movimiento Newton y son ecuaciones en derivadas parciales no lineales. Las ecuaciones son las mismas para cualquier situación de flujos de fluidos, la particularización a los casos concretos viene definida por las condiciones de contorno y los valores iniciales.

Ecuación de continuidad:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad [33]$$

Ecuación de la cantidad de movimiento:

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\nabla p + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad [34]$$

En donde, en el primer término aparece la derivada total de la velocidad, que está compuesta por el cambio de velocidad en el tiempo, más el término convectivo.

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = \rho \left[\frac{\partial V}{\partial t} + (V \cdot \nabla) V \right] \quad [35]$$

$-\nabla p$, representa el gradiente de presión. $\rho \vec{g}$, representa las fuerzas externas que interactúan sobre el fluido, como lo es la fuerza de gravedad. Finalmente, en la *ecuación*

$$\mu \nabla^2 \vec{V} = -\nabla p + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 V \quad [34],$$

$\mu \nabla^2 \vec{V}$ representa un término de fuerzas viscosas, siendo μ la difusividad.

Ecuación de conservación de energía:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial t} \quad [36]$$

En donde: el primer término representa la variación temporal de la energía total, el segundo el calor aportado por unidad de tiempo y el tercero el trabajo realizado por unidad de tiempo.

Estas ecuaciones son muy complejas, por lo que su solución analítica solo es posible en casos muy elementales. Por lo anterior, se recurre a la solución numérica a través de los computadores, dando origen a la dinámica de fluidos computacional o CFD. Como se mencionó anteriormente, la metodología CFD se basa en la resolución de las ecuaciones de continuidad, *ecuación [33]*, cantidad de movimiento, *ecuación [34]* y energía, *ecuación [36]*, sobre volúmenes de control definidos dentro del sistema. De acuerdo con las necesidades, se permite agregar más modelos, como, por ejemplo: reacción, combustión, turbulencia, etc.

Centrándonos en el área de combustión, el flujo en los motores de combustión interna se desarrolla en un entorno fluidodinámico turbulento, por lo que la resolución del modelo se complica. Es por lo que, en este tipo de cálculos, se intenta llegar a una relación de compromiso entre el realismo de los resultados y el coste del cálculo computacional. En la actualidad, la potencia de cálculo de la que se dispone limita el uso de resolución numérica directa de las ecuaciones de conservación o DNS (Direct Numerical Simulation), por lo tanto, se asume que las escalas más pequeñas de turbulencia no se van a resolver y se da paso a otros métodos de resolución como el método RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) o LES (Large Eddy Simulation). La técnica RANS proporciona una buena aproximación a los valores reales considerando todas las escalas de turbulencia y se obtienen como resultados valores promedio de las magnitudes. Por otro lado, el método LES, es más complejo y con mayor coste de cálculo, se basa en aplicar un filtro al conjunto de ecuaciones y resolver las escalas de turbulencias más grandes [168].

El cálculo o simulación de un motor completo mediante un *modelo de CFD* es inviable debido a su excesivo tiempo de cálculo, es por ello que el uso de esta herramienta se limita a elementos puntuales del motor [169]. El proceso de puesta en marcha de un modelo CFD incluye diferentes fases, las principales son: representación gráfica y mallado del dominio de cálculo, elección del método de resolución de ecuaciones, elección del modelo de turbulencia, definición de las características de encendido, definición de la cinética de reacción, elección de las condiciones de contorno, ejecución del cálculo. Estas fases serán explicadas ampliamente en párrafos posteriores.

El conjunto de problemas fisicoquímicos que es preciso abordar en el cálculo CFD del proceso de combustión hace que sea un método complejo de llevar a cabo. Aun así, la posibilidad de resolver con precisión las características de la combustión y de obtener información que es difícilmente extraíble de un ensayo experimental hace que los modelos de simulación numérica se abran un hueco en el campo de los MCIAs.

Para el desarrollo de este estudio se utilizó el código CFD multidimensional *FIRE* de *AVL*, el cual permite simular el proceso de combustión en geometrías complejas e incorpora *submodelos* para considerar efectos de turbulencia, de fuerzas de gravedad y otros [170].

En este capítulo se presenta la metodología desarrollada para un proceso de combustión en una bomba de combustión a volumen constante, sus resultados, análisis de estos y posteriormente su comparación con los datos experimentales.

5.3 Aplicación del cálculo CFD a la bomba de combustión cilíndrica

5.3.1 Descripción del modelo CFD

En este apartado se describe el modelado CFD aplicado a la *bomba de combustión cilíndrica* que existe en el Laboratorio de Motores de la EII. Dicho modelado *CFD* se inicia con la selección del software a utilizar, para el cual se eligió el software *FIRE* de *AVL*, ya que éste, está diseñado especialmente para procesos de combustión.

La configuración del modelado se inicia con la construcción de la *geometría* y *mallado* de la bomba, *Figura 5.1*, para lo cual se utiliza un software auxiliar. Con el mismo se tomó un *dieciseisavo de la bomba* para ahorrar tiempo computacional posteriormente. A partir de la geometría, se sigue con el mallado de la misma; para ello se emplearon dos tamaños de malla, los que se definieron como **malla fina 0.5mm** y **malla gruesa 1mm**. Cabe resaltar que se puede trabajar con mallas aún más pequeñas, pero por limitaciones de los recursos computacionales disponibles, los tamaños de mallas definidos presentaban resultados aceptables.

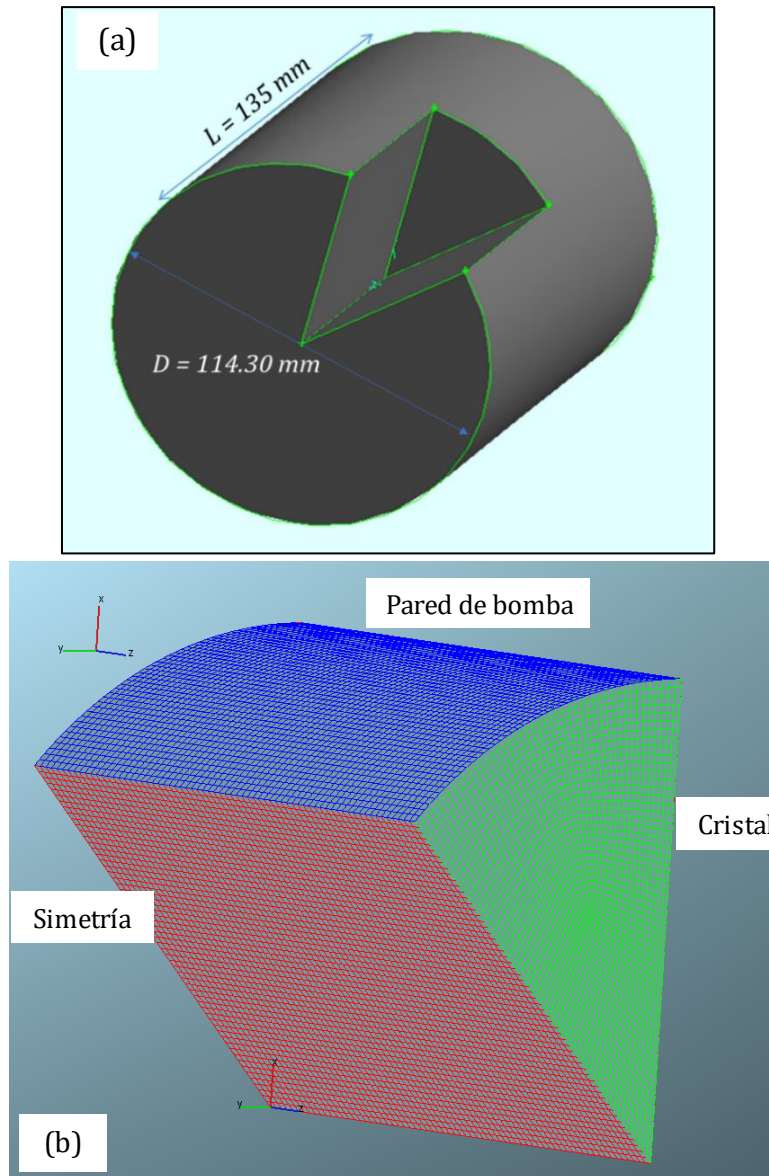


Figura 5.1: (a) Geometría y (b) mallado de modelo de un dieciseisavo de bomba CFD.

Con la geometría y el mallado fino del dieciseisavo de bomba representado en la Figura 5.1, se establecen las *condiciones de frontera o de contorno* del modelo, para la cual se define: *pared de bomba* para la parte cóncava del dieciseisavo, *pared de cristal* para uno de los extremos en dirección radial y *simetría* en los dos lados con dirección axial y uno en dirección radial, esta condición de simetría lo que nos indica es que en los lados adyacentes ocurre el mismo proceso.

Con todo lo anteriormente expuesto y definido, se exportan los documentos al software *FIRE - AVL*. Una vez dentro de *FIRE*, primero se importa el archivo de malla (*.msh*), y a continuación se realizan las siguientes acciones:

- **Definición de intervalo de tiempo de cálculo:** A partir de establecer el tiempo de cálculo del proceso de combustión en *70 ms*. se fija el intervalo de tiempo de cálculo, considerando un valor mínimo $ts_{min} = 1\mu s$ y unos valores máximos que se eligieron en $ts_{max} = 10, 100, 300$ y $500\mu s$.
- **Activación de módulos del código FIRE:** Se activan los módulos que permiten el estudio del proceso, en este caso los módulos de *combustión* y de *transporte de especies*.
- **Definición de condiciones de frontera o contorno:**
 - Temperatura en la pared de la bomba, $T_w=300K$
 - Condición adiabática $h_w=0$.
 - Temperatura en la pared de cristal, $T_{wc}=300K$
- **Condiciones iniciales de mezcla**
 - Tipo de combustible: CH_4
 - Temperatura inicial, $T_i= 300K$
 - Presión inicial, $p_i=0.1$ MPa
 - Dosado relativo combustible/aire, $\phi=1.0$
- **Control de solver.** Se establecen valores adecuados para lo siguiente:
 - Criterios de convergencia, iteraciones máximas y mínimas
 - Monitores de simulación
 - Ecuaciones activadas
 - Momento
 - Continuidad
 - Energía
 - Turbulencia: k- epsilon
 - Compresibilidad
- **Módulos de solución**
 - Transporte de especies
 - Combustión
 - Modelo de combustión: Turbulent flame speed closure

- Chispa de ignición: Tamaño, tiempo de inicio, duración y localización.

Es importante resaltar que el modelo de combustión seleccionado, *turbulent flame speed closure*, es el que mejor representa el caso en estudio. Dicho modelo se basa en la determinación de la **tasa de reacción** basándose en un enfoque que depende de los **parámetros de turbulencia**, es decir, la intensidad de la turbulencia, la escala de longitud turbulenta, y un tercer parámetro que es la estructura de la llama asociada al espesor y la velocidad de la llama, respectivamente [171].

La **tasa de reacción** se puede calcular por medio de dos mecanismos diferentes: esquema de autoignición y esquema de propagación de llama. El primer mecanismo viene dado por una expresión de tipo de Arrhenius, que permitiría calcular el inicio de combustión en condiciones de autoinflamación. En el caso de este trabajo, dado que la combustión se inicia mediante el salto de una chispa, se simula la propagación de la llama dentro del flujo, inicialmente en reposo. De esta forma, la tasa de reacción, ω_{FP} ($kg/(m^2.s)$), del mecanismo de propagación de llama, se escribe como el producto de la densidad del gas ρ , la velocidad de combustión turbulenta S_t y el gradiente de la fracción de masa de combustible ∇y_{Fu} , con la siguiente expresión:

$$\omega_{FP} = \rho * S_t * \nabla y_{fu} \quad [37]$$

Para aplicar este mecanismo a las mezclas homogéneas y no homogéneas se modificó el término del gradiente de la fracción de masa y fue reemplazado por el gradiente de la variable de progreso de la reacción ∇c , multiplicado por la fracción estequiométrica de la mezcla f_{st} , quedando la siguiente expresión:

$$\omega_{FP} = \rho * S_t * \nabla c * f_{st} \quad [38]$$

Se considera un tratamiento adicional de la tasa de reacción como lo es el **número de Karlovitz turbulento**, Ka_t , que describe la relación entre la escala de tiempo de la llama laminar ($t_F = \delta_l / S_l$) y la escala de tiempo de Kolmogorov ($t_k = L_K / u' = \sqrt{\nu / \varepsilon}$), donde: δ_l es el espesor de llama laminar, S_l la velocidad de llama laminar, ν la viscosidad cinemática y ε la tasa de disipación turbulenta.

Por consiguiente, la velocidad de combustión turbulenta, S_t , se determina a partir de las siguientes ecuaciones, dependiendo del número de **Karlovitz turbulento** [171]:

$$Ka_t = b_1 \left(\frac{u'}{S_L}\right)^{b_2} \left(\frac{\delta_L}{l_t}\right)^{b_3} \quad [39]$$

$$S_t = \left(S_L + \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha u'\right) (1.0 - Ka_t^2) \quad \text{para } 0 < Ka_t \leq 0.5 \quad [40]$$

$$S_t = \frac{3}{4} S_L \left(\frac{\alpha\beta}{2\sqrt{2}} + 1.0\right) \quad \text{para } 0.5 < Ka_t \leq 1.0 \quad [41]$$

$$S_t = 0.0 \quad \text{para } Ka_t > 1.0 \quad [42]$$

$$\alpha = \left(1.0 + \frac{\delta_L}{l_t}\right)^{b_4} \quad \text{y} \quad \beta = b_5 \left(\frac{S_L}{u'}\right)^{b_6} \left(\frac{l_t}{\delta_L}\right)^{b_7} \quad [43]$$

Donde u' representa la intensidad de turbulencia, l_t la escala espacial integral y b_1 a b_7 son constantes .

Finalmente, tanto la **velocidad de combustión laminar** necesaria para determinar la velocidad de combustión turbulenta como **el espesor de llama** se expresan en función del dosado (exceso de aire λ en la mezcla aire-combustible), la presión p y la temperatura T como:

$$\left. \begin{matrix} S_L \\ \delta_L \end{matrix} \right\} = (c_1 + c_2\lambda + c_3\lambda^2 + c_4\lambda^3 + c_5\lambda^4) \left(c_6 + \frac{c_7}{c_8+p} + \frac{c_9}{c_{10}+c_{11}p+p^2} \right)^{\left(c_{12} + \frac{c_{13}}{T} + \frac{c_{14}}{T^2} \right)} \quad [44]$$

Esta expresión es idéntica para ambas variables y difiere en los coeficientes individuales de cada uno, c_1 hasta c_{14} .

La **tasa de reacción química** viene expresada como un mecanismo de tipo de Arrhenius. Esta tasa determina la velocidad de llama. Existe un coeficiente que multiplica el valor de dicha tasa de reacción, denominado en el programa como CFP. Este **coeficiente CFP** debe tomar valores mayores que cero, pero el valor exacto (del orden de la unidad o superior) se debe ajustar en cada caso problema específico, ya que depende de la estructura detallada de los campos de flujo turbulento y de la llama respectivamente.

El combustible utilizado para las simulaciones fue una mezcla de 100%CH₄ y aire, con condiciones iniciales de mezclas y de contorno de: $p = 1 \text{ bar}$, $T_m = T_w = 300 \text{ K}$, $\phi =$

1.0, siendo éstas las mismas utilizadas para los ensayos experimentales. El encendido de la mezcla se realiza, al igual que en las instalaciones experimentales, por medio de una chispa simulada que se establece en el vértice de los lados definidos como simetría, ya que este sería el centro de la geometría completa.

5.3.2 Método para ajustar una expresión analítica a la forma del frente de llama considerando su deformación dentro de la cámara cilíndrica

Para calcular la velocidad de combustión a partir de los resultados obtenidos mediante el modelo numérico, se toma la evolución de la presión calculada en función del tiempo (pares presión-tiempo), para analizarlos mediante el modelo diagnóstico de dos zonas (2Z), que se explicó anteriormente. El análisis de la presión proporciona la tasa de masa quemada y al usar la superficie del frente de llama se puede obtener la velocidad de combustión equivalente, la cual se puede comparar con la obtenida a partir de los experimentos, mediante el mismo modelo 2Z.

Como se mencionó anteriormente, la velocidad con la que se propaga el frente de llama esférico resulta ser el resultado de sumar a la velocidad de combustión laminar la velocidad de expansión del frente de llama, de acuerdo con la expresión $S_n = u_l + V_a$ [23]. Si bien la mezcla en el interior de la bomba está en reposo antes de que se produzca la combustión, una vez que ésta se inicia, la densidad de los gases quemados es menor debido a su mayor temperatura y provoca una expansión de estos, induciendo a su vez el movimiento de la masa sin quemar durante el periodo de combustión. Estos efectos son inherentes al propio proceso de combustión confinada en la bomba cilíndrica y por ello son tenidos en cuenta por el modelo numérico, el cual proporciona valores del movimiento del frente de llama teniendo en cuenta la presencia de las paredes y la eventual deformación sobre el frente que genera dicha presencia.

Por su parte, el modelo diagnóstico 2Z considera la hipótesis de que el frente de llama tiene que ser esférico, lo que en el presente caso solo se cumple para los primeros instantes de tiempo, en los que el frente de llama es prácticamente esférico. Sin embargo, por efecto del confinamiento en la bomba cilíndrica, a medida que el **frente de llama avanza, se deforma**, perdiendo la simetría esférica y adoptando algo más parecido a una geometría elipsoidal. Esto ha obligado a introducir un ajuste en el cálculo del área de

frente de llama, considerando que el avance del frente de llama es mayor en la dirección axial que en la dirección radial.

Al considerar esta geometría deformada del frente de llama, se puede calcular de manera más exacta la velocidad de combustión con la forma real del frente. Inicialmente estos daban valores por debajo de los obtenidos en los ensayos experimentales y los encontrados en la bibliografía.

Ajuste de la geometría del frente de llama deformado

A continuación, se detalla la metodología utilizada para determinar la velocidad de combustión laminar cuando el frente pierde la geometría esférica.

Para poder manejar de forma cómoda la geometría del frente de llama calculado mediante las simulaciones numéricas, se ha buscado una expresión matemática que represente adecuadamente la forma del frente de llama deformado, usando como referencia la **Figura 5.2**. Considerando la geometría resultante de cortar por un plano medio el volumen que encierra el frente de llama, un frente esférico tiene una sección circular, mientras que el frente deformado tiene una sección a modo de elipse generalizada, con unos semiejes z_0 e r_0 . La expresión que representa dicha **elipse generalizada** es la indicada en [45], con la particularidad de que el exponente n de las variables puede tomar valores que cambian con el tiempo (en vez de 2, como en el caso de una elipse).

$$\left(\frac{z}{z_0}\right)^n + \left(\frac{r}{r_0}\right)^n = 1 \quad [45]$$

En donde z_0 , r_0 son los valores de los semiejes en cada instante de tiempo, ya que se corresponden a forma que tiene la circunferencia de la intersección del frente de llama con el plano perpendicular en ese instante de tiempo. En la medida en que z_0 e r_0 son diferentes entre sí, la sección deja de ser circular para pasar a ser elipsoidal, mientras que cuando n aumenta respecto al valor 2, la sección deja de ser una elipse para pasar a una forma más cuadrangular con vértices achatados. Eligiendo los valores adecuados de z_0 , r_0 y n , la expresión [45] puede ajustarse a la forma que tiene el frente de llama en cada instante de tiempo. No se considera la dependencia con respecto a una tercera

coordenada porque se supone que hay simetría de revolución respecto al eje del cilindro de la bomba.

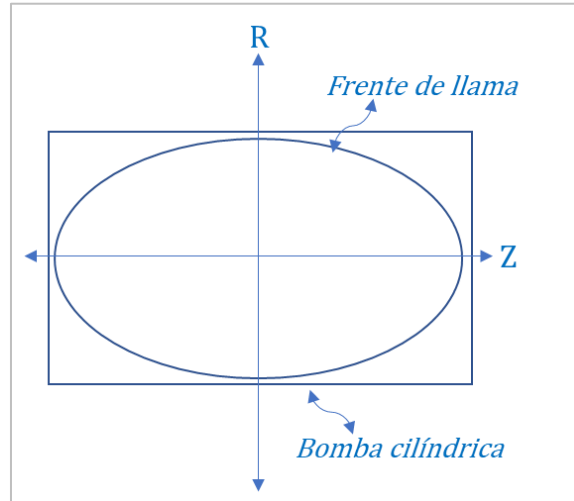


Figura 5.2: Sección del frente de llama en un tiempo (t) dentro de la bomba cilíndrica.

Una vez que se tiene la expresión para la forma de la sección del frente de llama, se necesita calcular el **volumen de gases quemados que encierra el frente de llama** en cada instante de tiempo dentro de la bomba cilíndrica.

Para ello se define un diferencial de volumen de disco en el sistema, **Figura 5.3**, y se obtienen las siguientes expresiones:

Volumen de un disco de revolución:

$$V_{disco} = \pi \int_a^b [f(x)]^2 dx \quad [46]$$

Despejando para "r" en la $\left(\frac{z}{z_0}\right)^n + \left(\frac{r}{r_0}\right)^n = 1$ [455, se tiene:

$$r = r_0 \left[1 - \left(\frac{z}{z_0}\right)^n \right]^{1/n} \quad [47]$$

Remplazando "r" en la ecuación de volumen del disco, queda:

$$V_{disco} = \pi \left\{ r_0 \left[1 - \left(\frac{z}{z_0}\right)^n \right]^{1/n} \right\}^2 dz \quad [48]$$

Y finalmente se tiene que el volumen total ocupado por el frente de llama es:

$$V_{Total} = 2\pi r_0 \int_0^{x_0} \left[1 - \left(\frac{z}{z_0}\right)^n\right]^{1/n} dz \quad [49]$$

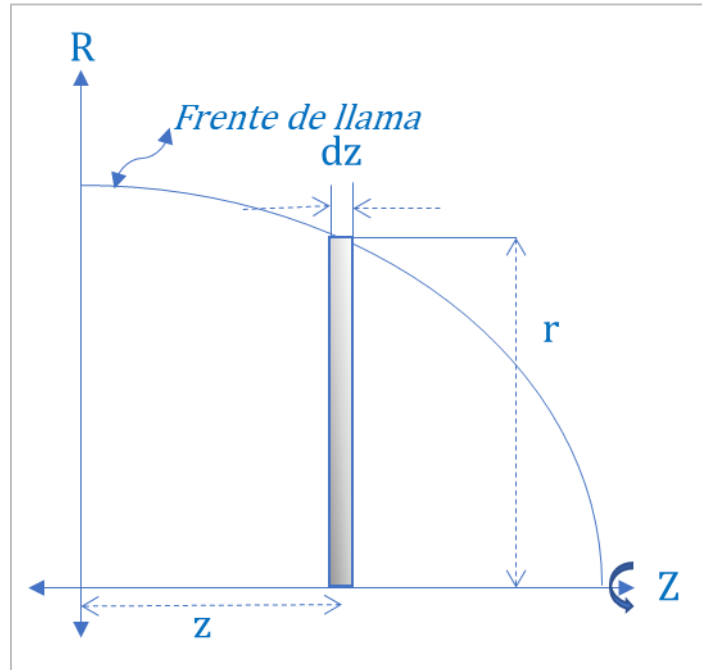


Figura 5.3: Diferencial de volumen en el sistema.

Teniendo esta expresión matemática para calcular el volumen, se pasa a resolver la integral. Para ello se utiliza integración numérica, específicamente la regla del trapecio, la cual se ha desarrollado mediante un algoritmo implementado en MATLAB y posteriormente se ha realizado un programa en C++, el cual permite para cada instante de tiempo, t , calcular los valores de z_0 , r_0 , n , V_{sq} , m_{sq} , T_{sq} entre otros y permite representar gráficamente como se va deformando el frente de llama. Finalmente, se introduce el área de frente de llama en la ecuación [21] y se hacen los ajustes en el programa de modelo diagnóstico para calcular la velocidad de combustión.

En el capítulo 9 de resultados del modelado CFD, se presentan los gráficos de las diferentes simulaciones que se han realizado, tanto como para poner el programa a punto, como los casos de estudios en sí.

CAPÍTULO 6

Resultados experimentales para mezclas de H₂ puro

6.1	Velocidad de combustión obtenida por el método de las presiones.....	97
6.1.1	Efecto del dosado relativo	98
6.1.2	Efecto de la presión inicial	100
6.1.3	Efecto de la temperatura inicial.....	102
6.2	Velocidad de combustión obtenida por el método óptico Schlieren.....	105
6.3	Inestabilidades en el frente de llama.....	107
6.3.1	Transición a celularidad	107
6.3.2	Densidad celular	111
6.4	Resultados de la dependencia de la celularidad y la densidad celular de las condiciones operativas.....	112
6.4.1	Efecto del dosado relativo	112
6.4.2	Efecto de la presión inicial	115
6.4.3	Efecto de la temperatura inicial.....	117
6.5	Resultados de la velocidad de combustión laminar.	120
6.6	Conclusiones sobre los resultados de mezclas de hidrógeno puro (H ₂)	122

6 RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA H₂ EN AIRE

En este capítulo se presentan los diferentes resultados obtenidos en la bomba cilíndrica a volumen constante para la combustión de hidrógeno puro mezclado con aire, tanto mediante la técnica de análisis de la evolución de la presión como del seguimiento del radio del frente de las imágenes Schlieren. Se ha realizado un estudio paramétrico variando el dosado (relación combustible/aire), y la presión y la temperatura iniciales de las mezclas experimentadas. A partir de esos resultados, se presenta una caracterización de los procesos de combustión, con el fin de obtener las **velocidades de combustión**, así como investigar la **morfología de los frentes de llama**, la **aparición de inestabilidades** y cuantificar su intensidad utilizando un **índice de densidad de celularidad** (definido como número de células/cm²).

Como se explicó anteriormente, en este trabajo se utilizan dos metodologías concurrentes para el tratamiento de los datos experimentales. La presión se registra en función del tiempo y se analiza mediante un modelo de diagnóstico de dos zonas (2Z), para obtener la velocidad de combustión. En paralelo, se registran imágenes Schlieren del frente de llama, que luego se tratan con un modelo de procesamiento de imágenes para medir la evolución del radio durante el proceso de combustión. De acuerdo con la nomenclatura comúnmente utilizada en la literatura (Bradley et al. [54]), u_n es la **velocidad de combustión laminar con stretch, afectada por la tasa de stretch, α** , y también **por inestabilidades** tanto hidrodinámicas como termodifusivas. Su valor experimental puede obtenerse a partir de las imágenes obtenidas mediante la técnica Schlieren, indicándose que se corresponde con la masa acumulada en el frente de llama, incluyendo la masa que todavía no ha tenido tiempo de quemarse dentro del frente de llama. Por su parte, u_l^p representa la **velocidad de combustión laminar obtenida a partir de la tasa de combustión** ($u_l^p = \dot{m}_b / \rho_{sq} * A_f$), y se calcula a partir de la **presión registrada** utilizando el modelo termodinámico 2Z.

El **estudio paramétrico para ver la influencia del dosado (6 valores), temperatura (2 valores) y presión (3 valores)** sobre la velocidad de combustión obtenida mediante las dos técnicas citadas tiene en cuenta algunas de las combinaciones de valores de entrada de cada experimento, de acuerdo con la

Tabla 6-1, sobre la velocidad de combustión.

Tabla 6-1: Condiciones iniciales de los experimentos para hidrógeno puro en aire.

MEZCLA	ϕ	P _{INICIAL} [MPa]		T _{INICIAL} [K]	
100% H ₂	0.5	0.1		315	
	0.6	0.1		315	
	0.7	0.1	0.2	0.3	315
	0.7	0.1	0.2	0.3	373
	0.8	0.1			315
	0.9	0.1			315
	1.0	0.1			315

6.1 Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones

En este primer método, la velocidad de combustión laminar u_l^p se determina mediante un análisis termodinámico de los datos de presión registrados durante el proceso de combustión en la bomba de combustión cilíndrica. La entrada principal del modelo de análisis de combustión de dos zonas es la evolución temporal de la presión registrada durante la combustión, además de las condiciones iniciales de composición de la mezcla combustible, masa de la mezcla gaseosa y la presión y temperatura inicial. Como se explicó en la metodología (ver capítulo 4), este modelo considera la división de la cámara de combustión en dos zonas diferentes: quemada (indicada con un subíndice q) y no quemada (indicada con un subíndice sq). En cada zona se aplican ecuaciones de conservación y gas ideal. Durante la combustión, la masa no quemada se convierte en masa quemada, que comienza en el centro geométrico de la bomba de combustión a partir del encendido provocado por una bujía, por lo que el frente de llama crece esféricamente hacia afuera. Entre otras variables, los resultados de este modelo son las temperaturas de cada zona, la fracción de masa quemada, la superficie del frente de la llama, la velocidad de combustión, el número de Lewis, el número de Zel'dovich, y la tasa de crecimiento de las inestabilidades.

En la *Figura 6.1* se presenta un **ejemplo de resultados del modelo de dos zonas**, donde se representa la presión experimental (adimensionalizada con el valor inicial) frente al tiempo de combustión, junto con algunos de los resultados más importantes del modelo: la temperatura de la zona sin quemar (adimensionalizada con el valor inicial), la fracción de masa quemada (FMQ, relación entre la masa real quemada y la masa total), el

radio de la llama y la velocidad de combustión. Este gráfico proporciona un valor de la velocidad de combustión, u_l^p , para cada par de presión-temperatura de la mezcla sin quemar. Dado que el período inicial de presión de combustión se ve afectado por las oscilaciones debidas al efecto de la energía de la chispa y también por el algoritmo numérico, los valores para tiempos muy cortos se trazan, pero no se utilizan para los resultados. Como referencia, la línea vertical en el gráfico representa el momento en el que la fracción de masa quemada toma el valor 1%. En algunas condiciones, aparece un aumento en la curva de la velocidad, asociado al aumento aparente de la velocidad de combustión una vez que se desarrolla el frente de llama celular.

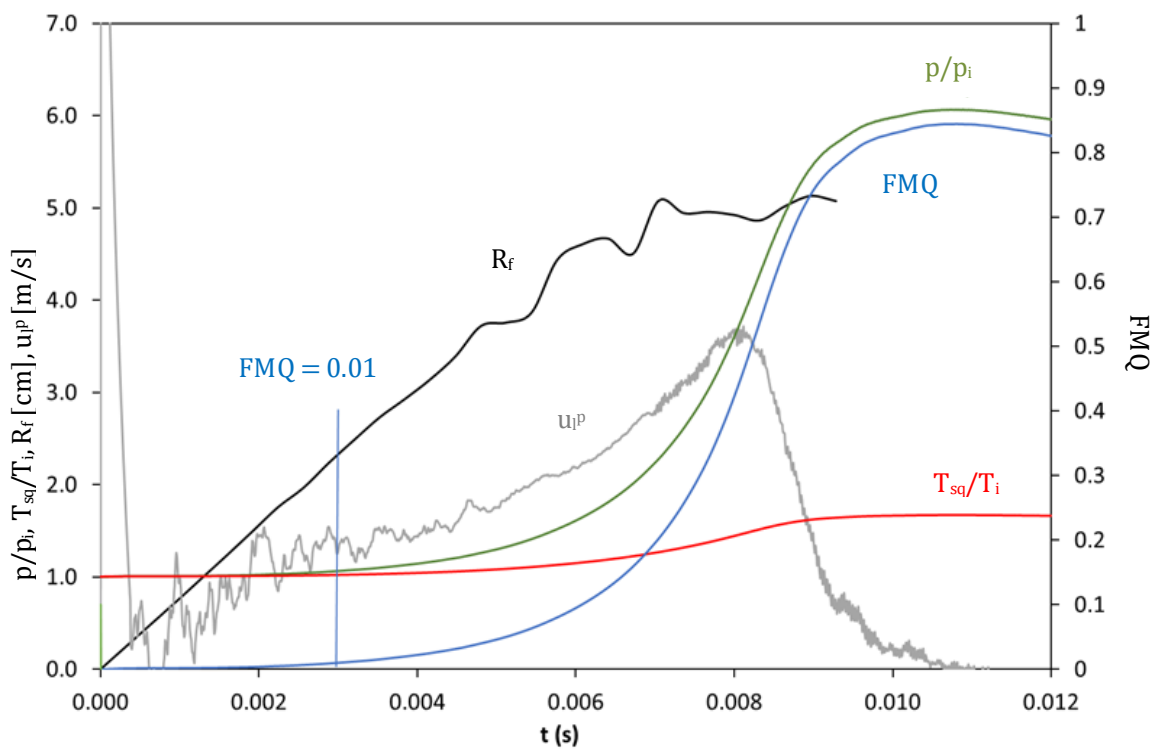


Figura 6.1: Evolución temporal de la presión experimental, valores calculados de velocidad de combustión (u_l^p), fracción de masa quemada (FMQ), temperatura de la zona no quemada y radio del frente de llama en función del tiempo, para una mezcla de aire-hidrógeno con dosado $\phi = 0.7$ y condiciones iniciales (0.1MPa y 300K).

6.1.1 Efecto del dosado relativo

Presión y velocidad de combustión laminar

Para analizar el efecto del dosado relativo sobre el desarrollo de la combustión, se han cambiado las condiciones iniciales en términos de dosado de (0.5 – 1.0), manteniendo la presión inicial a 0.1 MPa y la temperatura inicial en 315 K.

En la *Figura 6.2*, se muestra la evolución de la presión registrada para cada conjunto experimental de condiciones iniciales ($p_i = 0.1 \text{ MPa}$ y $T_i = 315 \text{ K}$), cubriendo el rango de dosados (desde la estequiometría hasta cerca del límite de combustión pobre de 0.5). Se puede observar el aumento de la duración de la combustión a medida que la mezcla es más pobre, asociado a menores velocidades de combustión, y también la reducción de la presión final de combustión.

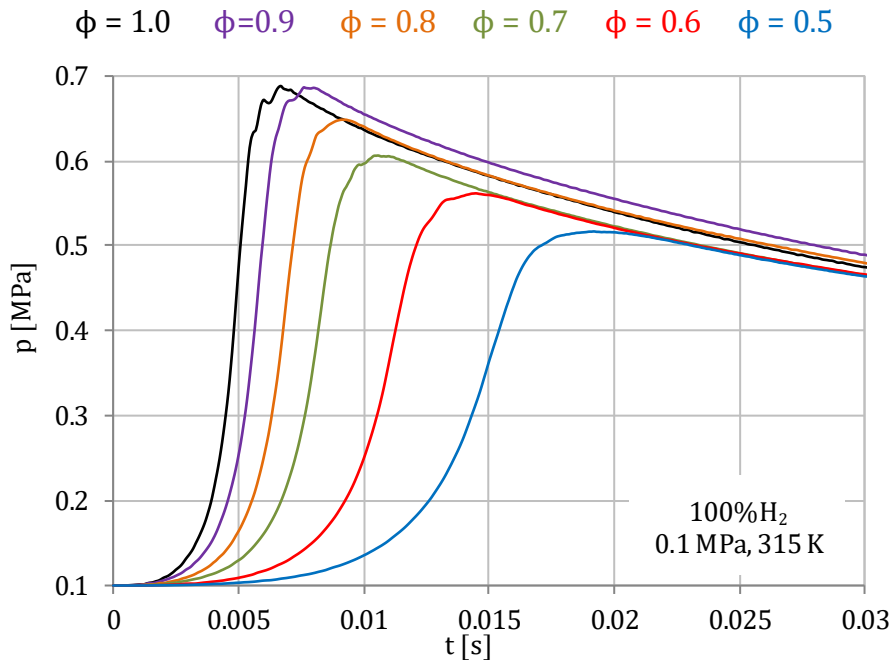


Figura 6.2: Evolución temporal de la presión para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y una variación de dosado $\phi = 0.5 - 1.0$.

Las curvas de presión anteriores son los datos de entrada del modelo termodinámico para determinar las velocidades de combustión. En la *Figura 6.3* se muestra la evolución de las **velocidades de combustión frente a la temperatura de la mezcla sin quemar** para cada valor de dosado. En esta figura, se puede ver que la velocidad de combustión aumenta a medida que aumenta el dosado, y esto se debe a que al ir subiendo el dosado, la mezcla se hace más rica y por ende aumenta la cantidad de combustible en la mezcla y a su vez la tasa de reacción. Las variables se muestran en función de la temperatura no quemada, ya que ésta proporciona un rango similar en el eje de abscisas para todos los experimentos. De hecho, la presión en cada punto es diferente, ya que la presión y la temperatura de la mezcla no quemada están relacionadas por una evolución cuasi-adiabática (resultado del modelo de dos zonas).

Esto significa que la velocidad de combustión u_l^p es una función $u_l^p = u_l^p(p, T_{sq}, Fr)$. Los valores para algunos puntos finales de cada línea de velocidad son incoherentes, probablemente debido a la pérdida de validez de la hipótesis de simetría esférica del frente de llama, que surge de la distorsión del frente debido al confinamiento cilíndrico. Además, el inicio del proceso de combustión está influenciado por el proceso de ignición, dando lugar a picos no realistas en la velocidad de combustión. En ambos casos esos valores se descartan para el cálculo de los valores de las velocidades de combustión.

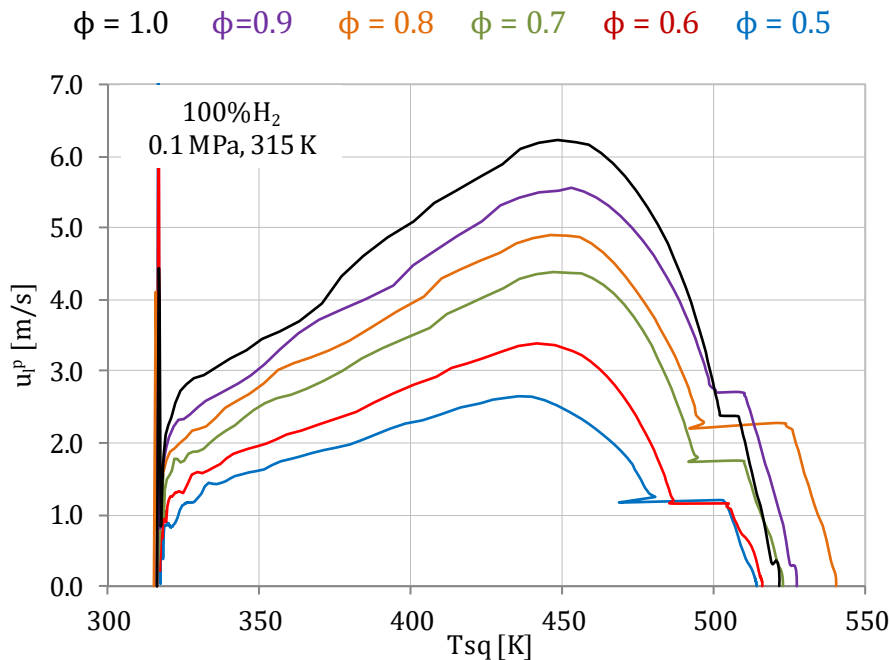


Figura 6.3: Velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y una variación de dosado $\phi = 0.5 - 1.0$.

6.1.2 Efecto de la presión inicial

Presión y velocidad de combustión laminar

Sumado al estudio paramétrico del dosado, se realizó un estudio para la variación de la presión inicial, en el cual se fijó el dosado a 0.7 y la temperatura a 315 K, variándose la presión inicial desde 0.1 a 0.3 MPa. Dado que el H₂ tiene velocidades de combustión altas a dosados pobres, se eligió un dosado intermedio ($\phi = 0.7$) entre la mezcla pobre y la estequiometría.

En la *Figura 6.4*, se presenta la evolución de la presión instantánea en función del tiempo para una mezcla de hidrógeno puro. Como se puede ver en gráfico, con el aumento de la presión inicial aumenta la presión durante el proceso de combustión y su pico máximo se alcanza en menor tiempo.

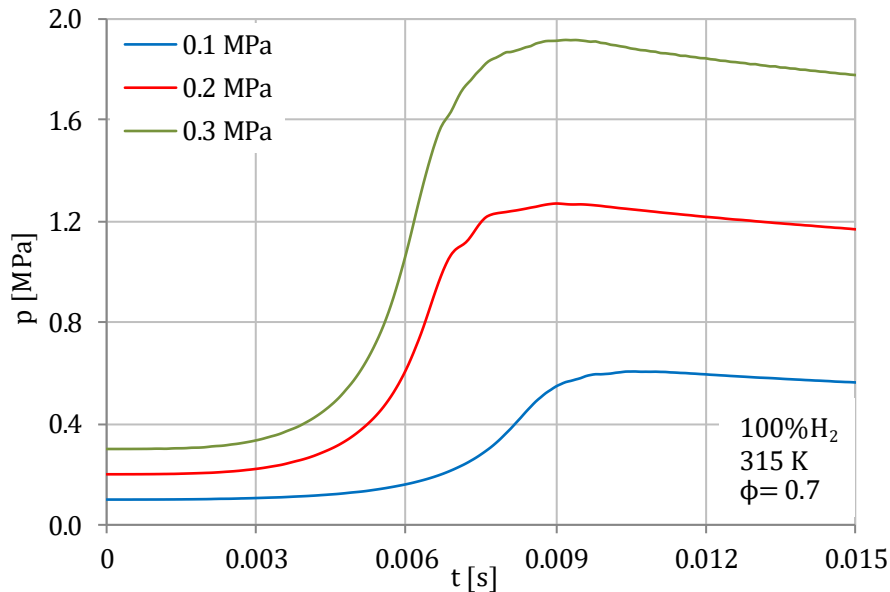


Figura 6.4: Evolución temporal de la presión para combustiones de H₂ - aire con condiciones iniciales de 315 K, $\phi = 0.7$ y $p_i = 0.1 - 0.3$ MPa.

Tal como se desarrolla en el Anexo I, desde el punto de vista teórico, al considerar una mezcla que reacciona en un volumen constante, se puede ver que **el aumento de presión** (diferencia entre la presión final y la inicial) **dividido por la presión inicial** es sólo **función de la temperatura inicial, del dosado y de la energía interna de combustión**.

$$\frac{p_f - p_i}{p_i} = \frac{\gamma_q - 1}{T_i \cdot R_{sq}} * \frac{F}{1 + F} \Delta U_c \quad [50]$$

Como en los experimentos indicados, estas tres variables se mantienen constantes, el aumento adimensionalizado de presión debe serlo también, como así resulta en los datos de la *Figura 6.4*, valiendo aproximadamente 5.5.

Esta misma expresión del aumento adimensionalizado de presión permite explicar la sucesión de valores que adoptan las líneas de la *Figura 6.2*, con valores de la relación $\frac{F}{1+F}$ progresivamente menores desde la estequiometría ($F = 1/34$) hasta un dosado relativo de 0.5 ($F = 1/68$).

A partir de las curvas de presión instantánea de la *Figura 6.4*, se puede obtener la evolución de la velocidad de combustión laminar con el tiempo, si bien es preferible su presentación en función de la temperatura sin quemar. Así, en la *Figura 6.5* se muestra la velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca. En la misma se puede ver claramente que la velocidad de combustión aumenta con la presión inicial, un comportamiento opuesto al del metano (la velocidad disminuye con el aumento de la presión). Sin embargo, el aumento más significativo se da al pasar de la presión inicial de 0.1 a 0.2 MPa, ya que el aumento de 0.2 y 0.3 MPa es menos pronunciado.

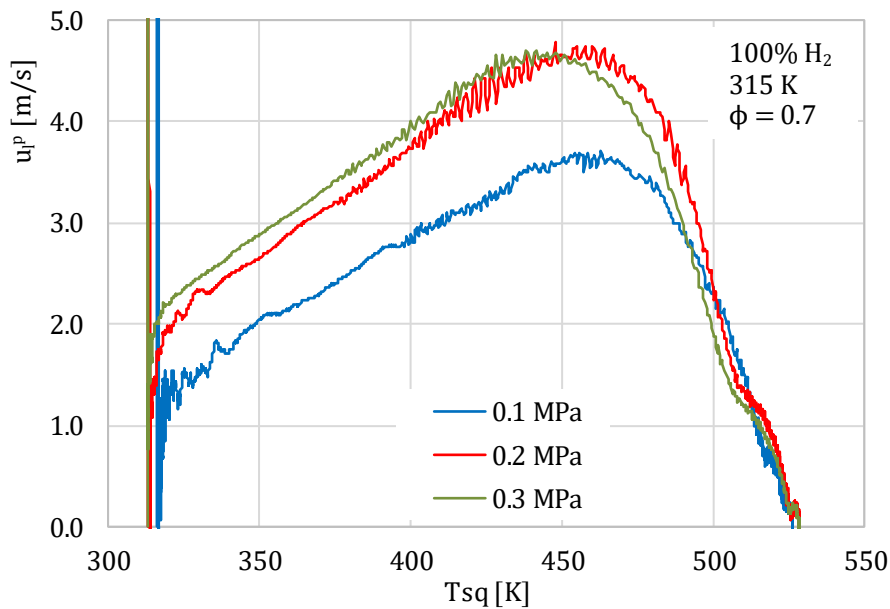


Figura 6.5: Velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca para combustiones de H₂-aire con condiciones iniciales de 315 K, $\phi = 0.7$ y una variación de $p_i = 0.1$ a 0.3 MPa.

6.1.3 Efecto de la temperatura inicial

Presión y velocidad de combustión laminar

Otro factor que resulta importante a la hora de caracterizar la combustión es la temperatura inicial. En la *Figura 6.6*, se muestran las curvas de presión para las dos temperaturas iniciales testeadas (315 y 373 K) y para las tres presiones iniciales en estudio.

En la misma se puede ver que el **aumento de la temperatura inicial provoca una reducción de la presión final**, en consonancia con la ecuación $\frac{p_f - p_i}{p_i} = \frac{\gamma_q - 1}{T_i \cdot R_{sq}} * \frac{F}{1 + F} \Delta U_c$ [50], lo que se repite para las tres presiones iniciales.

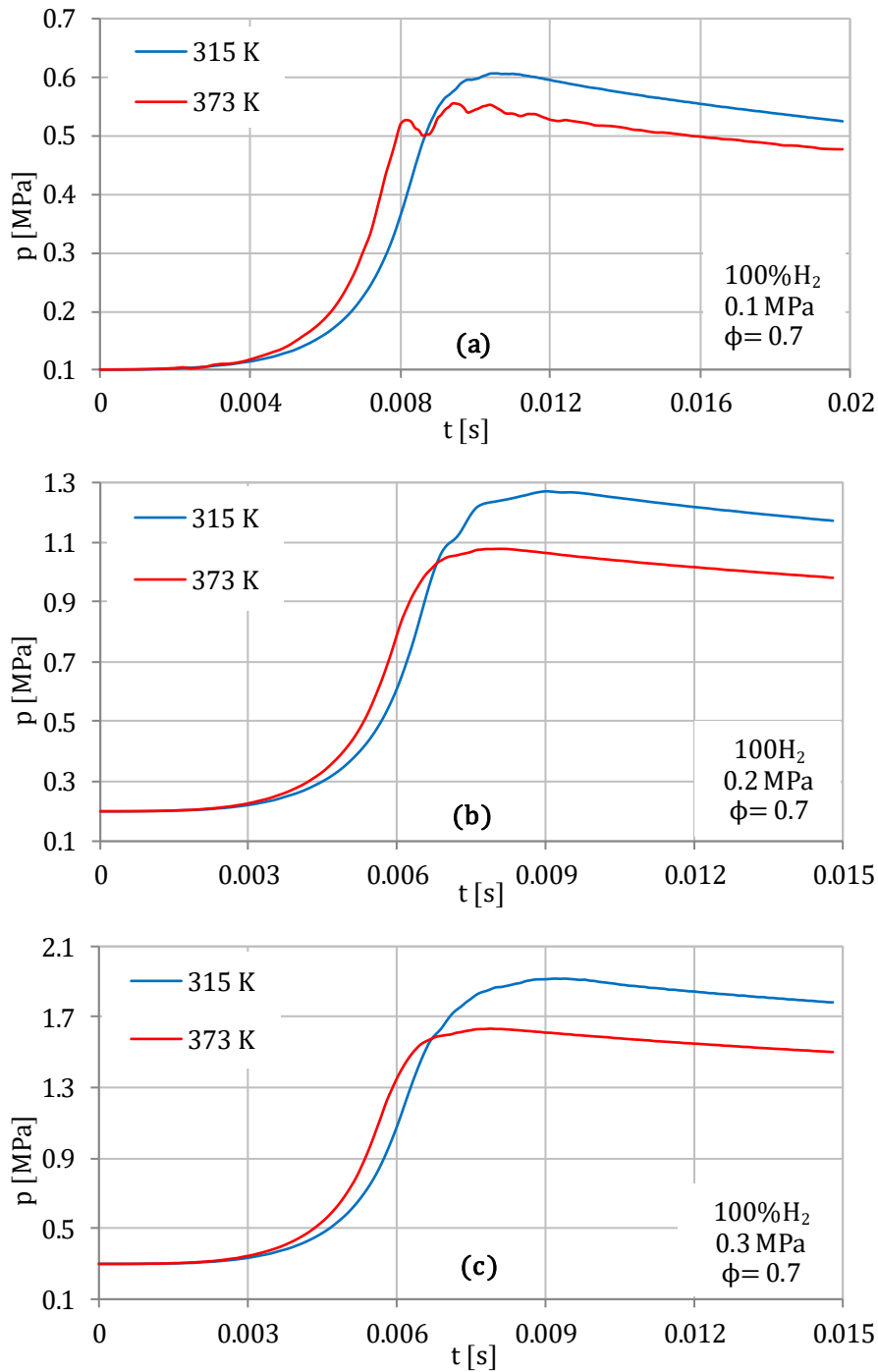


Figura 6.6: Evolución temporal de la presión para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de $\phi = 0.7$ y una variación de $T_i = 315$ y 373 K. (a) 0.1 MPa, (b) 0.2 MPa, (c) 0.3 MPa

En Figura 6.7, se muestran las curvas de velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca, para las dos temperaturas iniciales al igual que para las tres presiones iniciales.

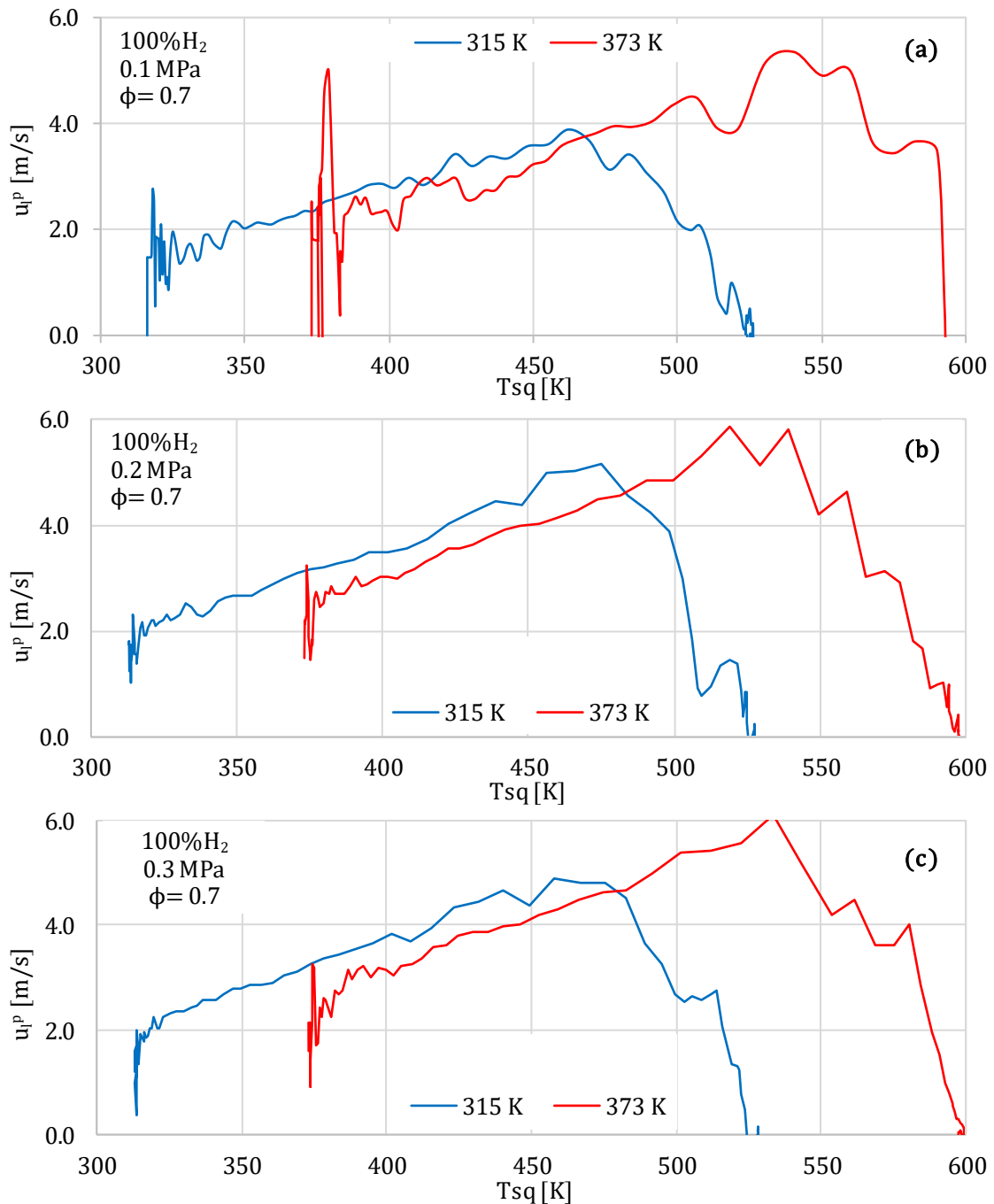


Figura 6.7: Velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca para combustiones de H₂ - aire con condiciones iniciales de $\phi = 0.7$ y una variación de $T_i = 315$ y 373 K. (a) 0.1 MPa, (b) 0.2 MPa, (c) 0.3 MPa

En dicha figura se puede ver que la **temperatura máxima de la mezcla sin quemar aumenta linealmente con el aumento de la temperatura inicial**, para las tres presiones iniciales estudiadas. Al aumentar dicha temperatura, se produce un aumento de la velocidad de combustión laminar, consecuencia del aumento de la tasa de reacción, como se puede ver al considerar una expresión de tipo de Arrhenius, con una cierta energía de activación. Hay que hacer constar que en cada una de las tres figuras los valores

de las dos líneas (azul para 315 K y roja para 373 K) aún para la misma abscisa no tienen por qué ser iguales en las ordenadas, ya que la presión es diferente (menor en las líneas rojas que en las azules, y por ello, con menor velocidad laminar).

6.2 Velocidad de combustión obtenida por el método óptico de imágenes Schlieren

Durante el proceso de combustión, como se mencionó en párrafos anteriores, se guarda un registro de las imágenes Schlieren de la evolución de la llama, para ser analizadas por medio de técnicas de reconocimiento de imágenes. En la bomba de combustión, tras el proceso de ignición, se desarrolla una combustión premezclada, y el frente de llama se propaga hacia afuera con la **velocidad de propagación de la llama S_n** , que se puede obtener de la evolución temporal del radio de llama r_u durante el proceso de combustión, obtenido por el método de imágenes Schlieren. De esta velocidad, se derivan otros parámetros, para la llama esférica que se propaga hacia el exterior como lo es la **tasa de stretch, $\alpha = (2/r_u) * S_n$** , de la llama.

Posteriormente de la relación lineal entre la velocidad de propagación y la tasa de stretch, se deduce la **velocidad de propagación de llama sin stretch, S_n^0** (ver metodología de técnica Schlieren, capítulo 4), con la que, junto a la **relación de densidades σ** de la masa quemada con la masa no quemada, se calcula la **velocidad de combustión sin stretch u^0** . La relación de densidades multiplicada por la velocidad de propagación de la llama da como resultado la velocidad de combustión afectada por la tasa de stretch. Es importante resaltar que este método óptico Schlieren es válido durante las primeras etapas del proceso de combustión, donde las condiciones de presión y temperatura se mantienen prácticamente casi constantes. De hecho, en los resultados presentados el aumento de presión no llega a sobrepasar el 2% de aumento con respecto a la presión inicial.

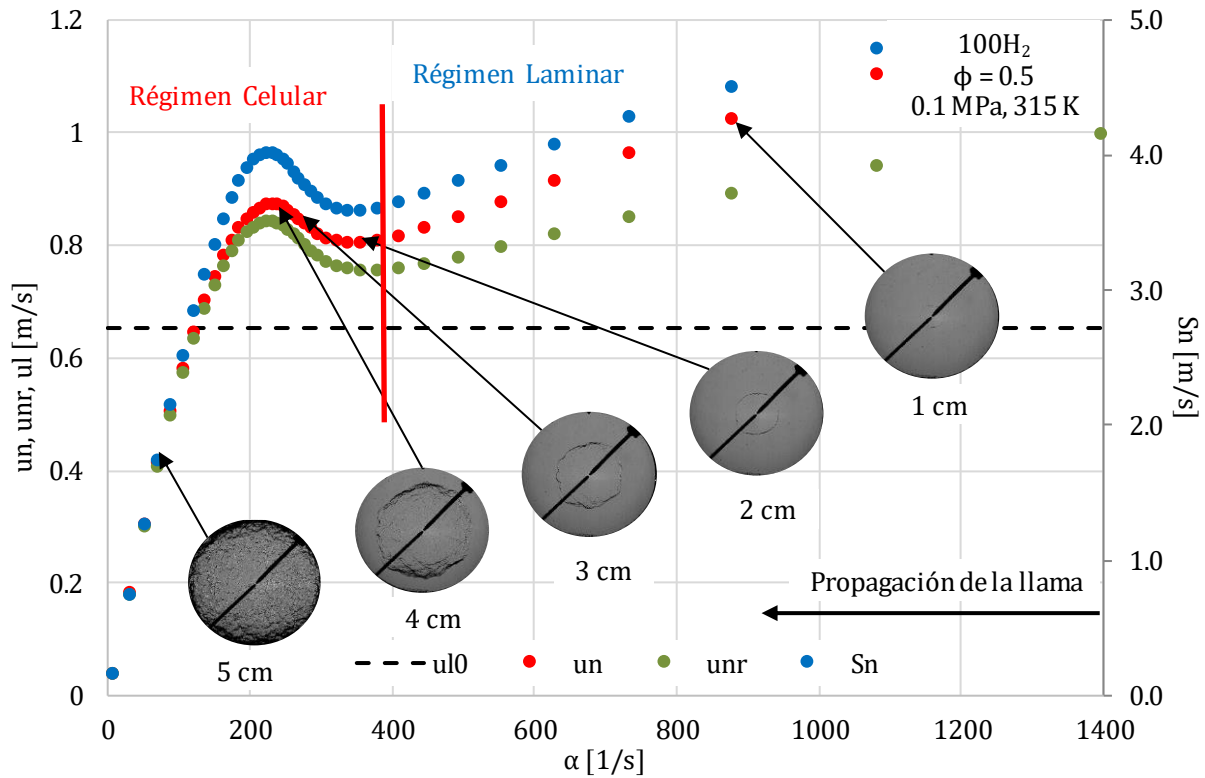


Figura 6.8: Diferentes velocidades (S_n , u_n , u_n y u_{nr}) obtenidas por el método Schlieren para una combustión de H_2 - aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosado de $\phi = 0.5$.

La **velocidad de propagación de llama con stretch** (S_n , curva de puntos azules), la **velocidad de combustión con stretch**, (u_n , curva de puntos rojos), **velocidad sin stretch**, (u_l^0 , línea negra punteada) y la **velocidad de combustión por la aparición de los productos quemados**, (u_{nr} , curva verde), se representa en la *Figura 6.8* frente a la **tasa de stretch** para la combustión de hidrógeno-aire a un dosado de 0.5, con valores iniciales de 0.1 MPa y 315 K. En esta figura se pueden ver dos partes diferentes: la derecha (parte inicial de la propagación de la llama), con tasas de stretch elevadas, pero con un régimen laminar de la llama, y la izquierda (última parte de la propagación de la llama), con tasas de stretch tendentes a cero, que corresponde al régimen celular debido al crecimiento de inestabilidades. A medida que la llama se desarrolla y aumenta de tamaño, la velocidad con stretch disminuye, y luego tiene un aumento cuando aparece la celularidad en la llama. Esta tendencia se da para todas las velocidades presentadas en el gráfico. Además, se puede ver que en el régimen laminar todas estas velocidades tienden a la **velocidad de combustión sin stretch**, u_l^0 . En las primeras etapas de combustión las velocidades se ven afectadas por el proceso de encendido, mientras que en las etapas finales lo son por el aumento de presión y las inestabilidades.

6.3 Inestabilidades en el frente de llama

6.3.1 Transición a celularidad

Recordando lo que se ha escrito en capítulos anteriores, antes de plantear un estudio sobre la velocidad de combustión laminar es necesario aclarar que no en todas las condiciones en las que puede esperarse un desarrollo laminar del frente de llama, éste tiene efectivamente ese carácter [51]. En efecto, la condición laminar puede que no se cumpla como consecuencia de la celularidad provocada por las inestabilidades fluidodinámicas y termodifusivas en el frente de la llama.

Existen varios tipos de fenómenos presentes en las llamas reales que pueden cambiar la velocidad de combustión laminar, entre otras propiedades. Las inestabilidades de la estructura del frente de llama son un tipo de fenómenos para tener en cuenta. La presencia de fuerzas másicas, como la gravedad, la expansión térmica de los gases cuando son alcanzados por el frente de llama y los fenómenos de origen termo-difusivo pueden generar inestabilidades en el frente de llama, que también pueden desarrollar deformaciones y arrugas en él.

Las inestabilidades fluidodinámicas conducen a la **celularidad de la llama**, la cual aparece en función de diferentes variables como son la presión, el tipo de mezcla, o el radio de la llama entre otras. Para caracterizar e identificar estas inestabilidades se consideran los **números de Markstein** (Ma), **Lewis** (Le) y **Peclet** (Pe), que son números adimensionales que agrupan las variables antes mencionadas. Ma y Le, dependen principalmente de la presión y del tipo de mezcla, por lo que en el tramo de presión constante su valor no varía con el avance del radio de la llama.

El **número de Peclet** está definido como la relación entre el radio de llama y el espesor de la misma, e indica la propensión a un elevado valor de la inestabilidad del frente de llama, consecuencia del crecimiento de células (o quizá grietas-cracks, en los bordes de las células). Cuando crece el frente de llama, el valor del número de Peclet aumenta por el aumento del radio, pero también por la reducción del espesor del frente de llama asociada al crecimiento de la presión. Puede hablarse de un **radio de llama crítico**, para el cual es evidente la consolidación de las células sobre la superficie del frente de llama, así como un espesor de frente de llama crítico correspondiente a las

condiciones de presión y temperatura del radio crítico. Por su parte el **número de Peclet crítico** es la relación entre el radio crítico y el espesor de frente de llama crítica. El desarrollo de la combustión reduce la tasa de stretch, mientras que el número de Peclet aumenta, con lo que la llama se hace más inestable y existe mayor probabilidad de que la llama se vuelva celular.

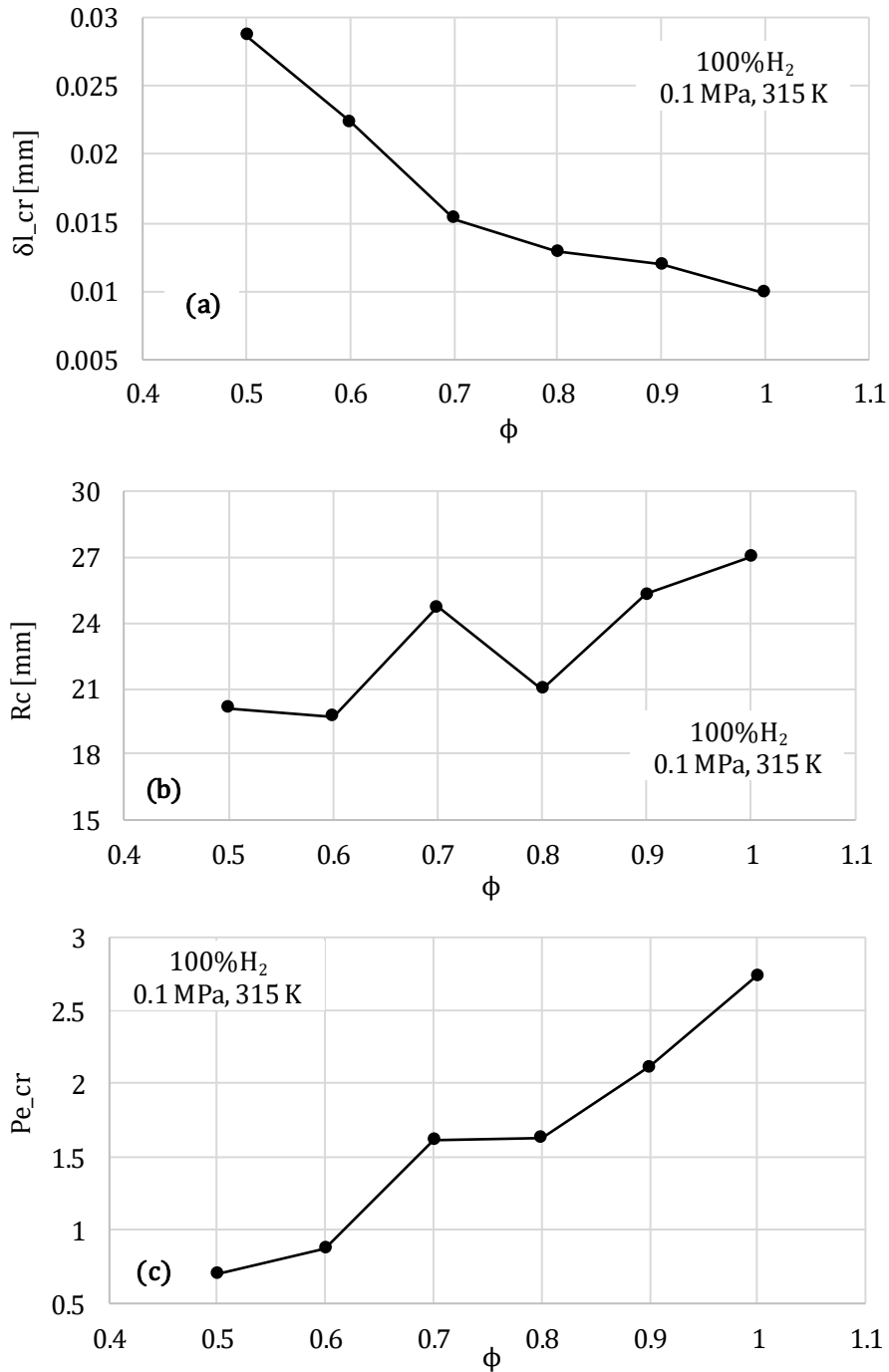


Figura 6.9: (a) Espesor de llama crítica. (b) Radio de llama crítica. (c) Número de Peclet crítico para diferentes dosados de mezcla de H₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.

En la *Figura 6.9(a)*, se muestra el **espesor de llama de llama crítico** para diferentes dosados, en la que se puede ver que a medida que aumenta el dosado, disminuye el espesor de llama. La *Figura 6.9(b)*, muestra el **radio crítico**, es decir el radio en el cual la llama cambia de laminar a celular. Finalmente, en la *Figura 6.9(c)*, se muestra el **número de Peclet crítico** calculado experimentalmente de los dos parámetros antes graficados, en la que se puede confirmar que éste aumenta con el aumento del dosado.

En cuanto al **número de Markstein**, definido como la relación entre la longitud de Markstein (a su vez relacionada con la curvatura de la llama) y el espesor del frente de llama. Caracteriza en qué medida se ve afectada la velocidad de combustión por el stretch y a su vez un indicativo de la tendencia que tiene la llama a desarrollar celularidad. Un valor de Ma positivo implica que de la velocidad de la llama real (u_n) se reduce con el stretch, mientras que un valor negativo significa que la velocidad de combustión aumenta con el stretch.

Las **inestabilidades termodifusivas** se caracterizan mediante el **número de Lewis de la mezcla** (relación entre la difusividad térmica y la difusividad másica) **calculado para el reactivo limitante**. Estas inestabilidades suelen provocar llamas lisas y uniformes a dosados relativos más altos sin incluir la estequiometría, ya que en esta mezcla no existe reactivo limitante o en defecto.

Para las mezclas de hidrógeno–aire, el **número de Lewis del reactivo limitante** (o en defecto) es el del **hidrógeno**, el cual aumenta con el dosado desde un valor menor que la unidad hasta un valor mayor a la unidad, haciendo que la inestabilidad de la llama se produzca incluso para las mezclas ricas, lo cual significa que el número de Lewis efectivo de la mezcla está cerca del número de Lewis del hidrógeno. Por lo tanto, el número de Lewis efectivo de las mezclas de hidrógeno–aire cambia de ser menor que la unidad ($Le < 1$) para las mezclas pobres a mayor que la unidad ($Le > 1$) para las mezclas ricas, *Figura 6.10*, si bien éstas no se han experimentado en este trabajo.

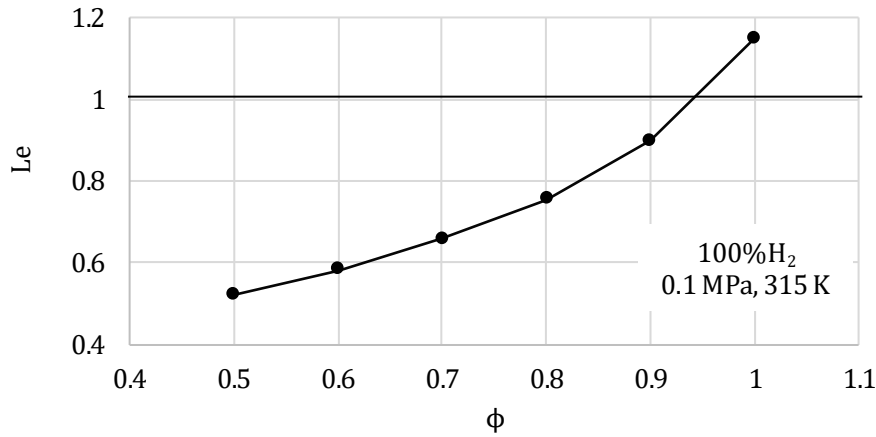


Figura 6.10: Número de Lewis para diferentes dosados de mezcla de H₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.

Para $Le > 1$, el efecto termo-difusivo favorece la estabilidad del frente de llama, mientras que para $Le < 1$ provoca agrietamiento en el frente de llama y la misma se vuelve más inestable. El efecto de la presión sobre Le es despreciable, como se ha dicho. Resumiendo, se puede decir que las inestabilidades fluidodinámicas se caracterizan por los valores negativos de Ma y por los valores elevados del número de Pe , mientras que las termodifusivas lo son por valores de Le menores que la unidad.

El efecto de las inestabilidades sobre la velocidad de combustión laminar es doble; uno es el aumento de la superficie del frente de la llama, con el consiguiente aumento de la velocidad efectiva de la llama; el otro, las deformaciones de la llama y la geometría del flujo, resultando en cambios de dirección y magnitud de la velocidad, debido a que los reactivos en la mezcla tienen diferente masa y difusividad térmica. La desviación de la geometría de la llama y el flujo con respecto a la llama unidimensional se puede cuantificar mediante la curvatura del frente de llama y la presencia de gradientes de velocidad de flujo en el frente de llama.

Las mezclas pobres de hidrógeno-aire son termo-difusivamente inestables a presiones del orden de 0.5 MPa, por lo que las inestabilidades están presentes generalmente en los frentes de llamas celulares ya al principio del desarrollo de la combustión.

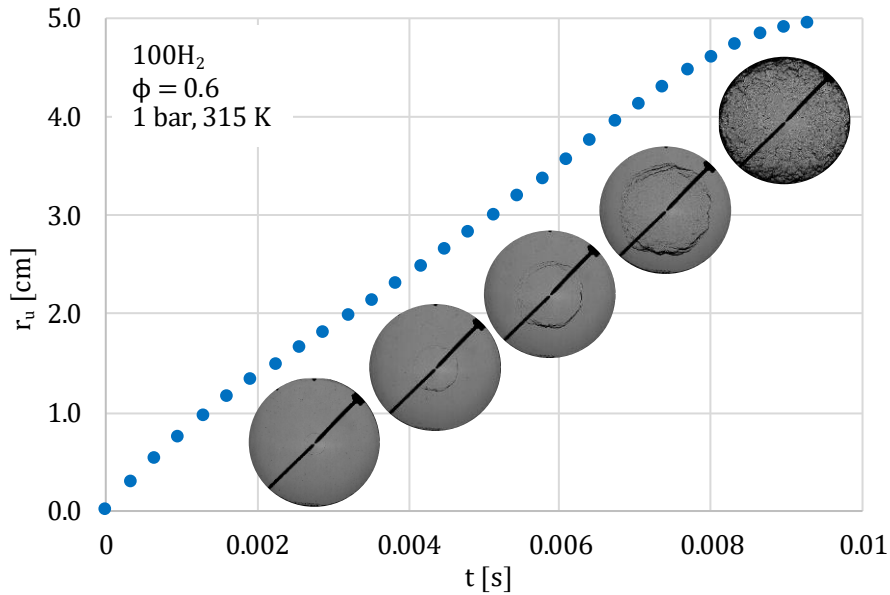


Figura 6.11: Evolución del radio de frente de llama e imágenes para una combustión de H₂ – aire con condiciones iniciales de 1 bar, 315 K y dosado de $\phi = 0.6$.

Un ejemplo de la **evolución temporal del radio del frente de la llama** de una mezcla pobre de hidrógeno en aire se muestra en la *Figura 6.11*, con las imágenes asociadas. La pendiente del gráfico del radio en función del tiempo es la velocidad de propagación de la llama S_n . Como en las primeras etapas de la combustión la presión y la temperatura de la mezcla sin quemar permanecen casi constantes, la variación en la velocidad de combustión con stretch u_n , es causada únicamente por la tasa de stretch. La velocidad de combustión laminar sin stretch u_l , podría obtenerse a partir de los datos experimentales extrapolando la velocidad con stretch para un radio infinito para el que la tasa de stretch es cero. Dada la relación $u_l - u_n = L_b * \alpha$, a partir de la misma se puede estimar la longitud de Markstein L_b [172].

6.3.2 Densidad de celularidad

Se ha desarrollado un algoritmo para procesar las imágenes de la evolución del frente, con dos propósitos. El primero es obtener el radio y el centro del frente de llama supuesto esférico. El segundo propósito es evaluar la falta de suavidad del frente de llama, lo que da el número de células por unidad de superficie, proporcionando **el índice de celularidad (número de células/cm²)**, así como las áreas de las células, contornos y centroides.

En la *Figura 6.12* se muestra un resultado, donde se representa el **índice de densidad de celularidad** frente al radio de la llama. Como se puede ver, en las condiciones particulares de ese experimento, la densidad de celularidad permanece pequeña (por debajo de 10 celdas/cm²) hasta que el radio es mayor de 3.0 cm; luego hay un rápido aumento hasta valores de aproximadamente 45 celdas/cm². Este comportamiento es característico de la combustión de hidrógeno en condiciones pobres.

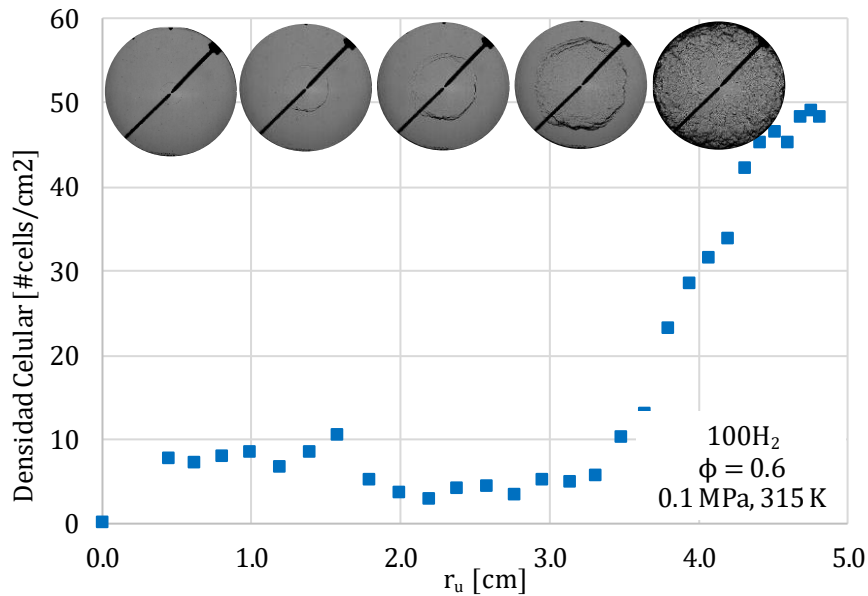


Figura 6.12: Evolución de la densidad celular en función del radio de llama de una combustión de H₂ - aire con condiciones iniciales de 1 bar, 315 K y dosado de $\phi = 0.6$.

6.4 Resultados de la dependencia de la celularidad y la densidad celular de las condiciones operativas

La técnica óptica de imágenes Schlieren se ha utilizado para estudiar la formación de celularidad durante el proceso de combustión en función del dosado, la presión y la temperatura iniciales, para ver el efecto de cada parámetro en el desarrollo de la estructura celular en las combustiones premezcladas de hidrógeno.

6.4.1 Efecto del dosado relativo

Morfología de la llama

El efecto del dosado sobre el desarrollo de la combustión y la aparición de celularidad se ilustra en la *Figura 6.13*. Esta figura muestra las imágenes Schlieren de la

propagación de la llama de mezclas de hidrogenado-aire para diferentes dosados de 0.5 a 1.0, para diferentes radios del frente de llama.

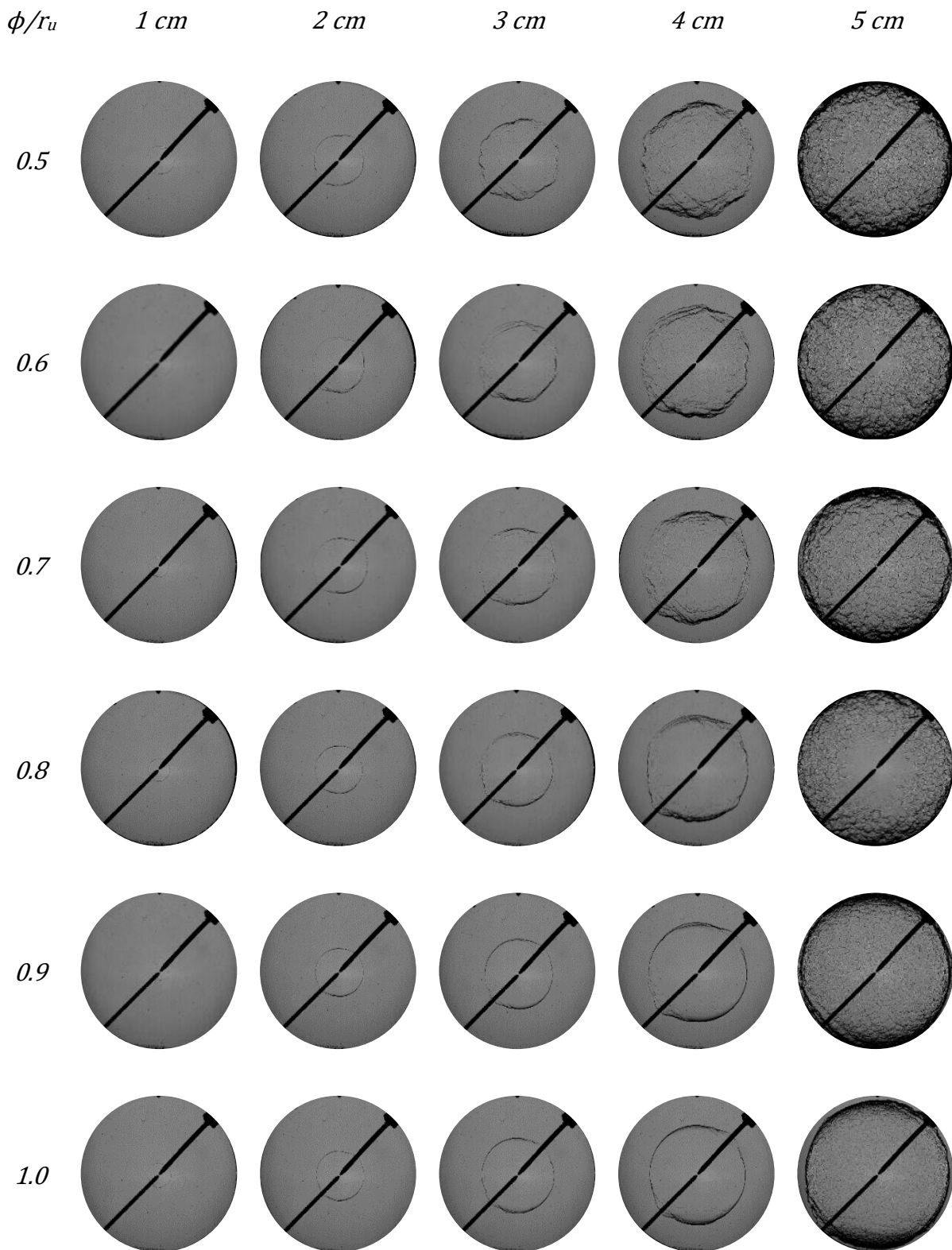


Figura 6.13: Imagen Schlieren de propagación de la llama de H₂ - aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosados de $\phi=0.5 - 1.0$.

En general, de acuerdo con el comportamiento de la *Figura 6.11*, para cada valor de dosado, el frente de llama inicialmente liso se vuelve celular a medida que aumenta el radio. Al comparar las imágenes con diferentes dosados, a medida que la mezcla se vuelve más pobre, la estructura celular del frente de llama se desarrolla en un radio más pequeño. Para una mezcla estequiométrica, la estructura celular aparece solo para el radio más grande presentado (5 cm). Además, para este último radio, el número de celdas con un dosado de 0.5 es mucho mayor que en mezcla estequiométrica, es decir, la celularidad aparece más tarde, pero es más intensa. Esta situación es contraria de la mayor parte de los hidrocarburos, incluyendo el metano.

Densidad de celularidad

Para investigar con más detalle la estructura celular generada durante la combustión, en la *Figura 6.14*, el **índice de densidad de celularidad** (celdas/cm²) se representa como una función del radio de llama durante el desarrollo de la combustión de mezclas de hidrógeno-aire al variar el dosado. En esta figura, se puede ver un aumento en la celularidad a medida que el dosado se reduce de la estequiometría a las condiciones pobres. El inicio de la estructura celular de la llama comienza a desarrollarse antes a medida que se reduce el dosado. Este efecto puede verse fácilmente si se considera un valor de referencia de, por ejemplo, 10 celdas/ cm².

Este comportamiento en mezclas pobres de hidrógeno-aire, en las que la estructura celular aumenta para las proporciones de dosado pobre, tiene su origen en la inestabilidad termo-difusiva. Para mezclas pobres, la difusividad térmica de la mezcla (α) es muy diferente a la difusividad másica del reactivo en defecto (D_{def}), el hidrógeno y el número de Lewis ($Le = \alpha/D_{def}$) es menor que unidad a excepción de la estequiometría. Esto significa que la velocidad de combustión aumenta con la tasa de stretch y esto genera una inestabilidad termo-difusiva, mientras que para el dosado estequiométrico, las inestabilidades son hidrodinámicas ($Le > 1$), lo que provoca la aparición de celularidad en mezclas pobres de hidrógeno antes que en mezclas que tienen un $Le > 1$, y el comportamiento contrario.

Aung et al. [173] y Berger et al. [174] describe en profundidad este proceso. El mismo comportamiento fue observado por Hu et al. [142], quien también detectó que no hay estructura celular en el frente de la llama cuando la mezcla se enriquece, lo que indica que la llama tiende a estabilizarse con el incremento del dosado.

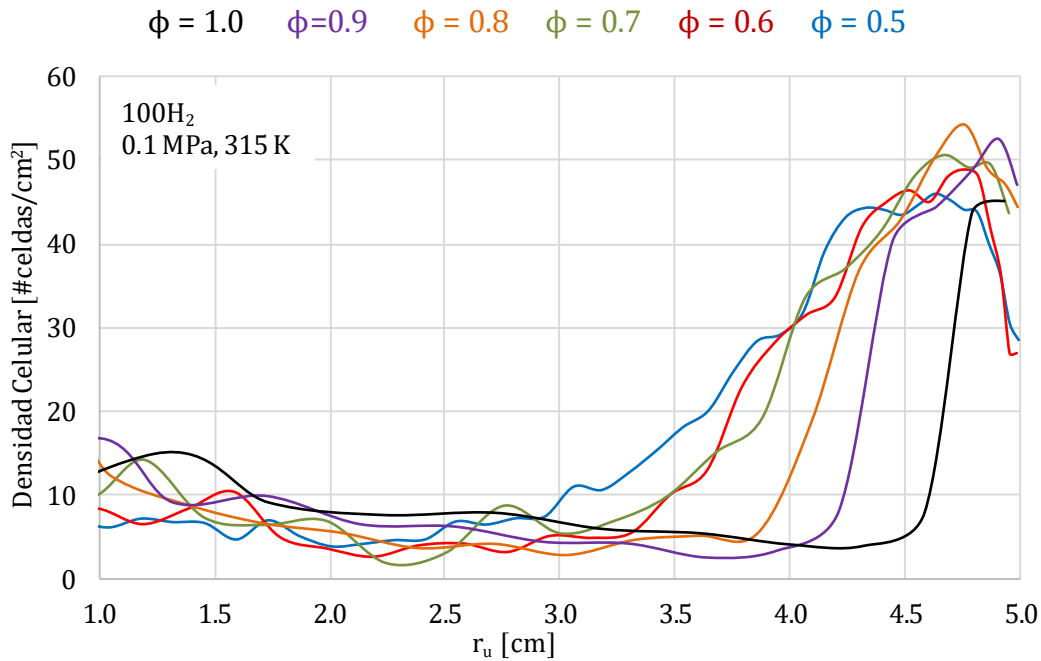


Figura 6.14: Densidad celular frente al radio de llama para una combustión de H₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosados de $\phi = 0.5 - 1.0$.

6.4.2 Efecto de la presión inicial

Morfología de la llama

Para investigar el efecto de la presión inicial en la aparición de la estructura celular, en la *Figura 6.15* las imágenes Schlieren obtenidas para las combustiones de hidrógeno – aire con una presión inicial variable de 0.1 a 0.5 MPa, a una temperatura inicial de 315 K y un dosado de 0.5 de mezcla hidrógeno – aire, están representados. Como puede observarse, el desarrollo de las inestabilidades y la posterior aparición de la llama celular se produce en un radio menor a medida que aumenta la presión inicial.

Al comparar las imágenes Schlieren de 0.1 MPa con 0.5 MPa a 1cm de radio de llama, es posible ver que para 0.1 MPa la estructura es laminar y se vuelve más celular con el incremento de la presión. Se observa el mismo comportamiento para otros radios. El aumento de la estructura celular se acentúa más cuando la presión inicial crece desde 0.1 hasta 0.2 MPa. Sin embargo, el efecto de los crecimientos adicionales de la presión inicial por encima de 0.3 MPa es menos relevante.

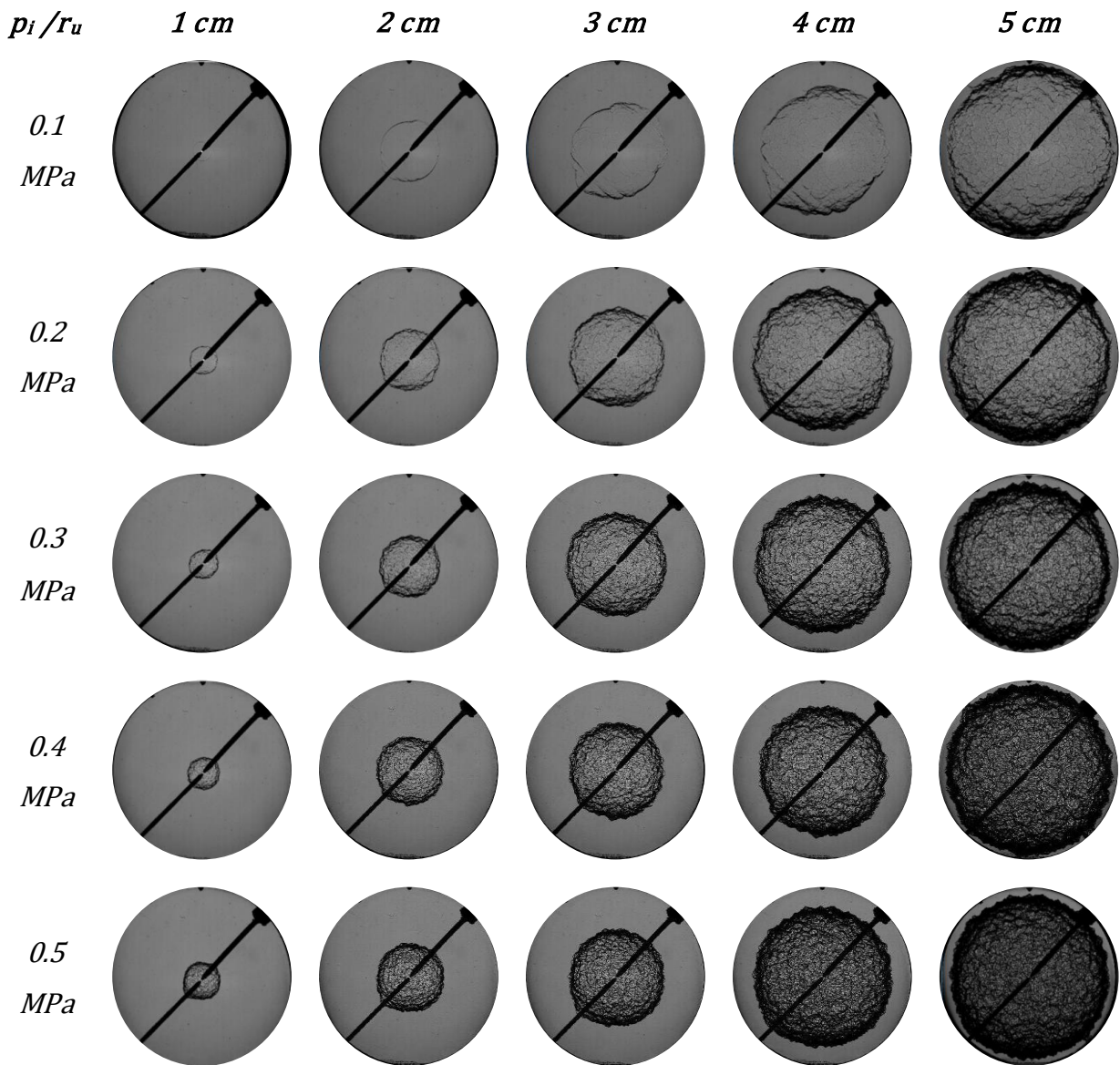


Figura 6.15: Imagen Schlieren del frente de llama para una combustión de H_2 – aire a diferentes presiones iniciales (0.1 – 0.5 MPa), 315 K y dosado de $\phi=0.5$.

Densidad de celularidad

Este comportamiento cualitativo derivado de la inspección directa de imágenes se puede apreciar más cuantitativamente en la *Figura 6.16*, en la que se representa la evolución de la densidad de celularidad frente al radio, con la variación de la presión inicial, para las combustiones de hidrógeno–aire a 0.5 de dosado y 313 K de temperatura inicial. La tendencia es aún más clara, ya que la presión inicial potencia la aparición de celularidad en la llama. Se observa un fuerte incremento cuando la presión inicial aumenta de 0.1 a 0.2 MPa, pero luego, para presiones iniciales más altas, el efecto se ralentiza.

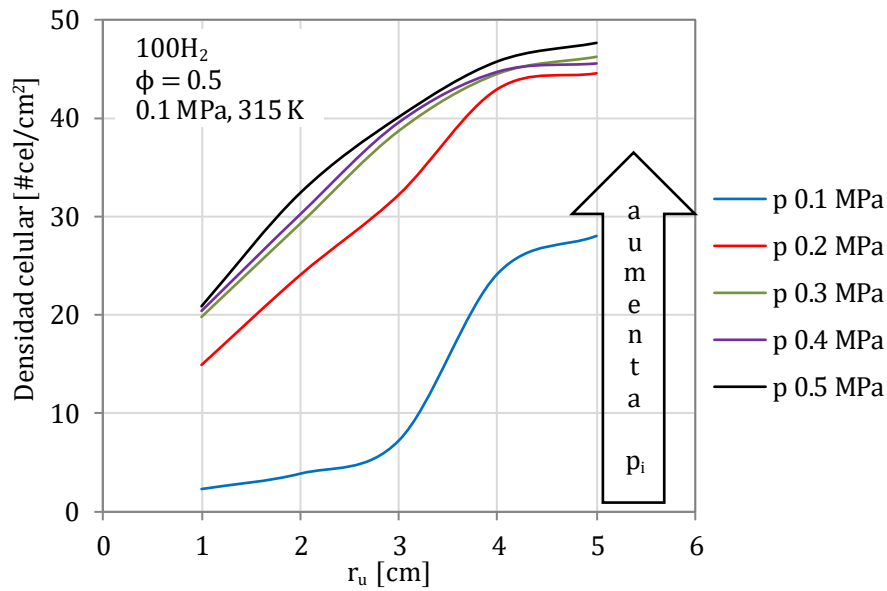


Figura 6.16: Densidad celular frente al radio de llama de H₂ – aire a diferentes presiones iniciales (0.1 – 0.5 MPa), 315 K y dosado de $\phi = 0.5$.

6.4.3 Efecto de la temperatura inicial

Morfología de la llama

En la *Figura 6.17* se representan las imágenes de Schlieren obtenidas para las combustiones de hidrógeno–aire con un dosado de 0.5, la presión inicial de 0.1, 0.2 y 0.3 MPa, y la temperatura inicial de 323 y 373 K. Al comparar las imágenes de los dos niveles de temperatura inicial para la misma presión inicial, se puede ver que el efecto de la temperatura inicial es incrementar la aparición de inestabilidades conduciendo a una mayor celularidad en el frente de llama.

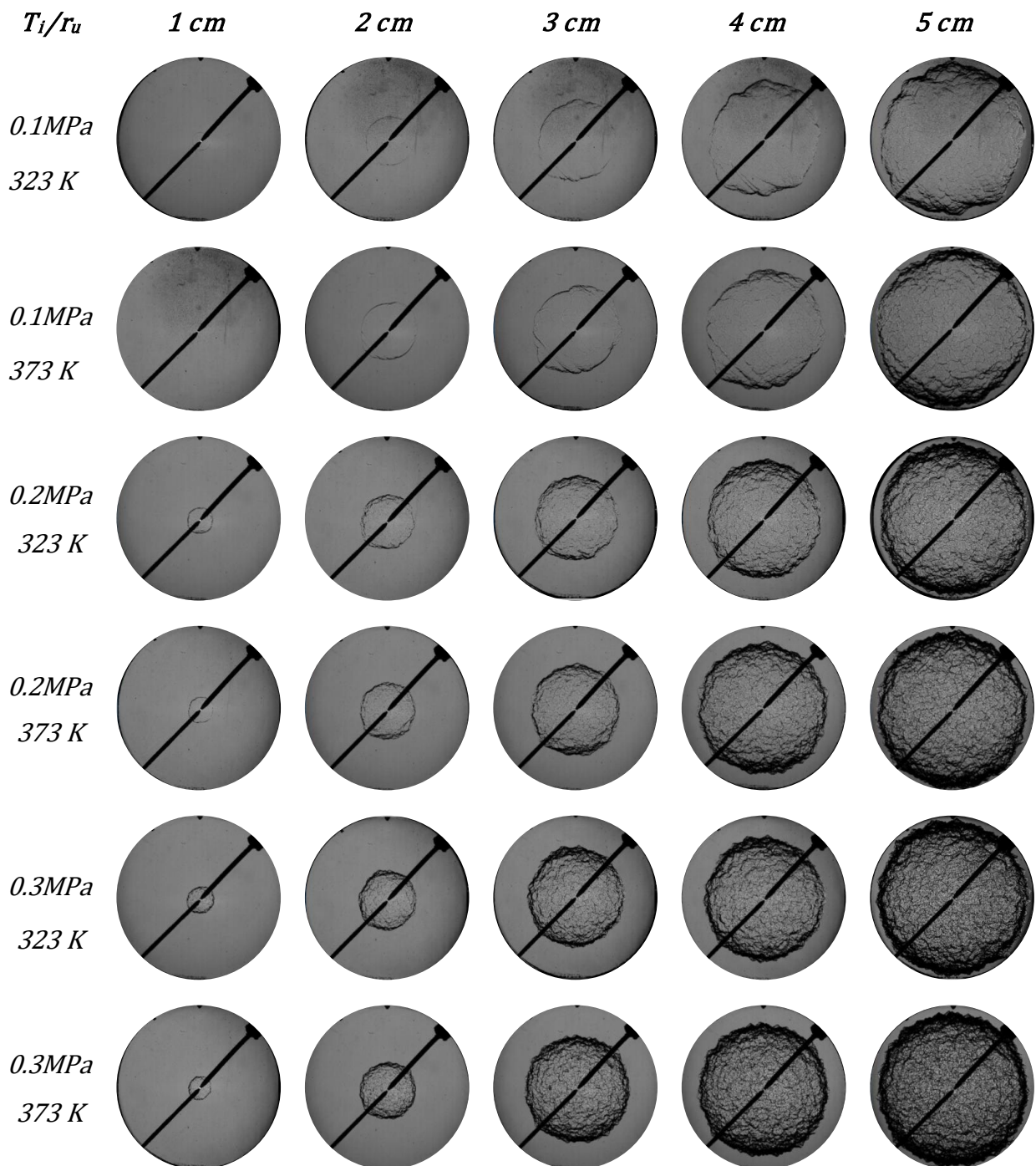


Figura 6.17: Imagen Schlieren para llamas a diferentes radios, variando presión y temperatura iniciales de H_2 - aire a dosado de $\phi=0.5$.

La tendencia cualitativa contenida en las imágenes de Schlieren se puede confirmar cuantitativamente en los gráficos de la *Figura 6.18*. Para los experimentos con dos temperaturas iniciales por cada presión inicial, se puede ver un fuerte aumento en la densidad de celularidad entre las más bajas (323 K) y la temperatura más alta (373 K).

Para la presión inicial de 0.1 MPa, aparece un valor de referencia de la densidad de celularidad de 10 células/ cm² en un radio de llama de 1cm para 373 K, en comparación con un radio de 3 cm para 323 K). Como se mencionó anteriormente, la superficie frontal de la llama aumenta en comparación con una superficie frontal esférica lisa, lo que conduce a un aumento aparente de la velocidad de combustión.

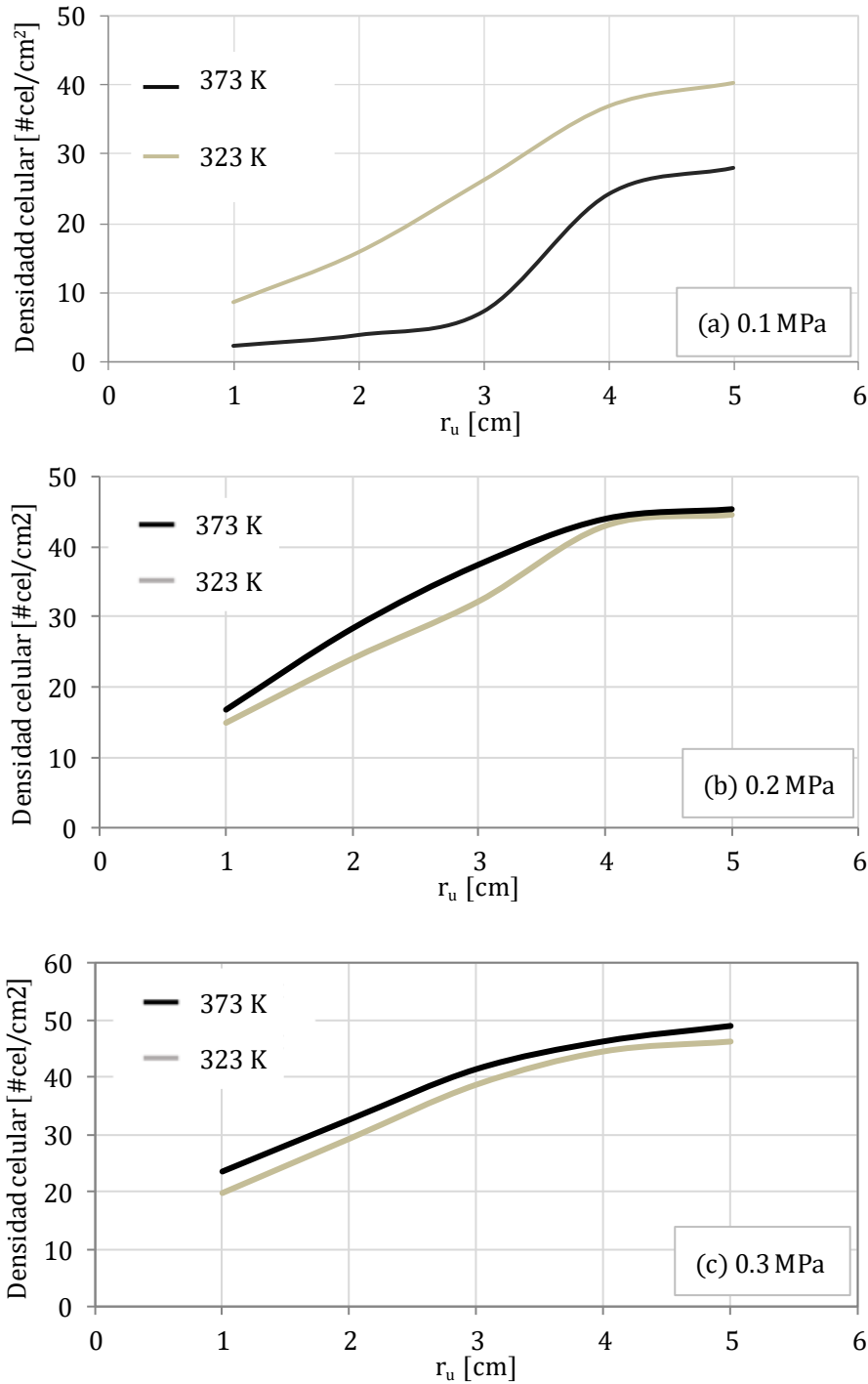


Figura 6.18: Densidad de celularidad para una mezcla de H₂ – aire a dosado de $\phi = 0.5$, para tres valores de presión inicial y dos valores de temperatura inicial.

6.5 Resultados de la velocidad de combustión laminar.

A partir de una adecuada combinación de los resultados de u_l^p para diferentes experimentos, es posible escribir una correlación analítica de u_l^p en términos de p y T_{sq} , con los coeficientes y exponentes dependiendo del dosado como se realiza en Reyes et al. [45].

Para fines de comparación con los resultados de otros autores, los valores obtenidos para 0.1 MPa y 300 K de la **velocidad de combustión libre de stretch u_l^p (método de las imágenes, círculo y línea negra)** se han representado, junto con los valores de la **velocidad de combustión u_l^p (método de las presiones, rombo y línea roja)** en la *Figura 6.19*, como una función del dosado que va de 0.5 hasta la estequiometría. En esta figura se puede observar una buena concordancia de los valores obtenidos con resultados publicados en la literatura.

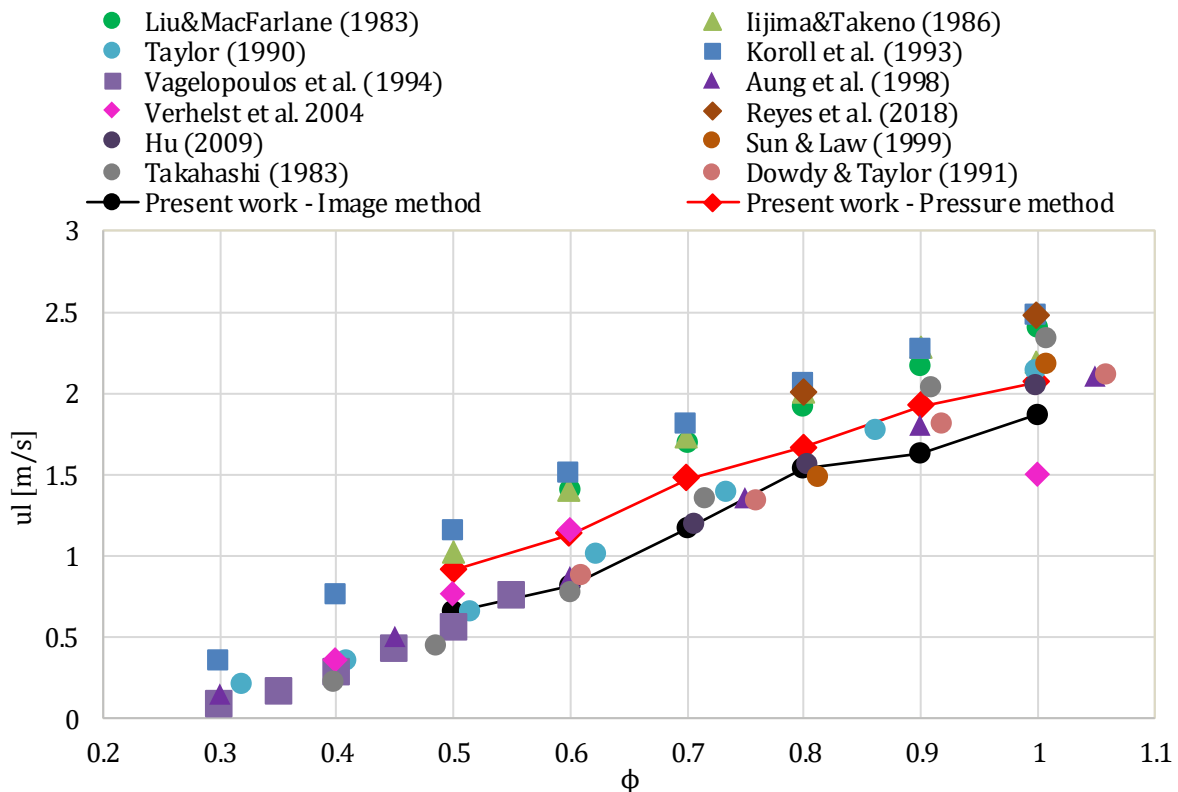


Figura 6.19: Comparación de la velocidad de combustión con la obtenida por otros autores para combustiones de H_2 – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y una variación de dosado de $\phi=0.5 - 1.0$.

De la comparación de las velocidades de combustión derivadas de las medidas de la velocidad de propagación de llama (con estudio termodinámico u óptico) y los resultados calculados numéricamente a partir de los mecanismos cinéticos, se puede ver que las velocidades de combustión determinadas son en general superiores a los valores dados por los modelos cinéticos. Esto se puede apreciar en la *Figura 6.19*, ya que los resultados de los métodos experimentales considerados (Liu & MacFarlane [175], Koroll et al. [34], Ijima y Takeno [176], Taylor [177], presentes autores) tienen tendencias similares y valores superiores a los resultados de los métodos cinéticos (Aung et al. [173], Vagelopoulos et al. [178], Verhelst et al. [85]).

Las velocidades de combustión obtenidas en el presente trabajo con el método de formación de imágenes u_1^0 también se representan (círculo + línea, negra) en la *Figura 6.19*, para todos los dosados ensayados. Los resultados obtenidos en este trabajo son comparables a los obtenidos por Koroll et al. [34] en una bomba de combustión de volumen constante a través de imágenes de llama. En el trabajo de Liu & MacFarlane [175] se midieron las velocidades de combustión de las mezclas de hidrógeno-aire e hidrógeno-aire-vapor en función de la temperatura y composición de los gases no quemados mediante anemometría láser Doppler y fotografía de Schlieren en un quemador de boquilla de velocidad constante. Los valores obtenidos son similares a los obtenidos en este trabajo con método de imagen. Los resultados obtenidos por Taylor [177] con imágenes de Schlieren son ligeramente superiores.

Para tratar de clarificar el efecto de la celularidad sobre la velocidad de combustión u_1 , la *Figura 6.20* presenta un gráfico tentativo de la **velocidad de combustión aparente** versus el índice de densidad de celularidad para cada valor de dosado (con las mismas condiciones iniciales). En esta figura, primero es posible ver como una tendencia general tal que la velocidad de combustión escala bien con el dosado (de 0.5 a 1.0). Los puntos a lo largo de cada línea están igualmente espaciados en el tiempo, debido a la diferente velocidad de propagación de la llama S_n . Para cada dosado, la velocidad de combustión aparente aumenta a medida que aumenta el índice de densidad de celularidad (en ambos casos, a medida que aumentan los radios de llama). También se puede estimar que cuando el índice de densidad de celularidad supera un cierto valor entre 5 y 10 celdas/ cm² la velocidad de combustión aparente aumenta significativamente, como resultado de la transición de regímenes laminar a celular. Esto es más evidente para las relaciones de

equivalencia de 0.8, 0.9 y 1.0. Para condiciones más pobres, debe recordarse que la llama es celular prácticamente desde el inicio de la combustión, y luego el aumento relativo de la velocidad de combustión (menor) aparece ya desde el inicio.

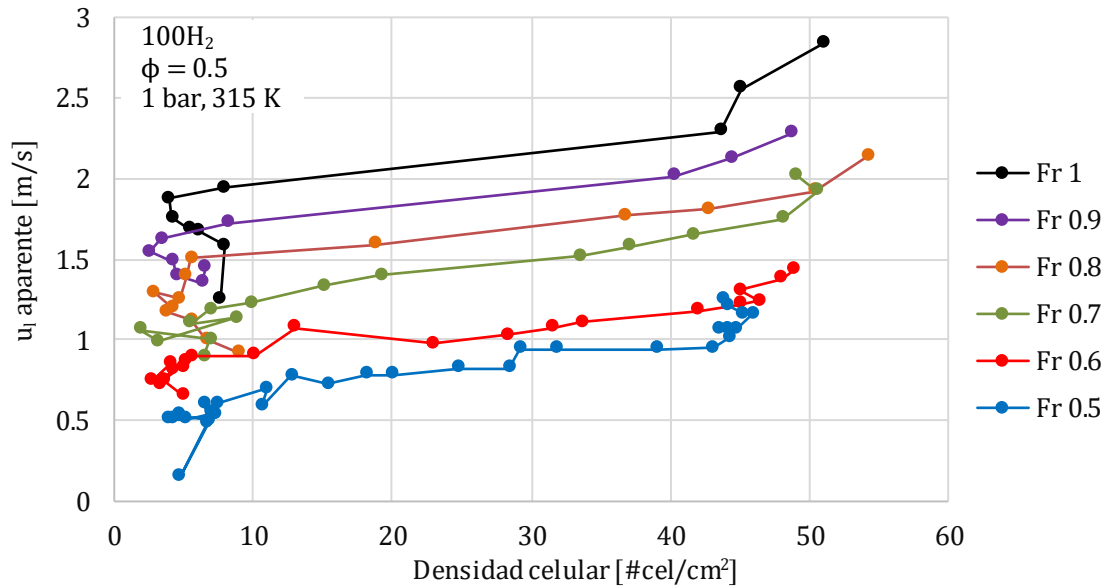


Figura 6.20: Velocidad de combustión aparente frente a la densidad celular para una mezcla de H₂ - aire a 1 bar, 315 K con una variación de dosado de $\phi = 0.5 - 1.0$.

6.6 Conclusiones sobre los resultados de hidrógeno puro

Como conclusiones de este capítulo, se resalta que se ha estudiado la velocidad de combustión de mezclas hidrógeno-aire, considerando un estudio paramétrico de modificación de las condiciones iniciales: dosado, presión y temperatura. Los resultados de los experimentos se analizan utilizando dos técnicas: imágenes Schlieren de la evolución del frente de llama, y análisis de la presión registrada durante el proceso de combustión, proporcionando ambos métodos valores consistentes.

El estudio de las inestabilidades producidas durante el crecimiento del frente de llama se ha abordado mediante una metodología desarrollada para caracterizar la estructura celular de las llamas hidrógeno-aire, contabilizando un índice de densidad de celularidad (celdas/cm²), bajo diferentes condiciones experimentales.

Los resultados del estudio paramétrico de la estructura celular de las llamas de hidrógeno al variar el dosado, la presión y temperatura iniciales muestran que las llamas

de **hidrógeno–aire presentan un carácter más celular**, es decir, la densidad de celularidad es mayor cuando: la **mezcla es más pobre** (reducción del dosado), **aumenta la presión y aumenta la temperatura**. En los tres casos, el inicio de la celularidad aparece en radios más pequeños. Los resultados se comparan bien con los encontrados en la bibliografía y con algunos realizados por otros investigadores del equipo, los cuales han sido obtenidos en otra cámara de combustión con geometría esférica, obteniéndose resultados similares [165].

La mezcla estequiométrica de hidrógeno–aire tiene la particularidad que presenta una llama celular con inestabilidad hidrodinámica, pero no termo-difusiva puesto que el número de Lewis es mayor que la unidad, lo que da una indicación de que la llama para dosados superiores al estequiométrico puede tender a ser estable.

CAPÍTULO 7

Resultados experimentales para mezclas de H₂ - CH₄

7.1	Introducción	126
7.2	Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones	127
7.2.1	Dependencia del contenido de hidrógeno en la mezcla	128
7.2.2	Influencia del dosado relativo de la mezcla	133
7.3	Velocidades de combustión obtenidas por el método óptico de imágenes Schlieren	137
7.3.1	Dependencia del contenido de hidrógeno en la mezcla	138
7.3.2	Influencia del dosado relativo	148
7.4	Comparación con resultados de velocidad de otros autores	167
7.5	Estudio de las inestabilidades para mezclas de hidrógeno-metano/aire	171
7.5.1	En función del contenido de hidrógeno en la mezcla	171
7.5.2	En función del dosado relativo	176
7.6	Conclusiones	180

7 RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE H₂ – CH₄ EN AIRE

7.1 Introducción

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos para los experimentos realizados en la bomba de combustión cilíndrica para mezclas de hidrógeno–metano/aire, *Tabla 7.1*, considerando en los dos apartados siguientes cada uno de los dos métodos utilizados para obtener la velocidad de combustión: método de análisis de las presiones (modelo 2Z) y método de análisis del avance de radio (imágenes del frente de llama por técnica Schlieren), dentro de los cuales se verá y analizará el efecto que se tiene al variar el dosado relativo de la mezcla y la cantidad de hidrógeno en la misma. En el apartado 7.4 se establece una comparación de los resultados obtenidos para la velocidad de las mezclas hidrógeno-metano con los de otros autores. Adicionalmente, en el apartado 7.5 se presentan los resultados correspondientes al estudio de la generación y crecimiento de inestabilidades en la superficie del frente de llama.

Tabla 7.1: Condiciones de los experimentos realizados para las mezclas de CH₄-H₂/aire.

%CH ₄	%H ₂	ϕ	P_INICIAL [MPa]	T_INICIAL [K]
100	0	0.6	0.1	315
		0.7		
		0.8		
		0.9		
		1.0		
80	20	0.5	0.1	315
		0.6		
		0.7		
		0.8		
		0.9		
50	50	0.5	0.1	315
		0.6		
		0.7		
		0.8		
		0.9		
20	80	0.5	0.1	315
		0.6		
		0.7		
		0.8		
		0.9		
0	100	0.5	0.1	315
		0.6		
		0.7		
		0.8		
		0.9		
		1.0		

Una de las ventajas del hidrógeno es la capacidad de reducir el dosado necesario en la mezcla y aumentar la velocidad de combustión. Es por lo que, al utilizar este combustible, se trata de trabajar con dosados inferiores al estequiométrico (mezcla pobre). Esto permite un ahorro de combustible lo suficientemente interesante como para ser aplicado en motores de automoción, con una reducción de emisiones contaminantes. Por el contrario, con el metano solo, aunque es posible trabajar con mezcla pobre en un motor de combustión, el dosado no puede reducirse por debajo de un valor en torno a 0.7, para evitar que la dispersión cíclica del proceso de combustión conduzca a variaciones no admisibles de la presión media indicada, con problemas derivados de incluso apagado de llama o al menos formación de contaminantes inquemados. Es importante conocer como varían los distintos parámetros con el dosado, para determinar cuáles son las condiciones óptimas de funcionamiento del motor y poder establecer un dosado lo suficientemente pequeño para garantizar una buena combustión y poder hablar en términos de ahorro de combustible.

El metano tiene una baja velocidad de combustión, lo que podría limitar la operación bajo dosados pobres en los motores debido al aumento de la variación ciclo a ciclo y la emisión de hidrocarburos no quemados [179]. El funcionamiento del motor con un dosado estequiométrico y con la utilización de catalizadores de tres vías y/o la recirculación de los gases de escape puede dar como resultado una reducción de las emisiones de escape y una mejora de la eficiencia térmica [180]. Sin embargo, la baja velocidad de combustión del metano también limita la cantidad de EGR que se puede utilizar sin afectar la estabilidad del funcionamiento del motor.

El hidrógeno, por otro lado, tiene una mayor velocidad de combustión que es aproximadamente cinco veces mayor que la del metano en condiciones estequiométricas y un límite de inflamabilidad más bajo y a mayores más bajo que los de los combustibles fósiles convencionales. Por lo tanto, la adición de hidrógeno es uno de los medios prácticos para aumentar la velocidad de combustión del combustible en los motores SI de gas natural. La gran velocidad de combustión conduce a ciclos robustos con menores tendencias de variaciones de ciclo a ciclo y permite el funcionamiento del motor en condiciones muy pobres o con una gran cantidad de recirculación de gases de escape, sin perjudicar la estabilidad del funcionamiento del motor.

7.2 Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones

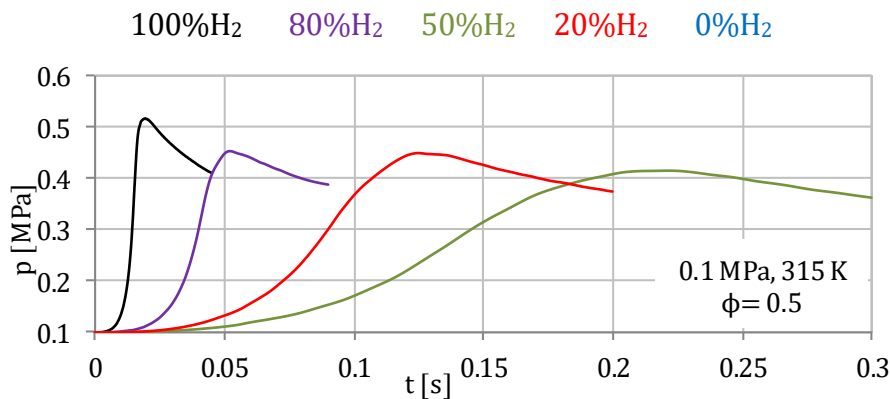
La presentación de los resultados comienza describiendo brevemente los resultados obtenidos por medio del método de análisis de las presiones. Por brevedad, sólo se indican los aspectos más relevantes, puesto que este método y sus resultados ya han sido estudiados y expuestos a detalle en otras tesis realizadas en el departamento: Reyes [104], Lafuente [48] e Iglesias [3]. Además, el enfoque de esta Tesis Doctoral se orienta más al método de análisis de las imágenes Schlieren.

Los resultados corresponden a mezclas de hidrógeno-metano/aire, variando desde una mezcla de 0% hasta un 100% de hidrógeno, con condiciones iniciales de $p_i = 0.1 \text{ MPa}$ y $T_i = 315 \text{ K}$, para diferentes dosados relativos $\phi = 0.5 - 1.0$, realizados en la bomba de combustión cilíndrica detallada anteriormente.

Para permitir la realización del análisis de los resultados desde dos puntos de vista, primero se presentan los resultados de los experimentos con las mezclas hidrógeno-metano/aire para distintos dosados, usando como parámetro la proporción de hidrógeno en cada mezcla, y luego para distintas proporciones de hidrógeno, considerando el dosado como parámetro.

7.2.1 Dependencia del contenido de hidrógeno en la mezcla

En la **Figura 7.2.1** se presentan las curvas de **evolución de la presión** frente al tiempo, para los experimentos de mezclas con **proporciones crecientes de contenido de hidrógeno**, para los **seis dosados relativos**, y todas ellas con **condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K**.



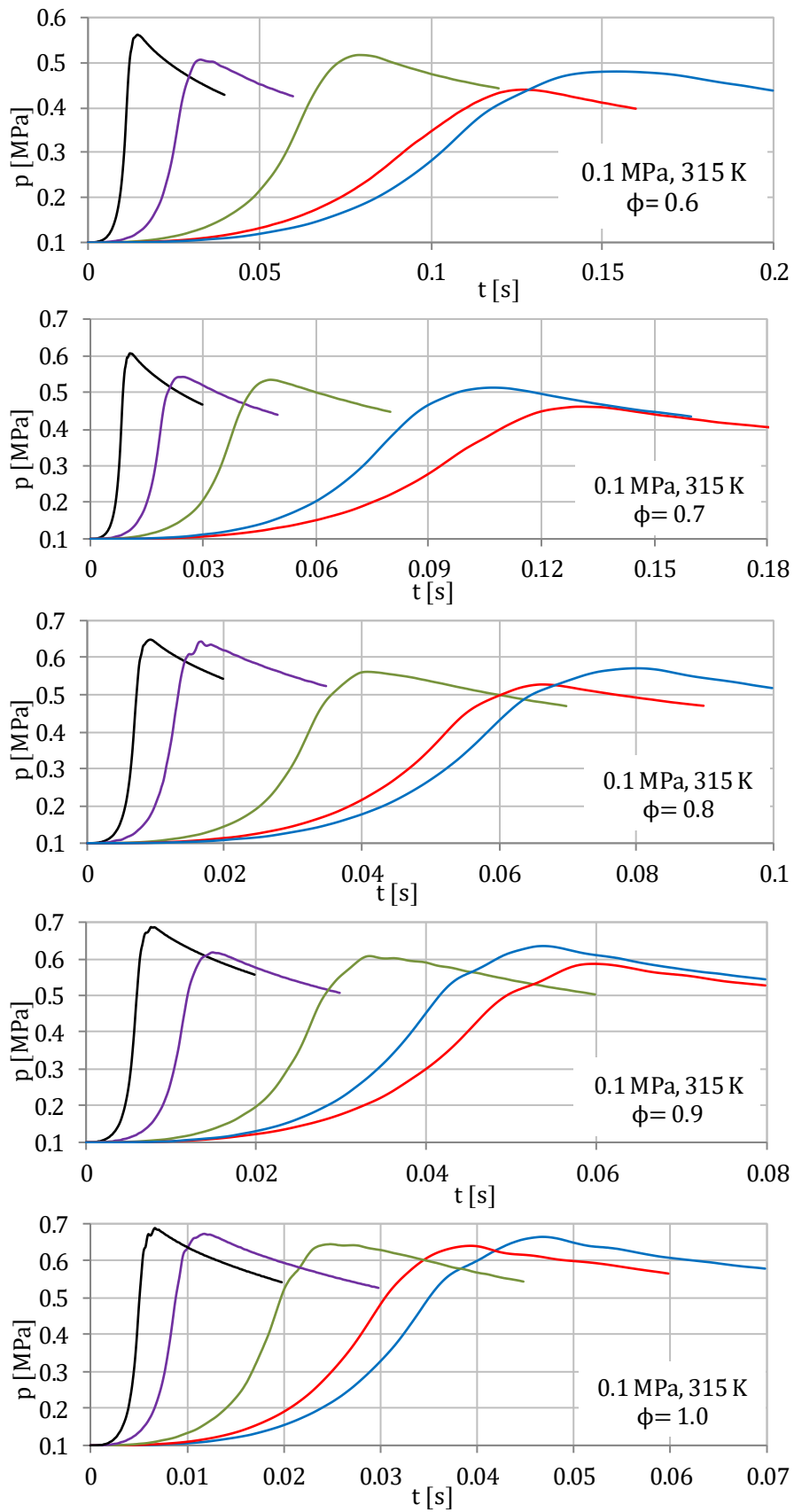


Figura 7.1: Evolución temporal de la presión instantánea, para mezclas con diferente contenido de H₂ y dosados $\phi = 0.5$ a 1.0, con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K (para metano puro no se produce el encendido a dosado 0,5).

En las distintas partes de la figura, con dosado creciente desde un valor muy pobre de 0,5 (arriba) hasta estequiométrico (abajo), cada parte tiene una escala temporal diferente, ya que la velocidad de combustión varía ampliamente en ese rango de dosado, acortándose el proceso de combustión a medida que la mezcla es más rica y el pico de presión máxima se alcanza en un menor tiempo.

Es importante indicar que para el dosado estequiométrico la presión máxima que se alcanza es prácticamente la misma independientemente de la proporción de hidrógeno en cada mezcla, lo que está en concordancia con el hecho de que la cantidad de energía que se libera por unidad de volumen en mezclas hidrógeno-metano es prácticamente independiente de la proporción relativa de los dos componentes. Esto se puede ver recordando la expresión [50] del aumento de presión del capítulo 6 que se reproduce a continuación:

$$\frac{p_f - p_i}{p_i} = \frac{\gamma_q - 1}{T_i \cdot R_{sq}} \frac{F}{1+F} \Delta U_c \quad [51]$$

Esto es así, porque al pasar p_i del denominador del primer miembro al numerador del segundo, quedaría:

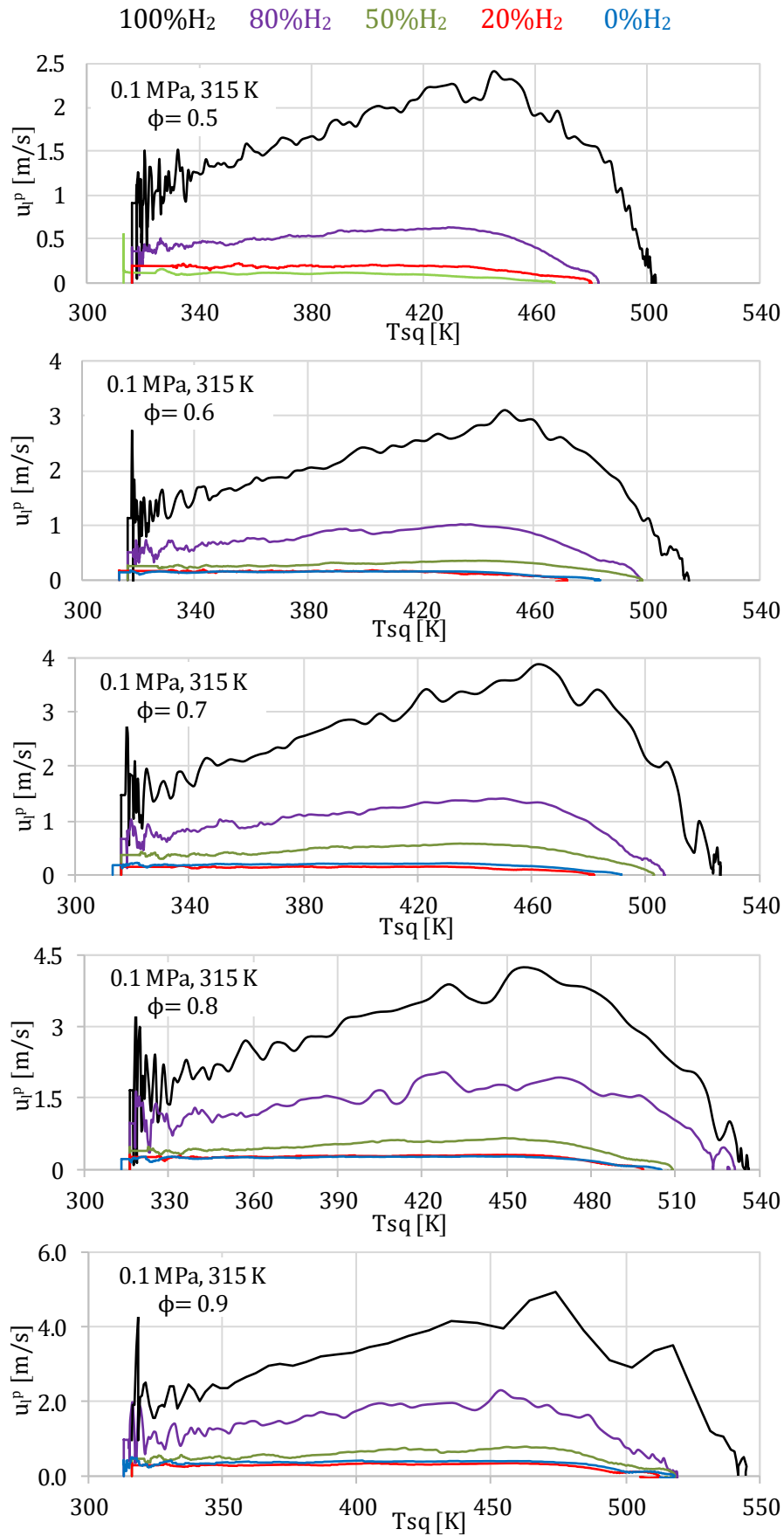
$$p_f - p_i = \frac{(\gamma_q - 1)p_i}{T_i \cdot R_{sq}} \frac{F}{1+F} \Delta U_c = (\gamma_q - 1) \frac{F}{1+F} \rho_i \Delta U_c \approx cte. \quad [52]$$

En los resultados experimentales, esta constancia de la presión independientemente de la proporción de hidrógeno se cumple cada vez menos a medida que el dosado es más pobre, lo que se atribuye a que la mayor duración del proceso de combustión invalida la hipótesis de proceso adiabático.

Velocidades de combustión

De las curvas de presión presentadas en los gráficos anteriores, al ser analizadas por medio del modelo de diagnóstico de dos zonas, se obtienen las **velocidades de combustión u^p** frente al tiempo representadas en la *Figura 7.2*, para los dosados considerados. En las dos partes de la figura se pueden ver las mismas tendencias ya apreciadas al considerar la evolución de la presión, es decir, el efecto de disminución de la velocidad de combustión al reducirse el dosado (nótese la diferente escala de los ejes de ordenadas), por un lado, y por otro el efecto de aumento de la velocidad de combustión sobre la del metano que supone incrementar la proporción de hidrógeno.

RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE H₂ - CH₄



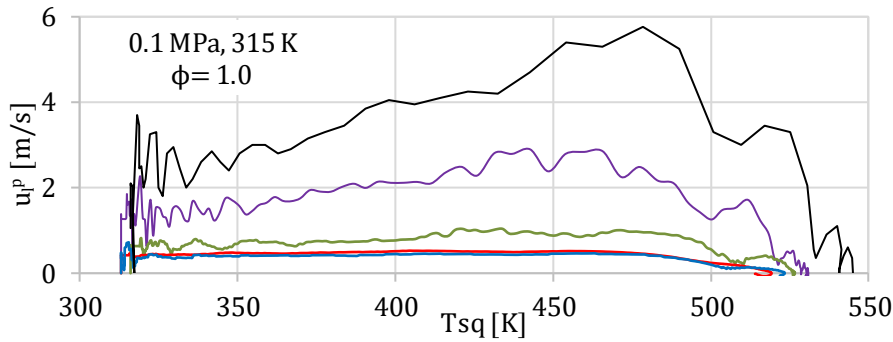


Figura 7.2: Velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla sin quemar, para dosados $\phi = 0.5$ a 1.0 , con diferentes contenidos de H_2 , y condiciones iniciales 0.1 MPa y 315 K.

Un análisis más detallado del efecto cuantitativo de incrementar la proporción de hidrógeno permite afirmar, en concordancia con lo identificado por otros autores, que hay un aumento importante de la velocidad de combustión desde el 50% hasta el 80%, y aún más importante al pasar al 100% de hidrógeno. En el lado contrario, el aumento de la velocidad de combustión de la mezcla al pasar del 0% (metano puro) al 20% de hidrógeno es muy pequeño, siendo necesario aumentar hasta el 50% para que el aumento sea claramente apreciable.

Este comportamiento en relación con los contenidos crecientes de hidrógeno en la mezcla con metano también puede identificarse en las curvas de presión representadas en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**, donde se puede observar las tres zonas antes descritas: 0–20% H_2 (curvas azul y roja) con metano dominante, 50% H_2 (curva verde) zona de transición, 80 – 100% (curvas morada y negra) con hidrógeno dominante.

Para ver mejor los valores cuantitativos sobre la velocidad de combustión, en la *Figura 7.3* se muestra la velocidad de combustión laminar en condiciones de referencia (0.1 MPa y 315 K) para cada porcentaje de hidrógeno en la mezcla, usando como desde una mezcla pobre hasta la estequiometría.

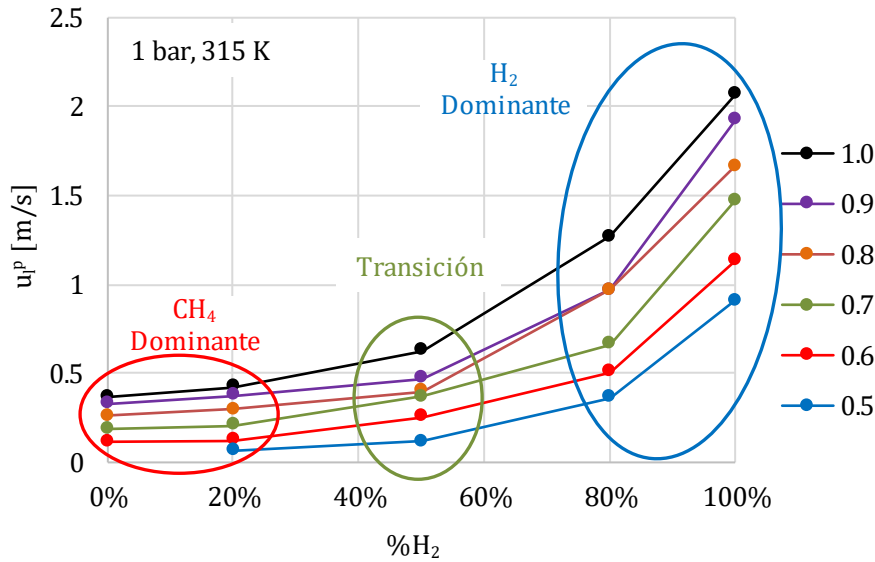


Figura 7.3: Dependencia de la velocidad de combustión laminar en función de la proporción de hidrógeno en las mezclas con metano.

En esta figura se puede ver claramente que las velocidades más altas se alcanzan con el hidrógeno al 100%. Además se identifican las tres zonas señaladas: proporciones 0–20% H_2 en las que el comportamiento se separa poco del del **metano (círculo rojo)**, teniendo la velocidad una ligera variación lineal con el contenido de H_2 ; proporciones en torno al 50% H_2 , correspondientes a **una zona de transición (círculo verde)**, en la que la velocidad aumenta con mayor pendiente al crecer el contenido de hidrógeno; y finalmente proporciones de 80–100% H_2 , en las que se tiene un **régimen dominado por el hidrógeno (círculo azul)**, en el que la pendiente de la dependencia respecto al contenido de hidrógeno aumenta fuertemente, hasta alcanzar la elevada velocidad de combustión del hidrógeno (del orden de 5 a 9 veces la del metano en las mismas condiciones).

7.2.2 Dependencia del dosado relativo de la mezcla

En la *Figura 7.4* se presenta primeramente la evolución de la presión frente al tiempo para los diferentes dosados ensayados, desde 0.5 hasta 1.0, para cada una de las proporciones de hidrógeno consideradas (0, 20, 50, 80 y 100%).

Se puede observar en los gráficos para cada proporción de hidrógeno que, a medida que aumenta el dosado, desde 0.5 hasta 1.0, se acorta el tiempo de combustión y

aumenta el valor máximo de presión alcanzado en la combustión. Estas dos tendencias se pueden apreciar de forma uniforme para los dos combustibles puros (metano e hidrógeno), para los cuales es de aplicación directa la expresión [50] por separado. En el caso de las mezclas intermedias, la tendencia general se cumple, si bien hay algunas variaciones sobre la misma.

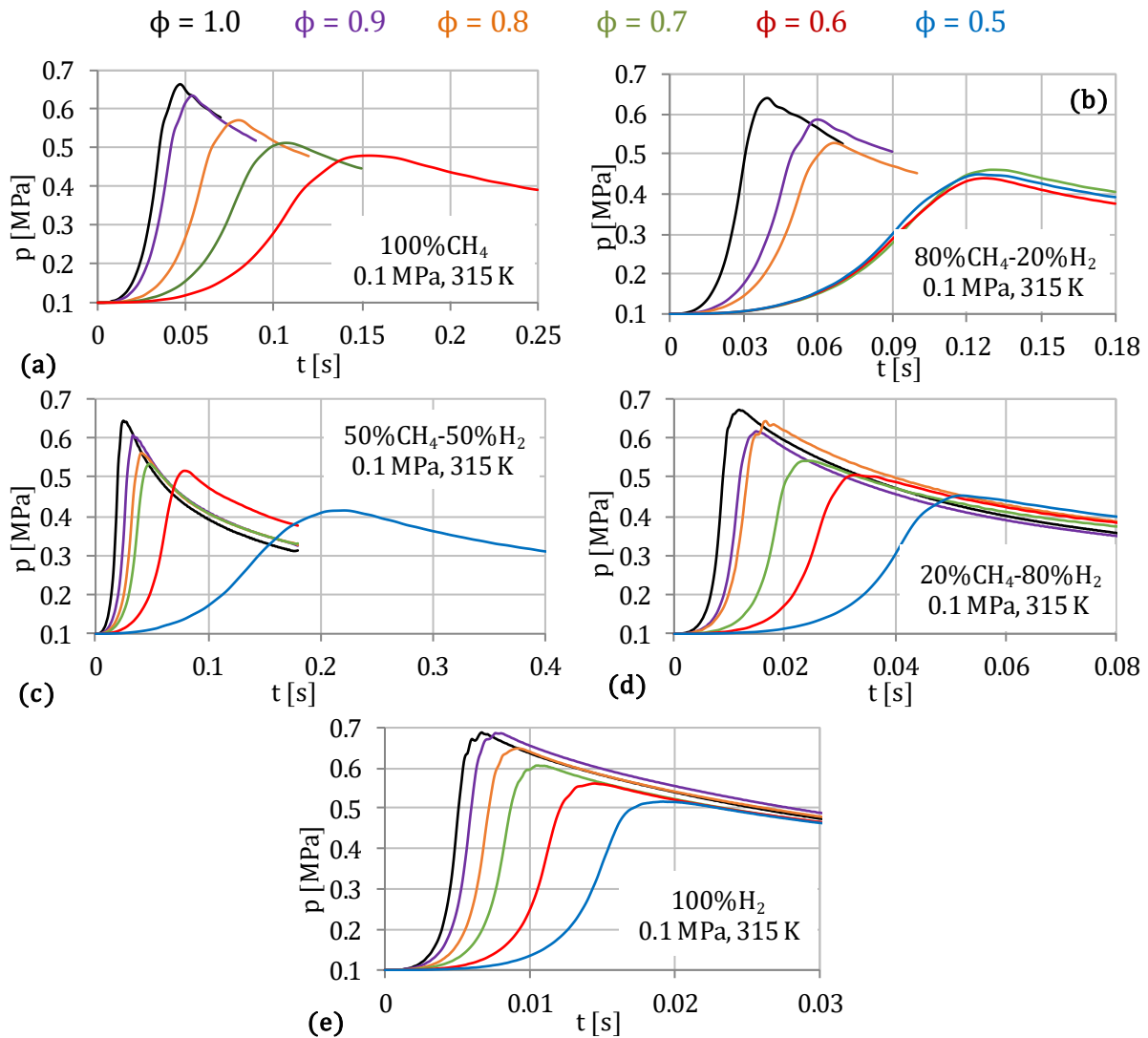


Figura 7.4: Evolución de la presión frente al tiempo, para diferentes dosados. (a) $100\% \text{CH}_4$; (b) $20\% \text{H}_2$; (c) $50\% \text{H}_2$; (d) $80\% \text{H}_2$; (e) $100\% \text{H}_2$.

De forma similar, si se considera un determinado dosado (un color dado de las curvas de la Figura 7.4) se puede ver que, al aumentar la proporción de hidrógeno, aumenta la velocidad de combustión, el pico de presión se alcanza antes (se acorta el tiempo de combustión) y la presión máxima crece.

Velocidades de combustión

En la *Figura 7.5* se presenta la evolución de la **velocidad de combustión laminar** u_f^p , obtenida a partir del registro de la presión instantánea en el interior de la cámara de combustión, en función de la temperatura de la masa no quemada. Nótese que la escala de los ejes de ordenadas es diferente en cada gráfico, para cubrir el aumento que se produce desde el metano hasta el hidrógeno.

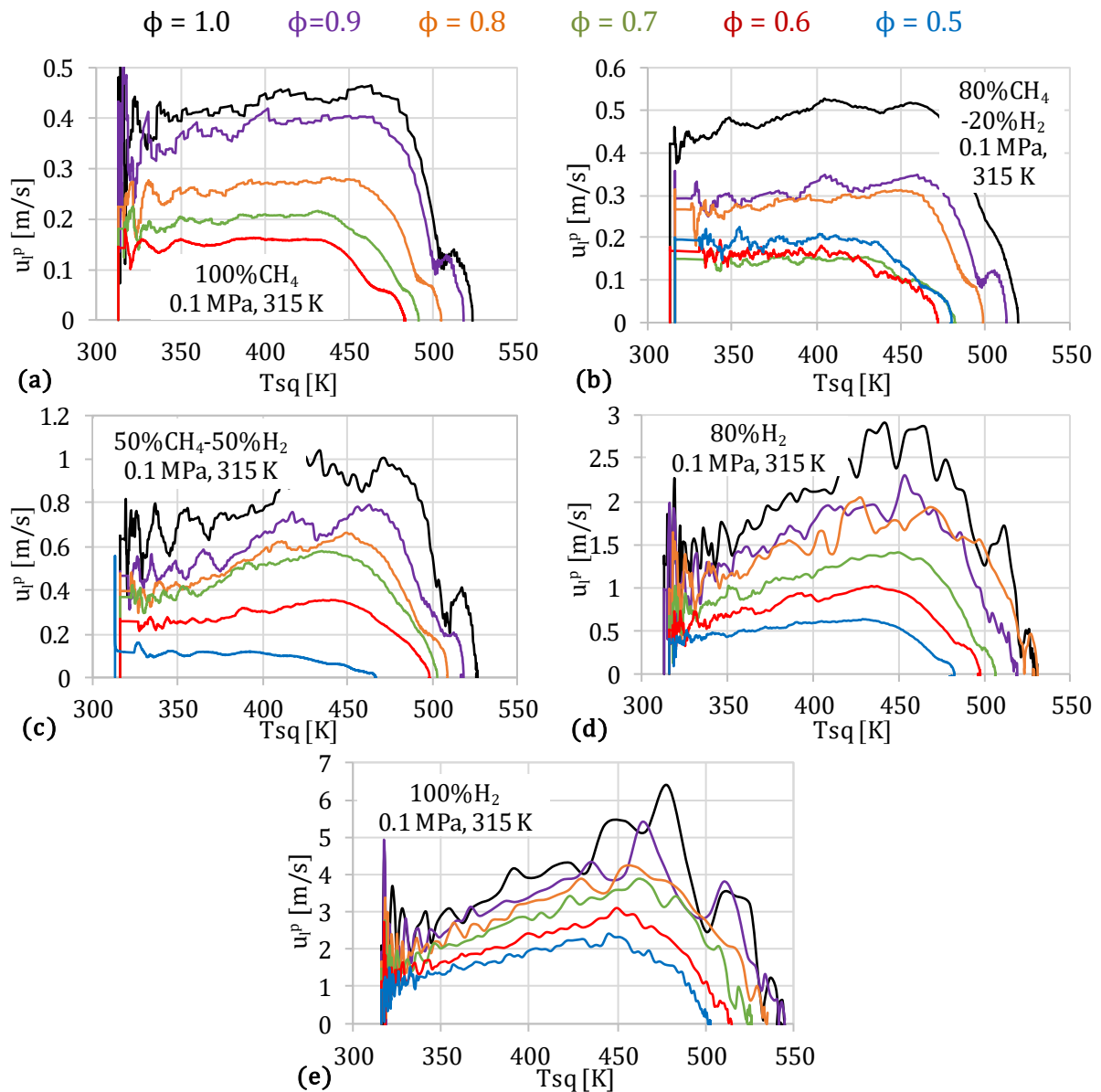


Figura 7.5: Evolución de la velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca, para diferentes dosados. (a) 100%CH₄; (b) 20%H₂; (c) 50%H₂; (d) 80%H₂; (e) 100%H₂.

Las tendencias generales que se puede observar coinciden con las ya indicadas para las curvas de presión de la *Figura 7.4.*, ya que la velocidad de combustión laminar crece a medida que aumenta el porcentaje de hidrógeno y también el dosado, por lo que se obtienen los mayores valores de velocidad de combustión laminar para mezclas 100% H_2 /aire a $\phi=1.0$.

La *Figura 7.6* muestra la velocidad de combustión laminar para cada dosado, para las diferentes mezclas de hidrógeno–metano, para los valores de referencia a 0.1 MPa y 315 K. En este gráfico se puede ver juntos el efecto que tiene tanto el aumento del dosado como el contenido de H_2 en la mezcla. Por tanto, se puede decir que a medida que aumenta el dosado aumenta la velocidad para todas las mezclas estudiadas, y de la misma forma, se observa como un aumento de un 20% H_2 en la mezcla no causa un aumento considerable en la velocidad de combustión (se toma como ejemplo una mezcla con $\phi = 0.7$ para cuantificar el aumento, se tiene un aumento de 1.52% con respecto a la mezcla de 0% H_2 o 100% CH_4), pero en la mezcla de 50% H_2 , se puede apreciar un aumento significativo de la velocidad de combustión (12.28% con respecto a la mezcla de 0% H_2 o 100% CH_4) y ya cuando se tienen contenidos de un 80% H_2 en la mezcla, aumenta de forma considerable la velocidad de combustión para cada dosado (aumento de 32.33% con respecto a la mezcla de 0% H_2 o 100% CH_4), llegándose a reafirmar que el hidrógeno multiplica por cinco las velocidades de combustión de las mezclas de metano puro.

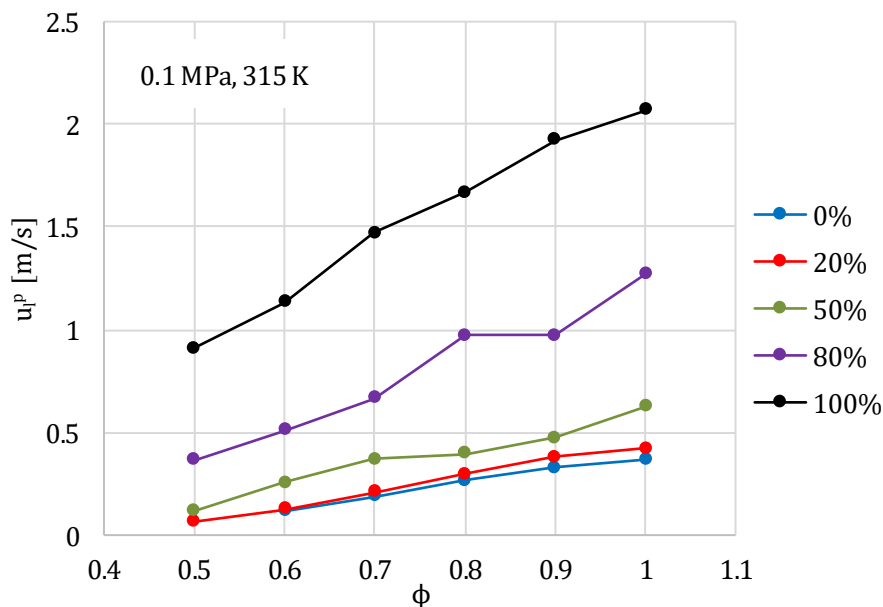


Figura 7.6: Dependencia de la velocidad de combustión laminar en función del dosado en las mezclas hidrógeno-metano

Otra forma de ver esta **dependencia de la proporción de hidrógeno/dosado** es considerar como ejemplo la velocidad de combustión del metano estequiométrico, que es de 0,42 m/s. Analizando la *Figura 7.6*, se puede ver que esa misma velocidad de combustión se puede tener con una mezcla pobre de dosado 0.9, constituida por hidrógeno al 20% en metano, o bien por una mezcla más pobre (0.8) con hidrógeno al 50%, o incluso con una mezcla extremadamente pobre de dosado 0.5 con hidrógeno al 80%.

7.3 Velocidad de combustión obtenida por el método óptico de imágenes Schlieren

A continuación, se detallan los resultados obtenidos mediante el método del procesado de imágenes (técnica Schlieren). Los resultados se presentan y analizan primero según la cantidad de H₂ en la mezcla, y luego según la variación del dosado relativo en una misma mezcla, es decir, se empezará por una **mezcla de 100%CH₄ hasta llegar a un 100%H₂**. Posteriormente, los resultados obtenidos se comparan con resultados encontrados en la bibliografía para su validación. Todos los resultados presentados en este ítem fueron realizados a **condiciones iniciales de $p = 0.1 \text{ MPa}$ y $T = 315 \text{ K}$** .

Antes de presentar los resultados, es importante indicar que las medidas para determinar la velocidad de propagación de frente de llama sin stretch corresponden exclusivamente a la fase inicial del proceso de combustión, donde la presión permanece prácticamente constante (con aumentos despreciables, del orden de un 1.20% de aumento de presión con respecto a la presión inicial.), pero en la que el efecto del proceso de encendido ha desaparecido. Por ello se tomaron a diferentes rangos de radios y tasa de stretch según la mezcla y el dosado. Se tomó como **radio mínimo 6mm** para el frente de llama, y como **radio máximo 25mm**, puesto que en este rango se considera que no existe influencia de la chispa de encendido, ni tampoco por el aumento de presión.

Se tomaron rangos diferentes para la validez de los radios, por analogía con la bibliografía, ya que no se encontró un rango válido para todas las mezclas y, cada autor toma un rango de radio y tasa de stretch diferente. Bradley et al. [58], utilizaron un rango de radios de frente de llama de 8–2 mm para una mezcla de iso-octano y comentan que

las medidas no se pudieron realizar en el mismo rango de tasa de stretch en las diferentes condiciones experimentales, puesto que la tasa de stretch, α , depende de la velocidad de frente de llama S_n . Por ejemplo, para una mezcla a 0.25 MPa y $\phi = 1.0$ el efecto de la tasa de stretch lo midieron en un rango de 100–500 s^{-1} , mientras que para un dosado de $\phi = 0.8$ el rango fue de 45–300 s^{-1} . Sin embargo, Hu et al. [142], realizaron las medidas en un rango de radio de 5–25 mm, para diferentes mezclas de $H_2 - CH_4$. En la *Figura 7.7* se muestra un ejemplo, para una **mezcla de metano puro**, de cómo varía la velocidad según el rango de radio que se elija, en la que se observa claramente que las mezclas más afectadas son tanto la mezcla más pobre ($\phi = 0.6$) como también la estequiométrica.

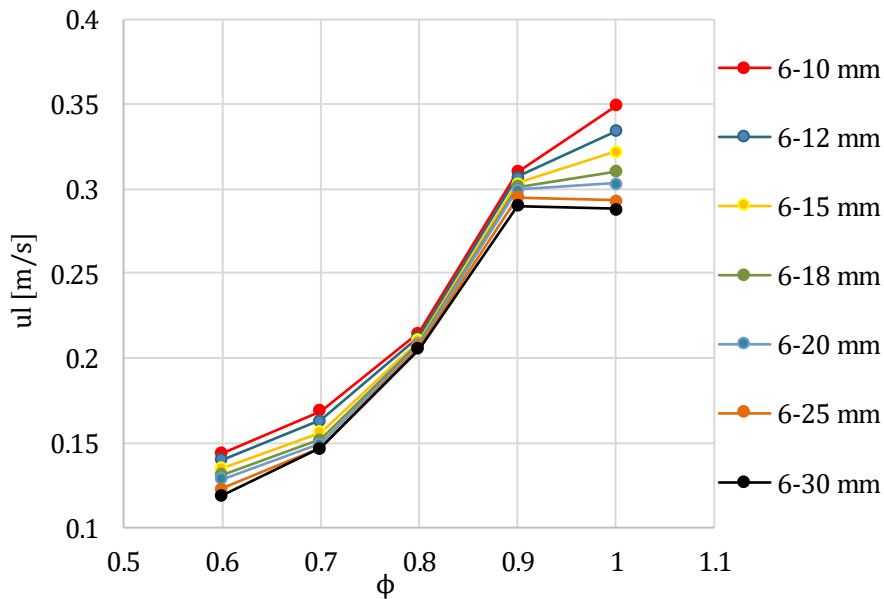


Figura 7.7: Velocidad de combustión laminar obtenida según el rango de radios elegido para su determinación.

7.3.1 Dependencia del contenido de hidrógeno en la mezcla

Morfología de las llamas

Para el estudio de la dependencia con respecto al contenido de H_2 en la mezcla, se ha elegido dos dosados (0.7 y 1.0) para la presentación de los resultados. Las matrices completas de imágenes Schlieren para todos los dosados ensayados se presentan en el Anexo II.

En llamas esféricas, el instante inicial del crecimiento de las perturbaciones del frente es anterior al momento en el que la inestabilidad se observa experimentalmente. Esto se explica porque las perturbaciones pueden no detectarse hasta que su amplitud alcanza un tamaño significativo. La tasa de crecimiento del frente de llama depende de tres factores principales: *difusividad térmica*, *molecular* y *viscosa*. Como ya se vio, en el capítulo 2 (apartado 2.3.2), la difusividad térmica siempre tiene un efecto estabilizador de las inestabilidades producidas por la variación de temperatura. La difusividad debido a la viscosidad también tiene un efecto estabilizador, debido a la importante variación de viscosidad a través de toda la superficie del frente de llama. Por otro lado, el efecto de la difusividad molecular está íntimamente ligado al número de Lewis, por lo que puede tener un efecto estabilizador del frente o, todo lo contrario [76].

En la *Figura 7.8* y *Figura 7.9* se muestra la evolución del radio de llama para las mezclas con contenido de H₂ en estudio a dosado estequiométrico (*Figura 7.8*) y pobre de 0.7 (*Figura 7.9*). Aunque las imágenes se capturan de forma secuencial con una base de tiempos de la cámara de alta velocidad, se han elegido las imágenes que corresponden a radios del frente de llama cada 0.01m (1cm).

En un apartado posterior se recogen los resultados cuantitativos del análisis de inestabilidades de los frentes de llama, por lo que aquí solo se indica un análisis cualitativo. En ese sentido, puede indicarse que, al comparar las dos figuras, se puede ver como hay una mayor tendencia a la aparición y crecimiento de inestabilidades en cada una de las mezclas de dosado pobre frente a la correspondiente mezcla estequiométrica con la misma proporción de hidrógeno. Además, al aumentar la proporción de hidrógeno para cada dosado, se incrementa la aparición de celularidad en el frente de llama (se puede ver bien esto en las secuencias correspondientes a radios de 4 y 5 cm).

En las imágenes se puede observar que para las mezclas de 100%CH₄ y 20%H₂, el frente de llama es completamente laminar. Para la mezcla de 50%H₂, la llama empieza a desarrollar pequeñas grietas a partir de un radio de 3cm, las cuales se desarrollan bruscamente al final de la combustión cuando el frente está por tocar la pared de la bomba. Para la mezcla de 80 y 100%H₂, la llama desde tempranas etapas de la combustión desarrolla grietas e inestabilidades, las cuales van creciendo a lo largo de todo el proceso convirtiendo la llama en celular. Con algunas reservas, también se pueden apreciar en las

secuencias de imágenes que existen los tres regímenes en los que se dividen las mezclas hidrógeno-metano que se comentaron en el apartado 7.2.

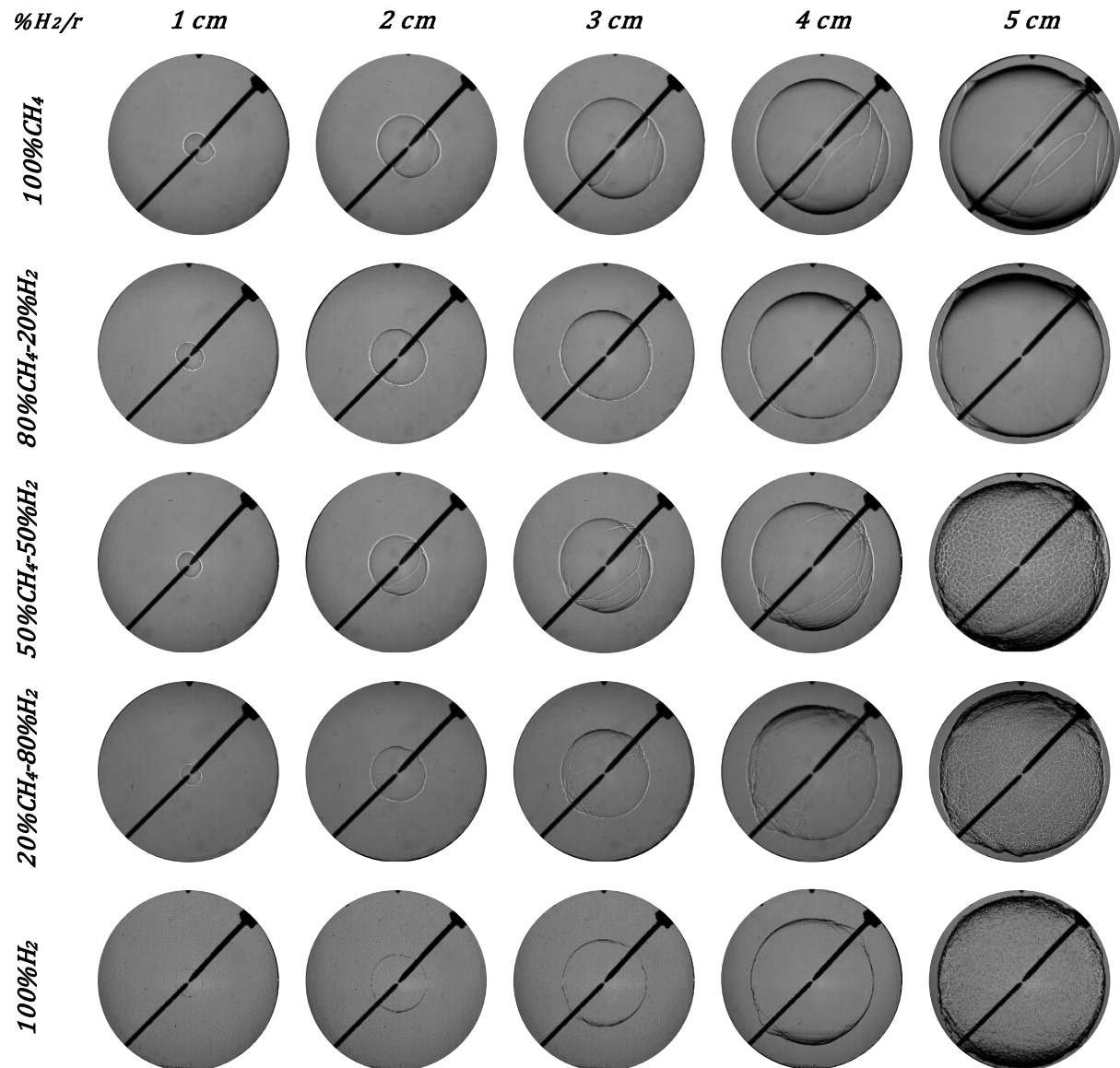


Figura 7.8: Imágenes Schlieren de frente de llama para mezclas con distinto contenido de H₂, en condiciones iniciales de $p = 0.1$ MPa y $T = 315$ K a $\phi = 1.0$.

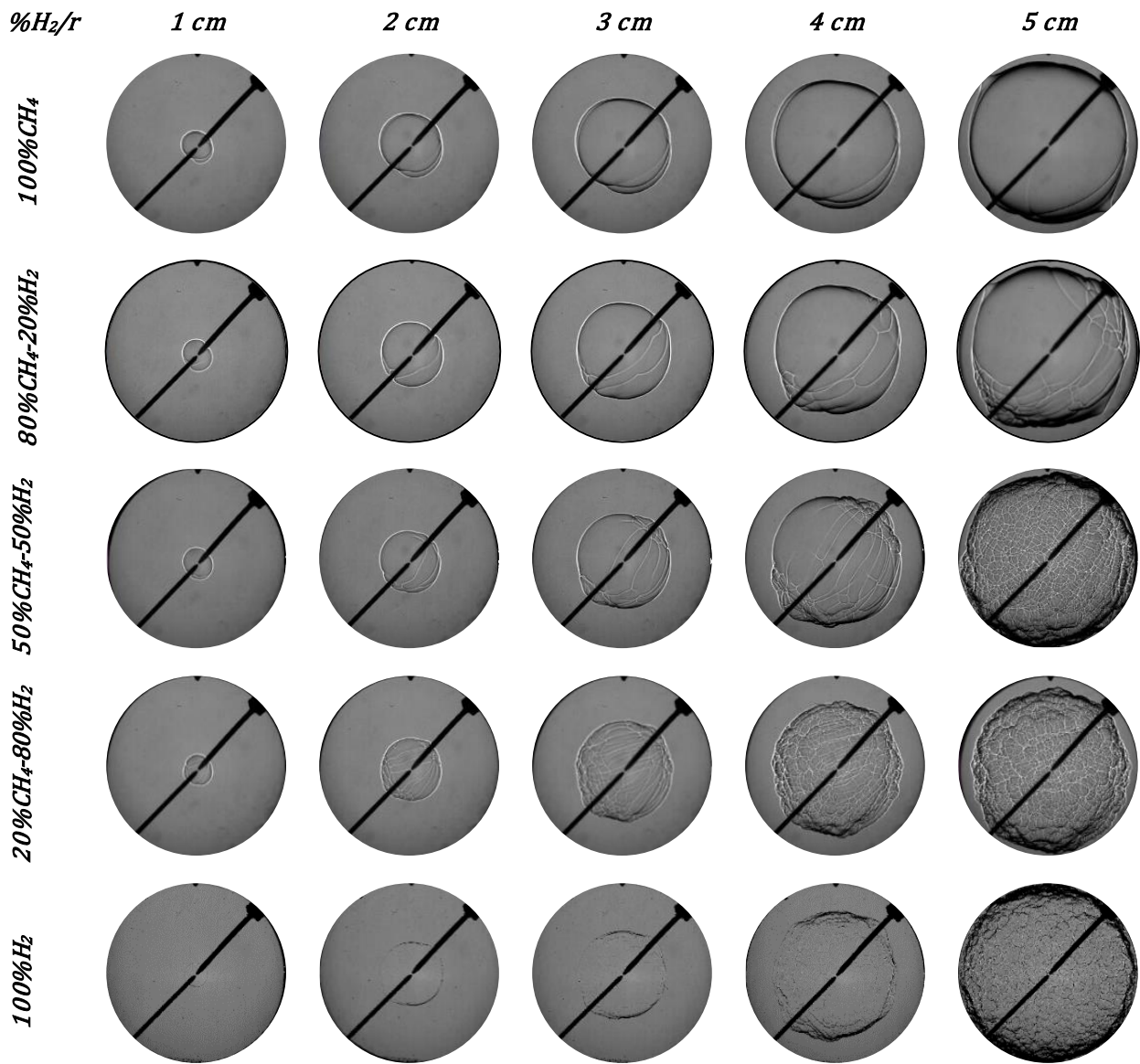


Figura 7.9: Imágenes Schlieren de frente de llama para mezclas con distinto contenido de H_2 , en condiciones iniciales de $p = 0.1 \text{ MPa}$ y $T = 315 \text{ K}$ a $\phi = 0.7$.

Radio del frente de llama

De las imágenes mostradas en las figuras anteriores *Figura 7.8* y *Figura 7.9*, después de ser tratadas mediante un algoritmo, se obtienen los radios de avance del frente de llama hacia la pared de la bomba *Figura 7.10*.

En las diferentes gráficas se puede ver como el contenido de hidrógeno aumenta la pendiente del radio del frente de llama, al comparar las curvas para las mezclas de 100% metano (curvas azules) hasta llegar a un 100% de hidrógeno (curvas negras); las curvas

van aumentando su pendiente y el radio avanza más rápido a medida que se incrementa el hidrógeno en la mezcla.

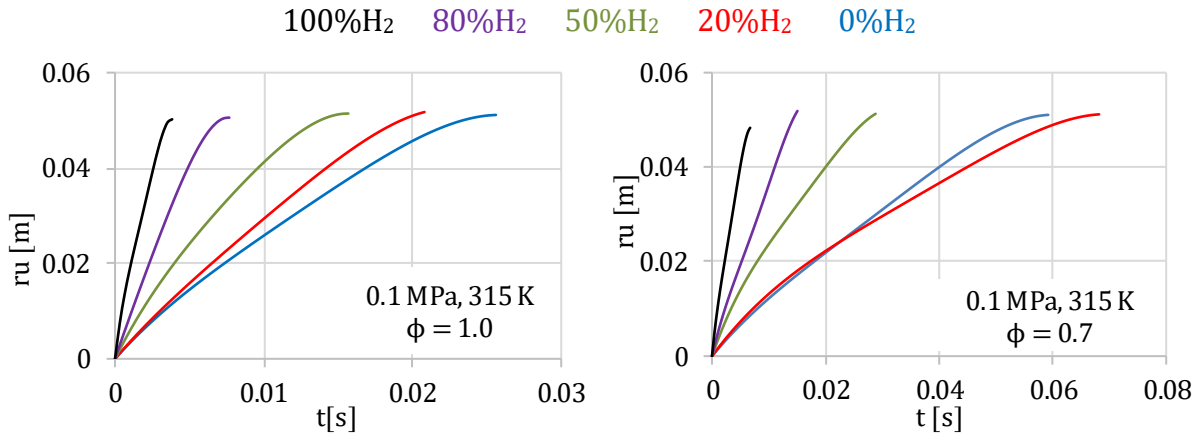


Figura 7.10: Evolución temporal del radio de frente de llama, para diferentes mezclas con dosados de $\phi = 0.7$ y 1.0 .

Velocidades de propagación del frente de llama S_n y S_l

Después de presentar la evolución temporal del radio de frente de llama, se muestra la velocidad de propagación de frente de llama S_n , que es la pendiente o derivada temporal del radio de frente de llama. En primer lugar, se presenta la velocidad de propagación frente al radio de llama r_u , *Figura 7.11*, y a continuación frente a la tasa de stretch, *Figura 7.12*. Esta última es de las más relevantes en el estudio por medio de las imágenes, ya que de ella se derivan o calculan las otras variables y velocidades.

Para todas las mezclas de hidrógeno y metano, S_n disminuye ligeramente a medida que se propaga la llama, y a medida que aumenta el radio, ver *Figura 7.11*. Esto es fundamentalmente consecuencia de la componente de velocidad de expansión de los gases quemados, que es muy alta al inicio, pero acaba anulándose cerca de las paredes de la cámara. La tasa de stretch α , como derivada logarítmica temporal de la superficie del frente de llama, tiene una tendencia similar. Existen casos excepcionales como lo es para las mezclas con alto contenido de hidrógeno, para las que la velocidad disminuye, luego se mantiene ligeramente constante, aumenta sutilmente y vuelve a disminuir.

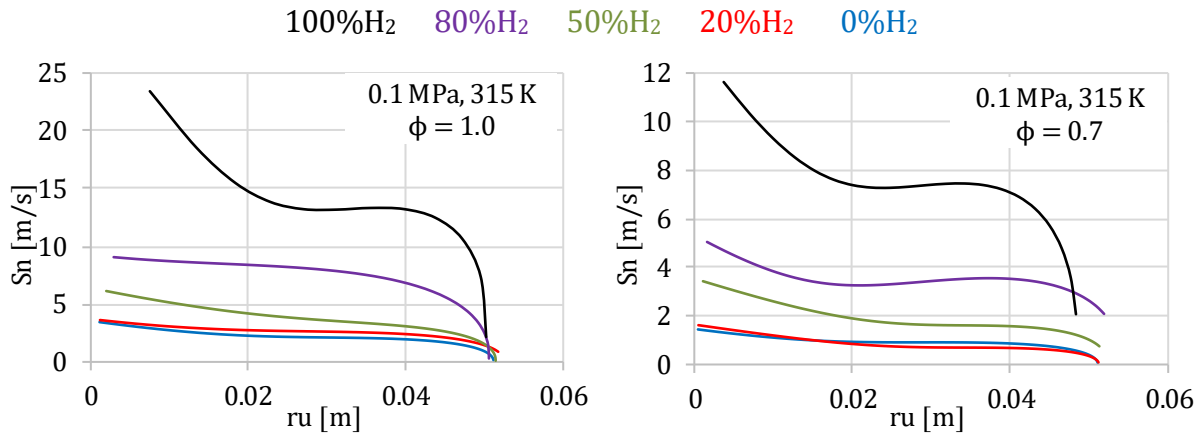


Figura 7.11: Velocidad de propagación de frente de llama S_n versus radio de llama, para mezclas con diferente contenido de H₂ a condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K, para dosados 1.0 y 0.7.

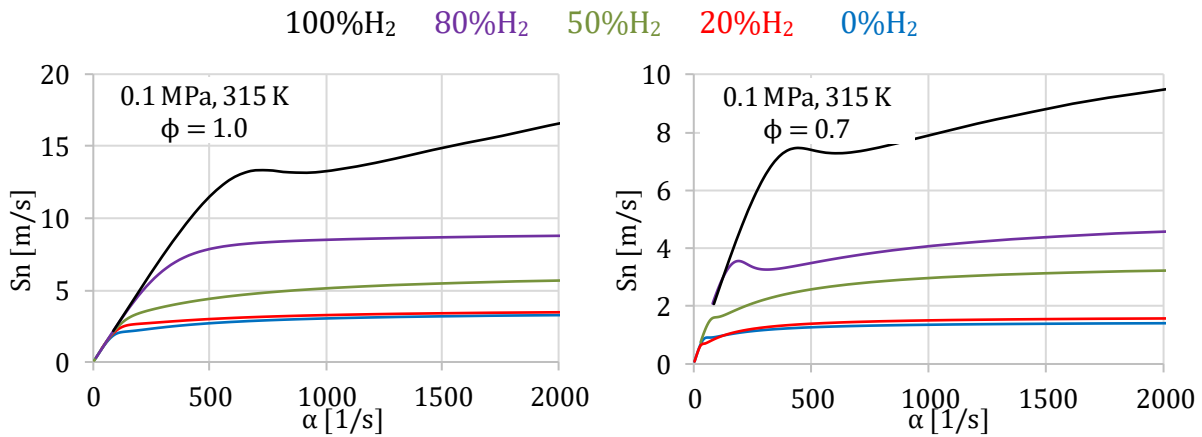


Figura 7.12: Velocidad de propagación de frente de llama S_n versus tasa de stretch, para mezclas con diferente contenido de H₂ a 0.1 MPa y 315 K y dosados 1.0 y 0.7.

La velocidad de propagación de la llama S_n aumenta con el incremento de la fracción de hidrógeno y de la tasa de stretch α , especialmente cuando la fracción de hidrógeno en las mezclas de combustible es superior al 80%. Los resultados muestran que las velocidades de propagación de la llama aumentan y las longitudes de Markstein, ($S_l - S_n = L_b \alpha$), del gas quemado disminuyen con el aumento de la fracción de hidrógeno, y esto indica que la llama tiende a ser inestable con el aumento de la fracción de hidrógeno.

La Figura 7.13 muestra las velocidades de propagación de la llama sin stretch S_l para mezclas con contenido de hidrógeno diferente y los dos dosados considerados. Para un dosado dado, la velocidad de propagación de la llama sin stretch aumenta con el aumento de la fracción de hidrógeno; este comportamiento se vuelve más obvio para las llamas

metano-hidrógeno-aire con una gran fracción de hidrógeno y las llamas de hidrógeno-aire. Se observa un pequeño aumento de S_I cuando la fracción de hidrógeno se incrementa desde 0% a 20% y luego 50%, mientras que el aumento es muy significativo al pasar al 80 y luego al 100%.

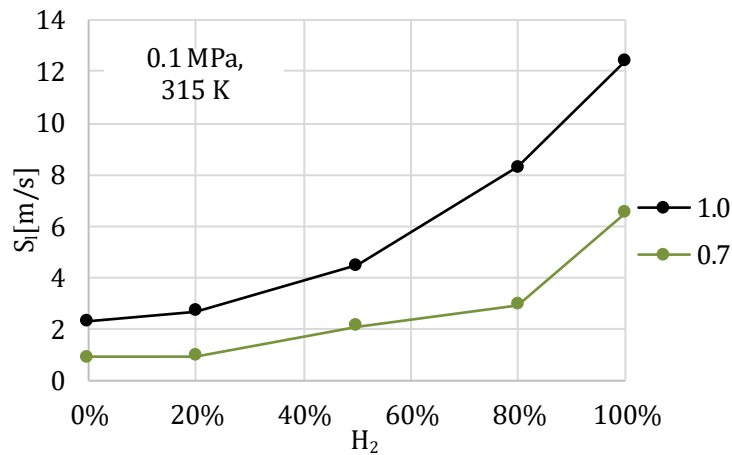


Figura 7.13: Velocidad de propagación de llama sin stretch para mezclas con diferente contenido de hidrógeno, con condiciones iniciales de 0.1 MPa 315 K y $\phi = 0.7$ y 1.0.

Velocidad de combustión libre de stretch u_l^0

La velocidad de combustión laminar libre de stretch u_l^0 se obtiene a partir de la correspondiente velocidad de propagación libre de stretch S_I mediante la relación de densidades, como ya se vio. La nueva velocidad u_l^0 se representa en la *Figura 7.14* en función del contenido de hidrógeno en las mezclas de combustible para los dos dosados considerados.

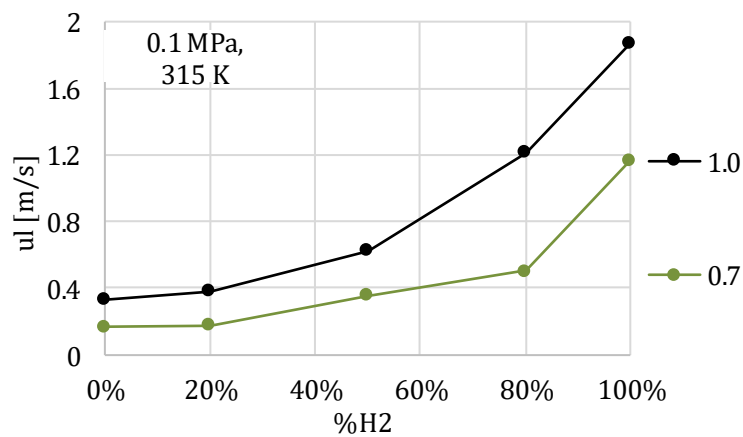


Figura 7.14: Velocidad de combustión laminar sin stretch para mezclas con diferente contenido de hidrógeno y dosado con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.

Las tendencias generales de la u^0 son las mismas que las de S_L , pero hay que tener en cuenta que u^0 es una propiedad intrínseca de la composición de la mezcla. Por ello, cabría preguntarse si la velocidad de las mezclas con proporciones intermedias de hidrógeno y metano deberían seguir alguna regla de prorrata con la fracción molar de cada componente. Mayo [50] en los capítulos dos y tres de su tesis doctoral analizó ampliamente este fenómeno. En la *Figura 7.14* esta regla de linealidad con la proporción de hidrógeno daría una línea recta entre la baja velocidad de combustión del metano y el alta del hidrógeno. Los resultados muestran que los valores de la velocidad de combustión laminar de las mezclas intermedias están claramente por debajo de los valores promediados estimados por proporciones molares. Esto implica la presencia de fuertes efectos no lineales en la cinética química y se refleja en los valores de la velocidad de combustión laminar sin stretch.

Como ya se puso de manifiesto anteriormente, para los dos dosados es posible identificar **tres regímenes en la magnitud de la velocidad de combustión** dependiendo de la proporción (fracción molar) de hidrógeno en las mezclas de combustible. En el caso de las mezclas con contenido de hidrógeno inferior al 60%, es el régimen de combustión dominado por metano. Aquí se presenta un aumento lineal leve en la velocidad de combustión laminar con el aumento de la adición de hidrógeno. En el caso de un contenido de hidrógeno superior al 80%, es el régimen de combustión de hidrógeno inhibida por metano o hidrogeno dominante. Aquí se presenta una disminución lineal y brusca de la velocidad de combustión laminar con el aumento de la fracción de metano en las mezclas de combustible y un aumento de la velocidad con la adición de hidrógeno. En el caso de que las fracciones de hidrógeno estén entre el 50% y el 80%, es el régimen de transición. Aquí, las velocidades de combustión laminar aumentan exponencialmente con el aumento del contenido de hidrógeno en las mezclas de combustible.

Velocidad de combustión con stretch, u_n y velocidad de combustión másica u_{nr}

En la *Figura 7.15*, se presenta la velocidad de combustión con stretch u_n , y la velocidad de combustión másica u_{nr} , para diferentes mezclas con contenido de hidrógeno a dosado estequiométrico, en la cual se puede ver que ambas velocidades aumentan de

magnitud a medida que se añade hidrógeno a la mezcla, y en cada mezcla la aumentan con el aumento de la tasa de stretch.

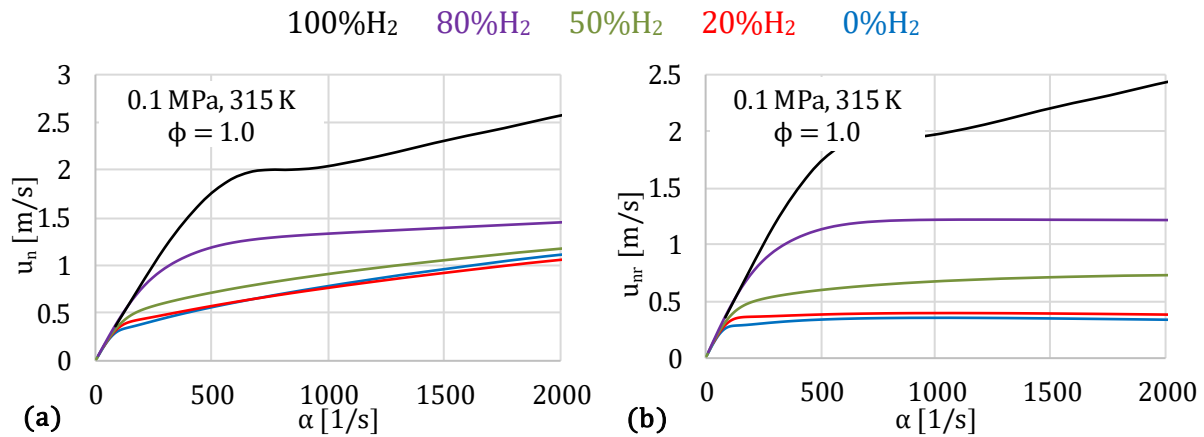


Figura 7.15: (a) Velocidad de combustión con stretch y (b) velocidad de combustión másica frente a la tasa de stretch.

Longitud de Markstein y otros parámetros de la transición a celularidad

La **longitud de Markstein**, que relaciona las velocidades de propagación del frente con y sin stretch ($S_l - S_n = L_b \alpha$), es otra propiedad importante en el estudio del frente de llama en una combustión. En la *Figura 7.16*, se muestran las longitudes de Markstein de las llamas metano–hidrógeno/aire para diferentes mezclas con contenido de hidrógeno en las que se puede ver que para las mezclas con una gran cantidad de hidrógeno y las mezclas de hidrógeno/aire muestran un aumento lento con el aumento del dosado. Esto sugiere que la estabilidad del frente de llama se mejora con el aumento del dosado, pero la adición de hidrógeno a las mezclas de metano/aire disminuye la estabilidad del frente de llama.

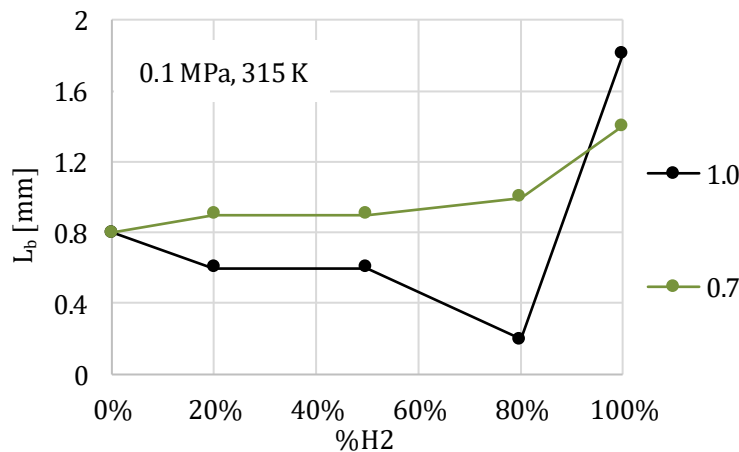


Figura 7.16: Longitud de Markstein para diferentes mezclas con diferentes contenidos de hidrógeno, con condiciones iniciales de 0.1MPa, 315 K y $\phi = 0.5$ y 1.0.

Es importante resaltar que no se han encontrado suficientes datos en la bibliografía de otros estudios sobre estas mezclas de combustibles. En relación con las pocas referencias encontradas, las tendencias obtenidas coinciden en algunos casos, siendo necesario ampliar este estudio experimental para corroborar la tendencia encontrada: a medida que aumenta el porcentaje de hidrógeno en la mezcla, la longitud de Markstein se incrementa. Esta tendencia se puede explicar con los modelos clásicos de inestabilidad de la llama por efectos de difusión preferencial propuestos por Manton et al. [113] y Markstein [181]. Las llamas laminares premezcladas tenderán a ser inestables debido a los efectos de la difusión preferencial bajo las condiciones donde el componente de rápida difusión (CH₄ y H₂ en el presente caso) es deficiente (correspondiente a la combustión de combustible en este estudio).

El **número de Zel'dovich** ($Ze = E_a(T_b - T_u)/RT_b^2$) representa la sensibilidad de la reacción química a la variación de la temperatura máxima de la llama, y su inverso denota físicamente un ancho adimensional efectivo de la zona de reacción. En la *Figura 7.17* se muestra el número de Zel'dovich y su evolución con el contenido de hidrógeno en la mezcla. Se puede ver que dicho número Ze se mantiene constante para mezclas con contenido bajo de hidrógeno (régimen de metano dominante) y luego aumenta rápida y bruscamente en la zona o régimen de transición y disminuye ligeramente para las mezclas con alto contenido de hidrógeno. Además, se puede observar que este número disminuye con el aumento del dosado y para todas las mezclas el valor mínimo se alcanza en la mezcla estequiométrica, que es donde se tiene una temperatura de mezcla quemada mayor.

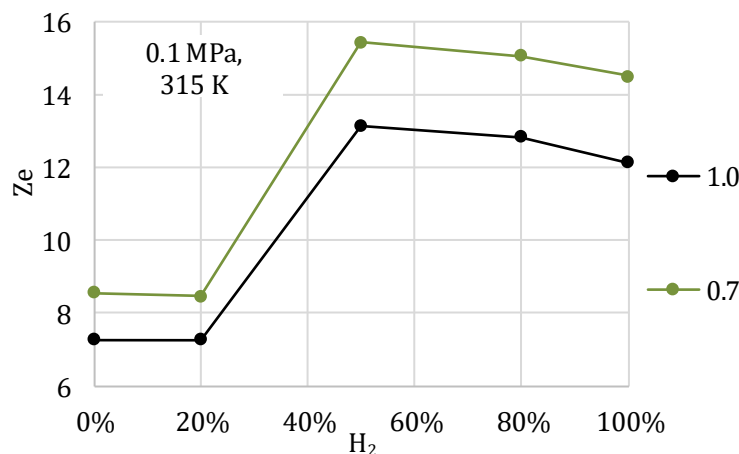


Figura 7.17: Número de Zel'dovich para mezclas con diferente contenido de hidrógeno, con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.5$ y 1.0.

7.3.2 Dependencia del dosado relativo

Como se ha comentado en el *capítulo 2*, el hidrógeno es un combustible que tiene una velocidad de combustión laminar cinco veces mayor que el metano, por lo que, al mezclar ambos, se pueden extender los límites de inflamabilidad con respecto al dosado. La bibliografía incide en que al introducir hidrógeno en gas natural implica un aumento de la celularidad de la llama y, por tanto, una intensificación de la formación de arrugas en el frente, aumentando la velocidad de propagación de la llama y extendiendo los límites de inflamabilidad, así como reduciendo la formación de óxidos de nitrógeno. Esta propiedad aumenta cuanto mayor sea la presión inicial de la mezcla, mayor el dosado, mayor el porcentaje de hidrógeno en la mezcla o menor la temperatura inicial (aumentar la temperatura desemboca en un mayor porcentaje de formación de óxidos de nitrógeno).

Generalmente, para mezclas constituidas por **hidrocarburos con dosados ricos** ($\phi > 1$) o **mezclas de hidrógeno-aire con dosados pobres** ($\phi < 1$), el **número de Lewis es menor que uno**, por lo que en esas condiciones la celularidad aparece poco después del salto de la chispa de ignición. Cuando se trata de **hidrocarburos con dosados pobres o mezclas de hidrógeno-aire con dosados ricos** ocurre todo lo contrario: el **número de Lewis adopta valores superiores a la unidad**, por lo que **la llama permanece estable** durante un tiempo tras la ignición, pero puede llegar a adquirir una apariencia celular una vez que se alcanza un tamaño crítico del radio del frente. En este último caso, la inestabilidad es hidrodinámica por naturaleza, desencadenada por efectos de expansión térmica [76].

Morfología de las llamas

La *Figura 7.18* muestra las imágenes Schlieren de mezclas de metano-aire para diferentes dosados relativos, elegidas cuando el radio del frente de llama adopta los valores indicados a medida que se propaga la llama. Como se puede ver para todos los dosados resulta una llama suave y que se propaga esféricamente hacia afuera del electrodo desde el centro de la bomba. Para todos los dosados se puede ver que, en las etapas tempranas, ($r = 1\text{cm}$), la llama crece menos en la dirección de los electrodos que en la dirección normal a ellos; esto se conoce como “efecto de electrodo frío”, pero a medida que la llama avanza y alcanza cierto radio ($r = 2\text{ cm}$), el efecto empieza a ser

despreciable. Para evitar la influencia de este efecto, se utiliza el radio normal a los electrodos (radio más grande) para los cálculos. A medida que avanza la llama para, $r = 4$ y 5 cm con dosados 0.9 y 1.0 , se pueden observar algunas distorsiones en la llama, estas probablemente son grietas asociadas al paso de la llama por los electrodos, pero que no influyen en velocidad de esta. Este comportamiento experimental concuerda con los razonamientos del valor del número de Lewis superior a la unidad.

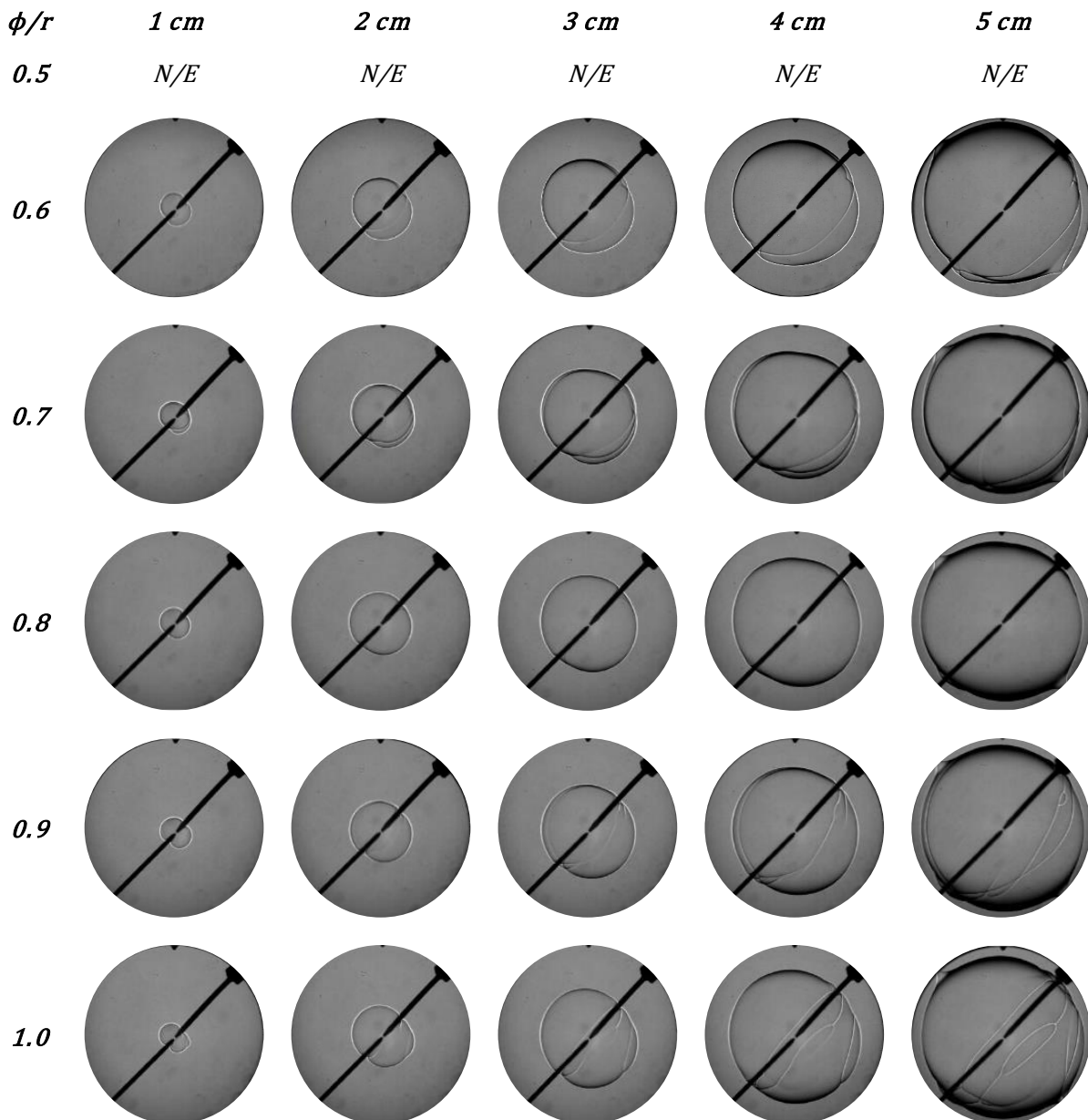


Figura 7.18: Morfología de evolución del frente de llama para una llama 100%CH₄ para diferentes dosados.

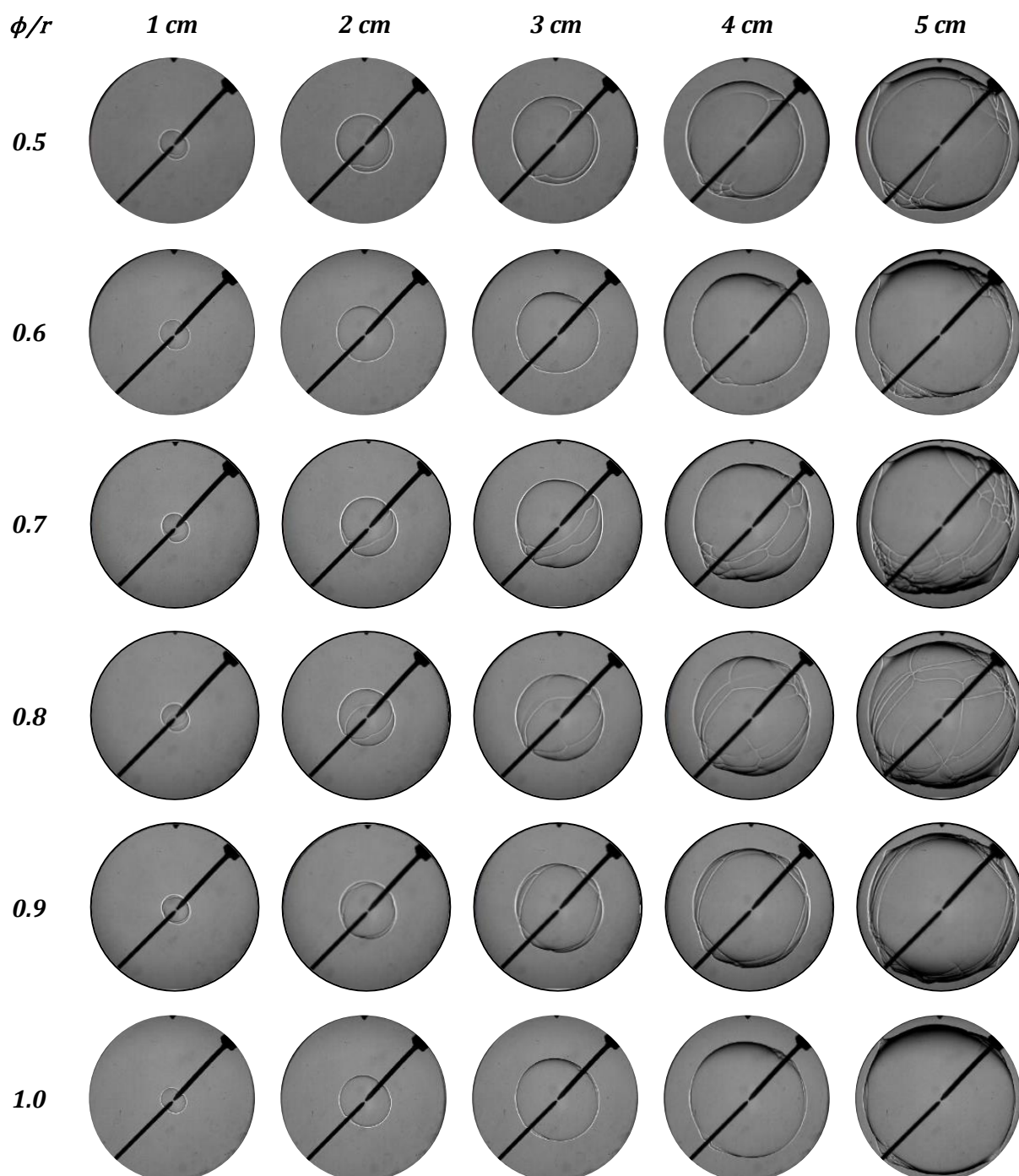


Figura 7.19: Morfología de evolución del frente de llama para una llama 20%H₂ para diferentes dosados.

Al añadir un 20%H₂ a la mezcla metano–aire (Figura 7.19), se puede observar que el comportamiento de la llama es similar al de la mezcla de metano puro; aparecen algunas grietas a partir de la mitad de la combustión ($r=0.03\text{m}$) y $\phi = 0.7$, pero las mismas no se llegan a desarrollar, lo cual confirma que es una llama permanentemente estable.

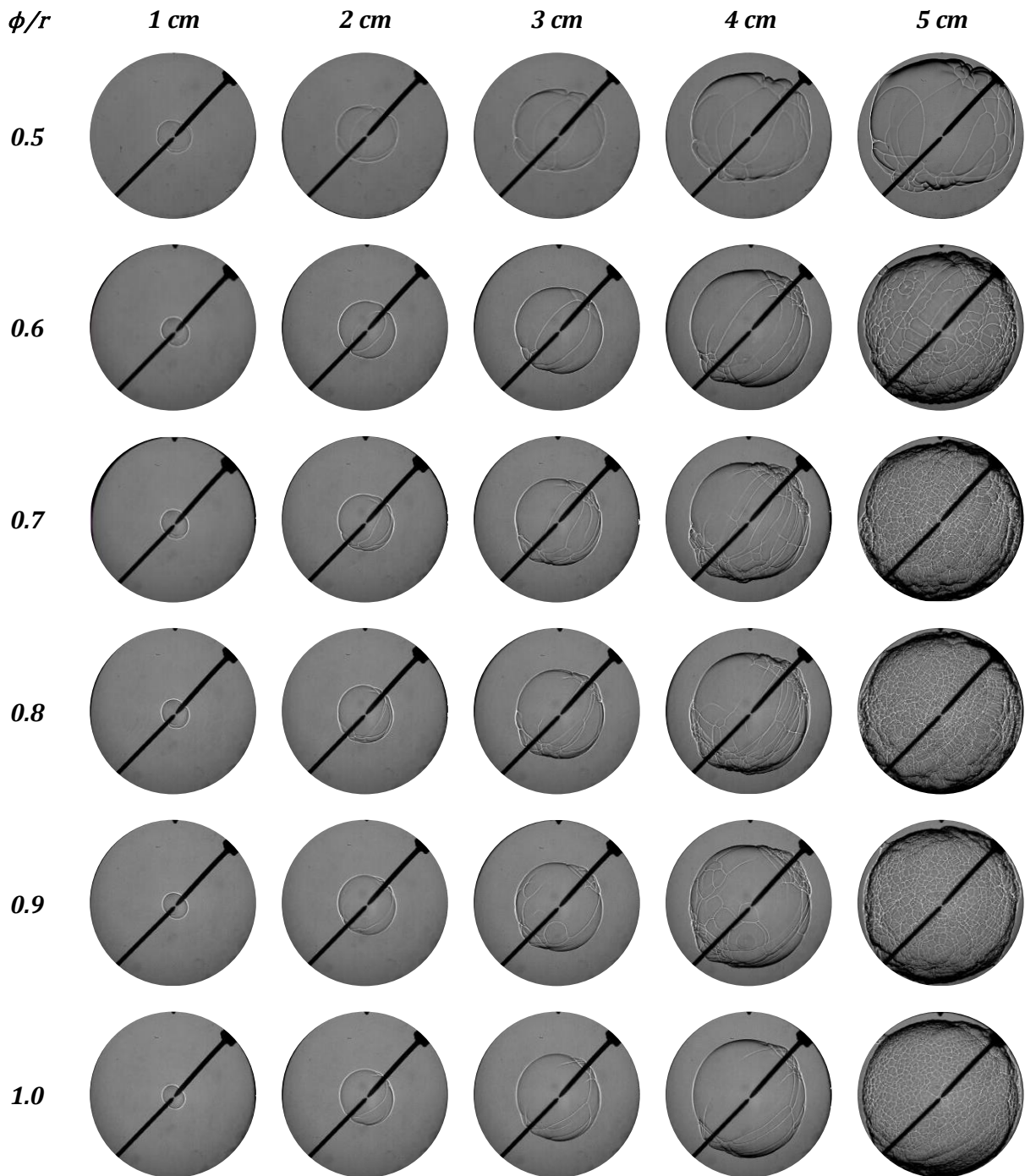


Figura 7.20: Morfología de evolución del frente de llama para una llama 50% H_2 para diferentes dosados.

En la *Figura 7.20* se muestran las imágenes de una mezcla 50% H_2 y 50% CH_4 , que según los tres regímenes definidos previamente entra en la zona de transición. En esta mezcla se puede observar que la llama comienza siendo laminar. A medida que la llama avanza se van desarrollando inestabilidades que crean grietas en todos los dosados, pero en las etapas finales ($r = 0.04$ y 0.05), donde la velocidad de propagación de las grietas aumenta, se fragmentan y se multiplican y la llama se convierte en completamente celular.

Estas inestabilidades en las llamas pobres pueden ser debido a los efectos termo-difusivos ($Le < 1$) o pueden ser inestabilidades hidrodinámicas (aumento en la relación de densidad y la disminución del espesor de llama).

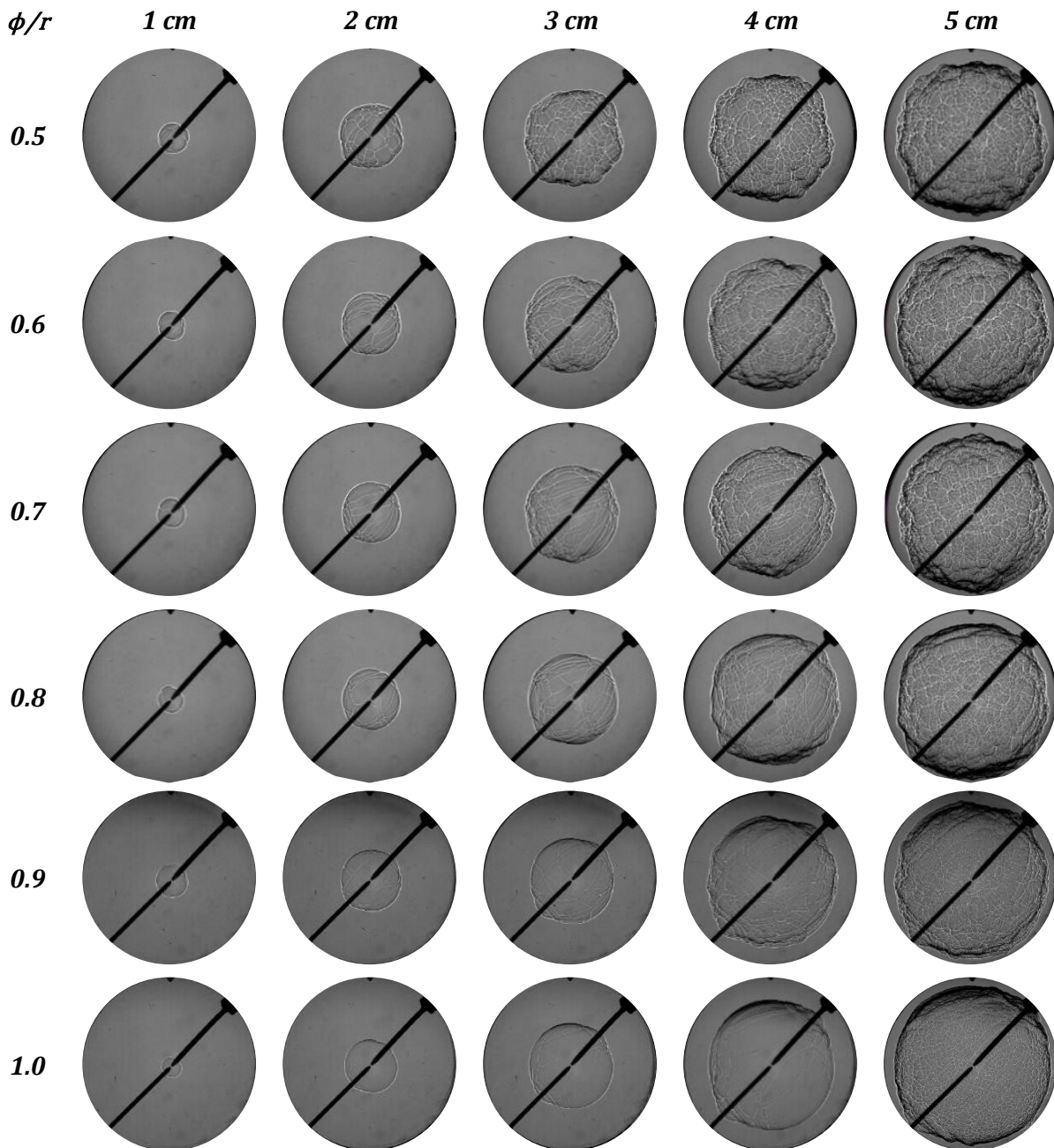


Figura 7.21: Morfología de la evolución del frente de llama para una mezcla con 80%H₂ y diferentes dosados.

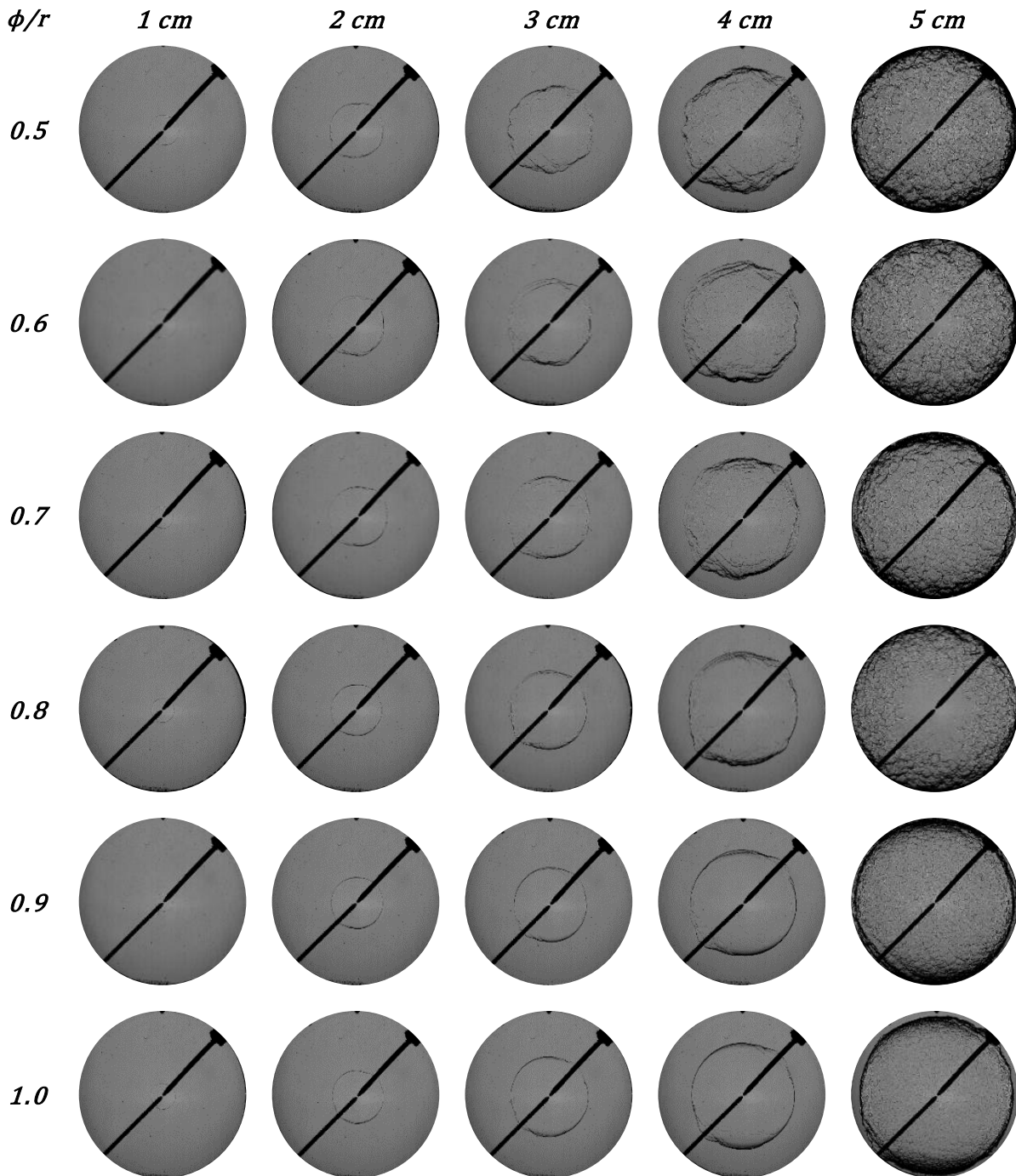


Figura 7.22: Morfología de evolución del frente de llama para una mezcla 100% H_2 y diferentes dosados.

Para el caso de una mezcla con 80% (Figura 7.21) y 100% de hidrógeno (Figura 7.22), se ve que la evolución de la llama empieza a ser celular ya desde poco después del salto de la chispa. La llama progresa rápidamente, desarrollándose llamas completamente inestables para todos los valores el dosado. Esto indica que a partir de un 80% de hidrógeno en la mezcla las llamas se desarrollan inestables, con un número de Lewis menor que 1. Además, como son llamas con alta velocidad de combustión, llevan asociado

un espesor de llama pequeño (aumenta el número de Peclet, relación entre el radio de llama y el espesor), por lo que se desarrollan también inestabilidades hidrodinámicas.

Radio del frente de llama

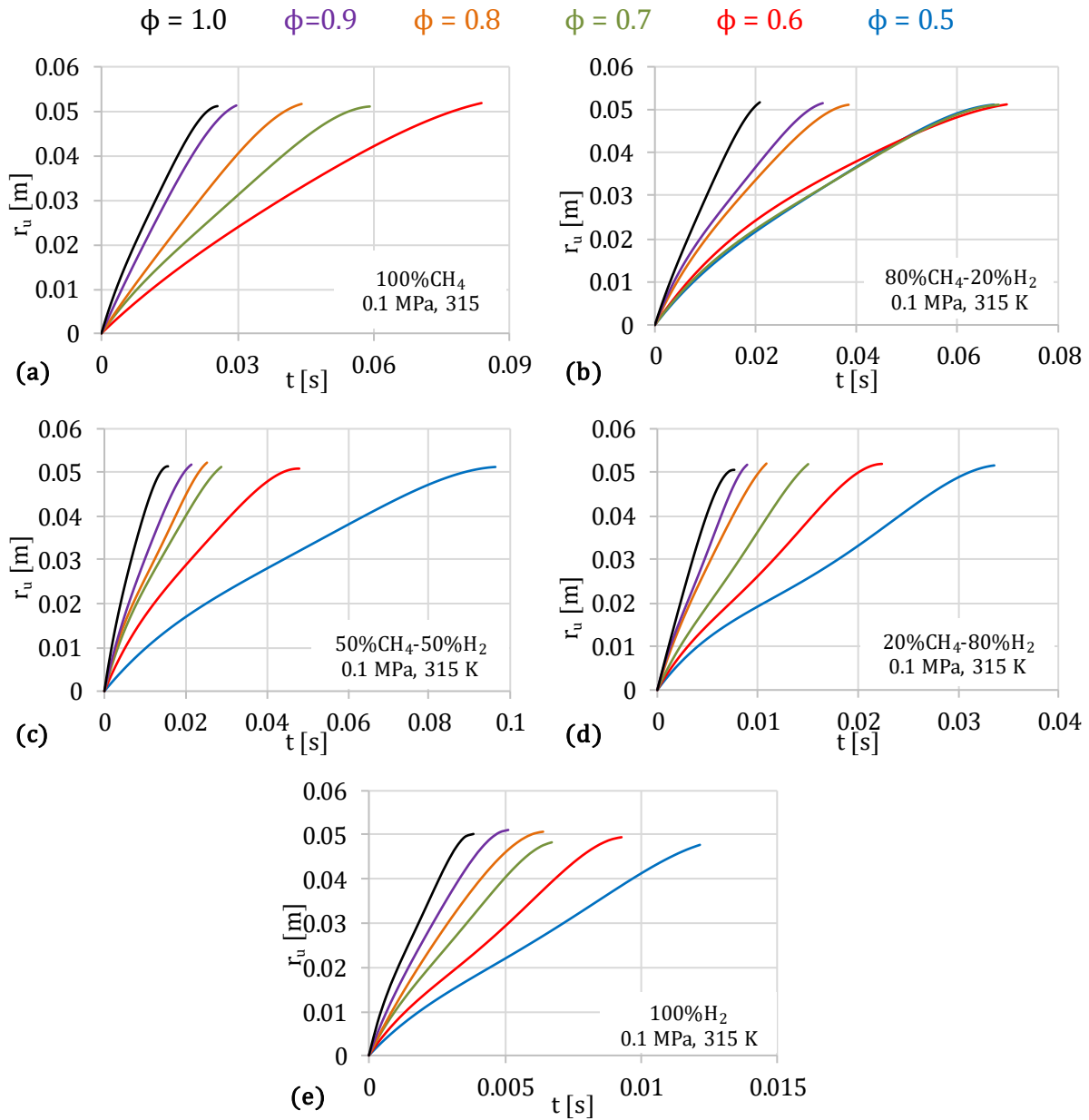


Figura 7.23: Evolución temporal del radio de llama para distintas mezclas de H₂ y dosados. (a) 0% H₂, (b) 20% H₂, (c) 50% H₂, (d) 80% H₂, (e) 100% H₂, $\phi = 0.5 - 1.0$.

En la *Figura 7.23*, se muestra la evolución del radio de llama en el tiempo para diferentes mezclas de H₂ - CH₄, con una relación lineal entre el radio de llama y el tiempo. Para un mismo dosado en las diferentes mezclas: a, b, c, d y e, se puede ver como la

pendiente de la línea de radio-tiempo aumenta con el aumento del dosado, lo que indica el aumento de la velocidad de propagación de la llama a medida que aumenta el dosado.

Velocidades de propagación del frente de llama S_n y S_l

En la *Figura 7.24*, se muestra la **velocidad de propagación del frente de llama S_n** en función del radio de la llama. Como se explicó en capítulos anteriores, la velocidad de propagación de la llama es la derivada del radio de la llama con respecto al tiempo, y refleja la velocidad de movimiento de la llama en relación con la pared de la bomba de combustión inmóvil.

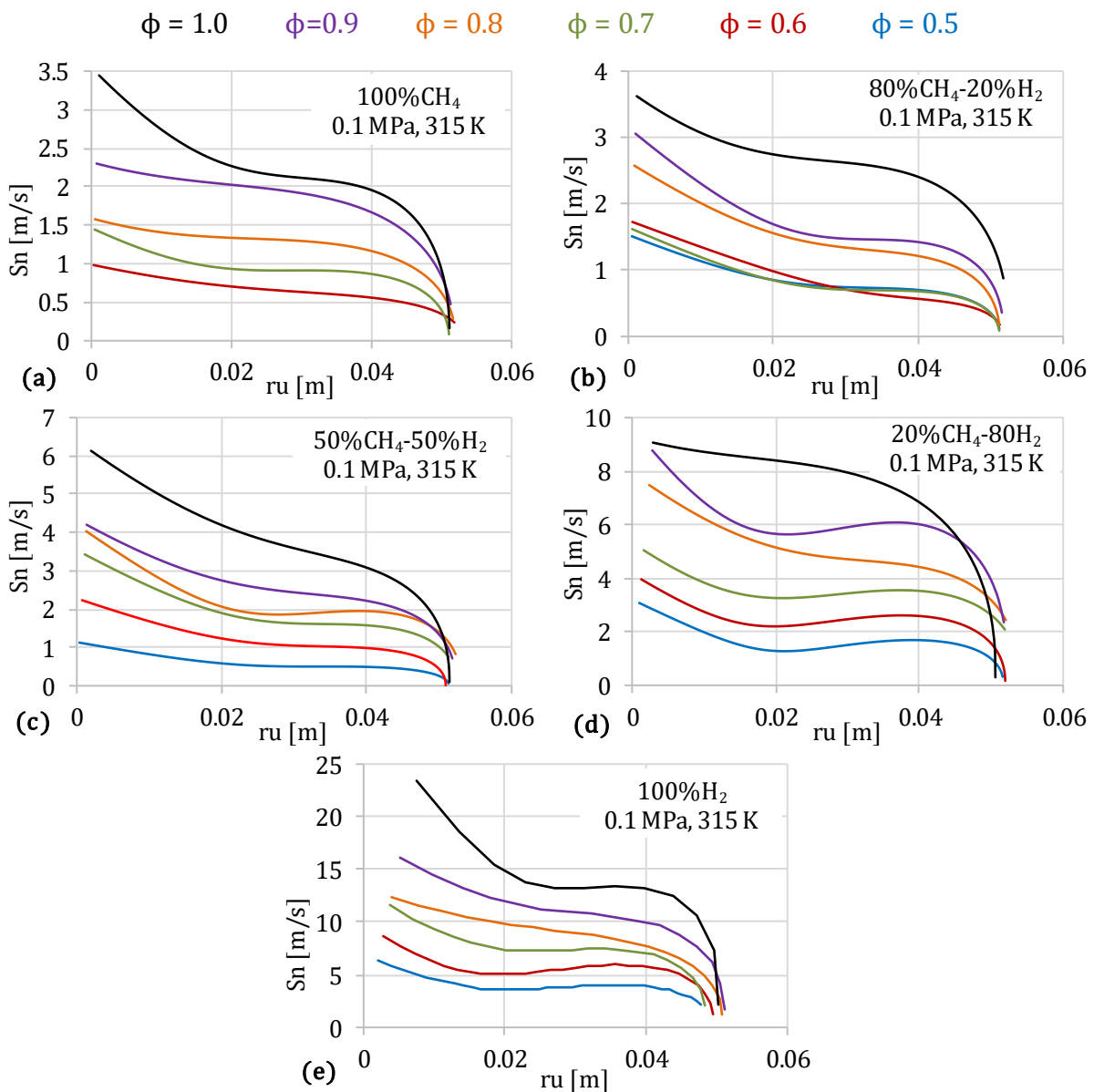


Figura 7.24: Velocidad de propagación de llama S_n frente al radio de llama para distintos porcentajes de H₂. (a) 0% H₂; (b) 20% H₂; (c) 50% H₂; (d) 80% H₂; (e) 100% H₂, y dosados $\phi = 0.6-1.0$.

La *Figura 7.24(a)–(e)* muestra la velocidad de propagación del frente de llama S_n para las distintas mezclas de hidrógeno-metano/aire en función del radio de la llama con diferentes dosados. Para la combustión de hidrógeno puro con $\phi < 1$, la velocidad de propagación de la llama disminuye ligeramente con el aumento del radio de la llama. Para las llamas estequiométricas de hidrógeno-aire, se presenta una disminución abrupta de la velocidad de propagación de la llama en las primeras etapas, luego aumenta ligeramente y vuelve a disminuir cuando se acerca a la pared. Para llamas de metano puro con dosados entre 0.6 y 1.0, la velocidad de propagación de la llama tiene la misma tendencia que la del hidrógeno, pero con una amplitud menor. La velocidad de propagación de la llama muestra una gran disminución con el aumento de radio de la llama en la etapa inicial de propagación y un ligero aumento con el aumento del radio de la llama en la etapa posterior de propagación de la llama. El valor máximo de la velocidad de propagación de la llama se presenta en el dosado estequiométrico (1.0) para las llamas de hidrógeno-aire.

En la *Figura 7.25* se muestra la velocidad de propagación de llama S_n frente a la tasa de stretch α para diferentes dosados y diferentes fracciones de hidrógeno en mezcla. Hay que recordar que, en la etapa inicial de la combustión, cuando el radio de llama es pequeño, la tasa de stretch es muy grande. Quitando los datos afectados por el salto de la chispa y por los electrodos en la etapa inicial del desarrollo de la llama, y los radios grandes donde la presión ha aumentado, se puede establecer una correlación lineal entre la velocidad de propagación de la llama y la tasa de stretch de ésta, considerando la longitud de Markstein.

Para la combustión de metano-aire, las velocidades de propagación de la llama generalmente aumentan con el aumento de la tasa de stretch, excepto para el dosado 0.7 y, por tanto, las pendientes de las líneas $S_n - \alpha$ tienen valores positivos, que a su vez representan los valores negativos de la longitud de Markstein. Sin embargo, en el caso de altos contenido de H₂, como 80% representado en *Figura 7.25*, en las primeras etapas de la combustión la velocidad de propagación disminuye y luego aumenta con las inestabilidades producto del crecimiento de la celularidad en las etapas finales de la combustión y la longitud de Markstein da un valor negativo.

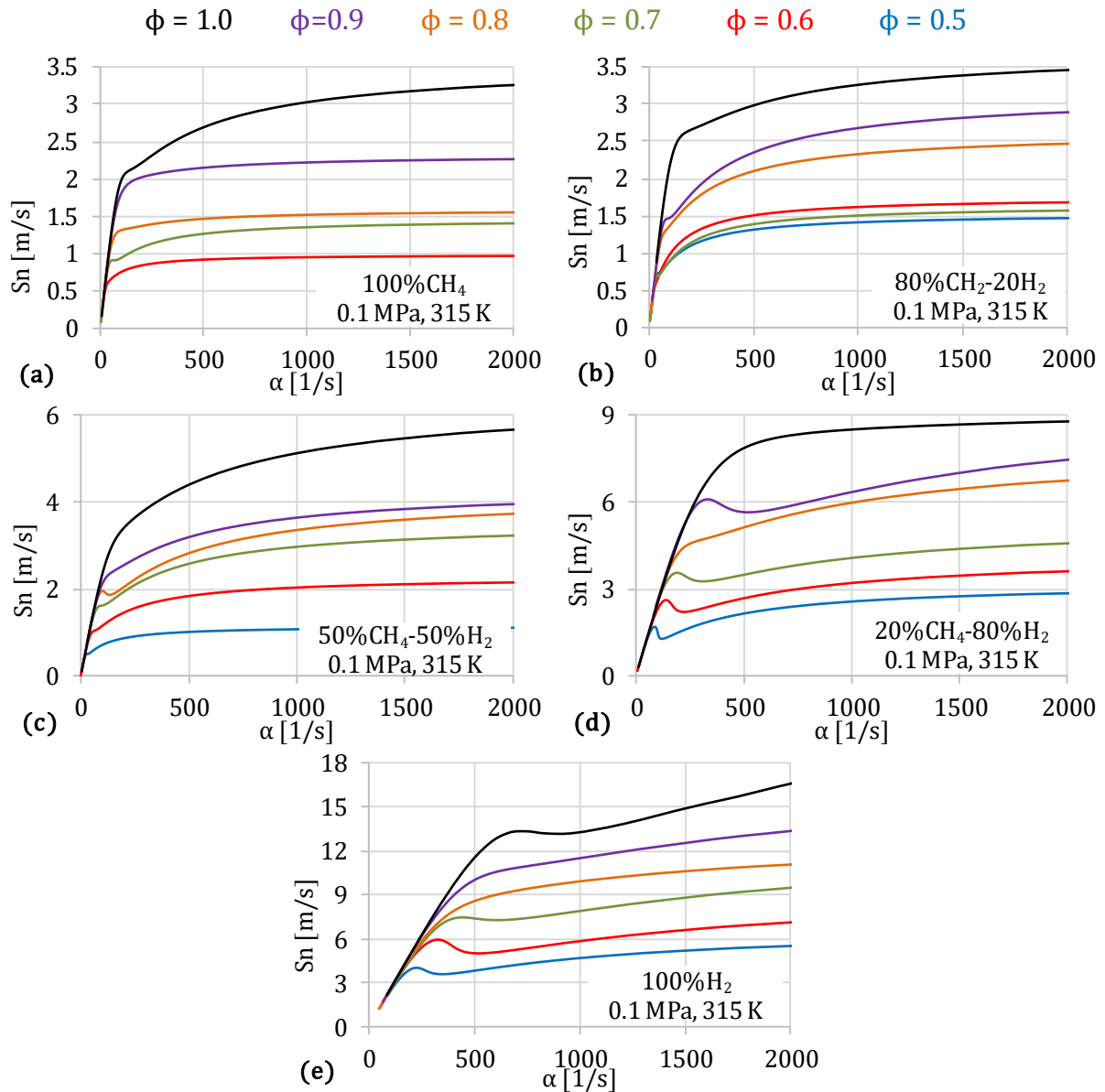


Figura 7.25: Velocidad de propagación de llama frente a la tasa de stretch para distintos porcentajes de H₂. (a) 0% H₂; (b) 20% H₂; (c) 50% H₂; (d) 80% H₂; (e) 100% H₂. Dosado $\phi=0.5 - 1.0$.

La Figura 7.26 muestra la velocidad de frente de llama S_n versus la tasa de stretch, α , para una mezcla de 80% H₂ a $\phi = 0.9$. Con este experimento se visualiza de forma clara el régimen laminar y el celular. Para las tasas altas de stretch (radios de llama pequeños), la velocidad de propagación de la llama es alta. A medida que la llama se expande, la velocidad de la llama se reduce ligeramente asociado a la disminución de la tasa de stretch. A medida que se reduce aún más el stretch, se alcanza un punto en el que la llama se vuelve inestable (radio crítico) y se desarrolla la celularidad, y esto se asocia con un aumento en la velocidad de la llama. El punto en el que la velocidad de la llama comienza a acelerarse rápidamente al disminuir el stretch define un **número de Peclet crítico** Pe_{α_c}

dado por el radio de la llama al inicio de la aceleración de la llama, normalizado por el espesor de la llama. A partir de este gráfico se puede calcular la velocidad de llama sin stretch S_l , a partir de un ajuste lineal de S_n en función de α en el rango de radios más grande posible, que excluye las regiones de llama celular y las afectadas por la chispa. La pendiente de la línea de regresión lineal proporciona el valor de $-L_b$, mientras que S_l es la ordenada en el origen. Los valores de S_l obtenidos a partir de los valores de la *Figura 7.25* se han representado en la *Figura 7.27*.

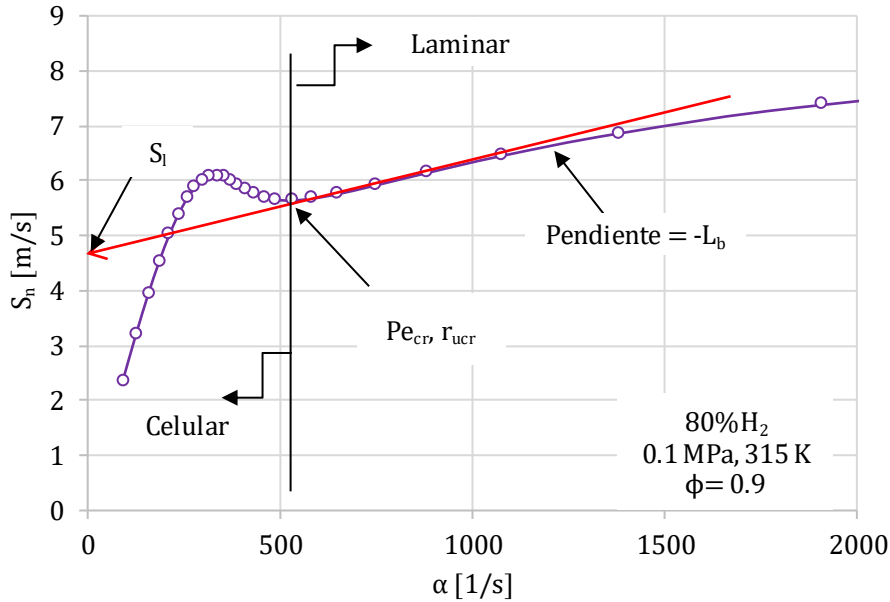


Figura 7.26: Velocidad propagación de llama frente a la tasa de stretch, para una mezcla con 80% H_2 con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.9$.

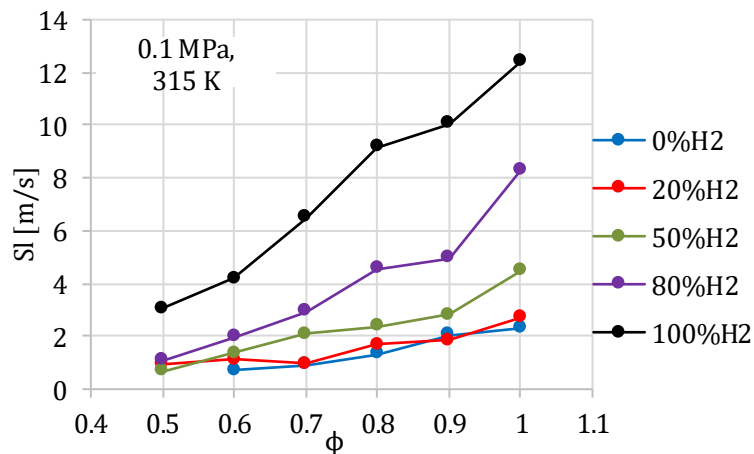


Figura 7.27: Velocidad propagación de llama libre de stretch para diferentes mezclas con contenido de H_2 con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.5 - 1.0$.

Velocidad de combustión libre de stretch u_l^0

Como se dijo en capítulos anteriores, la velocidad de combustión laminar **libre de stretch u_l^0** es el parámetro fundamental en la combustión y es la base para la velocidad de combustión turbulenta. Dicha velocidad se puede utilizar para validar los mecanismos de reacción química y es de importancia práctica en el diseño y optimización de motores de combustión interna.

La *Figura 7.28* muestra la velocidad de combustión laminar sin stretch u_l^0 frente al dosado para mezclas con diferente contenido de hidrógeno. Similar a la velocidad de propagación de la llama sin stretch, S_l , cuando la fracción de H₂ es inferior al 60%, con el aumento del dosado, las curvas muestran un patrón similar con el valor máximo de u_l^0 en el dosado estequiométrico. El valor máximo de la velocidad de combustión laminar sin stretch se presenta en la estequiometría, para todas las proporciones de hidrógeno en las mezclas. Se observa un aumento notable en la velocidad de combustión laminar sin stretch cuando la fracción de H₂ es mayor que 50%.

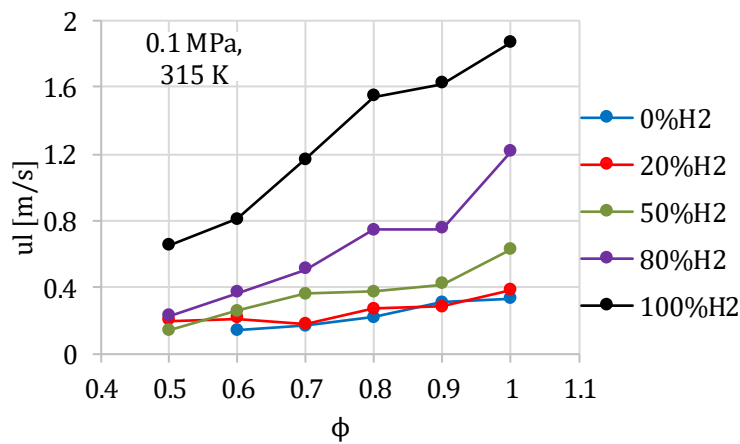


Figura 7.28: Velocidad de combustión laminar sin stretch frente al dosado para diferentes fracciones de hidrógeno.

Velocidad de combustión con stretch u_n y velocidad de combustión másica u_{nr}

Adicionalmente a los valores de las velocidades del frente con y sin stretch, y de combustión laminar, se han calculado los valores de las **velocidades de combustión con stretch u_n y de combustión másica u_{nr}** , de acuerdo con sus correspondientes definiciones introducidas en el Apartado 2.3.1.

El efecto de la tasa de stretch sobre la **velocidad de combustión con stretch u_n** , se muestra en la *Figura 7.29*, donde nuevamente se puede ver claramente que para todos los dosados en las diferentes mezclas con contenido de hidrógeno, la velocidad es elevada cuando la tasa de stretch es alta (al inicio de la combustión). A medida que se desarrolla y avanza la llama tanto la tasa de stretch como la velocidad disminuyen. En algunas condiciones, tiene un aumento ligero cuando aparece la celularidad asociada a las inestabilidades, visible para las proporciones de hidrógeno de 80 y 100%.

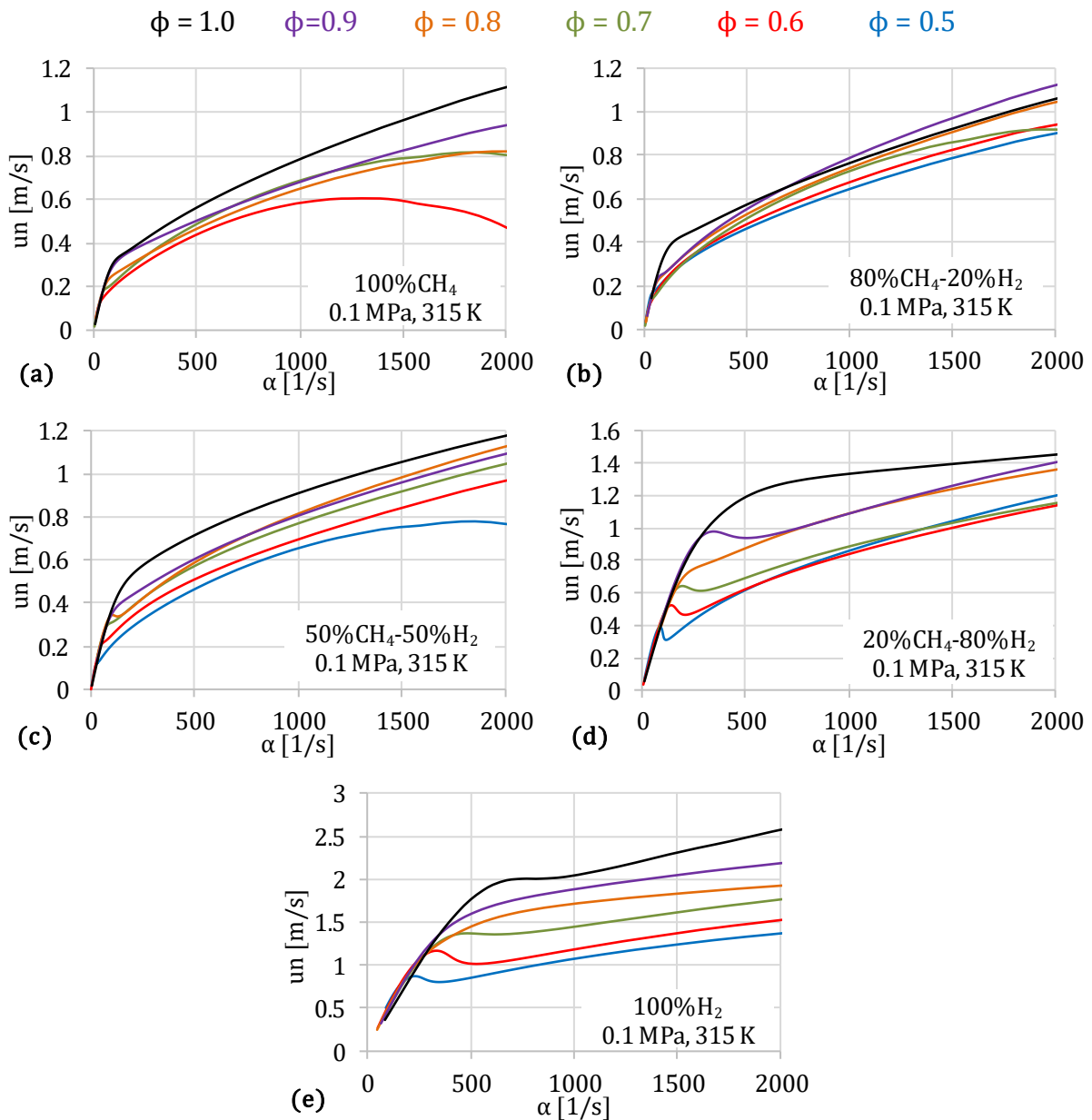


Figura 7.29: Variación de la velocidad de combustión con stretch u_n con la tasa de stretch para distintas mezclas con contenido de H₂ y dosados. (a) 0% H₂; (b) 20% H₂; (c) 50% H₂; (d) 80% H₂; (e) 100% H₂ y $\phi = 0.5 - 1.0$.

En contraste, se puede ver en la *Figura 7.30* que la **velocidad de combustión másica u_{nr}** tiene una dependencia con la tasa de stretch que es distinta según se trate de la zona de metano dominante (para la que u_{nr} disminuye con el aumento de la tasa de stretch, especialmente en las mezclas pobres) mientras que la dependencia con la tasa de stretch es creciente para para las mezclas de metano dominante. Esto subraya la importancia de considerar siempre definiciones inequívocas de las diferentes velocidades de combustión.

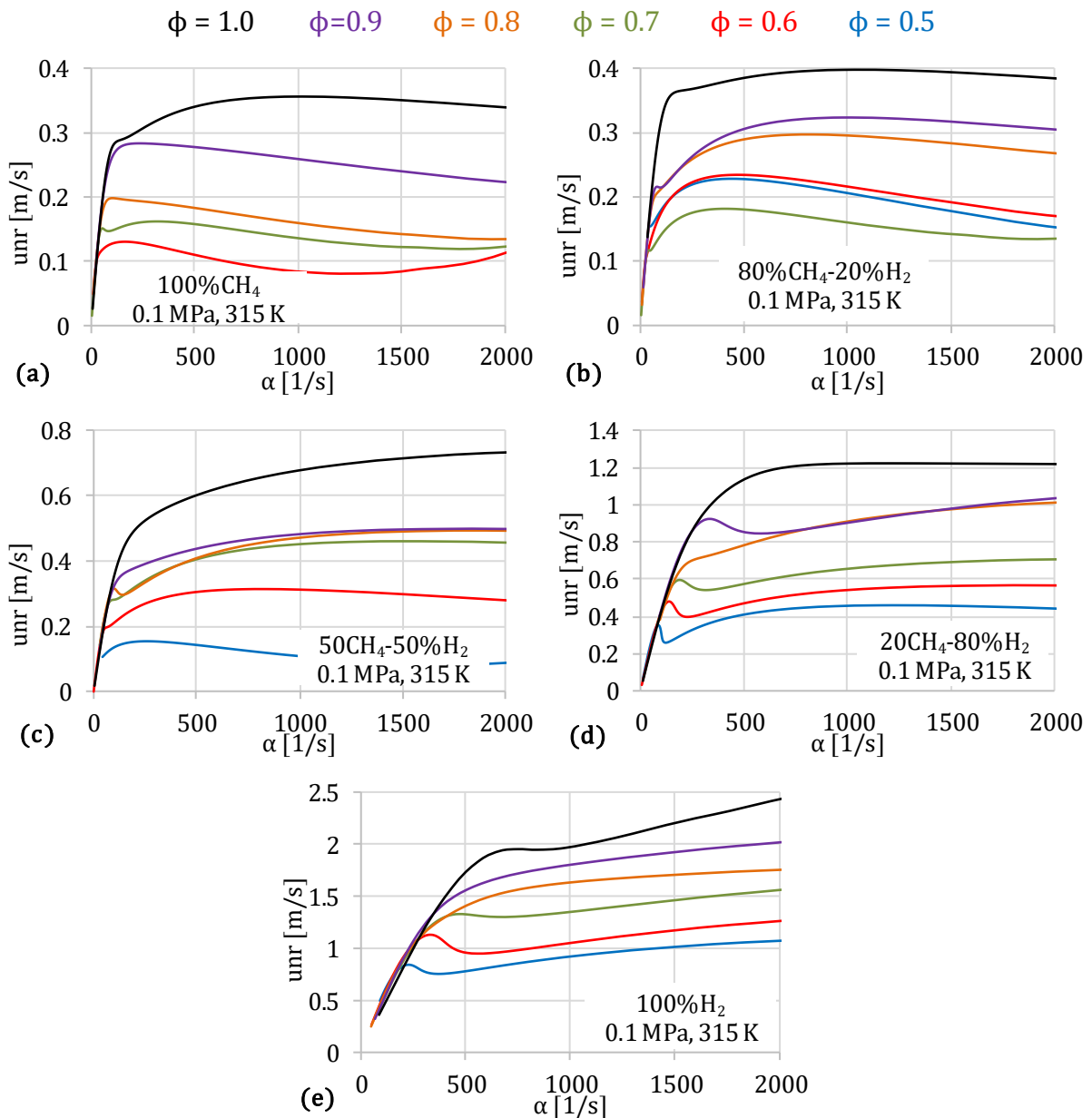


Figura 7.30: Variación de la velocidad de combustión másica con stretch u_{nr} , frente a la tasa de stretch para distintas mezclas con contenido de H₂. (a) 0% H₂; (b) 20% H₂; (c) 50% H₂; (d) 80% H₂; (5) 100% H₂ y dosado $\phi=0.5 - 1.0$.

Como se muestra en la *Figura 7.31*, la diferencia entre las dos últimas velocidades consideradas, la **velocidad de combustión laminar con stretch u_n** y la **velocidad de combustión por los productos quemados con stretch u_{nr}** , puede observarse claramente. La velocidad de combustión laminar con stretch u_n , que denota la tasa de arrastre de la mezcla, siempre aumenta a medida que aumenta la tasa de stretch. En contraste, la velocidad de combustión másica u_{nr} , que es la velocidad de combustión relacionada con la producción de gas no quemado, generalmente disminuye a medida que aumenta la tasa de stretch. La diferencia de velocidad ($u_n - u_{nr}$) aumenta con el aumento de la tasa de stretch, y esto se debe a la influencia del espesor de la llama en las velocidades de combustión. Se puede observar un gran valor de ($u_n - u_{nr}$) en radios pequeños que corresponden a una alta tasa de stretch, donde el espesor de la llama es del mismo orden que el radio de la llama. Como indica la definición, un valor alto de velocidad de stretch corresponde a un radio de llama pequeño; por tanto, la influencia del grosor de la llama se vuelve grande. Cuando la tasa de stretch llega a cero, el radio de la llama se vuelve infinito; por tanto, el efecto del grosor de la llama puede despreciarse y u_n y u_{nr} obtendrán el mismo valor, u_l , la velocidad de combustión laminar sin stretch. Para la mezcla mostrada de 100%CH₄ con condición estequiométrica ($\phi = 1.0$) hay una diferencia grande entre u_n y u_{nr} .

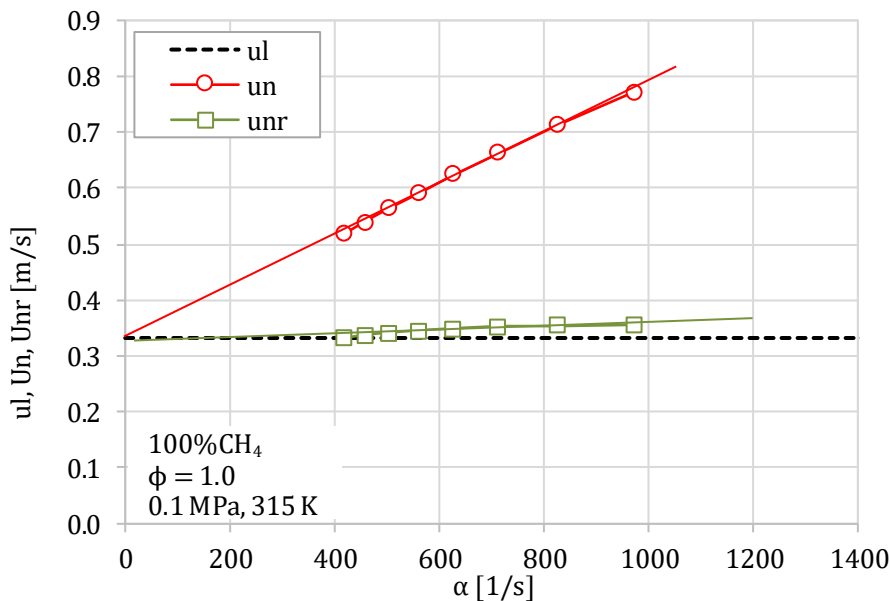


Figura 7.31: Velocidad de combustión sin stretch u_l , velocidad de combustión con stretch u_n , y velocidad de combustión másica u_{nr} frente a la tasa de stretch.

Longitud de Markstein otros parámetros de la transición a celularidad

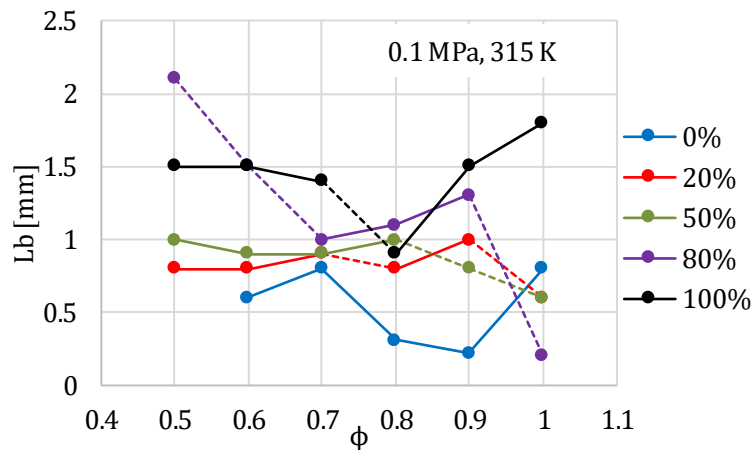


Figura 7.32: Longitud de Markstein frente al dosado para diferentes mezclas con contenido de H₂.

La Figura 7.32 muestra las longitudes de Markstein (L_b) frente al dosado para mezclas con diferente contenido de hidrógeno. Según los datos encontrados en la bibliografía [43][142], para todas las mezclas de metano–hidrógeno/aire, la longitud de Markstein muestra una tendencia de aumento con el aumento del dosado, y el comportamiento se vuelve más notable para dosados altos. Sin embargo, en este estudio las tendencias no son claras, las longitudes de Markstein de las llamas metano–hidrógeno/aire con un gran contenido de hidrógeno y las llamas de hidrógeno–aire muestran un aumento lento con el aumento del dosado, y la curva de $L_b - \phi$ tiende a ser plana en una región de mezcla rica. Esto sugiere que la estabilidad del frente de llama se mejora con el aumento del dosado, pero la adición de hidrógeno a las mezclas de metano–aire disminuirá la estabilidad del frente de llama. El aumento de la longitud de Markstein es indicativo tanto de una influencia creciente del stretch en la velocidad de combustión como de una propensión decreciente a la inestabilidad de la llama. Por lo tanto, el resultado implica que las llamas pueden ser menos inestables con un aumento en el dosado.

Como se dijo en apartados anteriores, las **longitudes de Markstein L_b** calculadas para las mezclas de metano–hidrógeno, coinciden en tendencia para algunos dosados, pero no en valores. Este comportamiento se debe a que la longitud de Markstein es directamente afectada por el rango de datos que se tomen para el cálculo de S_l . En la Figura 7.33, se muestran los gráficos de S_l y L_b para una mezcla de metano/aire, en la que se puede ver la variación que tienen estos parámetros según el rango de radio que se tome,

resaltando lo que se comentó a inicios de apartado 7.2, que en estudio se tomaron diferentes rangos según la mezcla y el dosado, de forma que se desprecia la parte afectada por el salto de la chispa, ni el aumento de presión.

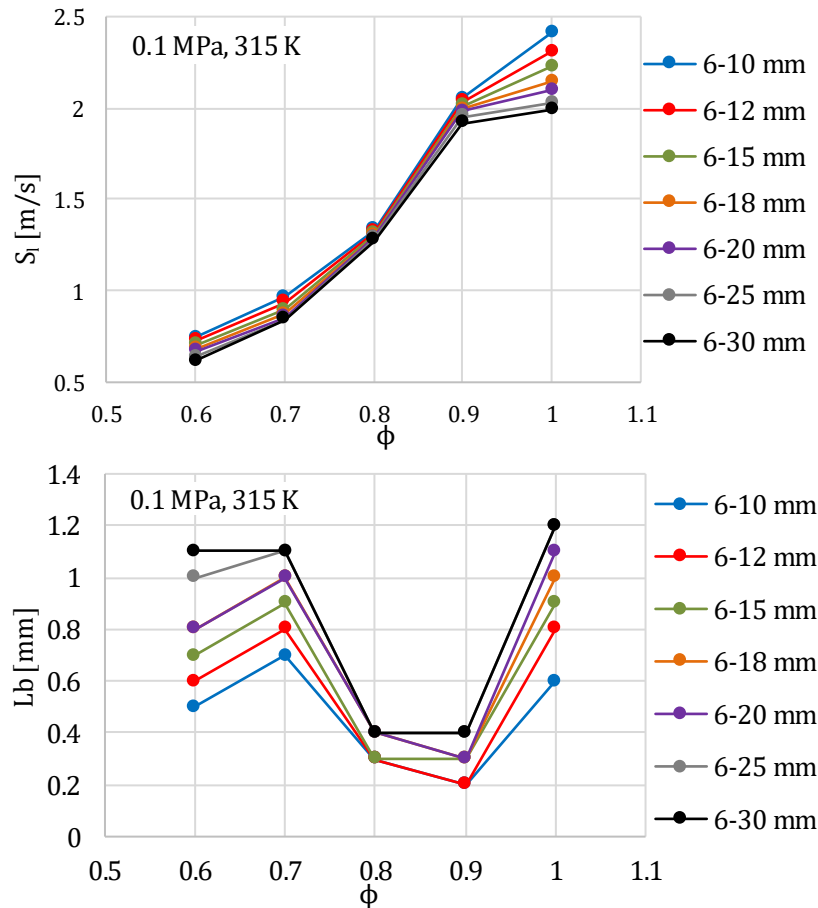


Figura 7.33: Velocidad de propagación de llama sin stretch S_f y longitud de Markstein L_b calculadas usando diferentes rangos del radio del frente.

En la *Figura 7.34* se muestran los valores del **número de Zel'dovich, Ze** , y su evolución con el dosado relativo para las distintas proporciones de hidrógeno en las mezclas. Se puede ver que dicho número disminuye con el aumento del dosado y para todas las mezclas el valor mínimo se alcanza en la mezcla estequiométrica, donde se tiene una temperatura de mezcla quemada mayor. Además, se puede ver que para mezclas con contenido de hidrógeno menor o igual al 20% el número de Zel'dovich prácticamente no varía, cuando las mezclas tienen un 50% de hidrógeno este número aumenta significativamente y es en este porcentaje donde se obtuvieron los valores más altos en todos los dosados, y para las mezclas ricas en hidrógeno Zel'dovich vuelve a disminuir.

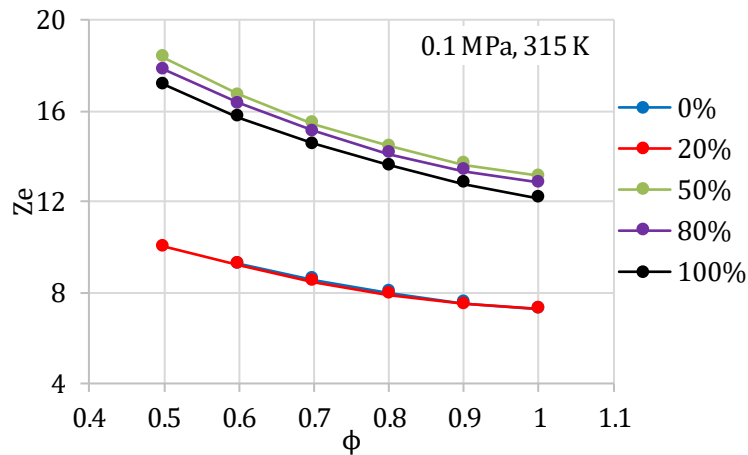


Figura 7.34: Número de Zel'dovich frente al dosado para mezclas con diferente contenido de H₂.

El **número de Karlovitz Ka** es un parámetro crítico para determinar las características de combustión turbulenta, es decir el límite de la estructura de la llama con velocidad laminar, e inicio de la velocidad de combustión turbulenta. A partir de su concepto, como relación entre las inversas de los tiempos de la inestabilidad y del tiempo asociado al frente de llama, se puede escribir como $Ka = \alpha_{cr} \delta_{lcr} / u_l$, donde aparece la tasa de stretch crítica α_{cr} multiplicada por el espesor de llama crítico, δ_{cr} , y dividido por la velocidad de combustión laminar.

Los **valores de Ka** se han representado en la Figura 7.35, observándose que tienen una **tendencia decreciente con el incremento del dosado**, más acusada a medida que disminuye la proporción de hidrógeno en las mezclas.

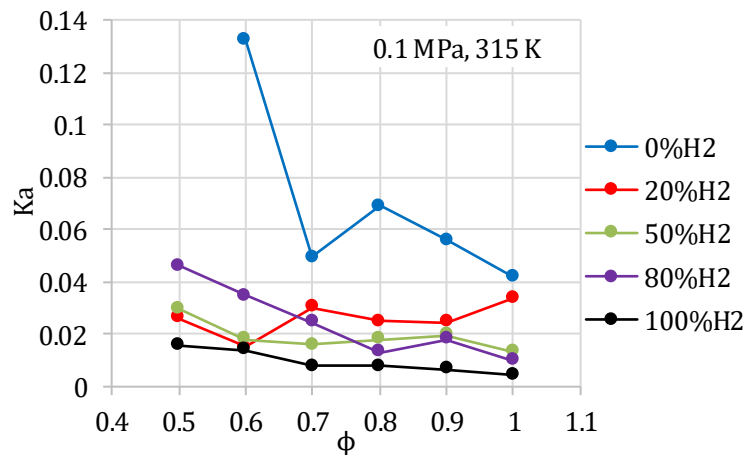


Figura 7.35: Número de Karlovitz para diferentes mezclas con contenido de H₂ a diferentes dosados.

Como se mencionó en capítulos atrás, existe un punto crítico en una mezcla de metano–hidrógeno/aire que define el instante exacto donde una llama pasa de ser laminar a desarrollar celularidad e inestabilidades. Dependiendo de la mezcla y las condiciones iniciales, este punto se localiza en las primeras etapas, en etapas intermedias o finalizando la combustión, asociado a un cierto valor del radio del frente de llama, denominado radio crítico.

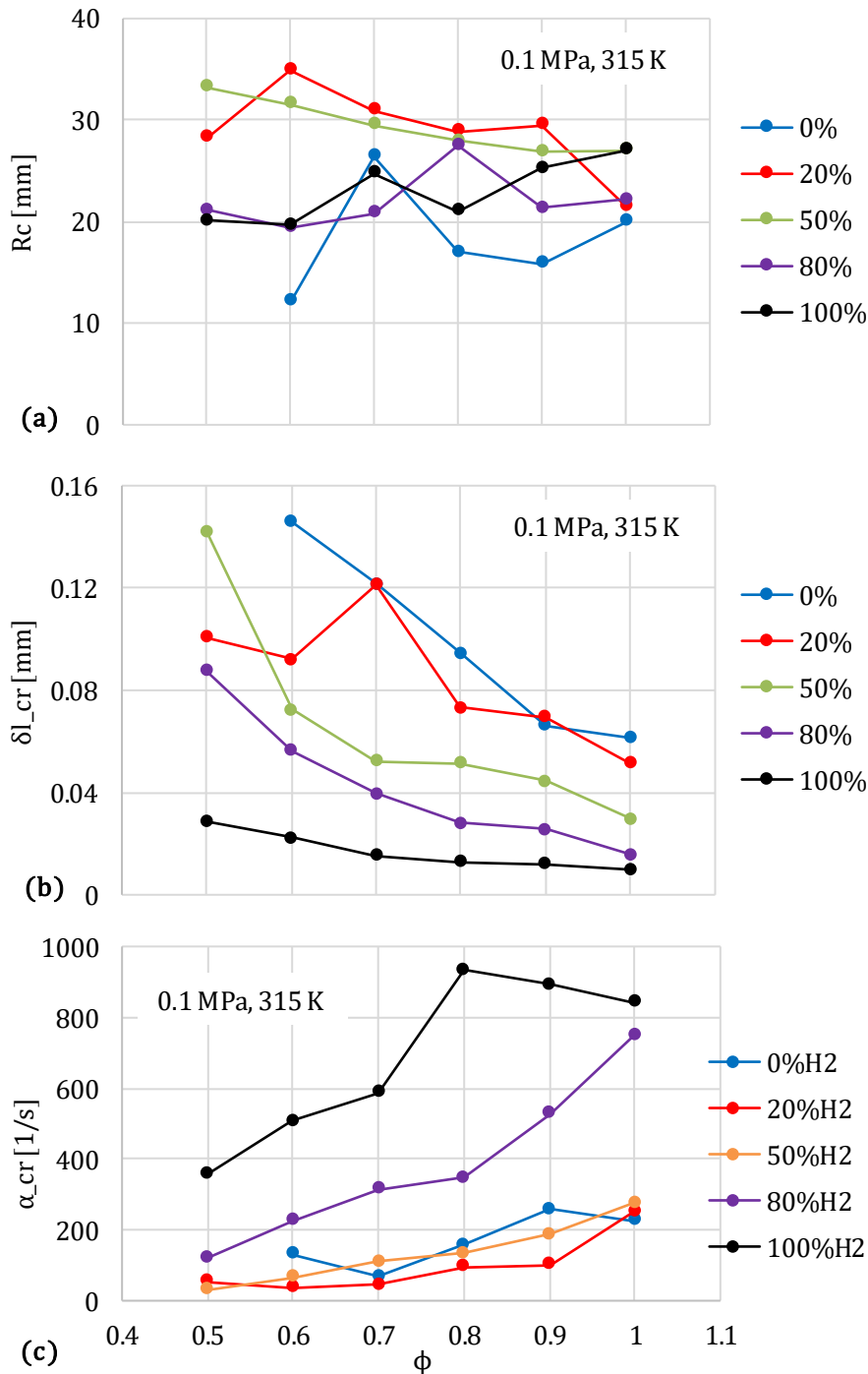


Figura 7.36: (a) Radio de llama crítica, (b) espesor de llama crítica, (c) tasa de stretch crítica en función del dosados para mezclas con diferente contenido de hidrógeno.

En la *Figura 7.36(a)* se presenta el **radio de llama crítico**, para las distintas mezclas ensayadas. Se puede ver que tiene una tendencia general decreciente a medida que aumenta el dosado, aunque para la mezcla de 100%H₂ existe un sutil aumento con el aumento del dosado.

En la *Figura 7.36(b)* se muestra el espesor de llama crítico, asociado al valor del radio crítico, el cual muestra también una tendencia decreciente con el aumento del dosado, consecuencia directa del aumento de la velocidad de combustión con el dosado.

Finalmente, en la *Figura 7.36(c)* se representan las curvas de la tasa de stretch crítica, valor correspondiente a cuando se alcanza el valor de radio crítico. En el gráfico se puede ver que este parámetro aumenta con el aumento del dosado y su razón está en que al aumentar el dosado el radio de llama crítico se alcanza a etapas más tempranas de la combustión, donde las tasas de stretch son altas, por lo que al ir aumentando el dosado, el radio crítico (r_{cr}) disminuye y la tasa de stretch crítica (α_{cr}) aumenta.

7.4 Comparación con los resultados de velocidad de otros autores

Para validar la metodología para la determinación de la velocidad de combustión laminar basada en el seguimiento del radio del frente de llama (registrado a través de la técnica Schlieren), se han comparado los resultados de dicha velocidad con los resultados obtenidos por otros autores citados ya en capítulos anteriores, obtenidos con la misma técnica o por otras técnicas ya detalladas.

Las *Figura 7.37*, *Figura 7.39*, *Figura 7.38* y *Figura 7.40*, contienen los valores de las velocidades de combustión laminar sin stretch de la mezcla de metano–hidrógeno/aire, tanto u_l^0 (**método de las imágenes, círculo y línea negra**) como la u_l^p (**método de las presiones, círculo y línea roja**), obtenidas en la tesis, así como otros resultados encontrados en la literatura. La comparación muestra que los resultados del presente estudio concuerdan bien con los de la literatura tanto en llamas de metano/aire (*Figura 7.37*), las de hidrógeno-metano/aire (*Figura 7.39*), como en llamas de hidrógeno/aire (*Figura 7.38*). Además, se obtienen valores muy cercanos a los obtenidos en la bomba de combustión esférica del laboratorio de motores por Reyes et al [45].

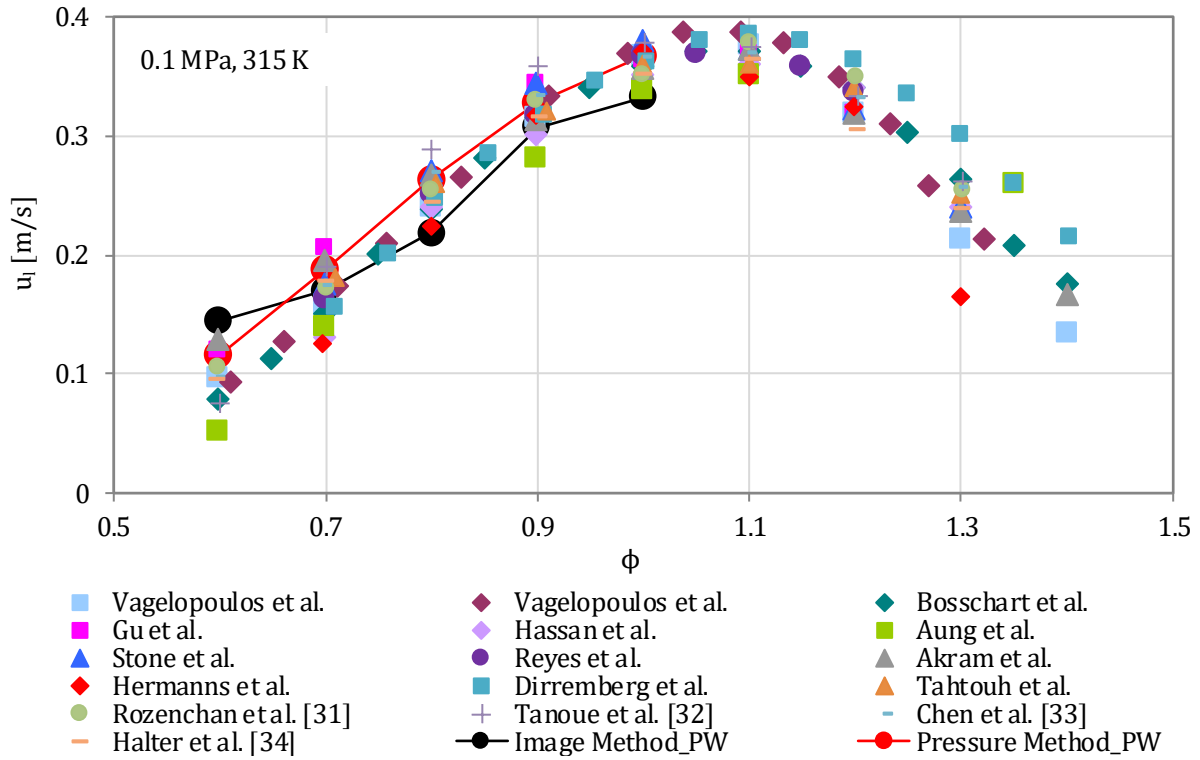


Figura 7.37: Comparación de la velocidad de combustión laminar para una mezcla de 100%CH₄ - aire para diferentes dosados.

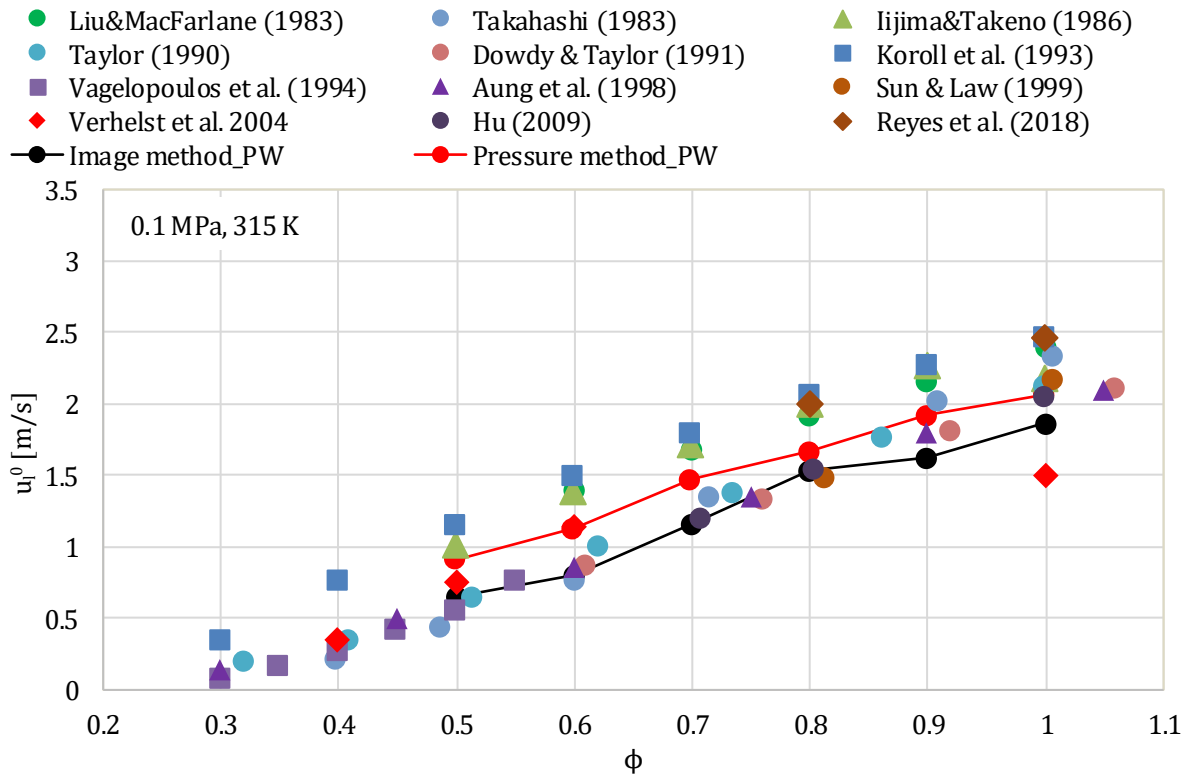


Figura 7.38: Comparación de la velocidad de combustión laminar para una mezcla de 100%H₂ - aire para diferentes dosados.

RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE H₂ - CH₄

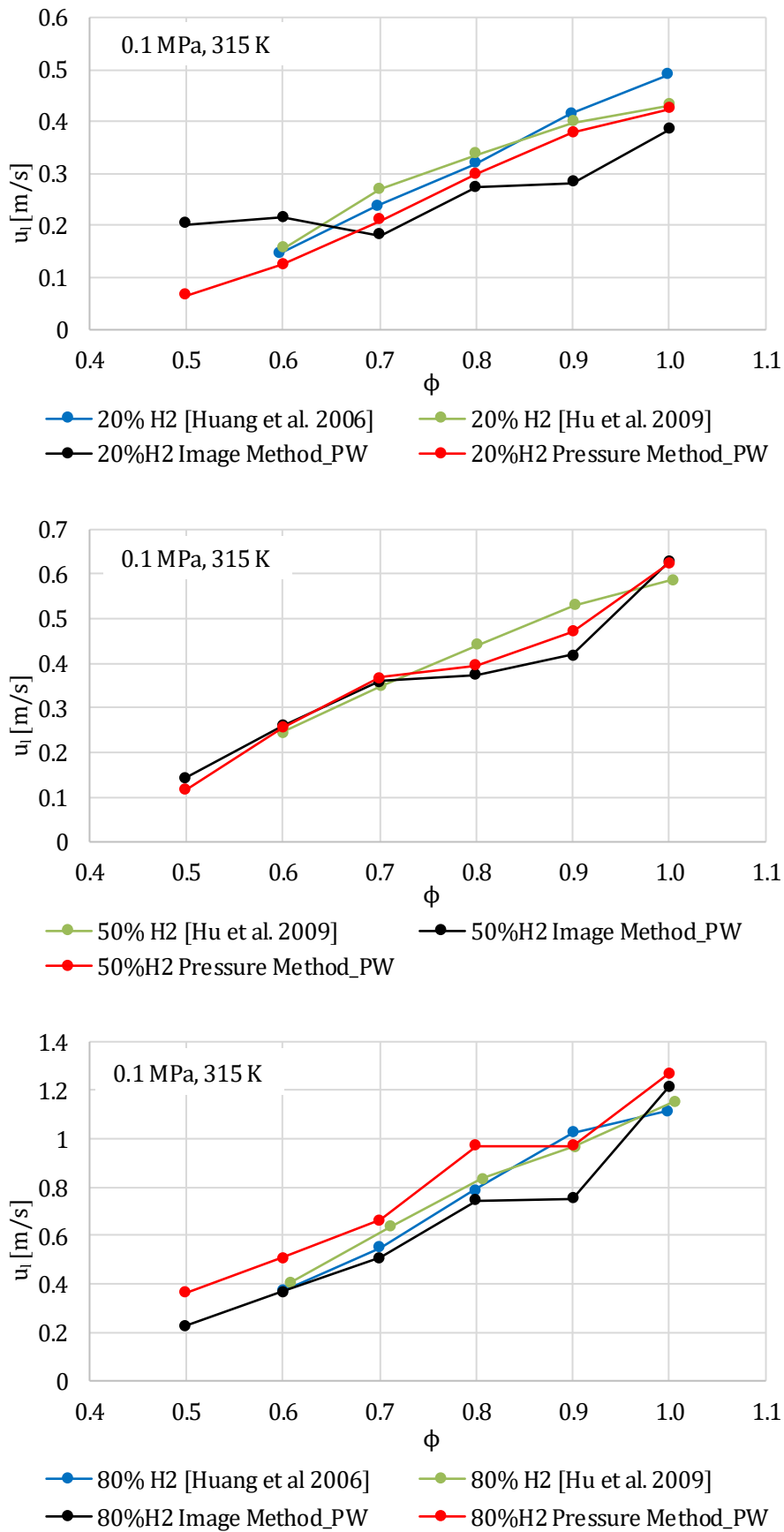


Figura 7.39: Comparación de la velocidad de combustión laminar para mezclas de 20%, 50 y 80% H₂ - aire para diferentes dosados.

Finalmente, la velocidad de combustión laminar u_l en función de la fracción de hidrógeno en mezclas de combustibles a dosado ($\phi=0.8$) se representa en la *Figura 7.40*. Como ya se indicó en el Apartado 7.3.1, los resultados muestran claramente que los valores de la velocidad de combustión laminar de las mezclas no se ajustan a los valores que podrían estimarse a partir de las proporciones molares. Esto implica la presencia de fuertes efectos no lineales en la cinética química y se refleja en los valores de la velocidad de combustión laminar sin stretch, menores que la interpolación lineal.

Como se muestra en la *Figura 7.40*, para este dosado 0.8, es posible identificar tres regímenes en la propagación de la llama híbrida dependiendo de la fracción molar de hidrógeno en las mezclas de combustible. En el caso de la fracción de hidrógeno inferior al 50%, es el régimen de combustión dominado por metano. Aquí se presenta un aumento lineal y leve en la velocidad de combustión laminar con el aumento de la adición de hidrógeno. En el caso de una fracción de hidrógeno superior al 80%, es el régimen de combustión de hidrógeno inhibida por metano o hidrógeno dominante. Aquí se presenta un aumento lineal y brusco de la velocidad de combustión laminar con el aumento de la fracción de hidrógeno en las mezclas de combustible. En el caso de que las fracciones de hidrógeno estén entre el 50% y el 80%, es el régimen de transición. A partir del 80% de hidrógeno, las velocidades de combustión laminar aumentan fuertemente con el aumento de la fracción de hidrógeno en las mezclas de combustible.

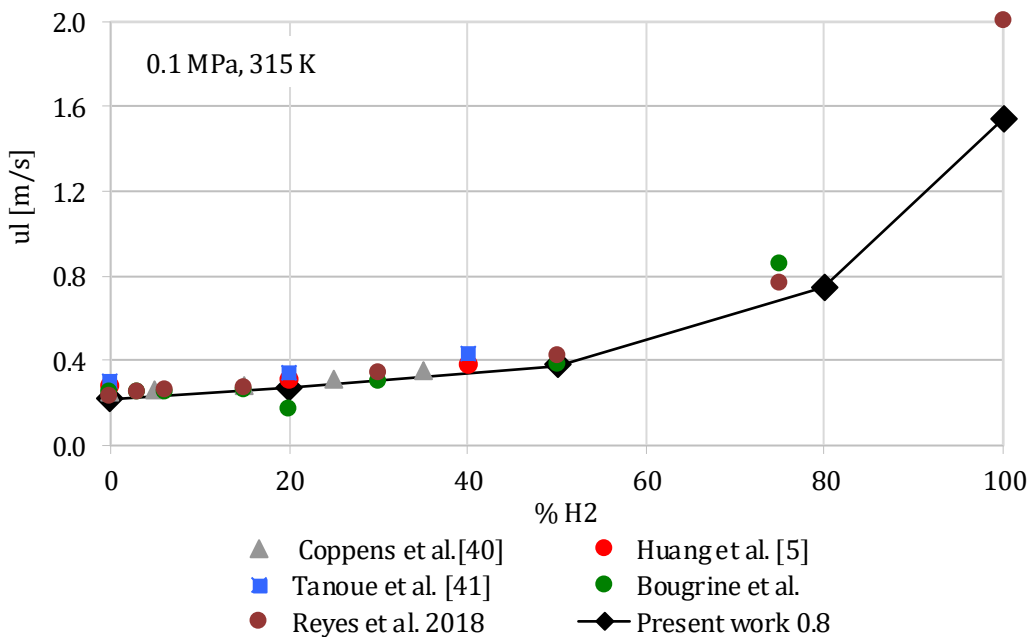


Figura 7.40: Comparación de la velocidad de combustión laminar para diferentes fracciones de H₂ - aire para un dosado de $\phi=0.8$.

7.5 Estudio de las inestabilidades para mezclas de hidrógeno-metano/aire

En este apartado se va a realizar un estudio de los parámetros que caracterizan las inestabilidades generadas durante el proceso de combustión. Estos parámetros han sido calculados a través del modelo de diagnóstico, a partir de la evolución de la presión en el interior de la bomba de combustión. Para tratar de clarificar mejor los resultados, estos se presentan de dos formas: usando el contenido en hidrógeno de las mezclas como variable independiente y el dosado como parámetro, y viceversa, con el dosado como variable independiente y el contenido en hidrógeno como parámetro.

7.5.1 En función del contenido de hidrógeno en la mezcla

Las dos fuentes principales de inestabilidad intrínseca en llamas premezcladas son causadas por los efectos hidrodinámicos, conocidos como inestabilidad de Darrieus-Landau y efectos termodifusivos. Los efectos termodifusivos generalmente tienen una influencia estabilizadora sobre la llama. Se han caracterizado por el número de Lewis, ya que dependen de la difusión relativa de las especies y del calor en la llama. Para una llama que se propaga libremente, la inestabilidad hidrodinámica se origina en la expansión térmica de los gases. Las perturbaciones de todas las longitudes de onda crecen, pero aquellas con longitud de onda corta crecen más rápidamente que aquellas con longitud de onda larga. Tanto los experimentos como las simulaciones numéricas [43] han informado del desarrollo de inestabilidad en forma de agrietamiento en la llama como precursor de una estructura celular. Una vez que se ha establecido la estructura celular, la llama se acelera debido al aumento del área de la superficie de la llama, y la inestabilidad conduce a un régimen similar en el que las células continúan creciendo y dividiéndose durante el crecimiento de la llama. La celularidad es una interacción compleja de inestabilidades termodifusivas e hidrodinámicas. El uso de la longitud de Markstein como medida de la susceptibilidad a la inestabilidad, supera la confusión entre los dos tipos de inestabilidad ya que es un indicador del efecto, no de la causa.

Inestabilidades hidrodinámicas

Como se dijo en el ítem anterior las inestabilidades hidrodinámicas también son conocidas como inestabilidades de Darrieus-Landau y quedan cuantificadas por su tasa

de crecimiento $\omega = S_L * k * \omega_{DL}$ (ver Apartado 2.3.2.2). En la *Figura 7.41(b)* se muestra el valor del **parámetro adimensional de Darrieus-Landau ω_{DL}** , función sólo (expresión [20]) de la relación de expansión σ , *Figura 7.41(a)*, con una dependencia moderada con el contenido de hidrógeno (esta tendencia concuerda con la obtenida por Okafor et al. [182]), pero con una dependencia mayor con respecto al dosado. En este gráfico se puede ver que el parámetro de crecimiento disminuye poco, pero casi linealmente con el contenido de hidrógeno para mezclas con dosados próximos al estequiométrico, mientras que, en las mezclas más pobres, el parámetro de crecimiento se mantiene casi constante.

La tasa de crecimiento de inestabilidades en la llama depende de tres factores importantes que son: la difusividad térmica (tiene un efecto estabilizante y por ende retarda el crecimiento), la difusividad molecular (que tiene un efecto diferente según el número de Lewis efectivo) y de la difusividad viscosa (que se presenta por medio del número de Pr).

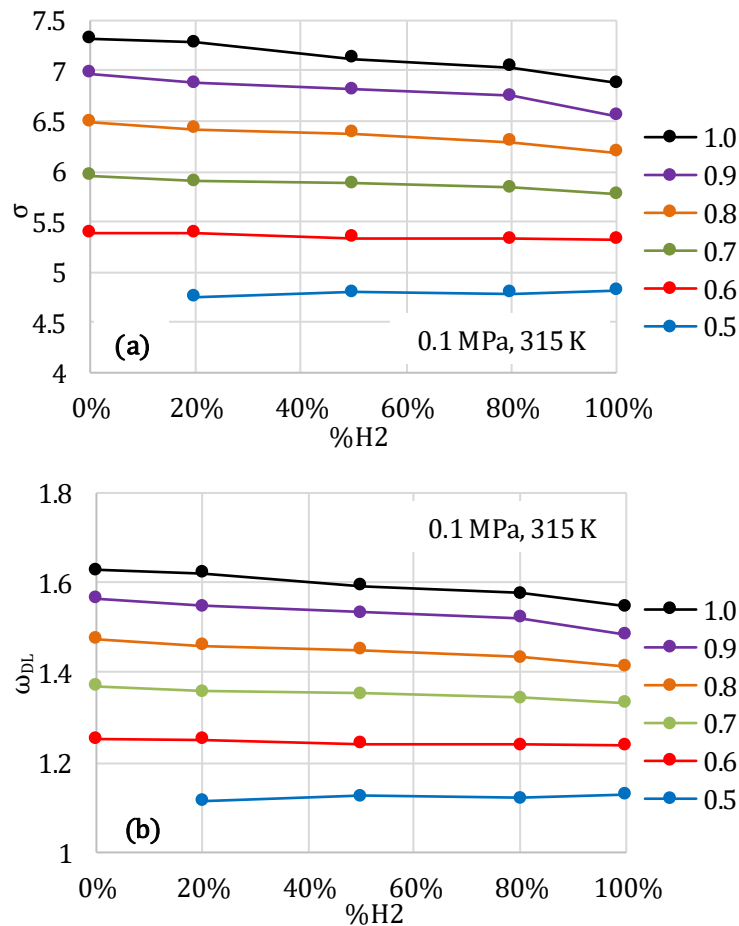


Figura 7.41: Dependencia con la proporción de hidrógeno de (a) Relación de expansión σ y (b) Parámetro ω_{DL} de la tasa de crecimiento de Darrieus-Landau, con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosado $\phi = 0.5 - 1.0$.

La difusividad molecular depende del número de Lewis y, en función del signo que adopte éste, tendrá un efecto retardante o amplificante de la tasa de crecimiento de la llama. En primer lugar, con el número $Le_{eff} < 1$ la difusividad molecular adquiere un símbolo positivo en la ecuación, por lo que la inestabilidad se crea al principio. Esta es una característica de las combustiones de hidrocarburos con dosados ricos o hidrógeno con dosados pobres. En segundo lugar, con $Le_{eff} > 1$, la difusividad molecular tiene un efecto negativo sobre la tasa de crecimiento, estabilizando la llama, siendo estable al principio. Es importante destacar que, para este último caso, cuando el radio alcanza el radio crítico, la llama comienza a ser celular. Esta característica es habitual en combustiones de hidrocarburos a dosados pobres o hidrógenos a dosados ricos [76]. Esto se corrobora con los datos de número de Lewis que se presentan en figuras posteriores.

Las **inestabilidades hidrodinámicas se caracterizan** principalmente por el **número de Markstein** ($Ma = L_b / \delta_{cr}$) y el **número de Peclet** ($Pe = r_{cr} / \delta_{cr}$). El número de Markstein, a través de la longitud de Markstein, expresa cuantitativamente la sensibilidad de la velocidad de combustión laminar a la tasa de stretch y está directamente relacionado con el inicio de la inestabilidad de llama debido a los efectos termodifusivos y es una función del número de Zel'dovich y del número de Lewis.

La *Figura 7.42*, muestra el **número de Markstein** para las mezclas en función del contenido de hidrógeno de cada mezcla para los diferentes dosados. El número de Markstein se calcula a partir de la **longitud de Markstein**, la cual se determina a partir de la correlación lineal de las velocidades de propagación del frente de llama en función de la tasa de stretch. Es decir, que debe ser considerado un resultado experimental, y como tal sujeto a las imprecisiones experimentales. Además, es preciso estimar de forma fiable el espesor del frente de llama δ y considerar el valor δ_{cr} que corresponde a las condiciones en las que la inestabilidad del frente de llama es evidente. En la *Figura 7.42*, puede observarse un aumento en el número de Markstein a medida que se incrementa el porcentaje de hidrógeno presente en la mezcla combustible. Esta tendencia se ve muy clara para porcentajes de hidrógeno superiores al 60% donde el aumento es considerablemente alto, mientras que para mezclas por debajo del 60%, el aumento es sutilmente lineal tanto con el aumento del dosado, como con la fracción de hidrógeno. Esto además indica que las llamas por encima del 60% son potencialmente más

inestables. En todos los casos se han obtenido valores positivos de la longitud de Markstein.

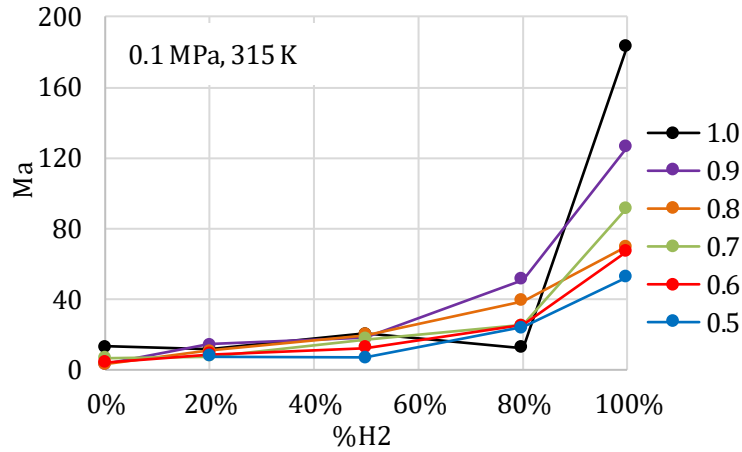


Figura 7.42: Número de Markstein en función del contenido de hidrógeno, para distintos dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.

En la Figura 7.43 se muestra como varía el espesor del frente de llama crítico δ_{cr} en función del contenido de hidrógeno, para los diversos dosados en cada mezcla. Los valores del espesor del frente de llama son resultados calculados a partir de la difusividad térmica y la velocidad de combustión. En la figura se puede ver que a medida que aumenta el dosado y el contenido de hidrógeno, disminuye el espesor del frente de llama, es decir que se hace más delgado.

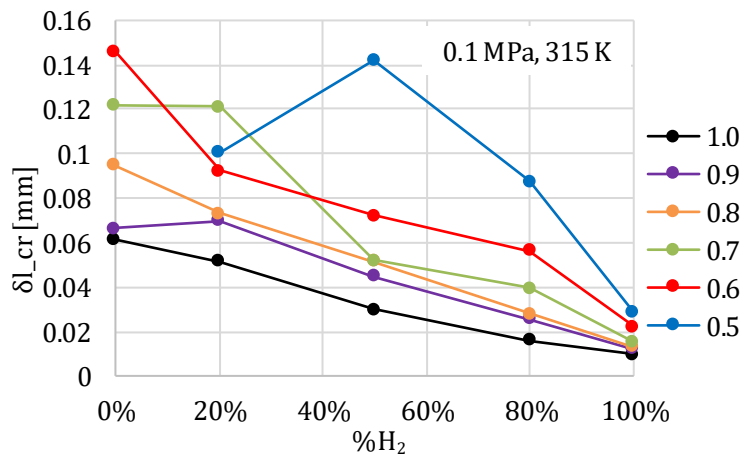


Figura 7.43: Dependencia del espesor de frente de llama con el contenido de hidrógeno para mezclas con diferentes dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones iniciales 0.1 MPa y 315 K.

El **número de Peclet crítico** viene definido por la relación entre el **radio crítico** r_{cr} y el **espesor de llama crítico** δ_{cr} . El radio crítico se determina a partir de las imágenes de crecimiento del frente de llama, considerando dónde aparece el aspecto celular del

frente, y por ello sujeto a incertidumbres. En la *Figura 7.44*, se muestra el **número de Peclet crítico para diferentes mezclas de hidrógeno-metano/aire** a diferentes dosados, en la que se puede ver que el número de Pe crítico tiene un aumento significativo para mezclas con contenido de hidrógeno alto y esto se debe a que, al aumentar el hidrógeno en la mezcla, aumenta la velocidad, lo que hace que el espesor de llama sea más delgado (ver *Figura 7.43*). Para mezclas con contenido de hidrógeno menor de 50%, el número crítico se mantiene prácticamente constante. Sería deseable haber obtenido un valor más universal, para poder establecer un criterio cuantitativo para la transición a la celularidad, basada en el valor crítico del número de Peclet.

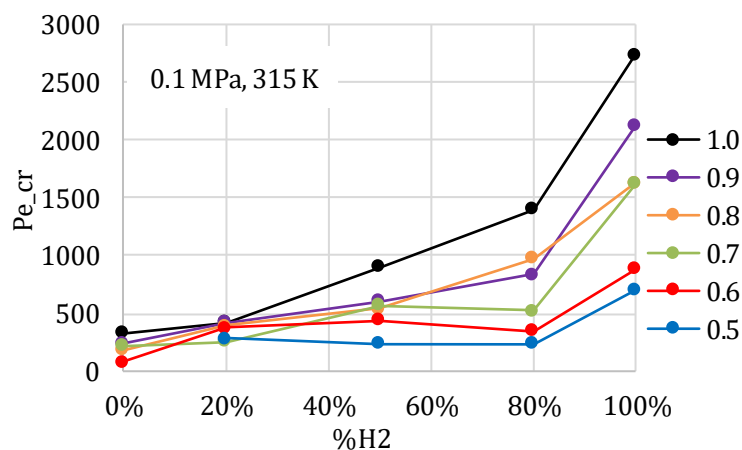


Figura 7.44: Número de Peclet crítico en función del contenido de hidrógeno para mezclas con diferentes dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.

Inestabilidades termodifusivas

El número de Lewis ($Le = \alpha_{mezcla}/D_{defecto}$) es el que caracteriza principalmente las inestabilidades termodifusivas, por ello es uno de los números adimensionales más importantes en el estudio de la velocidad de un frente de llama. El cálculo de este número se ha realizado por medio del método de las presiones, pues es en este método donde se utiliza toda la cinética de reacción de la combustión y se pueden calcular las variables que dependen de ella. Como ya se ha dicho, para saber si una llama es estable o no, hay que mirar si el número de Lewis es mayor (estable) o menor a la unidad (inestable).

La *Figura 7.45* muestra que para las mezclas de metano y con un 20%H₂ el número de Lewis es mayor que la unidad, aumentando ligeramente para todos los dosados, lo que indica que se trata de llamas estables. Sin embargo, para mezclas con 50%H₂ el número

de Lewis disminuye fuertemente por debajo de la unidad, y luego aumenta a medida que aumenta el contenido de hidrógeno, pero sigue siendo menor de la unidad, sugiriendo un carácter inestable de las mezclas. La única excepción es la mezcla estequiométrica de hidrógeno puro, cuyo número de Lewis vuelve a ser mayor que la unidad. Esta tendencia es similar a la obtenida por Okafor et al. [149]

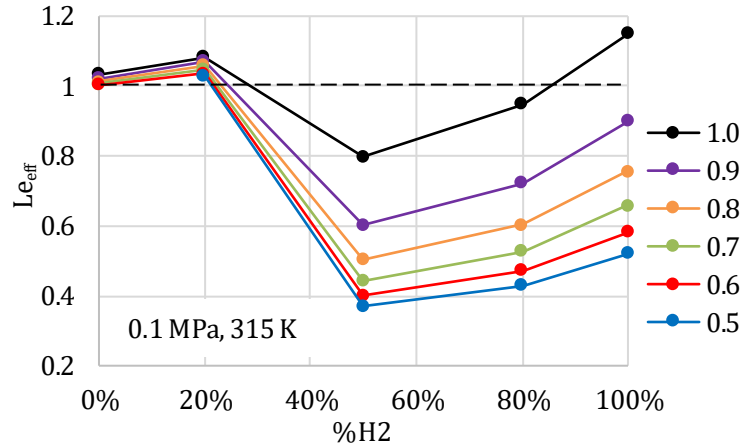


Figura 7.45: Número de Lewis en función del contenido de hidrógeno para mezclas con diferentes dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones de iniciales de 0.1 MPa y 315 K.

7.5.2 En función del dosado relativo

En los dos apartados siguientes se presenta el efecto que tiene la variación del dosado en cada una de las mezclas en estudio.

Inestabilidades hidrodinámicas

En la *Figura 7.46* se muestran los valores de la **relación de expansión σ** y del **parámetro adimensional ω_{DL}** , en función del dosado para cada mezcla hidrógeno-metano. La relación de expansión σ disminuye a medida que se reduce el dosado, y para cada valor de éste, se reduce al aumentar la proporción de hidrógeno en las mezclas. Por su parte, el parámetro ω_{DL} sólo depende de σ (de acuerdo a la expresión [20]), siendo decreciente al disminuir σ , como se puede ver en la parte inferior de la misma figura. En definitiva, el **parámetro ω_{DL} disminuye al disminuir tanto el dosado como la proporción de hidrógeno en las mezclas**. La influencia de este contenido de hidrógeno es menor a medida que el dosado se reduce y de hecho, los valores de ω_{DL} son prácticamente coincidentes para dosados de 0,5 (confróntese la *Figura 7.41*). Es importante señalar esto, ya que, por otro lado, las mezclas pobres con contenido elevado

de hidrógeno son inestables, mientras que sucede lo contrario para las de alto contenido en metano. Es decir, el análisis de inestabilidad hidrodinámica de Darrieus-Landau no explica por sí solo que una mezcla combustible sea inestable o estable, siendo necesario considerar la contribución de las inestabilidades termodifusivas.

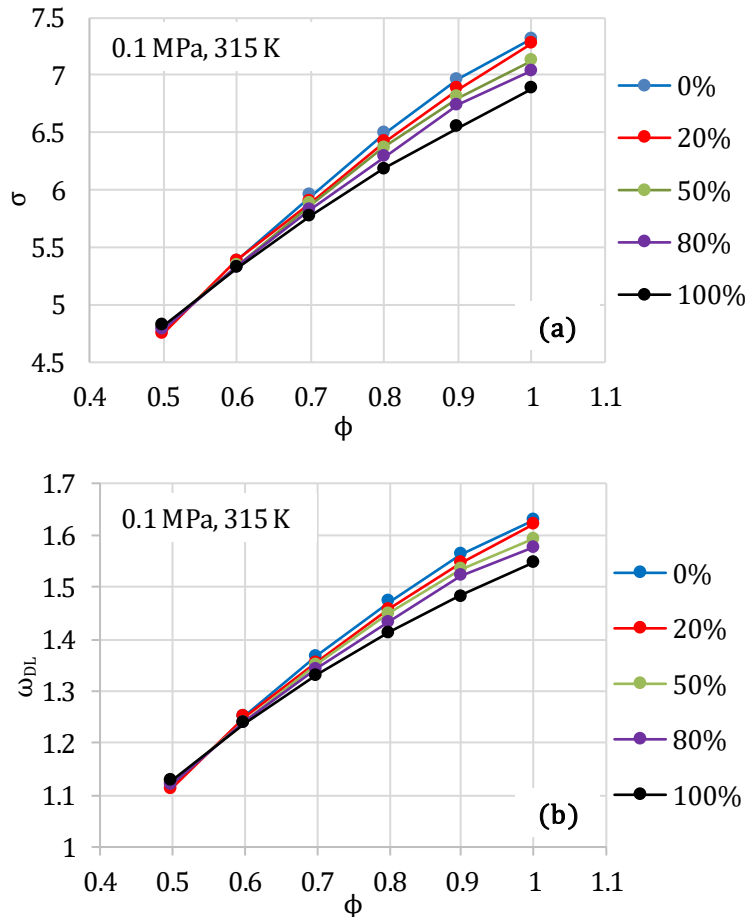


Figura 7.46: Dependencia con el dosado para diferentes contenidos de hidrógeno de (a) la relación de expansión σ , y (b) el parámetro ω_{DL} asociado a la tasa de crecimiento de inestabilidades de Darrieus-Landau.

Como se dijo en apartados anteriores, las inestabilidades hidrodinámicas son caracterizadas principalmente por los **números de Ma y Pe**. En la *Figura 7.47* muestra el efecto que tiene la variación del dosado sobre el **número de Markstein** para cada mezcla con diferentes proporciones de hidrógeno. Hay que recordar que el número de Markstein se calcula a partir de la **longitud de Markstein**, la cual se determina a partir de la correlación lineal de las velocidades de propagación del frente de llama en función de la tasa de stretch. Es decir, que debe ser considerado un resultado experimental, y como tal sujeto a las imprecisiones experimentales. En esta figura se puede ver que el número de Markstein es positivo para todas las mezclas (y en consecuencia la longitud de Markstein),

lo cual implica una disminución de la velocidad de combustión de la llama real (u_n) por efecto de la tasa de stretch.

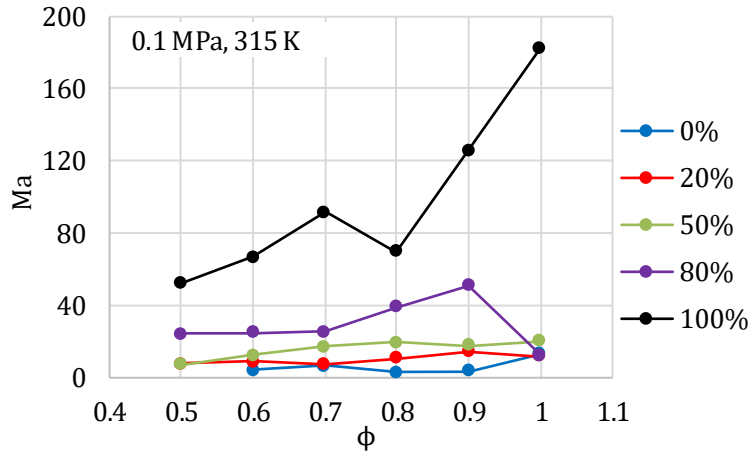


Figura 7.47: Dependencia del número de Markstein con el dosado, para diferentes proporciones de hidrógeno.

En la *Figura 7.48* se han representado los valores del espesor del frente de llama ($\delta_l = \vartheta_u/u_l$) en función del dosado, para cada una de las mezclas consideradas. Al contrario que las longitudes de Markstein, el espesor del frente de llama es un valor calculado a partir de la difusividad térmica y la velocidad de combustión laminar. En general, al aumentar el dosado o el contenido de hidrógeno el espesor del frente de llama se reduce.

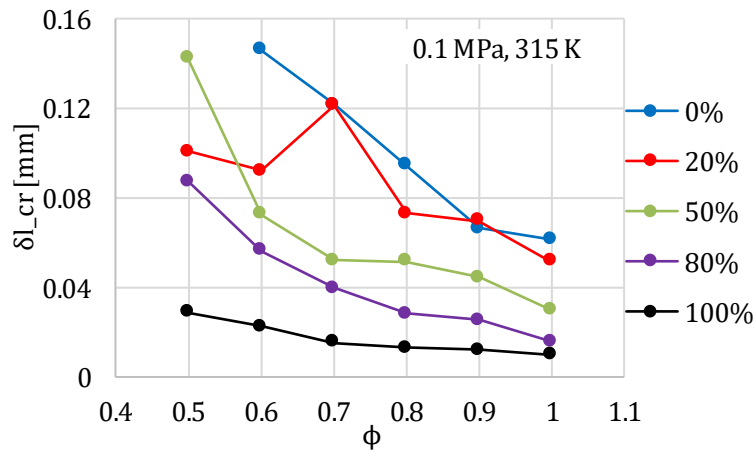


Figura 7.48: Variación del espesor de frente de llama para diferentes dosados.

En la *Figura 7.49*, se muestra el efecto que tiene la variación de dosado sobre el **número de Peclet**, que como se dijo, es el que dice en qué momento empieza la zona celular. En este caso, el número de Peclet se obtiene a partir de los resultados experimentales como relación entre el radio crítico del frente de llama (radio en el que en las imágenes Schlieren es evidente la aparición de celularidad) y el espesor del frente de

llama correspondiente a esas condiciones de presión y temperatura. Por ello, el número de Peclet se debe considerar también un resultado experimental, sujeto a las incertidumbres de los ensayos y también a la elección de la imagen con el inicio de la celularidad.

El número de Peclet obtenido tiene una tendencia ligeramente ascendente con el aumento del dosado para casi todas las mezclas por debajo del 80% H₂. Para las mezclas con 100% de hidrógeno, el número de Pe se duplica en comparación con las mezclas de 100% de metano, lo que se atribuye sobre todo a la reducción del espesor del frente de llama recogido en la *Figura 7.48*.

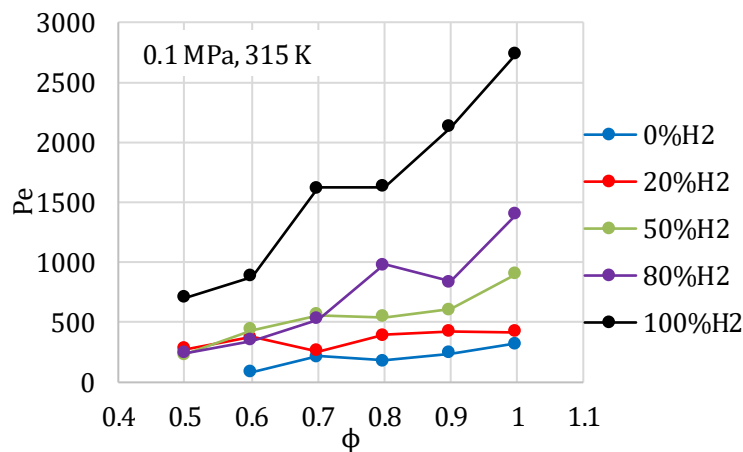


Figura 7.49: Número de Peclet crítico para diferentes dosados.

Inestabilidades termodifusivas

En apartados anteriores se presentaron los valores del número de Lewis de las mezclas, en dependencia del contenido de hidrógeno. En este apartado se presentan dichos valores dependientes del dosado, considerando como parámetro el contenido en hidrógeno de cada mezcla, *Figura 7.50*. En esta figura se puede confirmar que el **número de Lewis** permanece casi constante (ligeramente mayor que la unidad) independientemente del valor del dosado, para mezclas de metano o con poco contenido de hidrógeno (20%). Estos valores mayores que la unidad concuerdan con el carácter estable de ambas mezclas, confirmado con la observación de las imágenes del apartado 7.3.2.

Sin embargo, el número de Lewis tiene valores inferiores a la unidad en la zona de dosados pobres para las mezclas con 50-80-100% de hidrógeno (excepto para la mezcla estequiométrica de hidrógeno puro). Los valores del número de Lewis se reducen (sugiriendo mayor tendencia a la inestabilidad) a medida que disminuye el dosado. Sin embargo, no hay una tendencia estrictamente uniforme con respecto al contenido de hidrógeno para cada dosado, pudiendo apreciarse una vez más que existen los tres regímenes en las mezclas hidrógeno-metano dependiendo del porcentaje de hidrógeno en las mismas.

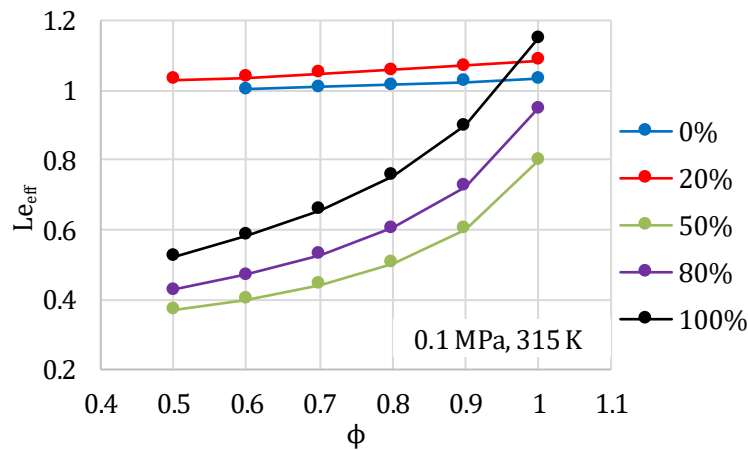


Figura 7.50: Número de Lewis en función del dosado para diferentes proporciones de hidrógeno en las mezclas con metano.

El número de Lewis como relación entre la difusividad térmica y la difusividad másica, depende fundamentalmente de la presión (por su influencia sobre la difusividad térmica) y del tipo de mezcla combustible/oxidante (por su influencia sobre la difusividad másica), por lo que, al ser medido en el tramo de presión constante, para estas mezclas sólo depende de la composición y del dosado.

7.6 Conclusiones sobre las mezclas de hidrógeno-metano

Del estudio realizado para las mezclas de hidrógeno-metano/aire, para los diferentes contenidos de hidrógeno en la mezcla y la variación de dosado, se puede concluir que, de estos dos parámetros, la variación del contenido de hidrógeno es el que mayor influencia tiene tanto en la velocidad de combustión laminar como en la aparición de inestabilidades y celularidad en las llamas.

Para la combustión de mezclas pobres, el radio de la llama aumenta con el tiempo, pero la tasa de aumento disminuye con la expansión de la llama para el metano y para mezclas con contenido bajos de hidrógeno, mientras que, para las fracciones altas de hidrógeno, existe una relación lineal entre el radio de la llama y el tiempo. Para la combustión de mezclas ricas, el radio de la llama muestra una tasa de aumento lenta en las primeras etapas de propagación de la llama y una tasa de aumento elevada en las etapas tardías de propagación de la llama para el metano y para mezclas con fracciones bajas de hidrógeno, y también existe una relación lineal entre el radio de llama y el tiempo para mezclas con altas fracciones de hidrógeno. La combustión en una mezcla estequiométrica demuestra la relación lineal entre el radio de la llama y el tiempo para las llamas de metano-aire, hidrógeno-aire y metano-hidrógeno-aire.

La velocidad de combustión sin stretch de una mezcla de hidrógeno-aire tiene un valor muy alto en comparación con las llamas de metano-aire y metano-hidrógeno-aire, incluso con una alta fracción de hidrógeno. La influencia del dosado en la velocidad de la llama sin stretch es mayor que la influencia de la adición de hidrógeno.

En función de la fracción de hidrógeno que se añade a la mezcla de combustible, se identifican tres regímenes. Ellos son: el régimen de combustión dominado por metano donde la fracción de hidrógeno es menor al 50%; el régimen de transición donde la fracción de hidrógeno está entre el 50% y el 80%, donde no se sigue una tendencia claramente definida y no es evidente que comportamiento domina; y el régimen de combustión de hidrógeno inhibido por metano en el que la fracción de hidrógeno es superior al 80%. Estos regímenes serán claramente explicados y analizados en los resultados.

CAPÍTULO 8

Resultados experimentales para mezclas de Syngas H₂ - CO en aire

8.1	Introducción	184
8.2	Velocidades de combustión a partir del análisis de las presiones	185
8.2.1	Influencia del contenido de H ₂ en el gas de síntesis	185
8.2.2	Influencia del dosado	187
8.3	Velocidades de combustión a partir del radio de llama o técnica Schlieren	190
8.3.1	Influencia del contenido de H ₂ en el gas de síntesis	190
8.3.2	Influencia del dosado	198
8.4	Comparación de resultados de la velocidad de combustión laminar	208
8.4.1	Resultados obtenidos por ambos métodos	208
8.4.2	Comparación con resultados de otros autores	210
8.5	Conclusiones sobre los resultados de mezclas de Syngas (H ₂ - CO)	212

8 RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE SYNGAS H₂-CO EN AIRE

8.1 Introducción

El gas de síntesis obtenido a partir de la reacción de diversos combustibles con oxígeno, evitando la presencia de nitrógeno, presenta gran interés como un compuesto intermedio que puede ser usado para la producción de combustible sintéticos o también como combustible. Sus componentes principales son el hidrógeno y el monóxido de carbono, con presencia de sustancias adicionales, normalmente inertes como CO₂ y H₂O, y también combustibles, como CH₄.

Diversos autores han estudiado el comportamiento del gas de síntesis como combustible para los motores de combustión interna y han comprobado que con un aumento de la concentración de H₂ y una disminución de la de CO se obtiene una mayor eficiencia térmica del motor, así como una disminución de las emisiones de NO_x y HC [150] [151].

Autores como Lee et al. [152], Bouvet et al. [153], Dong et al. [154], Fu et al. [155], y Sun et al. [156] han investigado la velocidad de combustión laminar de las llamas de gas de síntesis para mezclas con diferentes proporciones de H₂ - CO bajo condiciones atmosféricas. Todos ellos identificaron que la velocidad de combustión aumenta a medida que aumenta la proporción de hidrógeno en la mezcla.

En este capítulo, se recopilan los resultados obtenidos en la bomba cilíndrica a volumen constante sobre combustiones de gas de síntesis (mezclas H₂ - CO), *Tabla 8-1*, en un análisis similar al expuesto en capítulos anteriores, mediante las técnicas de evolución temporal de presión y la técnica óptica Schlieren de seguimiento del radio de frente de llama. Para reducir el número de valores de entrada en el trabajo experimental, sólo se consideran los dos integrantes principales del gas de síntesis, H₂ y CO. El estudio realizado, amplía el ámbito recogido por otras investigaciones, ya que considera la caracterización de la combustión de gas de síntesis a través de la visualización de la llama, el estudio morfológico del frente de la llama. Los resultados obtenidos se contrastan con los publicados en la bibliografía. Además, se comparan también con los realizados en la

bomba de combustión esférica, que pertenece al laboratorio de motores donde se ha realizado la presente Tesis doctoral.

Tabla 8-1: Experimentos con mezclas de H₂-CO

%H ₂	%CO	ϕ						P_INICIAL [MPa]	T_INICIAL [K]
0	100						1.0	0.1	300
6.7	93.3	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0		
25	75	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0		
50	50	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0		
80	20						1.0		
100	0						1.0		

8.2 Velocidad de combustión a partir del análisis de las presiones

8.2.1 Influencia del contenido de H₂ en el gas de síntesis

Como se comentó en párrafos anteriores, una de las principales características del gas de síntesis como un combustible alternativo es la gran influencia de la proporción relativa H₂/CO de este sobre la velocidad de combustión laminar.

En la *Figura 8.1*, se muestra la evolución temporal de la presión para diferentes composiciones de la mezcla desde 100%H₂ – 0% CO hasta 0%H₂ – 100%CO comenzando en condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K, y dosado estequiométrico. En esta gráfica se puede ver que, a medida que aumenta el contenido en hidrógeno de la mezcla, la combustión se realiza de forma más rápida y las presiones finales son ligeramente mayores. Esta tendencia se aprecia claramente al comparar las curvas de 0 y 100% de H₂, ya que en las mezclas con proporciones bajas (6.7 y 25% H₂) y medias (50% H₂) los picos de presión se mantienen prácticamente constantes. La tendencia que siguen las presiones se puede explicar mediante la ecuación 6.1, pero no es inmediato calcular los valores, dado que la composición de la mezcla es muy variable, y en consecuencia todos los términos que dependen de la composición cambian sus valores.

Como se ha dicho, al aumentar el contenido de hidrógeno en la mezcla se producen combustiones más rápidas, ya que los picos de presión se alcanzan en tiempos menores. Es interesante comparar las curvas de 0 (azul) y 25% (verde) de hidrógeno, comprobando que el pico de presión para el caso del 25% H₂ se produce en un tiempo entre dos y tres

veces menor que para el caso de monóxido de carbono puro. Esto refleja la gran influencia que tiene el contenido de hidrógeno de la mezcla en la velocidad de la combustión en el tramo inicial de composición.

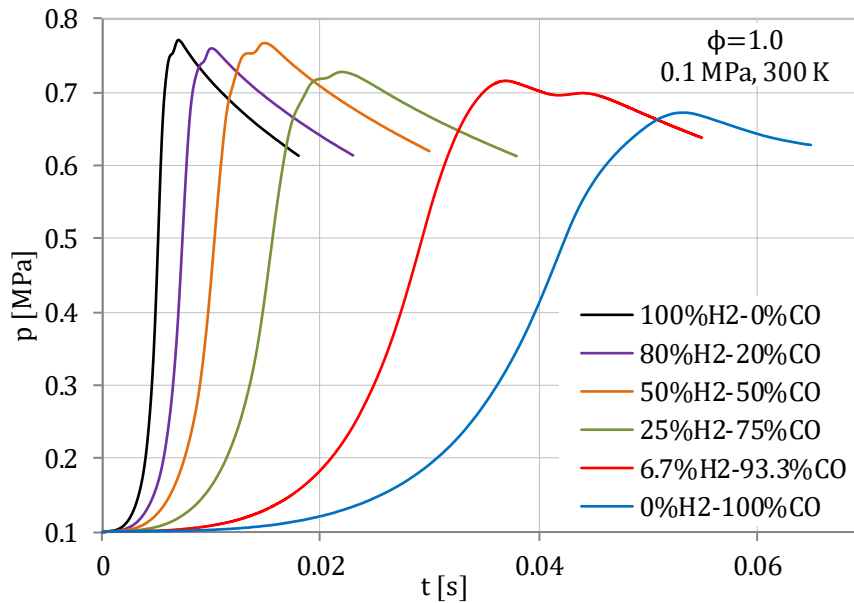


Figura 8.1: Evolución temporal de la presión para diversas mezclas con composición variables de la mezcla para 0, 6.7, 25, 50 y 100 % H_2 con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K, y dosado estequiométrico.

Las correspondientes curvas de velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca, obtenidas después de pasar el modelo de diagnóstico de dos zonas a las curvas de presión mostradas anteriormente, se muestran en la *Figura 8.2*. En esta figura se hace de nuevo evidente como el incremento en el contenido en hidrógeno de la mezcla hace que la velocidad de combustión laminar aumente de forma significativa. Las temperaturas finales de la mezcla sin quemar aumentan con el contenido de hidrógeno, consecuencia de las mayores presiones finales que se observan en la *Figura 8.1*.

A modo de resumen, se puede afirmar que tras los experimentos realizados con mezclas $H_2 - CO$, tanto los valores máximos de la presión como especialmente de la velocidad de combustión laminar se ven incrementados con el contenido en hidrógeno de la mezcla combustible, y se confirma de este modo lo que han informado diferentes autores consultados en la bibliografía [152–154,156].

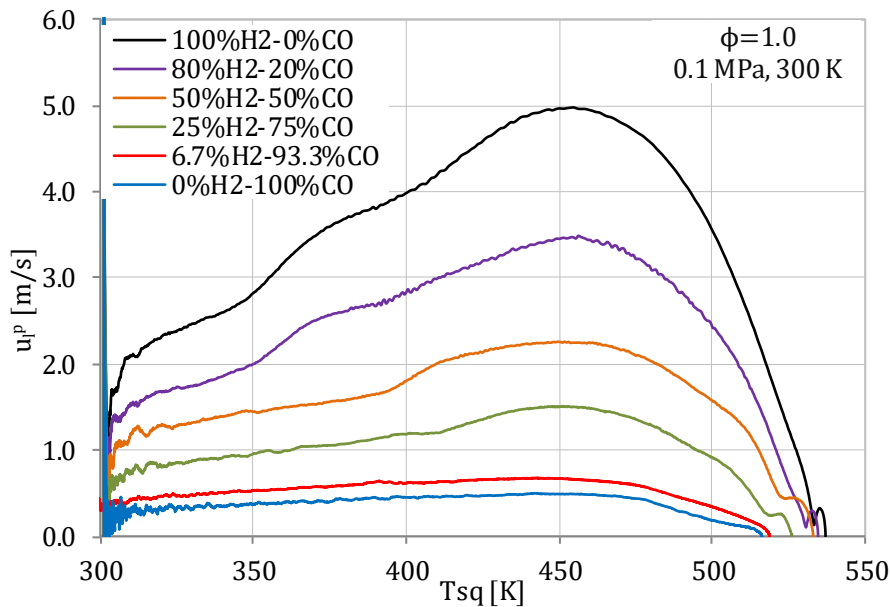


Figura 8.2: Velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca para diferentes mezclas H₂/CO con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K y dosado estequiométrico.

8.2.2 Influencia del dosado

Conocer la influencia del dosado de operación en los parámetros característicos de la combustión es necesario para poder determinar las condiciones óptimas de funcionamiento del motor y, además, alcanzar una solución de compromiso entre un dosado bajo, que permita un ahorro de combustible, y la consecución de una buena combustión.

En la *Figura 8.3*, se muestra la evolución de la presión con respecto al tiempo para tres mezclas combustibles, con porcentajes de hidrógeno del 6.7, 25 y 50%, en cada una de las cuales se ha variado el dosado relativo de 0.5 a 1, y se han mantenido constantes la presión y la temperatura iniciales en 0.1 MPa y 300 K, respectivamente.

A la vista de los resultados, como sucedía en el caso de H₂ puro presentado en el *capítulo 6*, se puede afirmar que, para una mezcla dada, a medida que aumenta el dosado se alcanzan valores de presión final más elevados. En este caso sí es de aplicación la *ecuación [50]*, ya que al aumentar el dosado, el término $\frac{F}{1+F}$ es mayor, lo que se traduce en un aumento de la presión final.

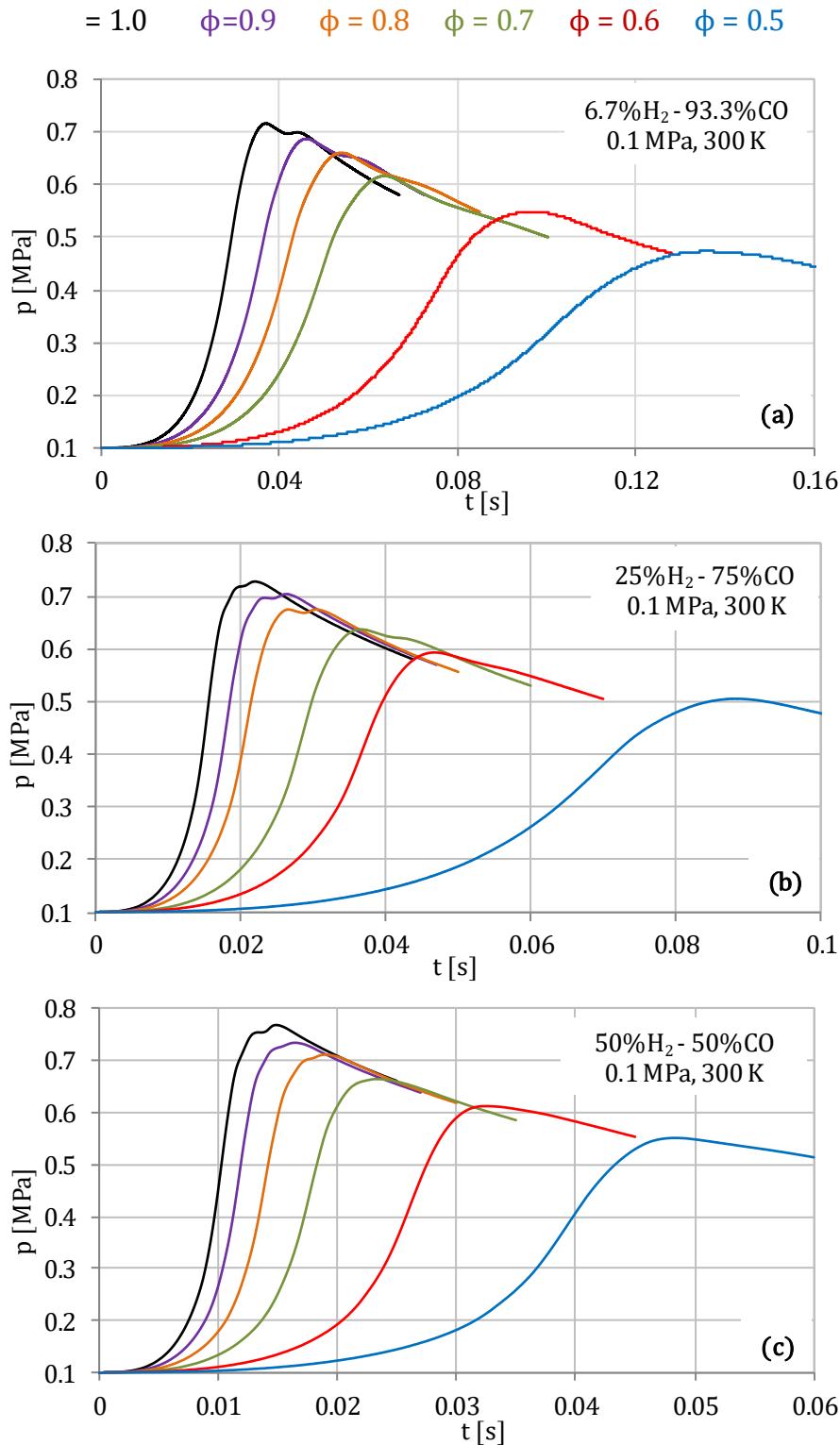


Figura 8.3: Influencia del dosado en la evolución temporal de la presión para mezclas de 6.7, 25, y 50% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K y una variación de $\phi = 0.5 - 1$.

Por otro lado, el aumento del dosado también origina un aumento de la tasa de reacción química y, en consecuencia, de la velocidad de combustión laminar, como variable macroscópica asociada a dicha tasa de reacción. Por ejemplo, para la mezcla de 6.7% de H₂ con dosado de 0.6, el pico de presión se alcanza en 0.1 s, mientras que el

correspondiente a la mezcla de 50% de H₂ se produce en apenas 0.032 s. La duración del proceso de combustión puede afectar a la cantidad de calor transmitido durante el mismo, siendo mayor en el caso de velocidades menores, con posible influencia sobre la presión final de combustión, tendiendo a reducirla.

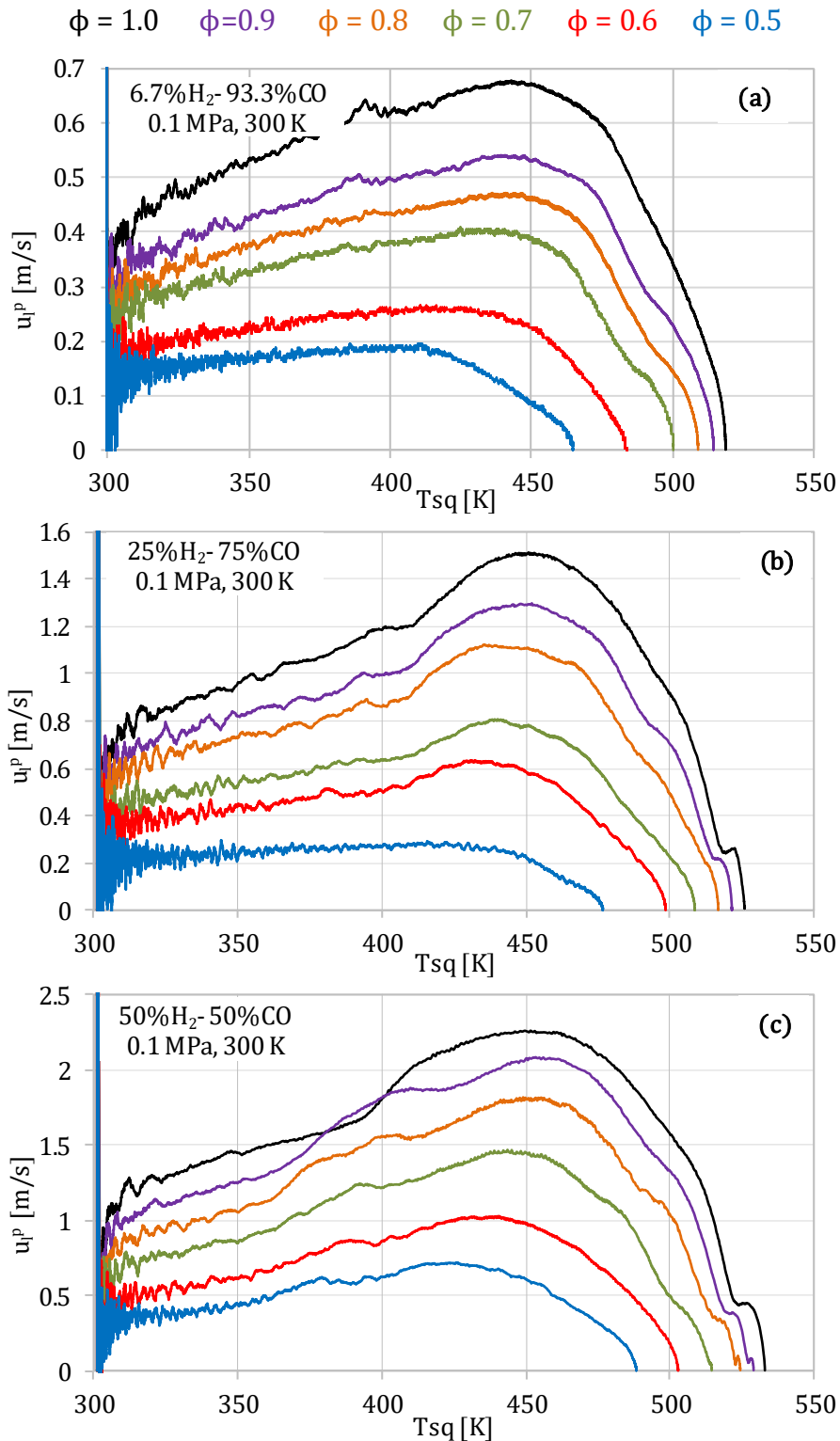


Figura 8.4: Influencia del dosado en la velocidad de combustión para mezclas de 6.7, 25, y 50% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K y un dosado $\phi = 0.5$ a 1.

En la *Figura 8.4* se muestra las velocidades de combustión laminar frente a la temperatura de la zona sin quemar, para tres proporciones $H_2 - CO$ con dosados variables. Hay que destacar que las temperaturas finales de la zona sin quemar crecen al hacerlo el dosado, ya que las presiones finales son mayores y por ello la temperatura de la compresión cuasiadiabática de la mezcla sin quemar.

De acuerdo con las gráficas de presión de la *Figura 8.3*, se puede ver que a medida que aumenta el dosado, aumenta la velocidad de combustión alcanzando su máximo para la mezcla estequiométrica. Además, se puede observar que para los dosados más bajos (0.5, 0.6 y 0.7), la velocidad de combustión aumenta de manera suave durante la primera etapa de la combustión a excepción de la etapa final, a pesar de que la temperatura y la presión aumentan. A medida que aumenta el dosado, la pendiente de estas líneas (relación entre u_{lP} y T_{sq}) se hace más pronunciada.

Finalmente, y combinando la información extraída acerca la influencia de la composición y el dosado de la mezcla sobre la velocidad de combustión laminar, se puede concluir que el efecto de enriquecer la mezcla con dosados más altos tiene un efecto positivo en la velocidad de combustión, similar al efecto de aumentar el contenido de hidrógeno en el gas de síntesis. En los apartados 8.3 y 8.4 se cuantifica este efecto.

8.3 Velocidad de combustión obtenida por el método óptico de imágenes Schlieren

Partiendo de las imágenes obtenidas de los procesos de combustión correspondiente al estudio paramétrico experimental, se ha realizado un análisis para identificar la influencia de la composición y el dosado de la mezcla sobre la morfología de la llama (aparición de celularidad e inestabilidades), la evolución del radio del frente de llama y su velocidad de propagación, así como la velocidad de combustión laminar.

8.3.1 Influencia del contenido de H_2 en el gas de síntesis

Morfología de los frentes de llama

En este apartado se presentan los resultados de las imágenes Schlieren obtenidas en el proceso de combustión de diferentes mezclas de H_2/CO variando el porcentaje de hidrógeno de 0 a 100%, y manteniendo constantes el resto de los parámetros (dosado

estequiométrico, presión inicial de 0.1 MPa y temperatura inicial de 300 K). En la *Figura 8.5* se presenta un conjunto de imágenes de diversos experimentos de combustión de forma que hay una secuencia temporal en horizontal en la que el radio de llama crece hasta los valores fijos indicados (de 1 a 5 cm), mientras que, para poder comparar el efecto de la proporción H₂ - CO, se presenta una serie vertical de imágenes para cada radio pero correspondiente a los distintos experimentos para cada composición de mezcla de combustible (aumentando verticalmente de 0 - 100%H₂).

Al observar estas secuencias de imágenes de los frentes de llama, se pueden apuntar las siguientes consideraciones generales:

En primer lugar, se debe resaltar la simetría circular de los diferentes frentes de llamas recogidos en las imágenes, aunque no puede apreciarse si este crecimiento es uniforme en las direcciones radial (observable en las imágenes) y axial (no observable). Esta cuestión se analiza con detalle en el capítulo 9. Dichos frentes de llama crecen con velocidades de aumento del radio aproximadamente lineales (luego se presentan en la *Figura 8.6*), pero dependientes de la proporción H₂ - CO.

Los frentes de llama son relativamente lisos, si bien, para valores elevados del radio y dependiendo de la proporción de H₂ las inestabilidades que aparecen consiguen generar células, distorsionando la superficie lisa del frente. Cuanto mayor es el contenido de hidrógeno en la mezcla, mayor es el efecto de las inestabilidades en la llama, es decir, el desarrollo de las inestabilidades conduce a crear células en el frente de la llama a medida que avanza la combustión generando un frente de llama distorsionado, de superficie efectiva mayor que la superficie lisa.

Como se ha indicado, en la evolución de las imágenes del frente de llama para cada proporción de H₂ - CO (secuencias horizontales), se puede ver que inicialmente el frente de llama es siempre liso, lo que es indicativo de un proceso laminar. Para las mezclas con 0 y 6,7% de H₂ se puede ver que incluso al final de la combustión, el frente de llama permanece liso; sin embargo, las mezclas con alto contenido de hidrógeno (80 y 100%) presentan frentes de llama con superficies celulares. Para todas las mezclas, independientemente de su composición, la estructura del frente de llama cambia con el avance de la combustión, y aumentan las arrugas y la aparición de inestabilidades

(visualización en vertical). Este último efecto se observa claramente para mezclas con mayor contenido de hidrógeno (80 y 100%) y para tamaños de llama mayores (4 y 5 cm).

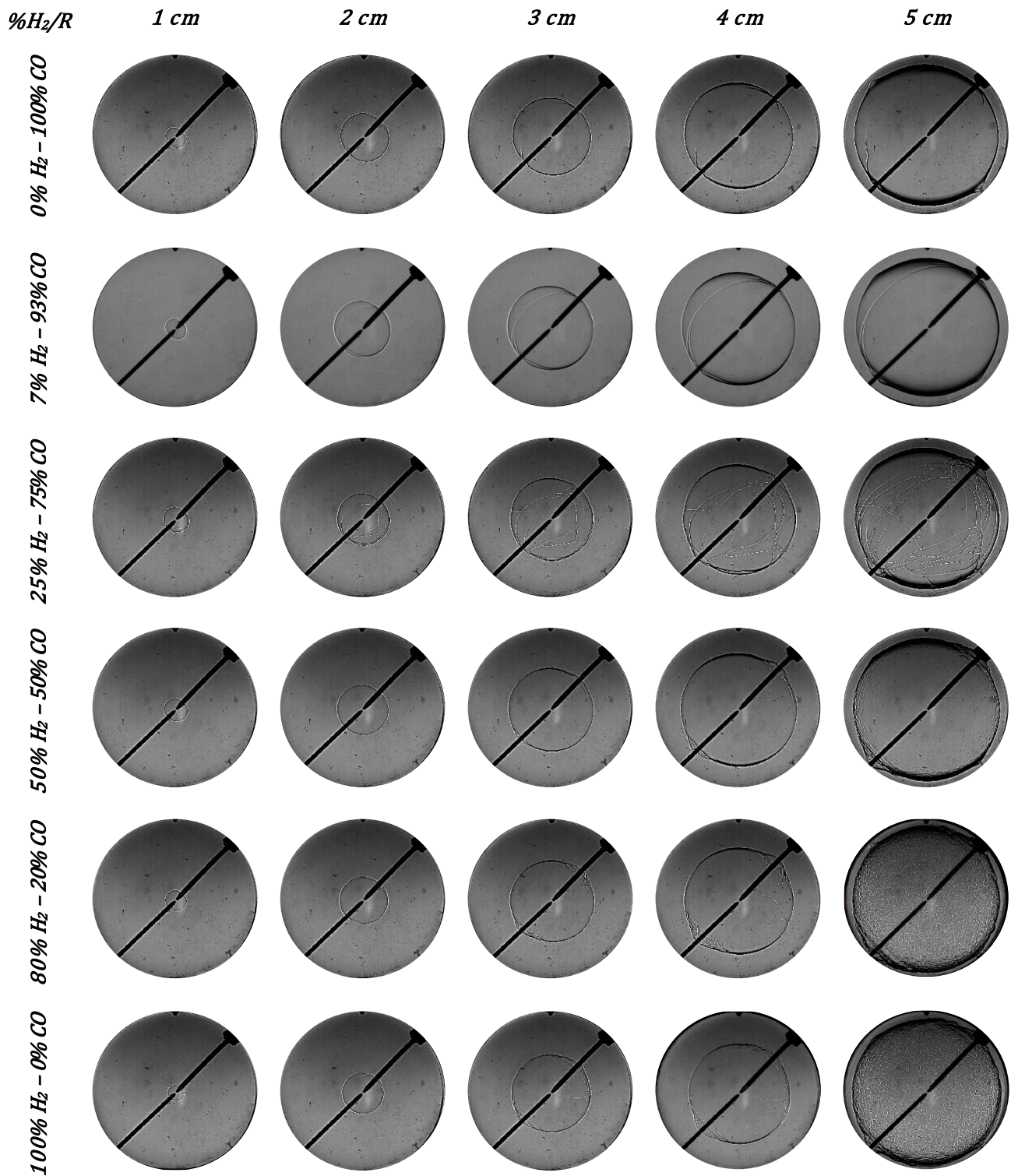


Figura 8.5: Imagen Schlieren para mezclas hidrógeno-CO con proporciones de 0 a 100% H_2 con condiciones atmosféricas (0.1 MPa y 300K) a dosado estequiométrico.

En resumen, se puede concluir que el contenido de hidrógeno en la mezcla de combustibles favorece el desarrollo de inestabilidades y la aparición de celularidad en el frente de llama. Se puede decir que el monóxido de carbono tiene llamas con una superficie completamente lisa y estable, y la presencia de hidrógeno hace que las inestabilidades tanto hidrodinámicas como termodifusivas tiendan a crear un frente de llama celular.

Radio de frente de llama

En este apartado se presenta el efecto que tiene el contenido de H₂ de la composición de la mezcla en el radio de frente de llama, ver *Figura 8.6*.

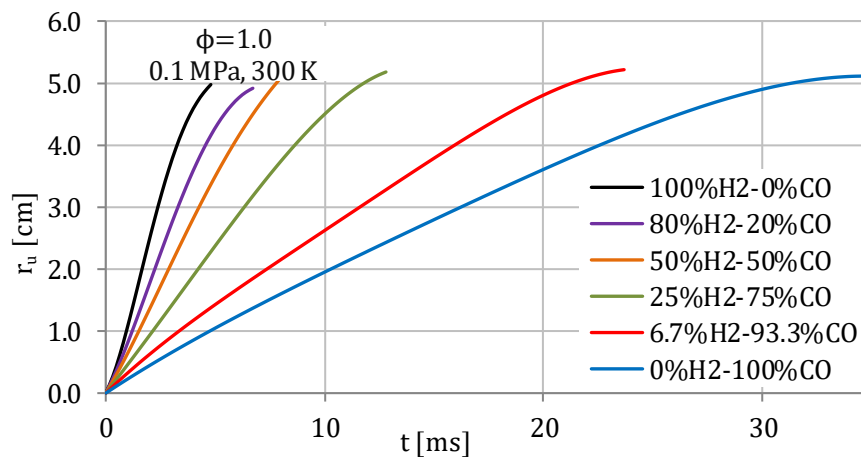


Figura 8.6: Evolución temporal del radio de frente de llama para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K a dosado estequiométrico.

La figura muestra la evolución temporal del radio de la llama para las diferentes composiciones de la mezcla. La pendiente de cada línea es representativa de la velocidad de avance del frente de llama en cada instante de tiempo S_n . Puede observarse como el contenido de hidrógeno de la mezcla favorece un crecimiento más rápido de la misma, ya que las pendientes son mayores y los radios máximos se alcanzan en tiempos menores.

Velocidad de propagación de la llama S_n y S_l

La variación temporal del radio de llama con respecto al tiempo, como se ha comentado anteriormente, equivale a la **velocidad de propagación de la llama, S_n** . Como se ha indicado, ésta es la derivada del radio del frente de llama obtenido a partir del registro de imágenes. Esta variable, que se puede calificar como cinemática, engloba en su

valor la influencia de la tasa de reacción, de los efectos de confinamiento, del stretch del frente de llama y de las estabilidades.

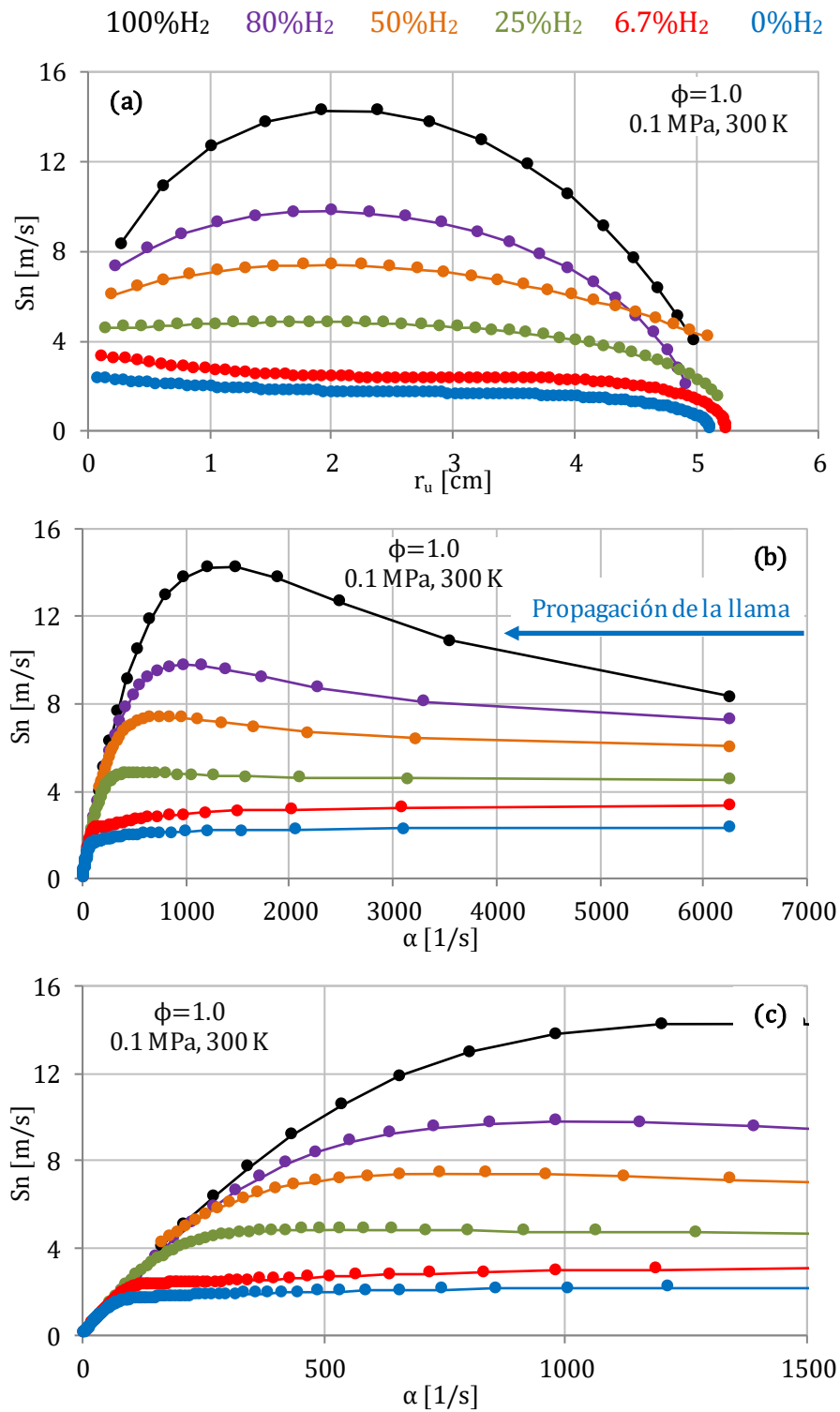


Figura 8.7: Velocidad de propagación de frente de llama para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa, 300K y $\phi = 1.0$. (a) frente al radio de llama. (b) frente a la tasa de stretch. (c) zoom de gráfico de S_n frente α

En la *Figura 8.7(a)*, se presenta la velocidad de propagación del frente de la llama en función del radio de la llama, para las combustiones de diferentes mezclas con un dosado estequiométrico, una presión inicial de 0.1 MPa y una temperatura de 300 K. De nuevo es evidente ver que el contenido de hidrógeno en la mezcla H₂ - CO acelera el proceso de combustión.

Para las mezclas con mayor proporción de hidrógeno, la velocidad de propagación S_n aumenta a medida que crece el radio, alcanzando un valor máximo y luego decrece. Esta tendencia se explica porque la velocidad de propagación del frente de llama tiene dos componentes: la velocidad de combustión en el propio frente, en general creciente al aumentar la presión y la temperatura de la zona sin quemar, y un segundo componente, que es la velocidad provocada por la expansión de la zona de los productos quemados, de menor densidad que la zona de mezcla sin quemar. Esta velocidad de expansión es grande al principio, cuando el frente de llama está muy alejado de las paredes de la cámara, pero se reduce progresivamente con el aumento del radio y llega a anularse cuando el frente de llama está cerca de las paredes de la cámara. Esta tendencia se aprecia muy bien en los experimentos con proporciones de H₂ de 50, 80 y 100%, para las que el frente de llama alcanza el pico de la velocidad de propagación para radios del orden de 2 cm, para acabar reduciéndose a medida que el frente se va aproximando a la pared de la cámara de combustión. Por su parte, las mezclas más pobres en hidrógeno presentan el pico de la velocidad de propagación en el mismo instante del inicio de la llama, para posteriormente disminuir ligeramente y mantenerse prácticamente constante hasta la extinción de esta. La razón es la misma indicada para las mezclas de mayor proporción, pero como la velocidad de combustión es menor en estas mezclas, el efecto global preponderante es el de la velocidad de expansión.

En la *Figura 8.7(b)*, se representa la velocidad del frente de llama S_n frente a la tasa de stretch α , haciéndose notar que el desarrollo del frente de llama se produce de derecha a izquierda, reduciéndose la tasa de stretch desde los altos valores iniciales hasta valores finales de cero. Se puede observar que en las primeras etapas de la combustión con elevadas tasas de stretch, la velocidad de propagación de la llama es independiente de ésta. Los primeros valores representados de la velocidad de propagación de llama para cada proporción de H₂ se escalan muy bien por el efecto de que la velocidad de combustión crece con la proporción de H₂. Las mezclas con contenido de H₂ inferior al 25% tienen

velocidades prácticamente independientes de la tasa de stretch en el rango entre 6000 y 1500 s⁻¹. Sin embargo, en las mezclas con alto contenido de hidrógeno (50% y sobre todo 80 y 100% H₂), se observa un incremento en la velocidad de propagación a medida que disminuye la tasa de stretch, coincidente con que en la parte superior (*Figura 8.7(a)*) se alcanza el radio 2 cm. Posteriormente, cuando el frente de llama supera el radio 2 cm y la tasa de stretch sigue decreciendo, la velocidad del frente se reduce casi linealmente con la tasa de stretch. Para las mezclas con contenido bajo de hidrógeno (0 y 6.7%) este comportamiento no es tan acusado debido a que la velocidad se mantiene baja, pero con pequeña reducción. Es interesante ver que, para la mezcla con contenido de 25% de hidrógeno, la velocidad de propagación se mantiene casi constante durante todo el proceso de combustión, independientemente de la tasa de stretch.

A partir de las líneas mostradas en la *Figura 8.7(b)* y *(c)*, al extrapolar linealmente estas curvas cuando S_n corta el eje de las ordenadas en $\alpha = 0$, se obtiene la **velocidad de propagación de la llama libre de stretch, S_l** . Los resultados se muestran en la *Figura 8.8*, donde se puede ver como a medida que aumenta el contenido de hidrógeno en la mezcla y se reduce el de CO, aumenta la velocidad de propagación libre de stretch linealmente hasta un 80% de hidrógeno en la mezcla, luego aumenta de forma más importante, hasta alcanzar el valor correspondiente al hidrógeno puro. Este comportamiento es similar al observado para mezclas de metano e hidrógeno.

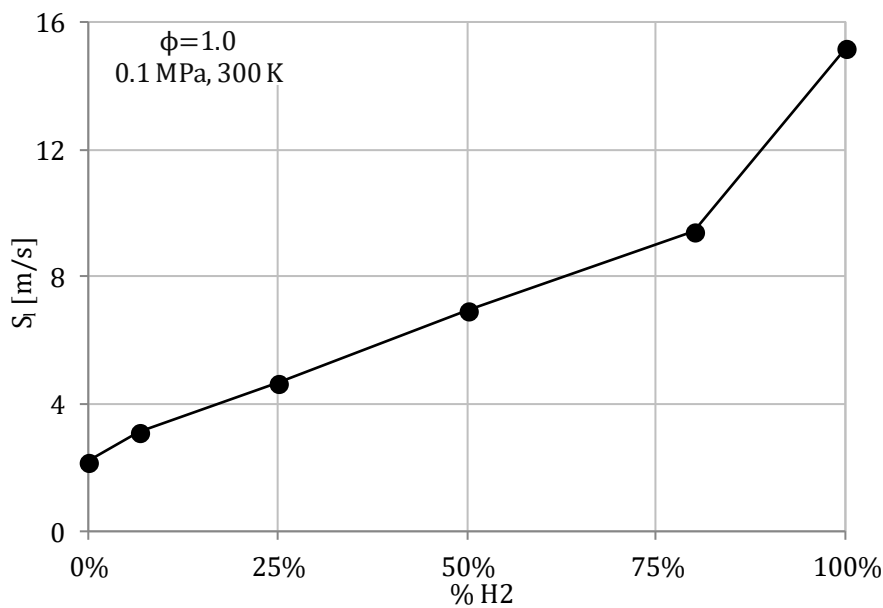


Figura 8.8: Velocidad de propagación de llama libre de stretch S_l para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales (0.1 MPa y 300K) a dosado estequiométrico.

Velocidad de combustión laminar u_l^0

Finalmente, la **velocidad de combustión laminar libre de stretch, u_l^0** , se obtiene de la velocidad de propagación de la llama libre de stretch, S_l , multiplicada por la relación de densidades de la mezcla fresca y la mezcla quemada, como se ha descrito en capítulos anteriores.

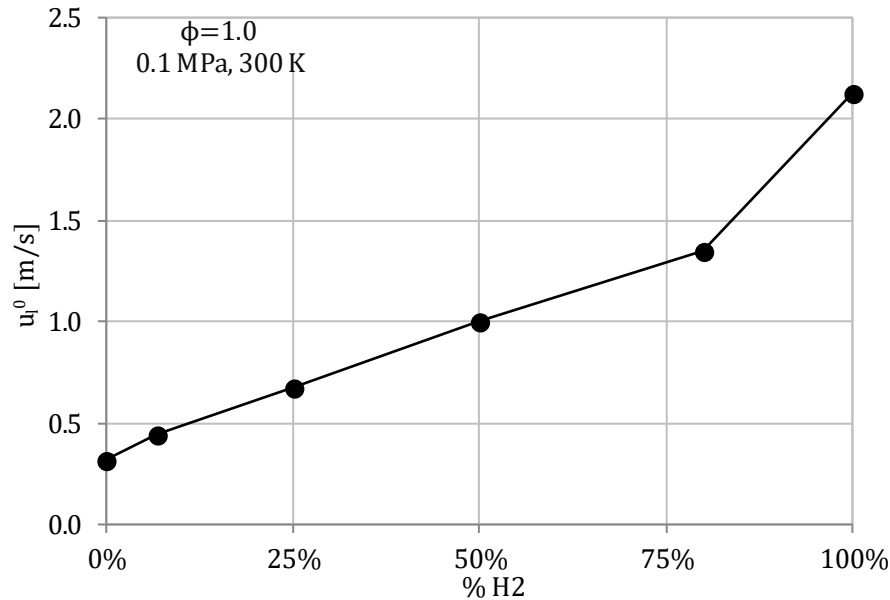


Figura 8.9: Velocidad de combustión laminar libre de stretch u_l^0 para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K y a dosado estequiométrico.

En la *Figura 8.9*, se muestran los valores de la velocidad de combustión libre de stretch versus el contenido de hidrógeno en la mezcla de combustible, para combustiones a dosado estequiométrico y condiciones ambientales (0.1 MPa y 300 K), mostrándose que la velocidad sin stretch tiene un comportamiento similar a la S_l , en donde se tiene un incremento linealmente constante hasta un 80% H₂ en la mezcla con una pendiente de 1.28% y luego aumenta considerablemente la pendiente (3.89%) hasta que se alcanza el 100% H₂, es decir que casi se duplica el aumento de la velocidad con los altos contenidos de hidrógeno.

Resumiendo, como ya se había comprobado anteriormente, el hidrógeno es un potenciador de la combustión en relación con el monóxido de carbono, y un incremento del contenido de H₂ en la mezcla H₂ - CO aumenta las diferentes velocidades, tanto de propagación de la llama, como la velocidad de combustión laminar, además de favorecer el crecimiento de celularidad durante el proceso de combustión.

8.3.2 Influencia del dosado

Como parte del estudio paramétrico del análisis de imagen, se ha variado el dosado de la combustible/aire, de 0.5 a 1.0, manteniendo constante la presión y temperatura inicial (0.1 MPa y 300 K), para cada una de las tres mezclas (6,7, 25 y 50% H₂) analizadas.

Morfología de los frentes de llama

En el análisis realizado en el apartado anterior de la influencia de la composición en la morfología de los frentes de llama, se ha concluido que el hidrógeno tiene un efecto desestabilizador sobre la llama, provocando celularidad en la superficie del frente de la llama, es decir, generando frentes de llama celular. Para verificar el efecto del dosado en la morfología de la llama, en las *Figura 8.10-Figura 8.12*, se representa en forma de matriz la evolución de las imágenes de Schlieren para las combustiones de tres mezclas diferentes: 6.7% H₂ – 93.3 % CO (*Figura 8.10*), 25% H₂ – 75% CO (*Figura 8.11*), y 50% H₂ – 50% CO (*Figura 8.12*), en los tres casos para presión y temperatura iniciales de 0.1 MPa y 300 K, respectivamente.

Analizando las imágenes de Schlieren horizontalmente, se puede observar la evolución del frente de llama para cada dosado, y así se comprueba la evolución de la misma llama a lo largo del proceso de combustión. Por otro lado, siguiendo una dirección vertical, se aprecia la influencia del dosado en la morfología de la llama para el mismo radio de llama. A la vista de las imágenes en la *Figura 8.10*, se muestra que para la mezcla de combustible con 6.7% de H₂ y 93.3% de CO, no aparece celularidad sobre la superficie del frente de la llama para ninguno de los dosados. Esto es indicativo de que el contenido de hidrógeno no es lo suficientemente alto como para provocar un efecto sobre la inestabilidad de la llama. No se ha presentado, pero puede decirse que, para el monóxido de carbono puro, las llamas tendrían superficies lisas.

Si se comparan las imágenes de la *Figura 8.11* con las de la *Figura 8.10*, se puede ver que al incrementarse el contenido de hidrógeno en la mezcla desde el 6.7% hasta el 25%, hay cambios evidentes en la morfología de la llama, con una mayor existencia de celularidad sobre el frente de llama, para los mismos radios de llama y dosados. La intensidad de la celularidad es mayor cuando el dosado de la mezcla es menor. Las imágenes para un dosado $\phi = 0.5$ (el valor más bajo probado) muestran el efecto

inestabilizador del contenido de hidrógeno, con distorsiones del frente de llama que modifican la geometría cuasi-esférica que sí se mantiene en los dosados mayores. Para el dosado más bajo, con una velocidad de propagación de la llama también pequeña, el efecto de las fuerzas de volumen conduce a un ascenso vertical del frente de llama en conjunto (proceso conocido como flotabilidad). Este efecto también se puede apreciar para las imágenes de la *Figura 8.10* correspondientes al mismo dosado de 0.5, en los radios 4 y 5 cm.

Cuando la mezcla de combustible contiene una cantidad importante de hidrógeno, 50%, en la *Figura 8.12*, se aprecia claramente el crecimiento de las inestabilidades que conduce a un frente de llama de aspecto celular. Siendo muy representativo para el radio de llama de 5cm, se puede afirmar que la rugosidad e inestabilidad de la superficie del frente de llama se incrementa con la disminución del dosado, como ya se observó para la mezcla con 25% de hidrógeno. Hay que recordar que la existencia de la estructura celular para un determinado radio es consecuencia tanto de la velocidad de crecimiento de las inestabilidades (función de la composición de la mezcla y del dosado aire-combustible) como del tiempo transcurrido para que el frente de llama alcance dicho radio (dependiente de la velocidad del frente, el cual a su vez es también función de la composición y del dosado). Esto explica que determinadas condiciones favorezcan el desarrollo de la estructura celular, pero no lo hagan otras.

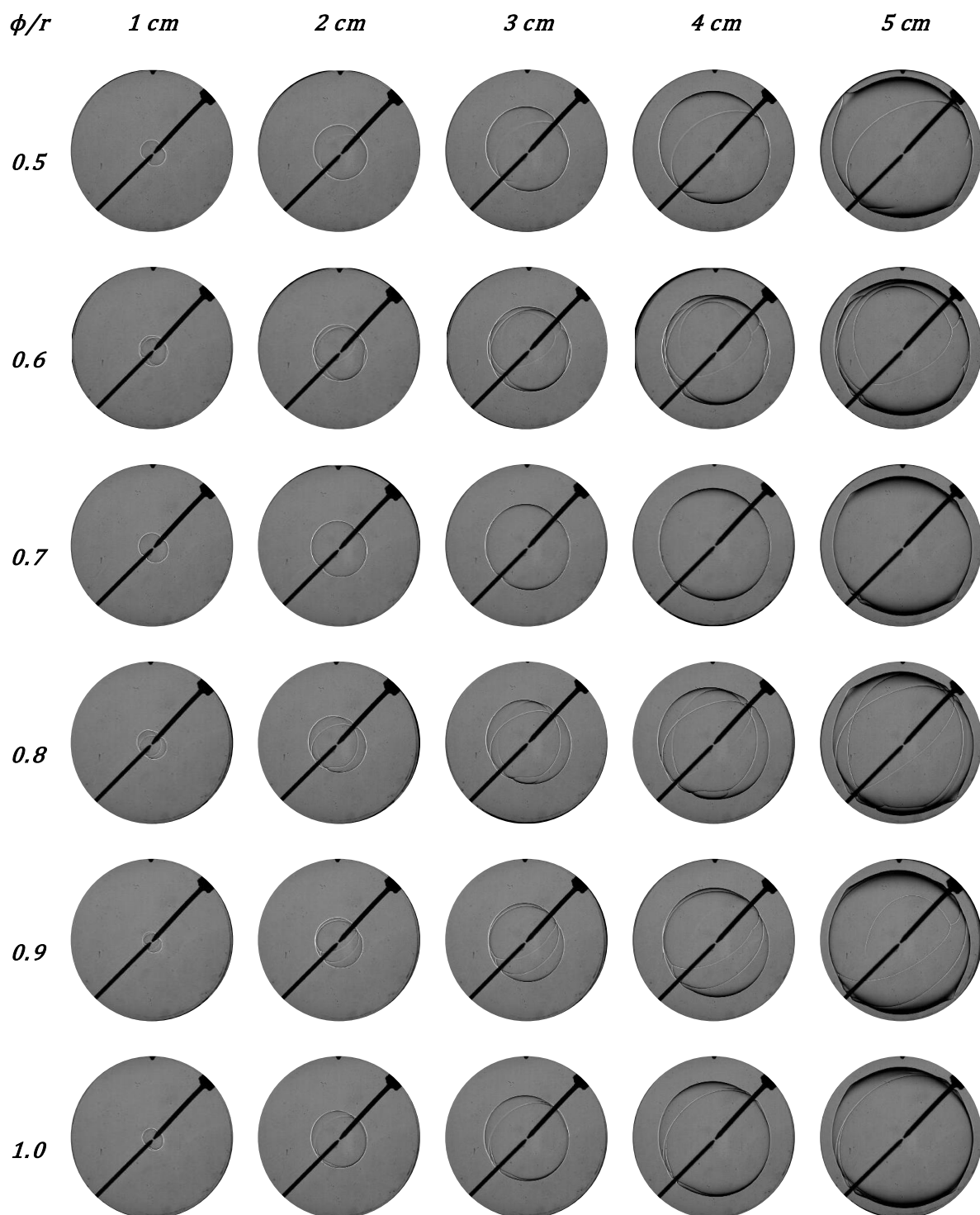


Figura 8.10: Imagen Schlieren para mezclas de 6.7% H_2 - 93.3% CO con condiciones iniciales de (0.1 MPa y 300K) y variación de dosado $\phi = 0.5$ a 1.0.

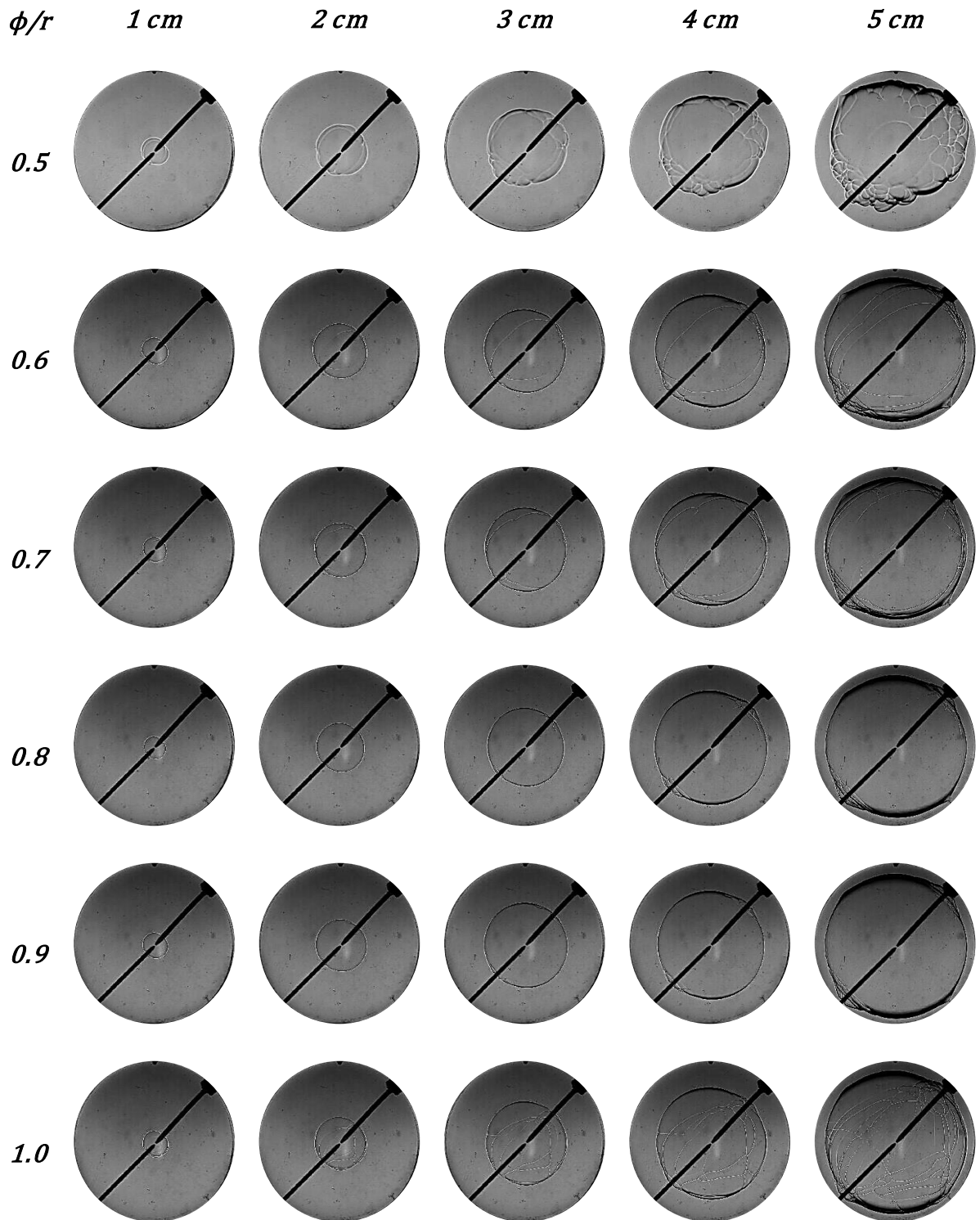


Figura 8.11: Imagen Schlieren para mezclas de 25% H₂ – 75% CO con condiciones iniciales de (0.1 MPa y 300K) y variación de dosado $\phi = 0.5$ a 1.0.

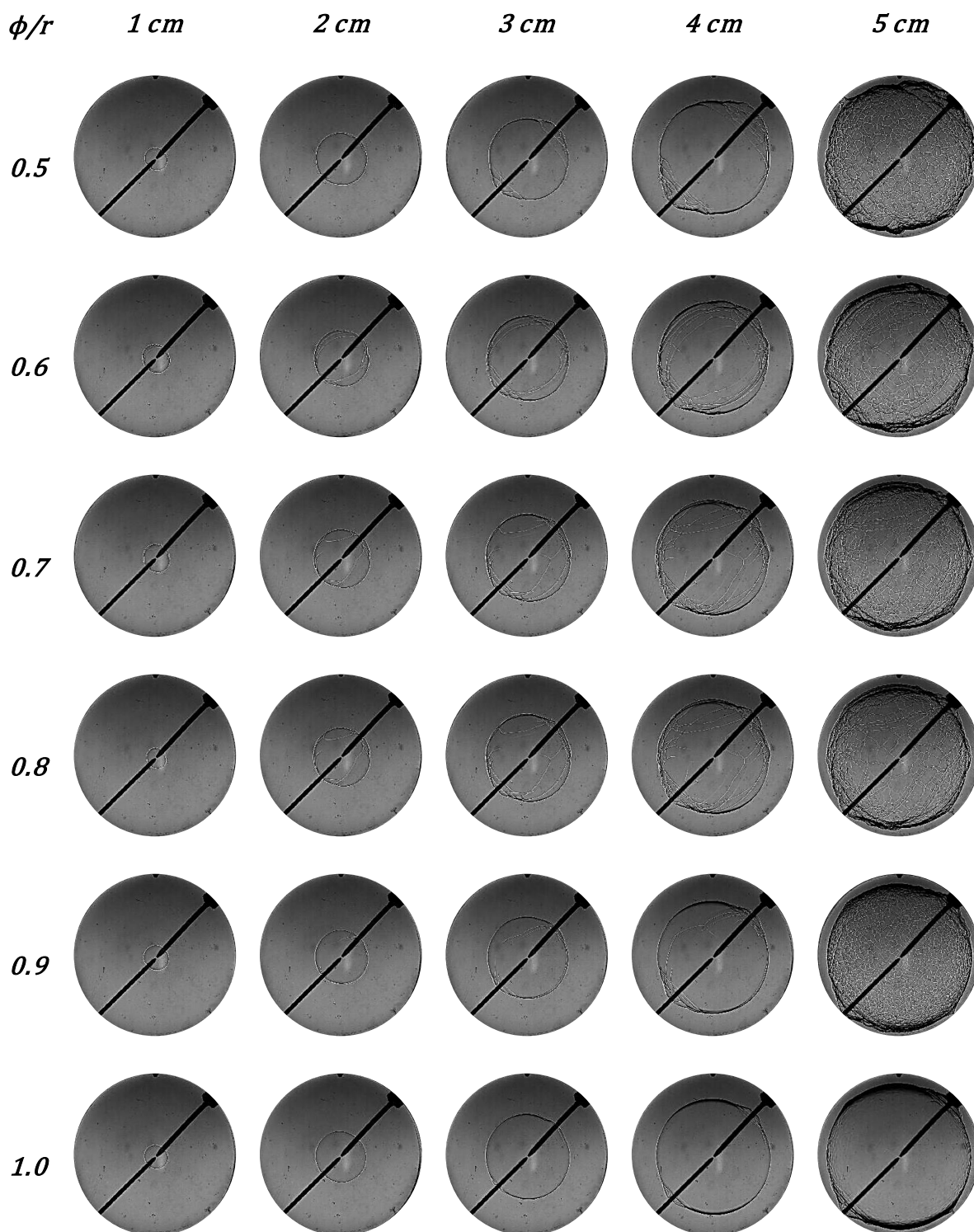


Figura 8.12: Imagen Schlieren para mezclas de 50% H_2 - 50% CO con condiciones iniciales de (0.1 MPa y 300K) y variación de dosado $\phi = 0.5$ a 1.0.

Radio del frente de llama

En cuanto a la evolución temporal del radio del frente de llama, mostrada en la *Figura 8.13*, se puede ver como el aumento del contenido de H_2 en la mezcla $H_2 - CO$

aumenta de forma importante las pendientes de las líneas del radio frente al tiempo, además del efecto que el dosado de la mezcla tiene al pasar de 0.5 a 1.0.

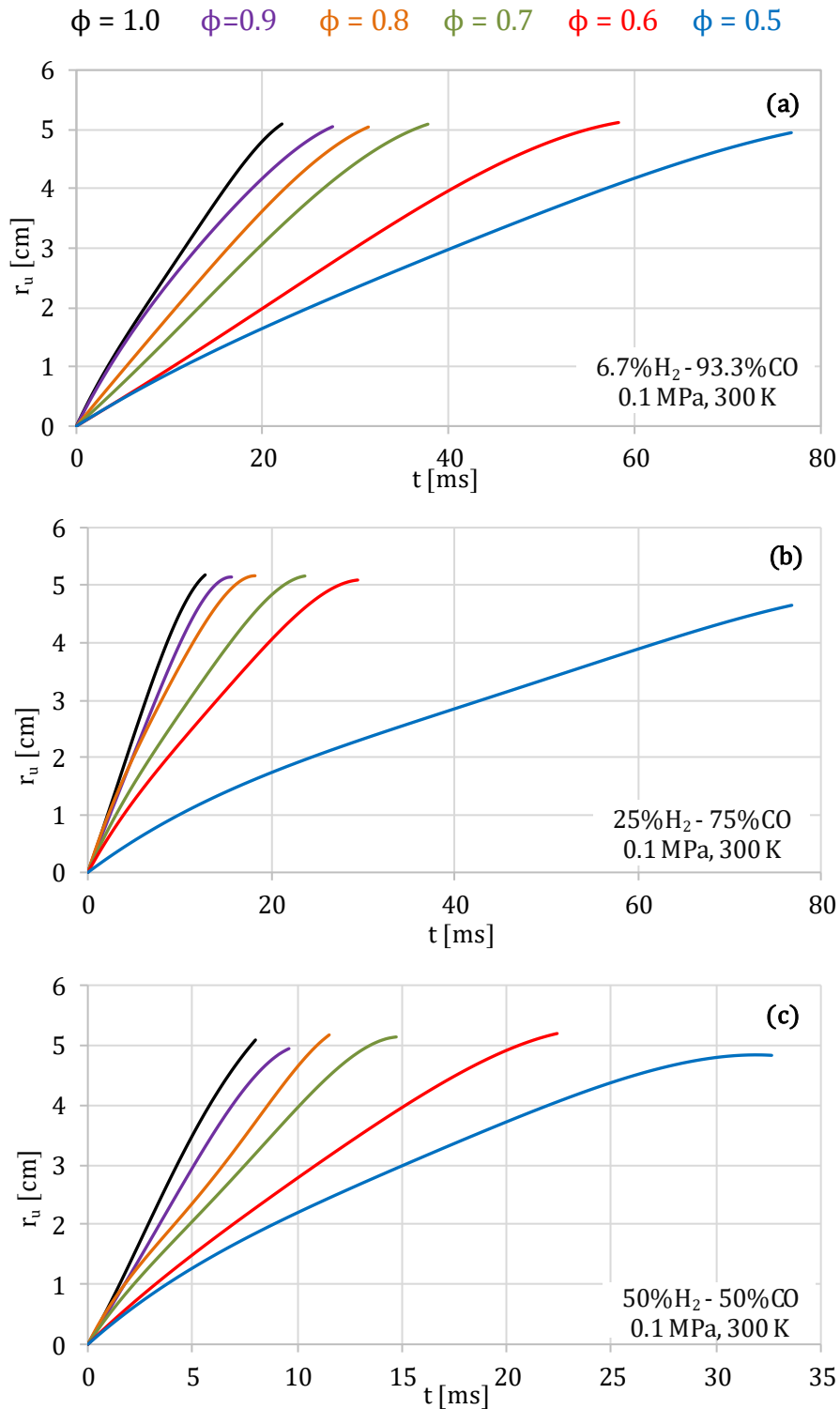


Figura 8.13: Evolución temporal del radio de frente de llama para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales (0.1 MPa y 300K). (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H₂.

Dentro de las líneas pertenecientes a la mezcla de 25% H₂ – 75% CO, *Figura 8.13(b)*, destaca la correspondiente al dosado 0.5, por lo mucho que difiere de los otros dosados. Esta curva corresponde a la mencionada en el apartado anterior con celularidad pronunciada (primera fila de imágenes de la *Figura 8.11*), con una evolución del radio de frente de llama más lenta que para el resto de dosados, favoreciendo la flotabilidad por fuerza de volumen. En la *Figura 8.13(c)*, debido a la reducción del tiempo de combustión para todos los dosados en mezclas con 50% de H₂, la escala de abscisas se ha cambiado respecto a las (a) y (b).

Velocidad de propagación de la llama S_n y S_l

De la representación de la velocidad de propagación de la llama con respecto al radio del frente de la llama, se puede deducir que, para el mismo tamaño de radio de frente de la llama, la velocidad de propagación de la llama aumenta a medida que lo hace el dosado, ver *Figura 8.14*.

En general, para proporciones bajas de H₂ en la mezcla, aun manteniendo la influencia del dosado, la máxima velocidad de propagación de la llama se da para radios de llama pequeños, al inicio del proceso. Esta velocidad disminuye gradualmente hasta que el frente de la llama llega a las paredes de la cámara y se apaga. Como se ha indicado en el apartado anterior, la velocidad de propagación de la llama es el resultado de dos contribuciones: la velocidad de expansión de los gases quemados sobre la mezcla fresca más la velocidad de combustión. Como esta última depende mucho del dosado, se explica la dependencia de la velocidad del frente con respecto a éste. Además, cuando la proporción de H₂ aumenta en la mezcla H₂ – CO, la velocidad de combustión es mayor y su contribución puede ser más importante que la de la expansión de los gases, como puede verse para algunos dosados en las partes (b) y (c) de la *Figura 8.14*. Incluso puede haber aumentos y reducciones sucesivas de la velocidad del frente, como se aprecia en alguna de las líneas para el 50% de H₂.

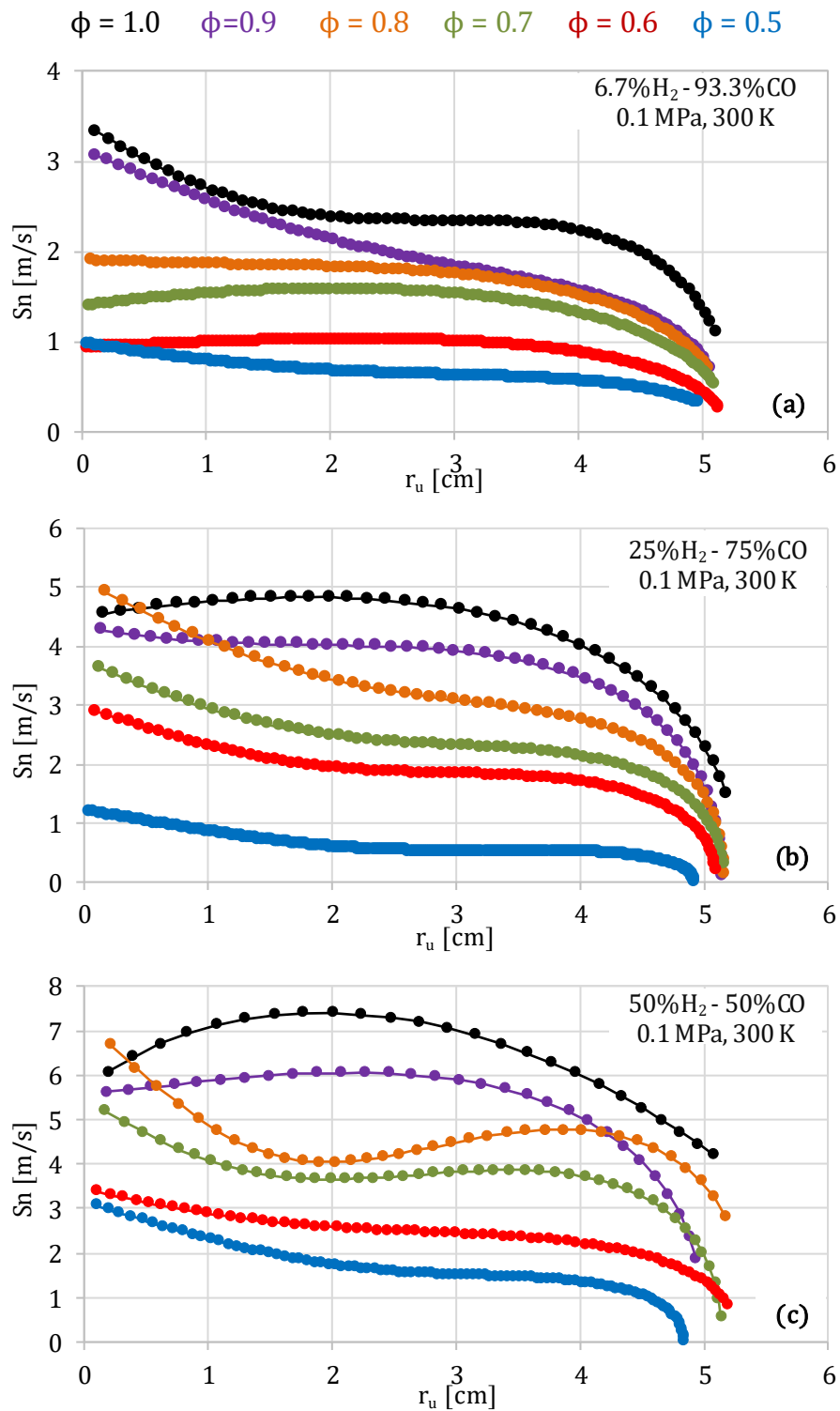


Figura 8.14: Velocidad de propagación de frente de llama en función del radio de llama para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K y proporciones. (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H₂.

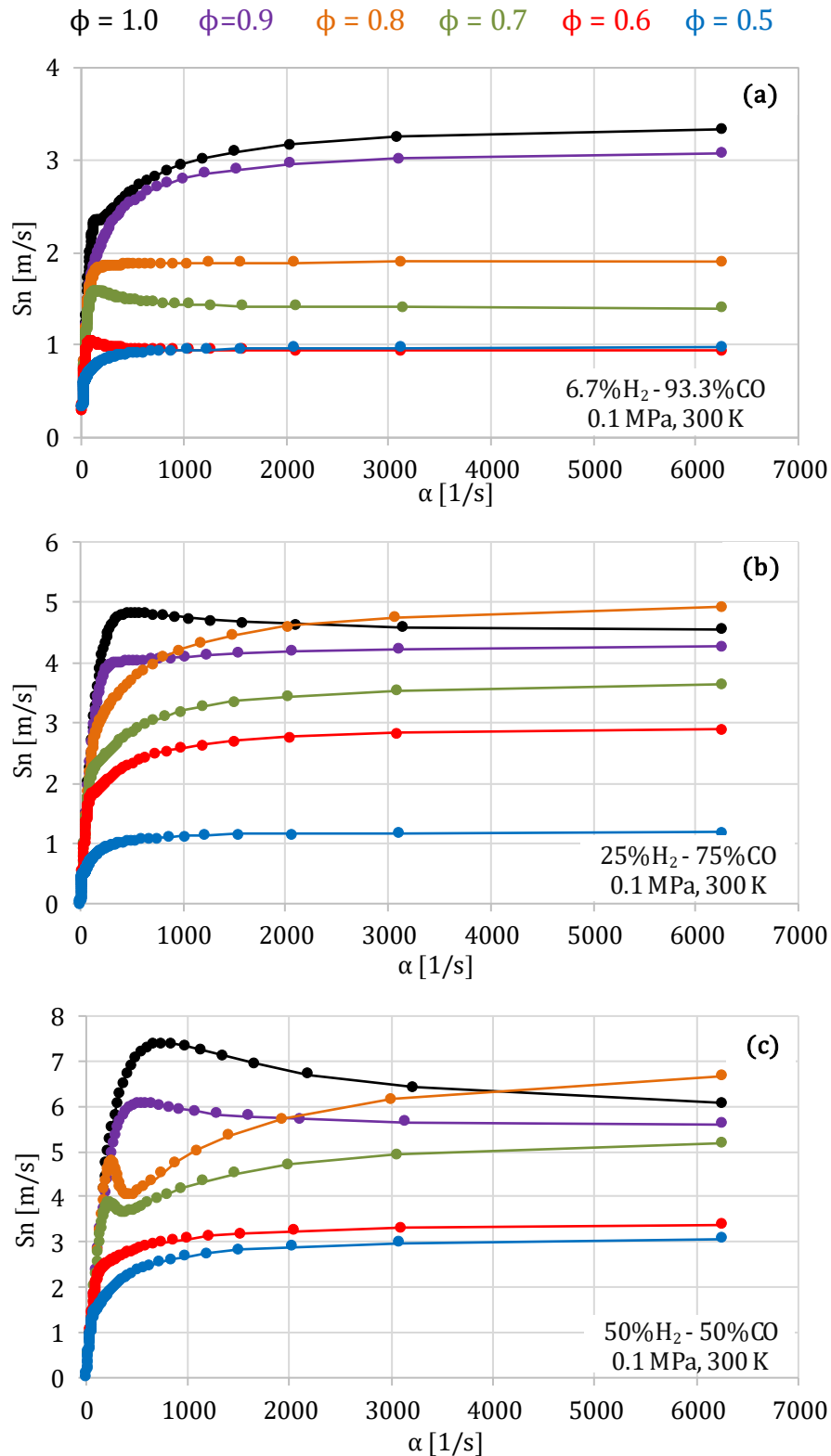


Figura 8.15: Velocidad de propagación de frente de llama versus la tasa de stretch para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K. (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H₂.

Similares tendencias se pueden observar cuando se representa la velocidad de propagación de la llama S_n frente a la tasa de stretch α (Figura 8.15). A medida que aumenta el dosado, para una misma tasa de stretch de la llama, aumenta la velocidad de

propagación de la llama. Estas curvas también tienen una primera sección en la que la velocidad de propagación de la llama aumenta fuertemente con la velocidad de estiramiento, y una sección final en la que la velocidad apenas depende del estiramiento de la llama. Se debe tener en cuenta que la parte derecha de estas líneas, correspondiente a los mayores índices de tasa de stretch, se refiere al inicio de la combustión; es decir, el inicio del frente de llama conduce a las tasas de stretch más altas debido al rápido crecimiento del frente de llama y, a medida que aumenta el radio, el stretch disminuye.

A partir de los gráficos anteriores de S_n , se puede obtener la velocidad de propagación de la llama libre de stretch S_l , mediante la extrapolación hacia el eje de ordenadas de las líneas de S_n en la parte de las curvas en las que la S_n se hace prácticamente independiente del stretch ($\alpha = 0$). Los resultados se presentan en la *Figura 8.16*. Para cada proporción de H₂ en el gas de síntesis, la tendencia general es de aumento de la velocidad de propagación de llama libre de stretch con el aumento del dosado, con pequeñas fluctuaciones en torno a dicha tendencia lineal.

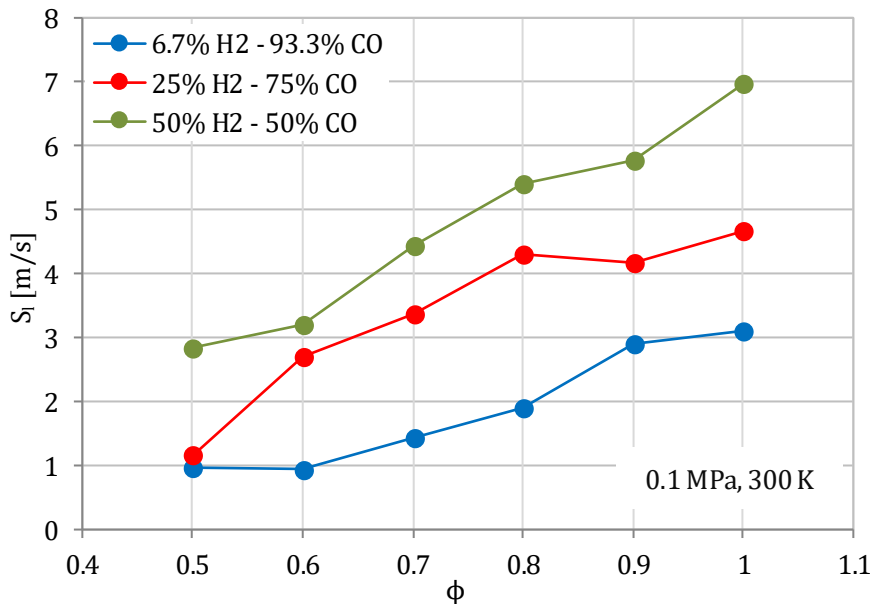


Figura 8.16: Velocidad de propagación de frente de llama S_l en función del dosado para distintas proporciones de H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K. (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H₂.

Velocidad de combustión laminar u_l^0

Finalmente, y para terminar con el estudio paramétrico sobre el análisis de las imágenes y cómo influye la variación del dosado, se presenta en la *Figura 8.17* la evolución de la velocidad de combustión laminar sin efectos de stretch u_l^0 función del dosado.

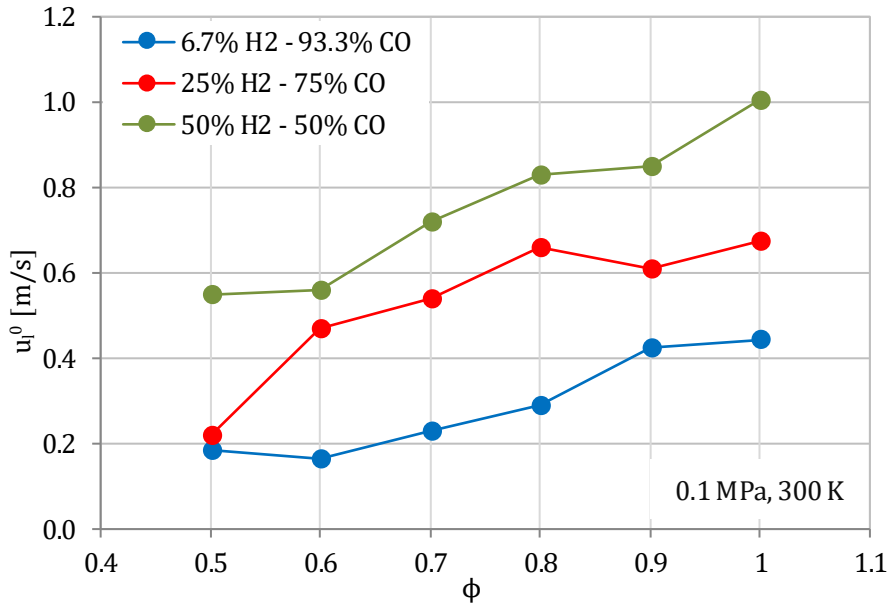


Figura 8.17: Velocidad de combustión sin stretch u_l^0 función del dosado, con distintas proporciones de H₂ y con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K.

Como ya se ha indicado, esta velocidad u_l^0 equivale a la velocidad del frente sin stretch S_l multiplicada por la relación de densidades. Por ello, las tendencias son similares a las de S_l . Se observa claramente el aumento de la velocidad de combustión laminar a medida que se incrementa el dosado relativo. Además, con esta gráfica, se puede también comprobar la influencia combinada de la composición de la mezcla y del dosado. Se aprecia que, a medida que aumenta el contenido en hidrógeno de la mezcla, la pendiente media de la curva se hace más pronunciada. Esto implica que, por ejemplo, un aumento de dosado de 0.7 a 0.8 en una mezcla con 50% H₂ – 50% CO, tiene un incremento en la velocidad de combustión laminar mayor que una mezcla con 6.7% H₂ – 93.3% CO, con el mismo aumento de dosado. Es decir, que es el efecto del contenido de hidrógeno en la mezcla es cualitativamente más influyente sobre la velocidad de combustión laminar.

8.4 Comparación de resultados de la velocidad de combustión laminar

8.4.1 Resultados obtenidos por ambos métodos

Una vez presentados por separados los resultados obtenidos mediante los dos métodos (análisis de la presión y seguimiento de imágenes), es interesante hacer una comparación entre las velocidades de combustión libres de stretch obtenidas por cada método. De esta forma, se pueden extraer las conclusiones adecuadas sobre la influencia

del contenido de hidrógeno en la mezcla y la variación del dosado en cada mezcla, durante desarrollo del proceso de combustión. La velocidad de combustión a condiciones de referencia (0.1 MPa y 300K), u_l^p obtenida por el método de las presiones (MP, líneas de trazos), se compara con la velocidad sin stretch ($\alpha = 0$), u_l^o , obtenida con el análisis de imagen (MI, líneas continuas), se presentan en la *Figura 8.18*, donde se aprecia un buen acuerdo entre ambas metodologías, siendo las velocidades obtenidas por el método de las imágenes superiores en casi todos los puntos a las del método de las presiones, en las mezclas con 25% H₂ y 50% H₂.

También es interesante ver que las diferencias más pequeñas ocurren para la mezcla de H₂ al 6.7%. Esto se debe a que, como ya se mencionó en el apartado correspondiente, a mayores contenidos de hidrógeno en la mezcla favorecen la inestabilidad de la llama y aumentan la rugosidad superficial. Esta irregularidad del frente de llama dificulta que el algoritmo de imagen obtenga el radio durante el análisis del video de combustión. Además, el aumento de la velocidad de combustión originado por el mayor contenido de hidrógeno provoca que en el método de las imágenes, para una cierta tasa de registro de imágenes en la cámara de alta velocidad, el número de fotogramas válidos se reduzca en el rango de crecimiento del radio entre el inicio y 5 cm.

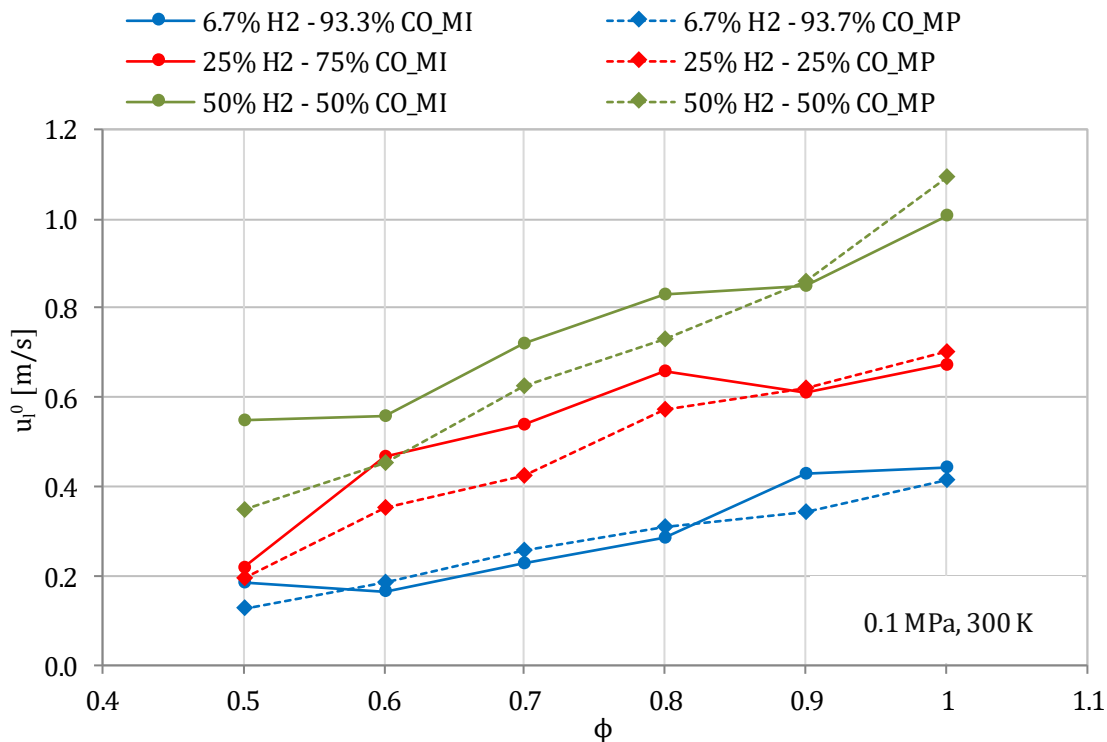


Figura 8.18: Comparación de la velocidad de combustión obtenidas por método de las presiones y de las imágenes, para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K.

8.4.2 Comparación con resultados de otros autores.

Para finalizar, es conveniente comprobar los resultados de la velocidad de combustión laminar, obtenidos en por ambos métodos con los obtenidos por diferentes autores, para validar la metodología. Para ello, en la *Figura 8.19*, se recogen las comparaciones de la velocidad de combustión laminar en función del dosado, con los de diferentes autores, para las mezclas 6.7% H_2 – 93.3% CO , 25% H_2 – 75% CO y 50% H_2 – 50% CO .

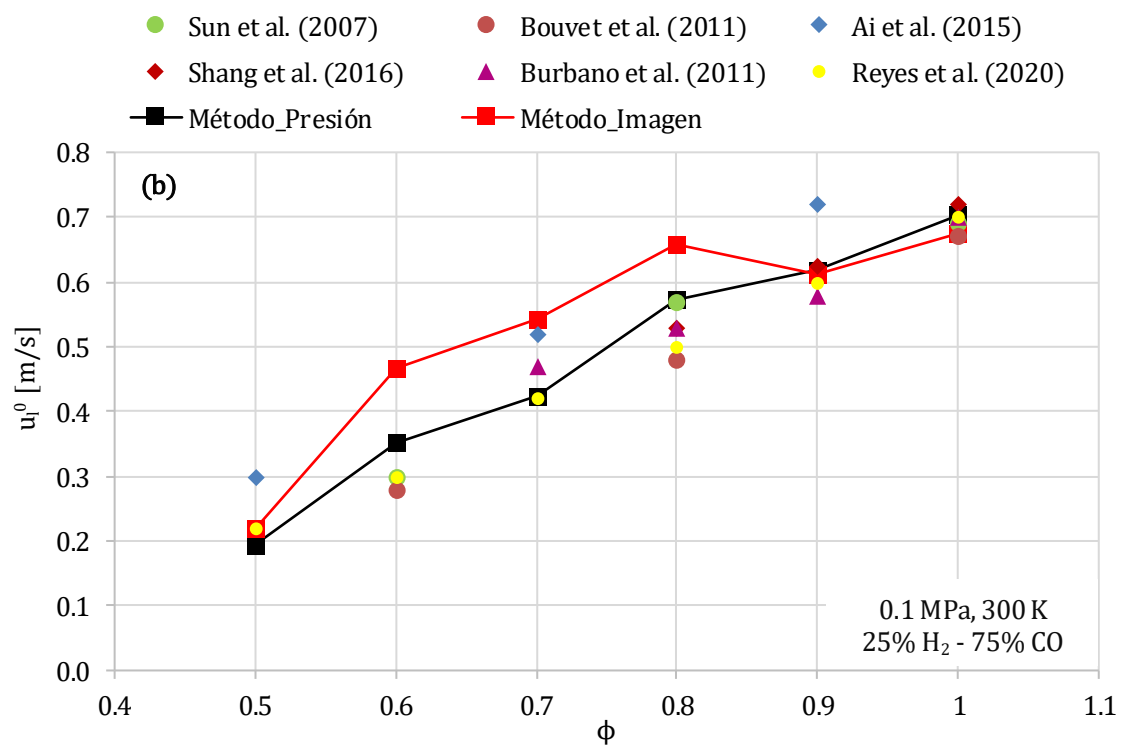
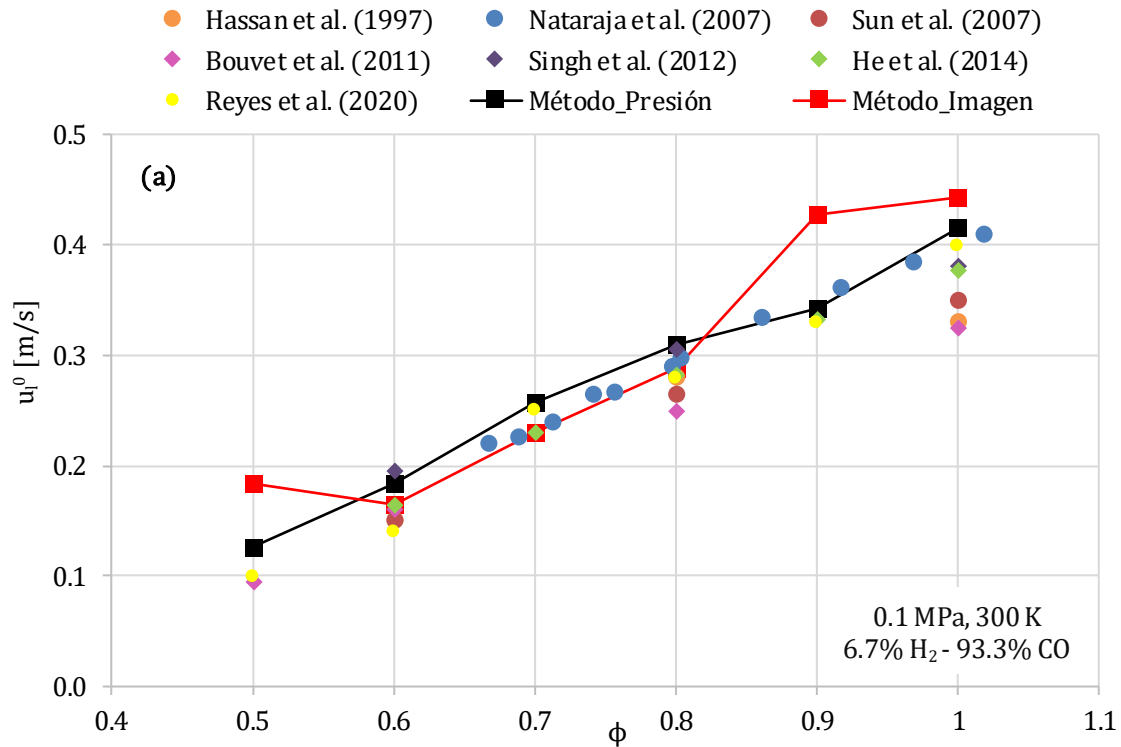
Para el caso de la mezcla 6.7% H_2 – 93.3% CO , *Figura 8.19(a)*, los valores de la velocidad de combustión resultantes en ambos métodos son similares y van en el mismo rango que los obtenidos por los autores. Es importante mencionar, que los datos de otros autores son para la mezcla 5% H_2 – 95% CO , por lo que los resultados del presente trabajo, con 6.7% H_2 , debería ir sistemáticamente por encima de los correspondientes al 5%, como sucede en los dosados bajos-medios. En general los resultados de la velocidad laminar de combustión del método de las presiones presentan menos desviaciones respecto a los del método de las imágenes, principalmente en los dosados más bajos y altos. Aun así, los resultados del presente trabajo, para esta mezcla combustible, pueden ser validados.

En cuanto a la mezcla 25% H_2 – 75% CO , *Figura 8.19(b)*, los valores de la velocidad de combustión resultantes de ambos métodos también son similares a los obtenidos por los autores. Nuevamente, la velocidad de combustión laminar del método de las presiones coincide más con los resultados de otros autores que la velocidad del método de las imágenes. Los resultados, correspondientes a los dosados de 0.6, 0.7 y 0.9, son similares a los de Ai et al. [183], que obtuvieron sus experimentos mediante una bomba cilíndrica de doble cámara. Una vez más, por seguir la misma tendencia y ser del mismo orden que los de la bibliografía, los resultados de ambas bombas se pueden considerar válidos.

Para la mezcla 50% H_2 – 50% CO , *Figura 8.19(c)*, los resultados obtenidos en el presente trabajo, tanto en el método de las presiones como en el de las imágenes, se asimilan más a los reportados por los autores. Por tanto, estos resultados y la metodología experimental empleada se dan por válidos.

RESULTADOS EXPERIMENTALES PARA MEZCLAS DE SYNGAS (H₂-CO)

Para las tres proporciones de H₂ consideradas, los resultados obtenidos por Reyes et al. [184], fueron obtenidos en una bomba de combustión esférica en el laboratorio de motores de la Universidad de Valladolid, y los mismos presentan un mejor ajuste con los resultados obtenidos mediante el método de las presiones en el presente trabajo.



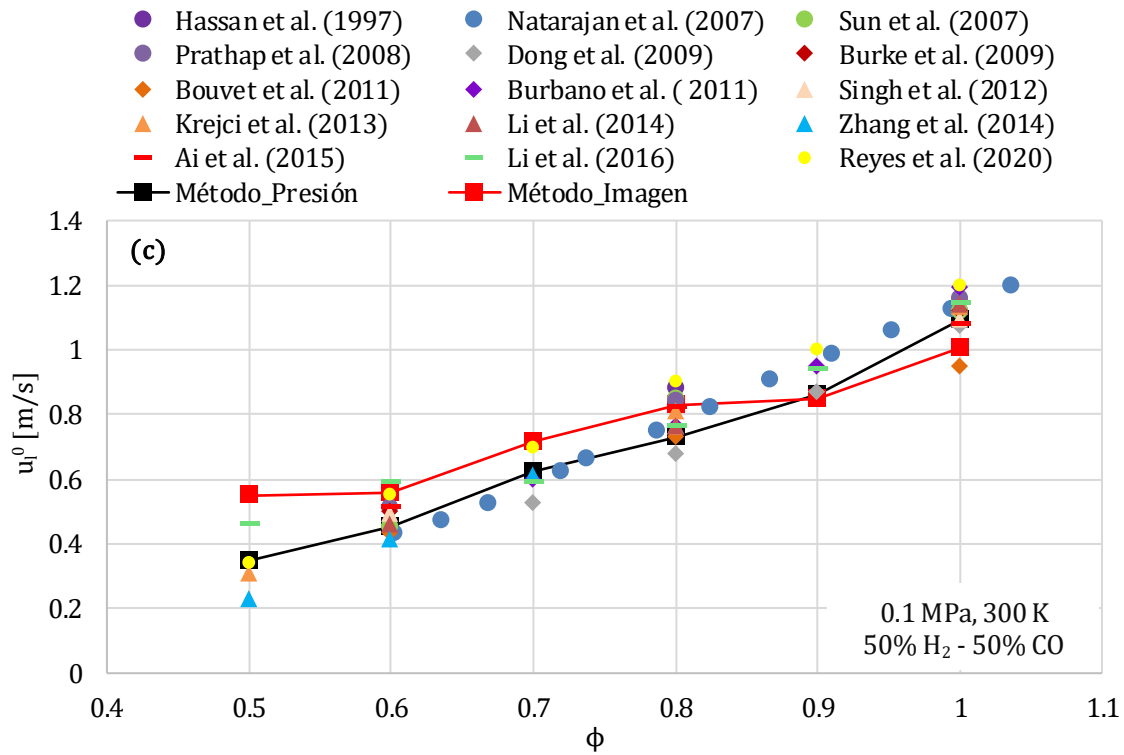


Figura 8.19: Comparación de la velocidad de combustión obtenida por método de las presiones y de las imágenes con otros autores para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K con distintas proporciones de $H_2 - CO$.

8.5 Conclusiones sobre los resultados de mezclas de Syngas ($H_2 - CO$)

Finalmente, para concluir este capítulo, se puede afirmar que la combustión del gas de síntesis se ha caracterizado por mezclas de sus principales constituyentes, hidrógeno y monóxido de carbono. Las mezclas probadas tienen porcentajes de H_2 de 0, 6.7, 25, 50, 80 y 100%, por lo que cubren la gama completa de las composiciones de gas de síntesis más típicas. Además, el dosado para estas mezclas se ha variado desde 0.5 hasta la estequiometría, rango que resulta interesante para la posterior aplicación en motores de combustión interna, ya que estos valores permitirían ahorros de combustible (condiciones pobres) y la compatibilidad con post -sistemas de tratamiento de emisiones contaminantes (estequiometría).

Para el análisis de los datos se han utilizado dos métodos ampliamente estudiados. En primer lugar, el método de análisis de las presiones, donde se ha utilizado un modelo de diagnóstico de dos zonas para procesar los datos obtenidos. Y en segundo lugar, el método óptico que se basa en el registro de imágenes Schlieren del frente de llama durante el proceso de combustión, para posteriormente tratar las imágenes obtenidas y

así obtener diferentes variables características del proceso como lo son el radio y la presencia de celularidad.

Con respecto a la composición de la mezcla, se ha encontrado que el contenido de hidrógeno aumenta la velocidad de combustión, acompañado de un ligero aumento de la presión máxima obtenida. Estos mismos efectos se obtienen cuando aumenta el dosado relativo para cada proporción de H₂ en la mezcla. Finalmente, la velocidad de combustión laminar obtenida por ambos métodos se ha validado, al ser comparada con los resultados anteriores obtenidos por otros autores, a las mismas condiciones iniciales y de mezclas y que han sido citados en la bibliografía, obteniendo una buena concordancia con sus valores.

CAPÍTULO 9

Resultados de simulación CFD

9.1	Estudios de sensibilidad al tamaño de malla e intervalo de tiempo de cálculo en la combustión de una mezcla combustible de CH ₄ - aire	216
9.2	Modificación de la geometría del frente de llama debida al confinamiento dentro de la cámara cilíndrica.....	221
9.2.1	Resultados relativos al crecimiento del frente de llama.....	222
9.2.2	Resultados relativos a la velocidad de combustión calculada mediante la simulación CFD	230
9.3	Conclusión sobre los resultados de la simulación CFD	232

9 RESULTADOS DE SIMULACIÓN CFD

En el capítulo 5 se describe la metodología desarrollada para poder calcular los procesos asociados a los experimentos de combustión en la bomba cilíndrica mediante simulación CFD. La orientación y los objetivos principales de esta tesis son la obtención de resultados experimentales de las velocidades de combustión de diversas mezclas de combustible. Como objetivo complementario de la tesis, se ha planteado realizar en paralelo una simulación numérica de algunos de los procesos de combustión realizados experimentalmente en la bomba de combustión cilíndrica. Para ello se ha utilizado el software FIRE-AVL [171], que permite considerar geometrías reales y plantear y resolver las ecuaciones de conservación del flujo, así como las de la cinética asociadas a las reacciones de combustión.

En este capítulo se presentan los resultados correspondientes a una **mezcla estequiométrica de metano-aire** con condiciones iniciales de $p_i = 0.1 \text{ MPa}$ y $T_i = 300\text{K}$.

9.1 Estudios de sensibilidad al tamaño de malla e intervalo de tiempo de cálculo en la combustión de una mezcla combustible de CH_4 - aire

Una vez definida la metodología para la simulación numérica como se recoge en el *Capítulo 5*, como este trabajo era pionero en simulaciones CFD dentro del grupo de investigación, se tenía que empezar desde las bases y definir cuál sería el tamaño de elemento óptimo que permite obtener resultados significativos del proceso real de la bomba de combustión, puesto que el tamaño de las celdas de la malla de cálculo es muy importante en los procesos de combustión.

Para el cálculo se parte de la geometría de la bomba de combustión cilíndrica, recordándose que el diámetro interior es de 114.3 mm y la altura entre las bases de cristal de 135.0 mm. Puesto que calcular y resolver las ecuaciones de conservación y de cinética en todo el volumen físico (1385 cm^3) está fuera de la capacidad de cálculo disponible, se realizaron diversos procesos de cálculo para determinar qué porción de geometría de la bomba es factible utilizar. Se iniciaron las pruebas con un octavo de la bomba, ya que en su momento se estaba empezando a aprender sobre el software FIRE-AVL, y el mallado dificultaba en gran medida el modelo. Posteriormente se probó con una porción más

pequeña del volumen, un dieciseisavo de la bomba (*ver apartado 5.3.1*). En paralelo con la porción de la geometría a utilizar, se probó con distintos tamaños de los elementos. Así, se realizaron pruebas con dos tamaños de elementos: malla gruesa (1 mm) y malla fina (0.5 mm).

Para tomar una decisión de cuál es el tamaño de malla más adecuado teniendo en cuenta el tipo de proceso y los medios de cálculo disponibles, se graficaron los resultados obtenidos de la fracción de masa quemada (FMQ) y de su derivada (dFMQ). En la *Figura 9.1* se muestran dichos resultados de forma comparada entre las figuras de la izquierda (1/8) y de la derecha (1/16). Se puede ver que, para los dos tamaños de malla considerados, los resultados son muy parecidos para las porciones de un octavo y de un dieciseisavo del volumen de la bomba de combustión, dada la geometría cilíndrica de ésta. Por ello, se adoptó realizar el resto de los cálculos **con la porción de un dieciseisavo** del volumen de la bomba.

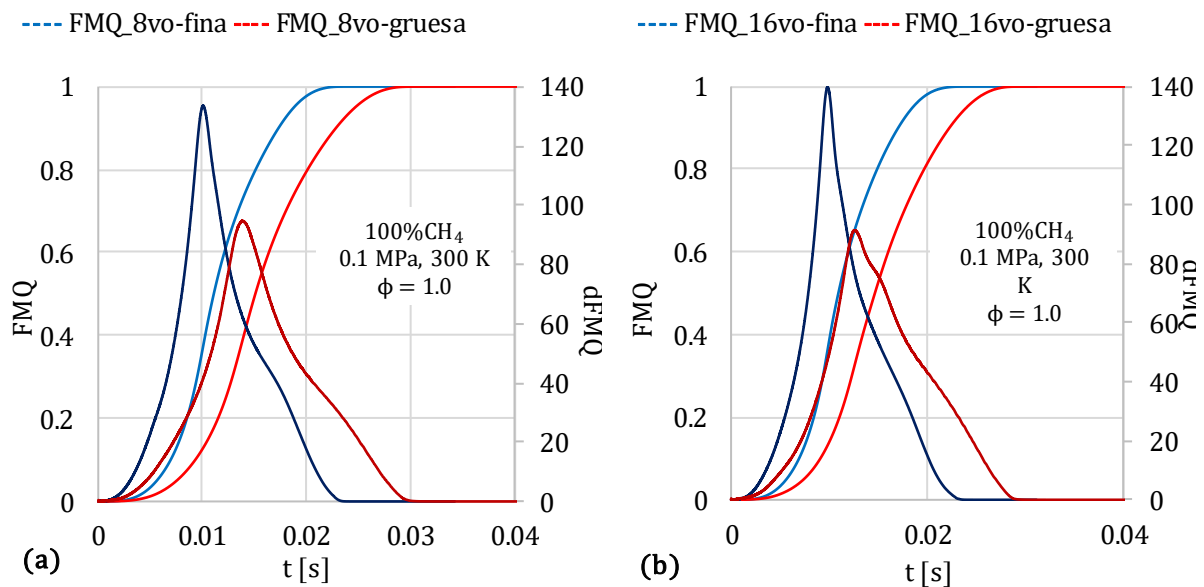


Figura 9.1: Pruebas de porción de geometría y tamaño de malla. (a) un octavo de bomba; (b) un dieciseisavo de bomba.

En cuanto al efecto del tamaño de los elementos, se puede observar que los resultados con los dos tamaños de malla son cualitativamente similares. La malla más fina adelanta el desarrollo de la combustión frente a la malla más gruesa. Se probó también con un tamaño de malla aún más fina, pero al almacenarse tantos datos durante la simulación, se desbordaba la capacidad de los recursos computacionales disponibles. Por

ello, si bien no se ha realizado un estudio exhaustivo de sensibilidad, se ha adoptado como tamaño de malla de cálculo la correspondiente a la malla fina (0.5 mm).

Una vez adoptada la porción de geometría y tamaño de la malla a utilizar en los cálculos, se prosiguió a realizar nuevas simulaciones para tratar de determinar los parámetros más adecuados para los cálculos. Es importante resaltar que este proceso numérico tiene un tiempo computacional largo (1 semana) por simulación y una necesidad de almacenamiento de alrededor de 25 gigabytes.

Un parámetro muy importante es el **intervalo de tiempo de cálculo** (time step), puesto que, si éste es muy grande en relación con la velocidad del proceso, se pierde información entre pasos de tiempo. Se realizaron simulaciones numéricas para diferentes tamaños de pasos de tiempo (10, 100, 300, 500 μ s). Adicionalmente también se realizaron pruebas variando el **coeficiente CFP** que es parte del modelo de combustión elegido para el proceso (*ver capítulo 5*), ya que el mismo determina la tasa de reacción.

En la *Figura 9.2* se muestra la evolución temporal de la presión calculada para un proceso de combustión, con **diferentes valores del intervalo de tiempo de cálculo**. Se ha representado también la curva de presión experimental para las mismas condiciones iniciales. Estos resultados se obtuvieron con un valor del coeficiente CFP de cinética química de 2.0. Se puede ver que al reducir el intervalo de tiempo de integración desde un valor que puede considerarse como grande, 500 μ s, es decir aproximadamente 1/100 de la duración del proceso (que es del orden 50 ms) hasta un valor de 10 μ s, es decir, 1/5000 de la duración del proceso). Se puede ver que, al reducir el intervalo de tiempo, la velocidad a la que se desarrolla el proceso aumenta, alejando la curva calculada de la experimental. En este gráfico también se puede ver que con la simulación se alcanza una p_{max} de 0.9 MPa, mientras que experimentalmente la p_{max} es de 0.7 MPa. Esta diferencia se atribuye a que en el proceso experimental se queda mezcla combustible sin quemar y por ello no se alcanza la misma presión.

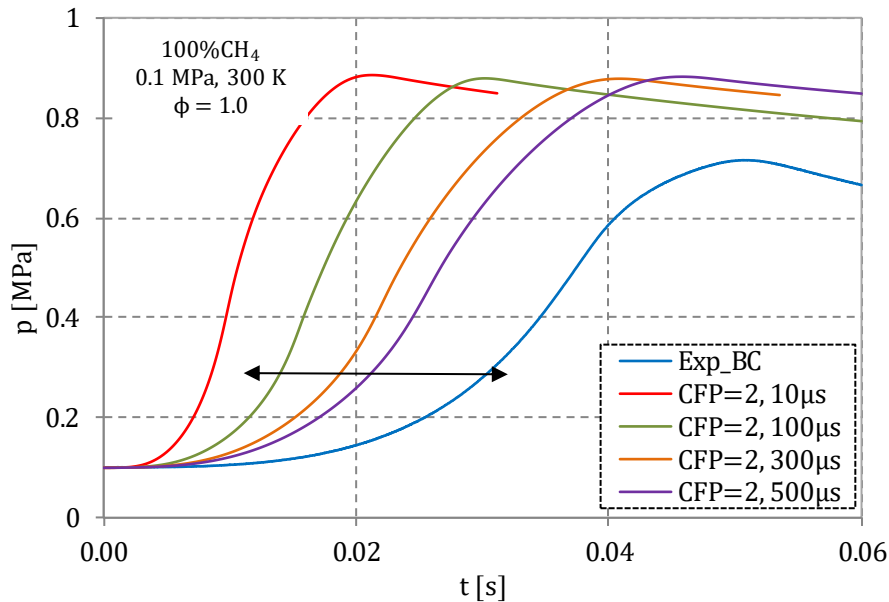


Figura 9.2: Evolución temporal de la presión media para el modelado CFD.

Debido a que, a pesar de variar el intervalo de tiempo de cálculo, no se logró que las curvas de presión resultado de la simulación se acercaran a la curva experimental, se procedió a realizar simulaciones variando el coeficiente CFP antes mencionado, considerando dos valores del intervalo de tiempo de cálculo: 10 μ s y 100 μ s. Para el coeficiente CFP se eligieron los valores de 1.0, 1.1, 1.2, 1.5 y 2. La Figura 9.3, muestra los resultados de las curvas de evolución de la presión **variando el CFP**, para 10 μ s, Figura 9.3a y para 100 μ s Figura 9.3b.

En ambas figuras se puede ver que al reducirse el valor del CFP la curva de presión simulada se acerca más a la curva experimental, es decir que el proceso ocurre más lento a medida que disminuye este parámetro, consecuencia de que se reduce el valor de la tasa de reacción efectiva.

Para identificar mejor el efecto sobre la velocidad de combustión de cada caso calculado y poder compararla con la velocidad de combustión experimental, se planteó aplicar un método simplificado de análisis de la presión, con gran rapidez de cálculo. Este método está basado en el propuesto por Lewis & Von Elbe [116], y tiene la ventaja de una gran rapidez de cálculo, ya que la velocidad de combustión se obtiene a partir de una expresión explícita de la derivada de la presión y otras variables termodinámicas características de cada proceso de combustión, con la hipótesis de un crecimiento esférico del frente de llama. Este método se detalló en el apartado 3.4.2.2, obteniéndose la ecuación

25, que proporciona un valor aproximado de la velocidad de combustión directamente a partir de la presión y de la derivada temporal de la misma.

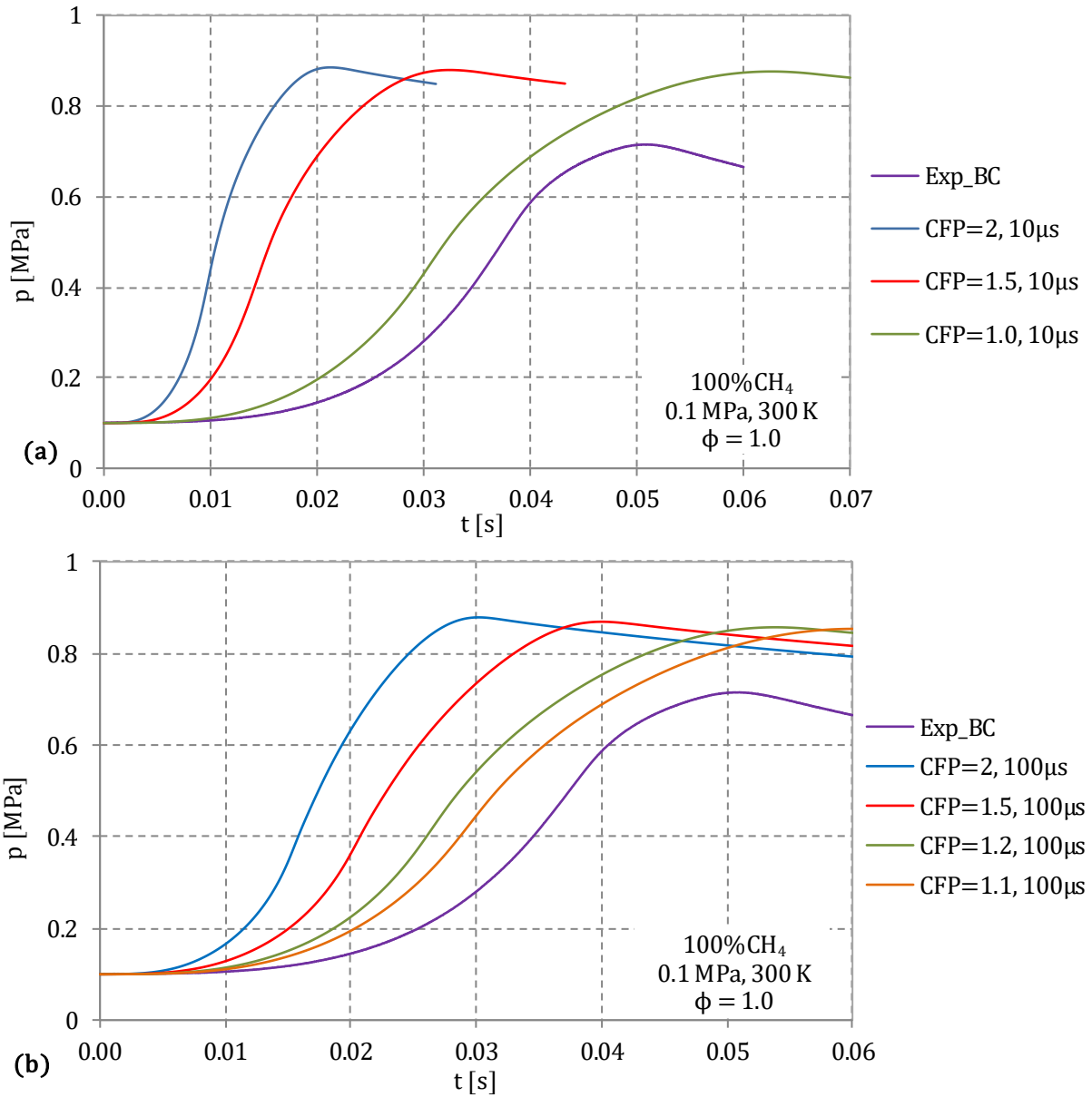


Figura 9.3: Evolución temporal de la presión media para el modelado CFD.

Así, en la *Figura 9.4* se muestran los gráficos del efecto del coeficiente CFP para dos valores del intervalo de tiempo de cálculo sobre la **velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca**, obtenida a partir de las presiones calculadas y la experimental de la *Figura 9.3*. En ambas partes de la *Figura 9.4* se puede ver el efecto que tiene sobre la velocidad de combustión el aumento del coeficiente CFP por encima del valor 1.0, tanto para el intervalo de tiempo de 10 μs (*Figura 9.4a*) como para 100 μs (*Figura 9.4b*).

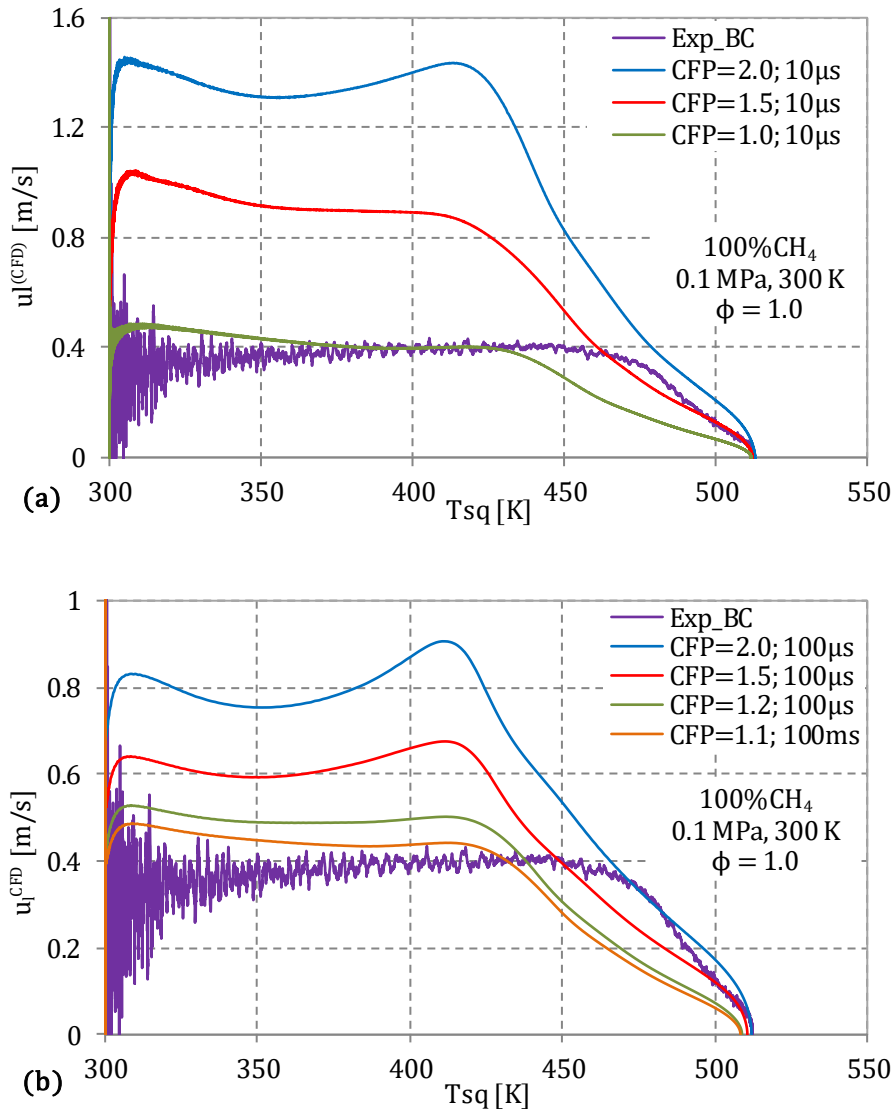


Figura 9.4: Velocidad de combustión de simulación CFD frente a la temperatura de la mezcla fresca.

Como conclusión general, se puede ver el que valor CFP = 1.0 proporciona valores de la velocidad de combustión calculada del mismo orden que los obtenidos experimentalmente, si bien se puede observar diferencias en los valores absolutos, tanto al inicio de la combustión, como hacia el final de la misma.

9.2 Modificación de la geometría del frente de llama debida al confinamiento dentro de la cámara cilíndrica

Uno de los objetivos de la simulación con CFD era el de poder desarrollar una metodología que fuera capaz de identificar la evolución de la geometría del frente de

llama, teniendo en cuenta que, al crecer, éste podría perder la simetría esférica, debido a que la propia bomba de combustión tiene una geometría cilíndrica, y los efectos de pared se “sienten” por el frente de llama incluso a distancias importantes de las paredes. Como consecuencia, el frente de llama pierde el carácter de superficie esférica y el volumen de quemados se asemeja a un elipsoide, si bien no es estrictamente dicha figura geométrica. La deformación del volumen depende de las características del desarrollo de la combustión y afecta al cálculo de la velocidad de combustión en la superficie del frente de llama.

En las siguientes imágenes se presenta los resultados del algoritmo descrito en el *capítulo 5* para obtener la forma y posición del frente de llama cuasi-elipsoidal, es decir, permitiendo que la propagación en dirección axial pueda ser diferente de en dirección radial, y a su vez con un exponente n que puede adoptar valores menores o mayores que 2. Para ello, se ha desarrollado un procedimiento que, a partir de los resultados de la posición del frente de llama con la simetría cilíndrica considerada, permite obtener los valores de los semiejes del elipsoide y el exponente n , todos ellos en función del avance del proceso de combustión con el tiempo.

9.2.1 Resultados relativos al crecimiento del frente de llama

La *Figura 9.5* muestra el seguimiento de la posición del frente de llama calculado, usando el algoritmo desarrollado. Se presentan imágenes del frente de llama simulada en diferentes instantes de tiempo considerando la coordenada axial Z (en horizontal) y la coordenada radial R (en vertical). Es importante resaltar que la imagen representa solo un cuarto de la bomba, en una vista lateral, perpendicular al eje axial del cilindro de la bomba. Se puede ver que el algoritmo para encontrar la posición del frente de llama funciona adecuadamente, ya que las líneas negras determinan la posición de éste, considerando un cierto espesor del mismo.

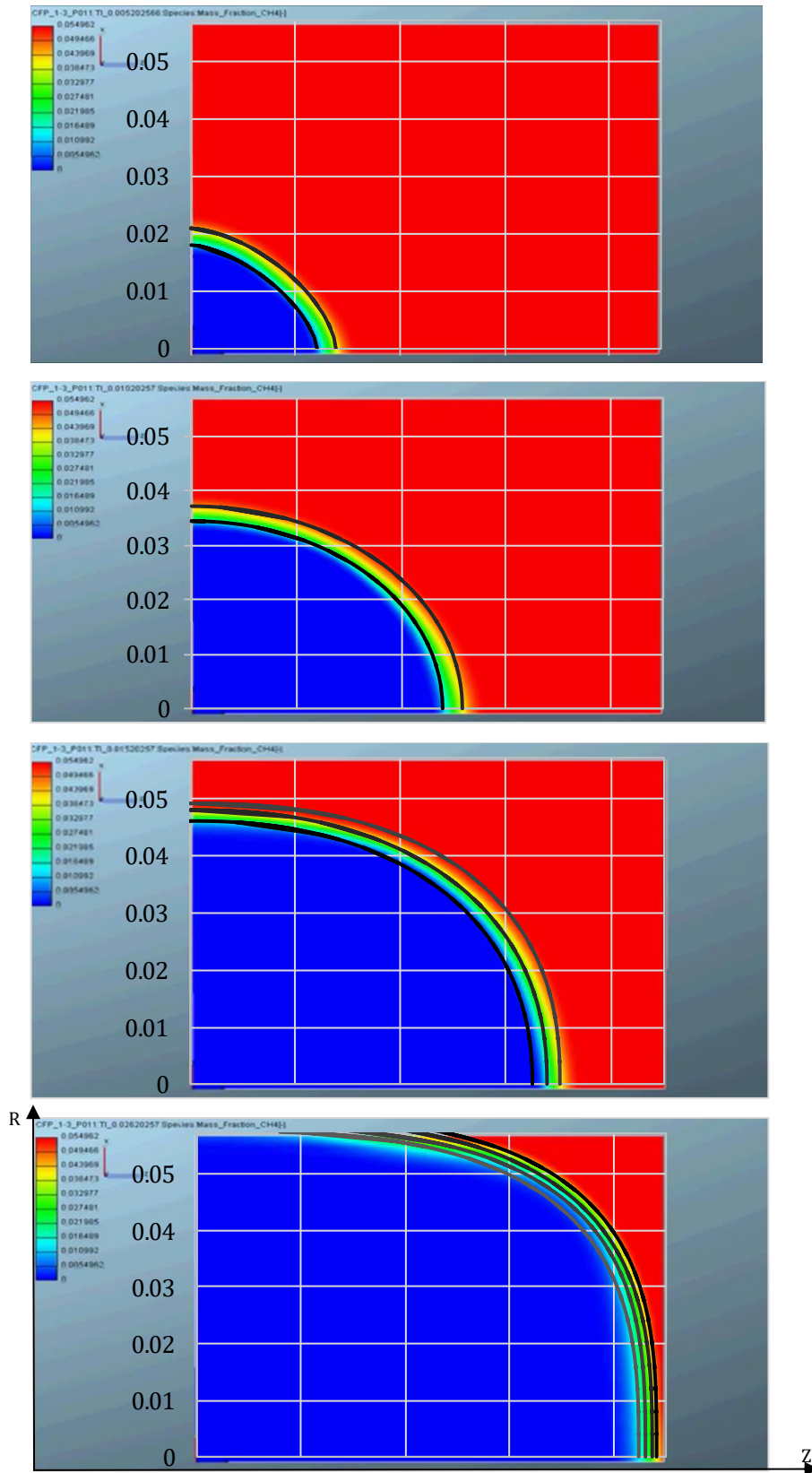


Figura 9.5: Seguimiento de la posición del frente de llama por el algoritmo desarrollado.

Por simple observación se puede constatar que el crecimiento del frente de llama es mayor en la dirección axial que en la radial. Como consecuencia, la superficie del frente

de llama que encierra el volumen de los gases quemados es mayor que si este volumen fuera estrictamente esférico. Esto es importante a la hora de determinar la velocidad de combustión como relación entre la tasa de combustión y el producto de la superficie del frente por la densidad de la zona sin quemar. La velocidad obtenida al considerar el frente de llama no esférico debe, en consecuencia, ser más parecida a la velocidad de combustión laminar de la mezcla.

Una vez que se ha podido comprobar que el algoritmo identifica adecuadamente la posición del frente de llama, se pasó a determinar los valores de los semiejes (axial z_0 y radial r_0) y del exponente n , y, a partir de los mismos, el área y el volumen de la zona de los quemados y no quemados, para poder calcular así la velocidad de combustión con la nueva superficie del frente de llama deformado.

En la *Figura 9.6*, se presenta la evolución temporal los valores de los semiejes z_0 y r_0 y del exponente n . A la vista de los mismos, se puede decir que el frente de llama es prácticamente esférico en los primeros momentos del avance del radio de llama, ya que se coinciden los valores de los dos semiejes, tanto en la dirección axial z_0 , como en la radial r_0 . Por su parte, el exponente n que representa la curvatura o forma de la llama en cada instante de tiempo, adopta valores que crecen desde menos de 2 (caso para una esfera de semiejes iguales, o de un elipsoide puro) hasta valores superiores a 3. En el inicio de la combustión los valores del exponente n tienen una tendencia irregular, consecuencia de la dificultad de ajuste en las imágenes para pequeños radios de llama.

A partir del tiempo desde el inicio de la combustión de 6 ms, ambos semiejes empiezan a adoptar valores diferentes (mayor z_0 que r_0), al mismo tiempo que el exponente n crece por encima del valor de referencia 2. Todo ello se corresponde con que el frente de llama se separa de la geometría esférica y tiende a una geometría cuasi-elipsoidal que se ha indicado.

Estudios realizados por Burke et al. [185], muestran que el frente de llama se mantiene de forma esférica en la zona comprendida entre $r_f < 0.3r_w$ y $r_f < 0.6r_w$, siendo r_f el radio de llama y r_w el radio de la bomba cilíndrica (57 mm en este trabajo). El límite de esta zona (0-34 mm) se ha resaltado con un círculo en color rojo en el gráfico.

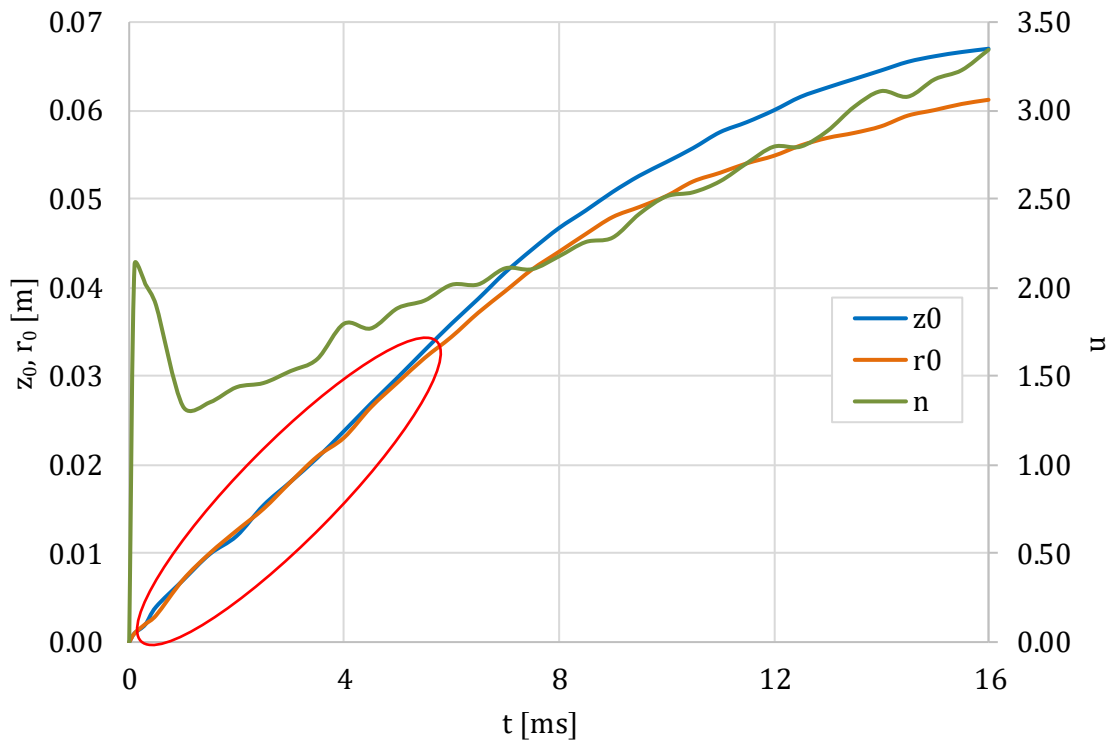


Figura 9.6: Evolución temporal del radio de frente de llama en dirección axial y radial.

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestra de manera gráfica la evolución de la geometría ajustada del frente de llama. Se puede ver como a partir de 6 ms (resaltado en rojo), correspondiente a unos valores medios del radio (semiejes) de 0.035 m, se empieza a deformar el frente de llama, tanto porque comienza a achatare en la dirección radial, mientras se alarga en la axial, como porque el exponente n adopta valores superiores a 2, generando una geometría de paralelepípedo con vértices redondeados.

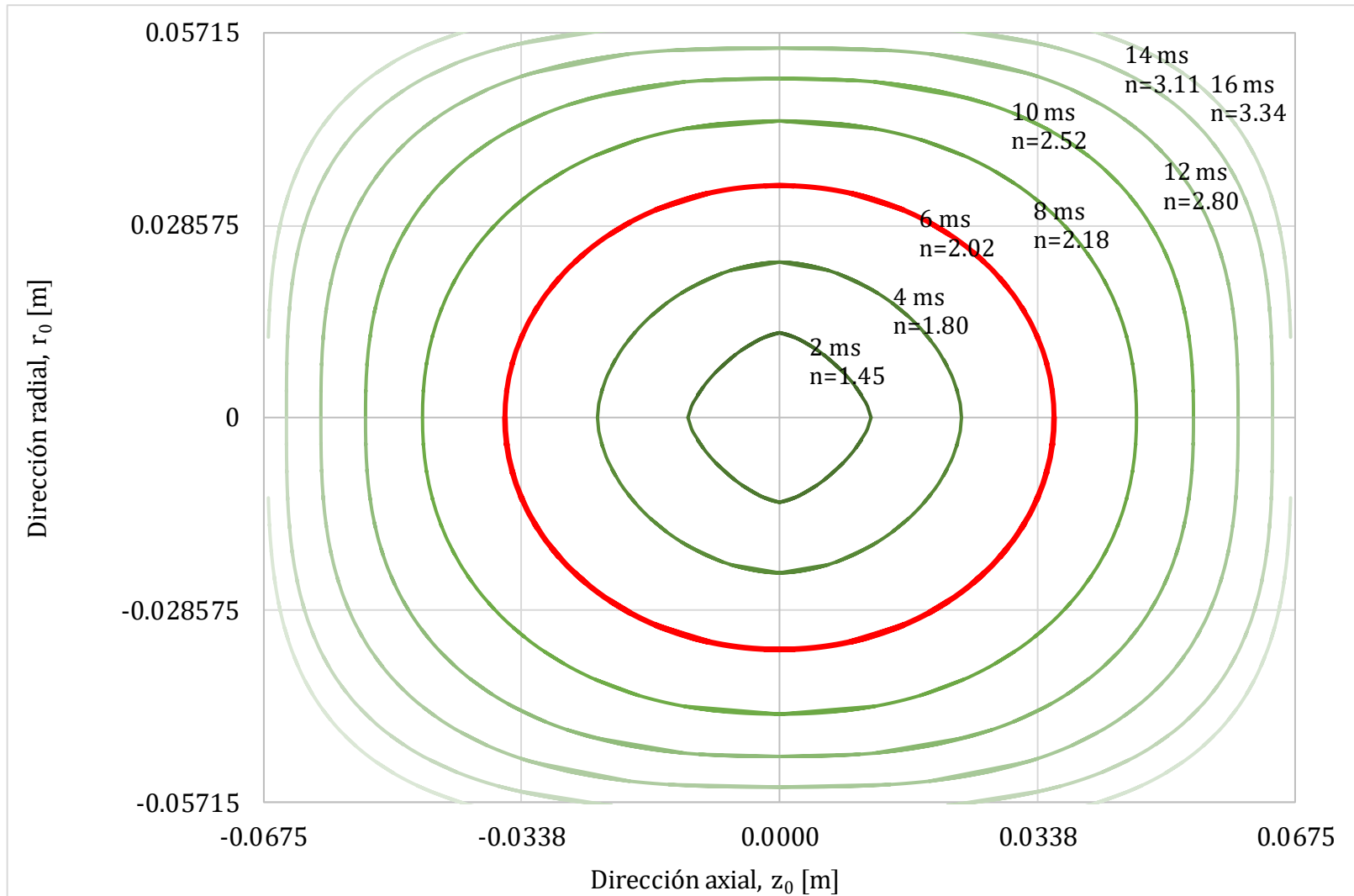


Figura 9.7: Evolución de la forma del frente de llama ajustado dentro de la bomba cilíndrica.

A partir de los correspondientes valores de r_0 , z_0 y n en cada instante de tiempo, en la *Figura 9.8* se presenta la evolución de la superficie del frente de llama (curva azul) y el volumen de gases quemados (curva roja). Puede verse que la superficie del frente de llama aumenta a medida que avanza el tiempo, si bien presenta algunas oscilaciones en las etapas finales del proceso inherentes al propio proceso de ajuste. Por su parte el volumen apenas presenta oscilaciones e igualmente avanza creciente con el tiempo.

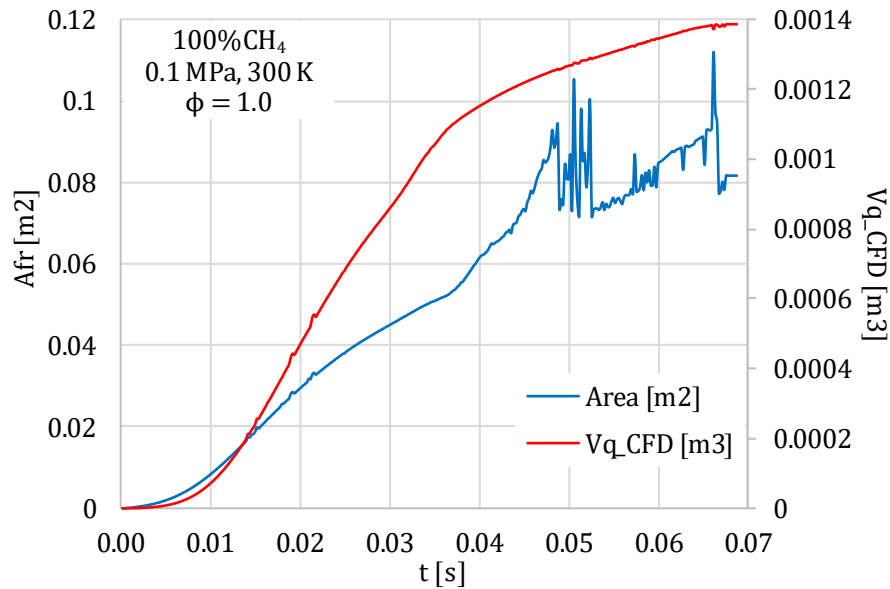


Figura 9.8: Área de frente de llama y volumen de la mezcla quemada frente al tiempo.

Es importante indicar que estos son los primeros resultados del procedimiento desarrollado, por lo que aún queda margen de mejora en cuanto a ajustes del mismo.

El volumen de la zona quemada (curva roja) y de la mezcla no quemada (curva azul) calculado mediante el algoritmo que resuelve la integral para el volumen (ver ecuación 48) se muestra en la *Figura 9.9*. También se presenta la línea de volumen experimental (curva verde) de la zona quemada. En la figura se puede ver que las curvas son muy similares en las etapas iniciales de la combustión. De hecho, para tiempos inferiores al de referencia de 6 ms indicado para la *Figura 9.6* y **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**, los volúmenes calculado y experimental son coincidentes. A medida que avanza la combustión, el volumen calculado crece más rápidamente que el experimental. Sin embargo, en el tercio final del proceso de combustión, el volumen calculado crece más lentamente que el experimental, debido a la influencia que tiene el confinamiento del frente dentro de la geometría cilíndrica de la bomba.

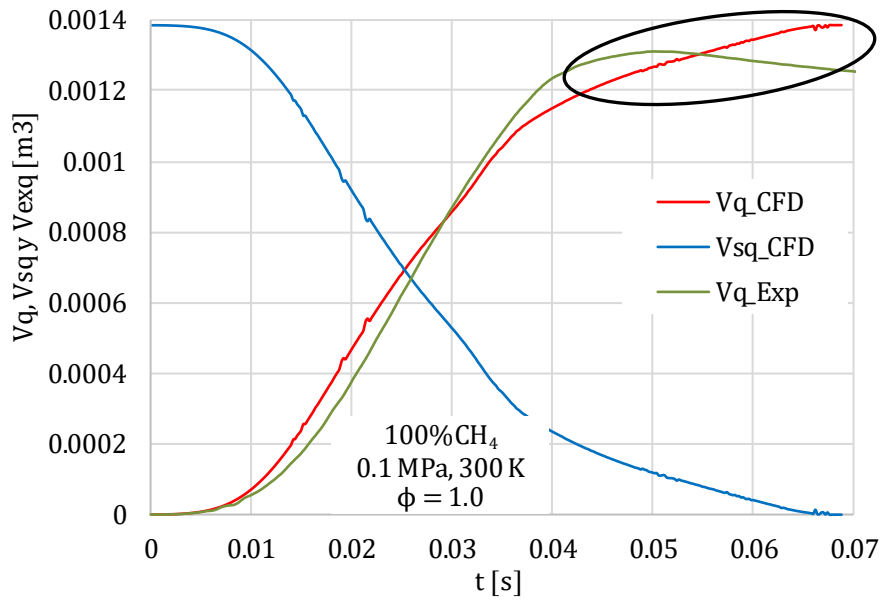


Figura 9.9: Volumen de la mezcla quemada, no quemada y volumen experimental frente al tiempo.

En la *Figura 9.10*, se representa el volumen de masa quemada frente al radio axial z_0 (curva roja) y frente al radio radial r_0 (curva azul). Ambas curvas a su vez se comparan con la curva de volumen de una esfera correspondiente al radio experimental (curva verde). Se puede ver que la curva que coincide mejor con la experimental es la del volumen en dirección axial, y esto puede explicarse con el radio esférico aproximado que se utilizó para los cálculos de los datos experimentales.

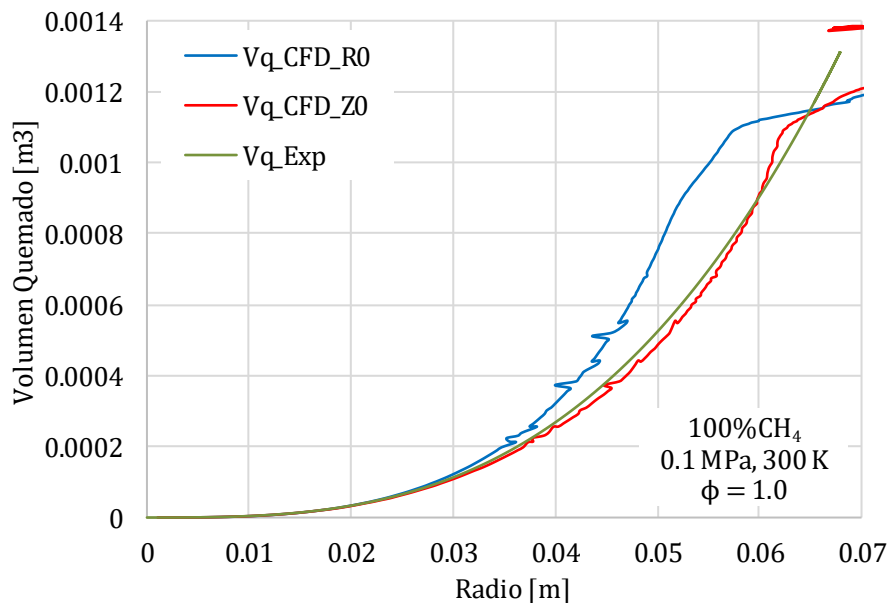


Figura 9.10: Volumen de la mezcla quemada, y volumen experimental frente al radio r_0 y z_0 .

En la *Figura 9.11*, se presentan los valores de la masa quemada y no quemada (curvas azules) calculados mediante CFD y sus homólogos de los datos experimentales.

Ya se ha indicado que existe un porcentaje de masa que no se quema durante el proceso de combustión experimental, ya que existe una diferencia significativa entre el máximo de la masa quemada alcanzada en la simulación CFD y en la curva experimental. Aparte de esa diferencia, las dos parejas de curvas presentan la misma tendencia, si bien se obtienen valores de la masa quemada adelantados en el tiempo respecto a los experimentales, en concordancia con las evoluciones temporales de la presión (*Figura 9.3*). Lo mismo puede afirmarse al comparar las curvas de fracción de masa quemada representadas en la *Figura 9.12*.

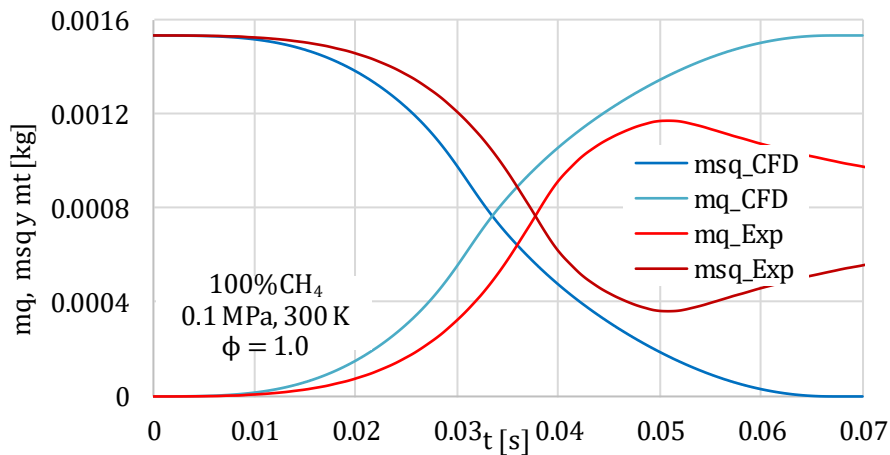


Figura 9.11: Masa quemada y no quemada frente al tiempo.

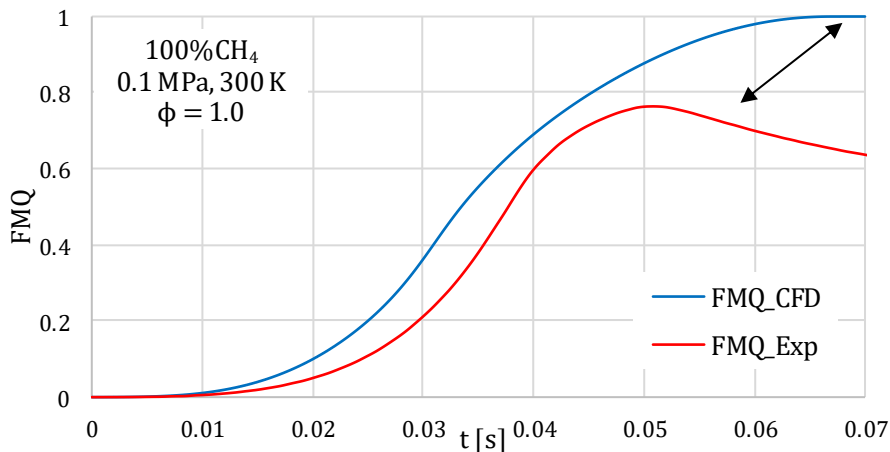


Figura 9.12: Comparación de la evolución temporal de la fracción de masa quemada frente al tiempo.

En la *Figura 9.13* se presenta la temperatura de la mezcla fresca frente al tiempo, tanto para el modelo CFD como la experimental. En la misma se puede ver que la temperatura obtenida con el modelo CFD aumenta su pendiente más rápidamente que la experimental en las fases iniciales de la combustión. Sin embargo, la línea de temperatura

calculada alcanza su valor máximo en un tiempo posterior al de la temperatura máxima experimental.

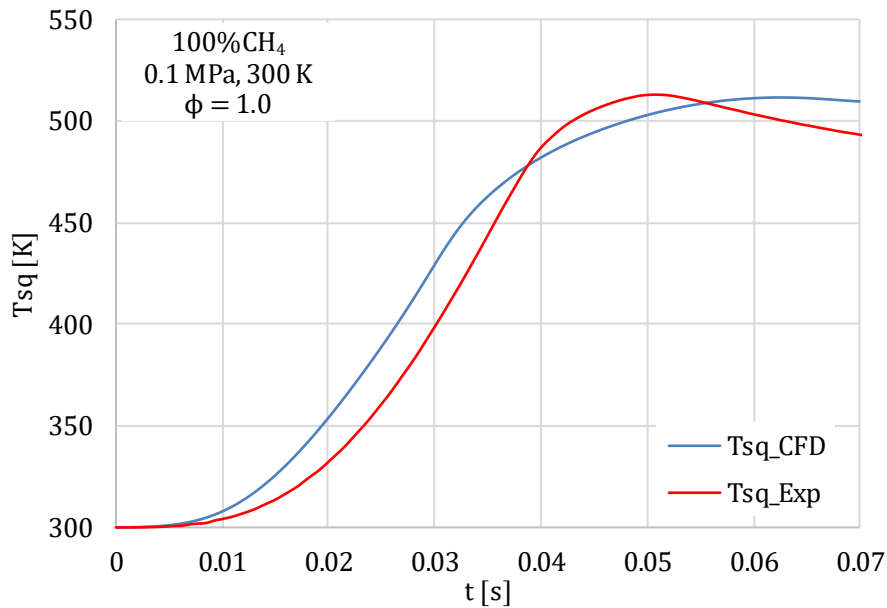


Figura 9.13: Comparación de la evolución temporal de la temperatura de la mezcla no quemada.

9.2.2 Resultados relativos a la velocidad de combustión calculada mediante la simulación CFD

En la *Figura 9.14*, está representada la velocidad de combustión laminar en función del tiempo (a, parte superior) y de la temperatura de la mezcla fresca (b, parte inferior). Al igual que en los gráficos anteriores se presenta también la curva de velocidad laminar obtenida a partir de los datos experimentales.

Puede verse que existe una diferencia entre la curva de velocidad de combustión calculada con el modelo CFD y la obtenida a partir de los experimentos.

La *Figura 9.14(b)* puede compararse con la *Figura 9.4(a)*, donde la curva experimental es la misma, mientras que la velocidad de combustión calculada es diferente, dado que en la *Figura 9.4* la curva representada es la que corresponde al análisis mediante el método de Lewis y Von Elbe (que supone geometría esférica), mientras que en la *Figura 9.14* se considera la geometría deformada del frente de llama dentro de la bomba cilíndrica. Aun así, persisten diferencias, atribuibles a que la tasa de reacción del proceso simulado es posiblemente mayor de lo que debería ser, en concordancia con el aumento de la presión calculada más rápido que el proceso experimental.

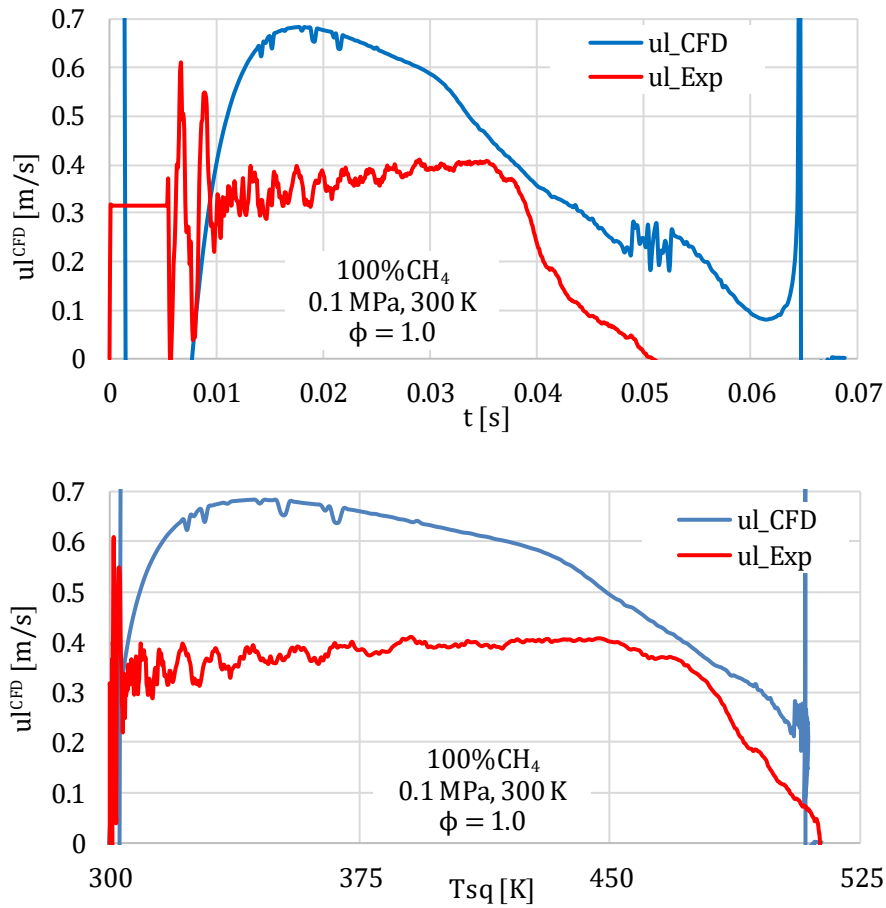


Figura 9.14: Velocidad de combustión laminar frente al tiempo y a la temperatura de la mezcla fresca.

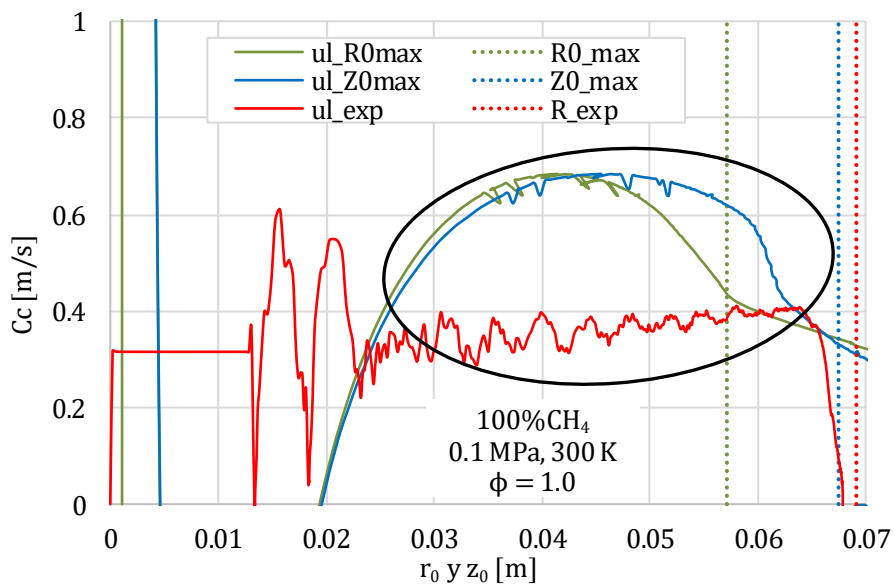


Figura 9.15: Velocidad de combustión representada en función de los radios r_0 y z_0 .

Finalmente, en la *Figura 9.15*, se presenta nuevamente la velocidad de combustión laminar calculada, pero esta vez representada frente a los valores de cada semieje, tanto en dirección axial z_0 como en dirección radial r_0 , además de su homóloga de los datos experimentales. Si se observan las curvas resultado del modelo CFD (curva azul y verde), se puede ver que la velocidad frente a r_0 empieza a disminuir antes que la velocidad frente a z_0 , lo que se debe a que el frente de llama toca la pared de la bomba primero en la dirección radial.

9.3 Conclusión sobre los resultados de la simulación CFD

De este capítulo se puede concluir que el algoritmo desarrollado hasta el momento permite seguir la evolución del radio del frente de llama calculado mediante la simulación CFD. Hay que recordar que, a partir de un radio del frente de aproximadamente el 60% de radio de la bomba cilíndrica, se pierde la simetría esférica, con posibilidad de crecimiento diferente en las direcciones principales de la bomba cilíndrica (radial y axial). El volumen de la zona quemada se asemeja cada vez más a una geometría de tipo cuasi-elipsoidal, que acaba siendo una geometría paralelepédica con vértices redondeados.

A partir de ello se han podido calcular de forma más exacta resultados como son: el volumen de la mezcla quemada, la masa y fracción de masa quemada, el área del frente de llama deformado, las cuales son importantes para el cálculo de la velocidad de combustión laminar y de la cual se ha logrado obtener los resultados.

Precisamente, el resultado que se puede considerar más importante de la simulación CFD es precisamente constatar la deformación del frente de llama, apartándose de la geometría esférica.

Aun así, otra parte del trabajo de simulación numérica no se ha podido acometer por carencia de medios de cálculo adecuados, especialmente para poder calcular de forma más adecuada las tasas de reacción. Hay que recordar que el proceso que se quiere simular numéricamente no es el habitual en procesos tecnológicos, donde en general la turbulencia del flujo tiene gran importancia.

CAPÍTULO 10

Conclusiones y sugerencias para trabajos futuros

10.1	Conclusiones.....	235
10.1.1	Conclusiones generales	235
10.1.2	Conclusiones particulares	237
10.2	Principales aportaciones de la Tesis doctoral.....	241
10.3	Trabajos futuros	243

10 CONCLUSIONES Y SUGERENCIAS PARA TRABAJOS FUTUROS

10.1 Conclusiones

En la presente Tesis doctoral se ha realizado un estudio que ha permitido ampliar el conocimiento acerca del proceso de combustión premezclada de mezclas de combustibles gaseosos, principalmente las mezclas de hidrógeno–metano/aire e hidrógeno–monóxido de carbono/aire, en una bomba de combustión a volumen constante con geometría cilíndrica y accesos ópticos, e instrumentada con la técnica de adquisición de imágenes Schlieren, y el registro de la presión instantánea durante el transcurso del proceso de combustión.

Para abordar este trabajo se han utilizado tanto herramientas experimentales como modelos teóricos de análisis y diagnóstico. De forma complementaria, se han realizado simulaciones CFD de alguna de las mezclas ensayadas experimentalmente, concretamente metano/aire estequiométrico. Con todo ello, se han alcanzado los objetivos planteados al comienzo de la Tesis.

10.1.1 Conclusiones generales

Las **conclusiones generales** obtenidas de la presente Tesis son las siguientes:

- Se ha realizado una extensa **revisión bibliográfica**, que ha incluido el estado del arte actual del proceso de combustión de mezclas gaseosas de combustibles formadas por metano, hidrógeno y monóxido de carbono, la teoría del proceso de combustión, su clasificación y aspectos fundamentales, así como la definición de la velocidad de combustión y las metodologías experimentales para su obtención, analizando las ventajas e inconvenientes de las técnicas de experimentación utilizadas en este trabajo en relación con las utilizadas históricamente por otros autores. Esta revisión ha permitido ampliar, entender y comprender los conceptos fundamentales en los que se basa el proceso de combustión de mezclas de combustibles centrados principalmente en mezclas de hidrógeno/metano e hidrógeno/monóxido y profundizar en los aspectos más complejos de dicho proceso. Por otra parte, se han respaldado los resultados obtenidos experimentalmente con los obtenidos por otros autores de la bibliografía.

- Se han estudiado, desarrollado y comparado **dos metodologías complementarias** para la obtención de la velocidad de combustión, una de ellas a partir de la evolución de la presión (Modelo 2Z) y la otra a partir de la evolución del frente de llama a lo largo del proceso de combustión (técnica de imágenes Schlieren), exponiendo las ventajas e inconvenientes de cada método.
- El **modelo de diagnóstico de dos zonas** permite, a partir del análisis de la presión instantánea medida experimentalmente, obtener las variables que intervienen en el proceso de combustión, posibilitando una caracterización cuantitativa del proceso de combustión, siendo sensible, de forma indirecta, a la aparición de inestabilidades en el frente de llama durante el desarrollo de la combustión. El modelo permite evaluar las variables físicas y termoquímicas que intervienen en el proceso de combustión, como la velocidad de combustión y los diferentes parámetros que caracterizan las inestabilidades desarrolladas durante la combustión, como número de Lewis, Peclet, longitud de Markstein, etc.
- La utilización de la **técnica de diagnóstico óptico mediante imágenes Schlieren**, basada en la visualización y registro de la evolución del frente de llama durante el proceso de combustión de combustibles gaseosos, se muestra atractiva para el estudio de los procesos de combustión y la morfología de la llama generada en dichos procesos.
- Los **accesos ópticos de la bomba de combustión cilíndrica** han permitido visualizar, realizar un estudio morfológico y registrar el proceso de combustión a través de una cámara de alta velocidad y, con un programa de análisis obtener la evolución del radio del frente de llama durante el transcurso de la combustión, además de las inestabilidades producidas durante el proceso de combustión que, en algunos casos, generan celularidad en el frente de llama. Así como también la velocidad de propagación del frente de llama, la tasa de stretch de la llama, la velocidad de combustión laminar, la longitud de Markstein y diferentes números adimensionales importantes en el estudio del proceso de combustión.
- Se ha desarrollado una metodología para la **simulación con CFD del proceso de combustión en una bomba cilíndrica** dentro del grupo de investigación MYER del Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la UVa, y se ha implementado un nuevo algoritmo para el cálculo de la velocidad de combustión que incluye la deformación del frente de llama.

10.1.2 Conclusiones específicas

Como **conclusiones específicas** de la metodología desarrollada en la presente Tesis Doctoral se destacan:

- Se ha **validado la instalación experimental**, consistente en una bomba de combustión cilíndrica a volumen constante con accesos ópticos, para la determinación de la velocidad de combustión laminar haciendo uso de dos metodologías diferentes (diagnóstico de la presión instantánea y evolución del frente de llama registrado a través de la técnica Schlieren). Para ello, se ha determinado la velocidad de combustión de diferentes mezclas combustibles: hidrógeno, mezclas de hidrógeno/metano y mezclas de hidrógeno/monóxido de carbono (gas de síntesis).
- Se han seleccionado las **condiciones iniciales de experimentación** de tal manera que la instalación experimental (bomba cilíndrica) sobre las que se llevan a cabo puedan soportar principalmente los valores máximos de presión y temperatura que tienen lugar durante el proceso de combustión.
- En la bomba de combustión cilíndrica, por la geometría de la misma, se produce una **deformación del frente de llama esférico**, posibilitando, además, que cierta cantidad de combustible se quede sin quemar. A esto se atribuye el hecho de que las presiones máximas alcanzadas en esta bomba son más bajas que las obtenidas en otros experimentos en la bomba esférica o las registradas por otros autores. Por lo tanto, la velocidad de combustión se ha determinado fundamentalmente mediante el método óptico, donde, a partir de la evolución del radio del frente de llama en la fase inicial (con aumento de presión muy pequeño), se obtiene la velocidad la velocidad de propagación del frente con stretch S_n , y a partir de la misma, la velocidad de propagación libre de stretch S_l y finalmente la velocidad de combustión laminar u_l^0 . Como también se ha empleado el método de análisis de las presiones, la velocidad obtenida u_l^p se ha comparado con u_l^0 y con los resultados de otros autores, mostrando valores similares entre ellos.
- Las velocidades de combustión obtenidas a partir de la curva de presión u_l^p son ligeramente menores que las que las obtenidas para una misma mezcla en la bomba de combustión esférica existente en el laboratorio de motores, pero igualmente entran en el rango de valores, cuando son comparadas con otros

autores de la bibliografía. Esta diferencia se le atribuye a que en la bomba esférica se alcanzan picos máximos de presión más altos que en la bomba cilíndrica.

En relación con la caracterización del proceso de combustión de **mezclas de metano/hidrógeno** en la bomba de combustión cilíndrica, se destaca:

- Los experimentos con **mezclas de metano/hidrógeno** se han realizado con el propósito de observar la influencia del contenido de hidrógeno, con una alta velocidad de combustión, sobre el metano, cuya velocidad de combustión es mucho menor, aumentando el contenido de hidrógeno en proporciones crecientes hasta llegar a hidrógeno puro. Las dos metodologías utilizadas para determinar la velocidad de combustión (registro óptico y de la presión instantánea dentro de la cámara de combustión) permiten la obtención de resultados para establecer comparaciones y analizar cómo varían los parámetros estudiados en esta investigación en función del porcentaje de hidrógeno en la mezcla, el dosado relativo la presión y la temperatura.
- Las **velocidades de combustión de las mezclas de metano-hidrógeno** van creciendo progresivamente a medida que aumenta el contenido de hidrógeno en la mezcla, y además este contenido de hidrógeno promueve la aparición y aumento significativo de las inestabilidades tanto hidrodinámicas como termodifusivas del frente de llama, generándose lo que se conoce como **celularidad**. En cuanto a los valores de las **presiones máximas de combustión**, para mezclas estequiométricas estos son prácticamente independientes del contenido de hidrógeno, en consonancia con la expresión teórica que predice el aumento de presión. Sin embargo, para mezclas pobres se aprecia un ligero crecimiento de la presión máxima a medida que el contenido de hidrógeno en la mezcla aumenta.
- Gracias a la comparación de los resultados de experimentos con **variación del porcentaje de hidrógeno** en la mezcla es posible determinar **tres zonas principales**: una primera región donde el comportamiento del hidrógeno domina durante toda la etapa de combustión independientemente de la cantidad de metano introducida (100 y 80% de hidrógeno). Otra región comprende aquellos porcentajes de hidrógeno en metano donde ocurre lo contrario y es el metano el elemento dominante (100 y 80% de metano). Por último, existe una zona de transición donde se agrupan aquellos experimentos que no tienen un

comportamiento dominado por ninguno de los dos componentes (50% de hidrógeno).

- Los experimentos comprendidos en la **primera zona (hidrógeno dominante)** presentan un aumento de la presión instantánea, la fracción de masa quemada y la velocidad de combustión con el aumento del dosado relativo de la mezcla. En contra, las arrugas del frente de llama no son tan significativas como cuando se trabaja con dosados relativos menores. El número de Lewis, tal y como indica la bibliografía, es menor que la unidad. El aumento de la presión inicial de llenado genera un aumento significativo de la velocidad de combustión, la presión y la fracción de masa quemada, además de provocar un mayor arrugamiento de la superficie del frente de llama. La variación de temperatura en el rango experimental considerado no aporta una diferencia significativa de los parámetros de la combustión analizados.
- Los experimentos comprendidos en la **denominada zona de transición** no presentan un comportamiento claro, siendo en algunas ocasiones similar al del hidrógeno dominante y, en otros casos, al del metano dominante. Los números de Lewis, en este caso, estarían en una zona de incertidumbre.
- Los experimentos **dominados por el metano** presentan un aumento de los parámetros de la combustión con el aumento del dosado relativo, pero, por el contrario, presentan un descenso de estos a medida que aumenta la presión inicial de llenado. El número de Lewis para esta región es mayor que la unidad, tal y como explica la bibliografía para mezclas de hidrocarburos de dosados pobres.
- El **efecto combinado** de dependencia de la velocidad de combustión con respecto a la **proporción de hidrógeno/dosado** permite ver que una misma velocidad de combustión se puede tener con una mezcla estequiométrica de metano, o bien con una mezcla pobre de dosado 0.9, constituida por hidrógeno al 20% en metano, o bien por una mezcla más pobre (0.8) con hidrógeno al 50%, o incluso con una mezcla extremadamente pobre de dosado 0.5 con hidrógeno al 80%.

De la caracterización del proceso de combustión del **gas de síntesis (mezclas hidrógeno/monóxido de carbono)** en la bomba de combustión cilíndrica, se destaca:

- El **gas de síntesis** se ha representado como una mezcla de **hidrógeno y monóxido de carbono**, ya que son los constituyentes principales de este combustible. Las

mezclas con las que se ha experimentado tienen porcentajes de hidrógeno del 0, 6.7, 25, 50, 80 y 100%, abarcando así el rango completo de las composiciones más típicas del SYNGAS. Además, el dosado relativo de estas mezclas se ha variado desde 0.5 hasta el estequiométrico, rango que resulta interesante para la posterior aplicación en un motor de combustión interna.

- Los **resultados** así calculados son acordes a los obtenidos y validados con resultados presentados por otros autores encontrados en la bibliografía. Es decir, en la bomba cilíndrica también se producen incrementos de la presión y de la velocidad de combustión, al aumentar, tanto la concentración de hidrógeno como el dosado de la mezcla.
- A su vez, del análisis de la **morfología de la llama**, se ha llegado a la conclusión de que el contenido en hidrógeno favorece la rugosidad e inestabilidad del frente de llama. El efecto que el dosado tiene en la estabilidad de la llama es el opuesto, ya que son los dosados bajos los que favorecen la celularidad, y con ella, la inestabilidad de la llama.
- Se ha realizado una **comparación** de los resultados obtenidos en la **bomba de combustión cilíndrica** con resultados obtenidos en la **bomba esférica** (disponible en el Grupo, pero no usada directamente en esta tesis). Así se ha comprobado que, efectivamente, las presiones registradas en la bomba cilíndrica son inferiores a las que se obtienen en la esférica.
- Las **velocidades de combustión** obtenidas mediante el **análisis de las imágenes en la bomba cilíndrica** y mediante el **procesado de la presión con el modelo de diagnóstico de dos zonas en la bomba esférica**, y han resultado ser muy similares, para las diferentes composiciones y dosados analizados. Estos resultados han sido, a su vez, comparados y validados con los obtenidos por diferentes autores de la bibliografía.

De la caracterización del **avance del frente de llama** mediante **simulación CFD** se destaca:

- En cuanto a la caracterización mediante **simulación CFD** se puede concluir que se presentan en esta tesis los primeros resultados de simulación realizados en el Grupo Motores y Energías Renovables. Dichos trabajos, si bien restringidos exclusivamente a la combustión estequiométrica de metano y con tasas de

reacción no totalmente ajustadas, han permitido evaluar la **deformación del frente de llama** respecto a la geometría inicialmente esférica, consecuencia de los efectos que las paredes internas de la cámara cilíndrica causan sobre dicho frente.

- Este resultado es muy importante porque implica que la hipótesis de geometría esférica del frente de llama, aun siendo atractiva por su simplicidad (como lo prueba el elevado número de autores que la asumen), no es válida cuando el radio de llama supera un 60% de la dimensión máxima posible de crecimiento (radial y axial). El **volumen ocupado por los gases quemados** adopta una **forma cuasi elipsoidal**, con una sección en un plano horizontal que llega a ser la de un paralelepípedo con los vértices redondeados. Como consecuencia, la velocidad de combustión calculada en las últimas fases de la combustión usando como superficie del frente de llama la superficie de una esfera no es correcta, pudiendo este error explicar parte de las discrepancias de los resultados experimentales.
- Para poder seguir la **evolución temporal de la geometría del volumen de los gases quemados** calculada mediante CFD, se ha desarrollado un algoritmo que permite obtener los **semiejes radial y axial**, así como el **exponente** de una expresión analítica para ajustarse a la forma de la sección del frente de llama. Todo ello permite dar seguimiento a la posición instantánea del frente de llama calculado mediante CFD, permitiendo crecimientos diferentes en las direcciones radial y axial. A partir de ello se han podido calcular otros parámetros importantes como son: el volumen de la mezcla quemada, la masa y fracción de masa quemada, el área de frente de llama deformada, la relación de densidades entre otras, los cuales son importantes para el cálculo de la velocidad de combustión laminar incluyendo el área de frente de llama deformado.

10.2 Principales aportaciones de la Tesis doctoral

La realización de esta Tesis doctoral ha permitido ampliar el conocimiento sobre el proceso de combustión de hidrógeno, y mezclas de hidrógeno-metano e hidrógeno-monóxido de carbono en bombas de combustión de volumen constante, utilizando proporciones de las anteriores mezclas que antes no habían sido utilizadas.

Además, el estudio de la morfología de la llama se realiza por primera vez en la presente Tesis Doctoral, en el Grupo de Investigación MYER del laboratorio de Motores y Máquinas Térmicas, de la Universidad de Valladolid.

Se ha presentado una primera metodología para la simulación con CFD del proceso de combustión para una mezcla estequiométrica de metano puro en condiciones ambientales y un algoritmo para el seguimiento del radio de frente de llama simulado, que permite calcular la superficie y área de frente de llama deformado y el posterior cálculo de la velocidad de combustión laminar.

Para avalar los trabajos de investigación y los resultados obtenidos en la presente Tesis Doctoral se han publicado dos artículos científicos en Journals indexados situados en Q2 y Q3, además de dos contribuciones a congresos científicos internacionales:

Publicaciones científicas indexadas:

- Reyes, M., Tinaut, F.V.; Camaño, A. Experimental Study of Premixed Gasoline Surrogates Burning Velocities in a Spherical Combustion Bomb at Engine Like Conditions. **Energies**, Vol. 13, pp. 3430. 2020.
<https://doi.org/10.3390/en13133430>

Indicadores de calidad: Q3, 63/112 Fuel Technology, journal impact factor: 2.702. Editorial: Elsevier Ltd. Lugar de publicación: Reino Unido

- Reyes, M.; Tinaut, F.V.; Giménez, B.; Camaño, A.; Combustion and flame front morphology characterization of H₂-CO syngas blends in constant volume combustion bombs. **Energy & Fuels**, Vol. 35, pp. 3497 – 3511, 2021.
<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c03598>

Indicadores de calidad: Q2, 55/112 ENERGY & FUELS, journal impact factor: 3.421 (2019). Editorial: ACS Publications. Lugar de publicación: Estados Unidos de América.

Trabajos enviados a conferencias nacionales e internacionales:

- M. Reyes, F.V. Tinaut, B. Giménez, A. Camaño. Experimental characterization of burning velocities of premixed iso-octane, n-heptane, and n-heptane/toluene in-air mixtures in a combustion bomb at engine-like conditions. MCS11: 11th Mediterranean Combustion Symposium. Tenerife, Spain. 16-20 June 2019. Abstract + oral exposition + paper.

- Reyes M., Camaño A., Sastre R., and Gabana P. Characterization and morphologic study of the premixed combustion of hydrogen/methane mixtures in a combustion bomb. 15th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics. HEFAT 2021. Virtual Conference. 25 – 28 July 2021. Abstract + oral exposition + paper.

10.3 Sugerencias para trabajos futuros

Como trabajos futuros merece la pena la continuación con la presente línea de investigación, incidiendo en las inestabilidades que se producen en las mezclas combustibles estudiadas: hidrógeno-metano y gas de síntesis. Para ello, es necesario mejorar y optimizar la metodología de ensayo y experimentación, además de continuar experimentando con diferentes mezclas combustibles. En cuanto a las mezclas de syngas, realizar mezclas incluyendo diferentes gases inertes, como el N_2 o el CO_2 , que son componentes presentes en el gas de síntesis. Además, para tener un conocimiento más amplio, se ha de completar el estudio con diferentes condiciones experimentales, en las que se varíen las presiones y temperaturas.

La continuación con simulaciones fluidodinámicas del proceso de combustión, puesto que el análisis de la combustión y la deformación del frente de llama es algo primordial para conocer cómo progresa el frente de llama y qué geometría adopta durante la combustión. Las simulaciones con CFD son importantes para poder determinar las causas de las diferencias obtenidas en los resultados calculados con la hipótesis simplificativa de que el frente de llama permanece esférico. También es necesario seguir trabajando en el desarrollo de un algoritmo más robusto y eficaz para el seguimiento del frente de llama deformado y posterior cálculo de la velocidad de combustión.

BIBLIOGRAFÍA

1. La concentración de CO₂ en la atmósfera, en el nivel más alto en 800.000 años [Internet]. Disponible en: <http://www.lavanguardia.com/natural/20171030/432486014463/concentracion-co2-bate-nuevo-record-advierde-omm.html>
2. Concentración de CO₂ en la atmósfera alcanzó nuevo récord en 2016, según OMM | Ecología | Vida | El Universo [Internet]. [citado 25 de abril de 2018]. Disponible en: <https://www.eluniverso.com/vida/2017/10/30/nota/6458605/concentracion-co2-atmosfera-alcanzo-nuevo-record-2016-segun-omm>
3. Iglesias D. Caracterización de mezclas de combustibles para motores térmicos en una bomba de combustión a volumen constante. Universidad de Valladolid; 2015.
4. Control de emisiones contaminantes en Europa y Estados Unidos | Revista CESVIMAP [Internet]. [citado 25 de abril de 2018]. Disponible en: <http://www.revistacesvimap.com/control-de-emisiones-contaminantes-en-europa-y-estados-unidos/>
5. Tinaut F V., Melgar A, Giménez B, Reyes M. Characterization of the combustion of biomass producer gas in a constant volume combustion bomb. *Fuel*. 1 de marzo de 2010;89(3):724-31.
6. Tinaut F V., Reyes M, Giménez B, Pastor J V. Measurements of OH* and CH* chemiluminescence in premixed flames in a constant volume combustion bomb under autoignition conditions. *Energy and Fuels*. 20 de enero de 2011;25(1):119-29.
7. Gettel LE, Tsai KC. The effect of enhanced ignition on the burning characteristics of methane-air mixtures. *Combust Flame*. 1 de diciembre de 1983;54(1-3):183-93.
8. Liao SY, Jiang DM, Cheng Q. Determination of laminar burning velocities for natural gas. *Fuel*. 2004;83(9):1247-50.
9. Seshadri K, Bai XS, Pitsch H, Peters N. Asymptotic analysis of the structure of moderately rich methane-air flames. *Combust Flame*. 1998;113(4):589-602.
10. Tinaut F V., Melgar A, Horrillo A, De La Rosa AD. Method for predicting the performance of an internal combustion engine fuelled by producer gas and other low heating value gases. En: *Fuel Processing Technology*. Elsevier; 2006. p. 135-42.
11. Naber JD, Siebers DL, Di Julio SS, Westbrook CK. Effects of natural gas composition on ignition delay under diesel conditions. *Combust Flame*. 1 de noviembre de 1994;99(2):192-200.
12. Soyly S. Prediction of knock limited operating conditions of a natural gas engine. *Energy Convers Manag*. 1 de enero de 2005;46(1):121-38.
13. Demirbas A. Progress and recent trends in biofuels. *Prog Energy Combust Sci*. 2007;33(1):1-18.
14. Huang J, Hill PG, Bushe WK, Munshi SR. Shock-tube study of methane ignition under engine-relevant conditions: experiments and modeling. *Combust Flame*. 1 de enero de 2004;136(1-2):25-42.
15. Aung KT, Hassan MI, Faeth GM. Flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen/air flames at normal temperature and pressure. *Combust Flame*.

-
- 1997;109(1-2):1-24.
16. Garforth AM, Rallis CJ. Laminar burning velocity of stoichiometric methane-air: pressure and temperature dependence. *Combust Flame*. 1978;31(1978):53-68.
 17. Hassan MI, Aung KT, Faeth GM. Measured and predicted properties of laminar premixed methane/air flames at various pressures. *Combust Flame*. 1998;115(4):539-50.
 18. Hernandez JJ, Lapuerta M, Serrano C, Melgar A. Estimation of the Laminar Flame Speed of Producer Gas from Biomass Gasification. *Energy & Fuels*. 2005;19(5):2172-8.
 19. Lü X, Hou Y, Zu L, Huang Z. Experimental study on the auto-ignition and combustion characteristics in the homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion operation with ethanol/n-heptane blend fuels by port injection. *Fuel*. 1 de diciembre de 2006;85(17-18):2622-31.
 20. Liao SY, Jiang DM, Huang ZH, Zeng K, Cheng Q. Determination of the laminar burning velocities for mixtures of ethanol and air at elevated temperatures. *Appl Therm Eng*. 2007;27(2-3):374-80.
 21. Vancoillie J, Demuyneck J, Galle J, Verhelst S, Van Oijen JA. A laminar burning velocity and flame thickness correlation for ethanol-air mixtures valid at spark-ignition engine conditions. *Fuel*. 2012;102:460-9.
 22. Eisazadeh-Far K, Moghaddas A, Al-Mulki J, Metghalchi H. Laminar burning speeds of ethanol/air/diluent mixtures. *Proc Combust Inst*. 2011;33(1):1021-7.
 23. Konnov AA, Meuwissen RJ, De Goey LPH. The temperature dependence of the laminar burning velocity of ethanol flames. *Proc Combust Inst*. 2011;33(1):1011-9.
 24. Kwon OC, Aung KT, Tseng LK, Ismail MA, Faeth GM. Comment on «Approximations for burning velocities and Markstein numbers for lean hydrocarbon and methanol flames,» by U. C. Muller, M. Bollig, and N. Peters. *Combust Flame*. 1999;116(1-2):310-2.
 25. Metghalchi M, Keck JC. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature. *Combust Flame*. 1982;48(C):191-210.
 26. Müller UC, Bollig M, Peters N. Approximations for burning velocities and Markstein numbers for lean hydrocarbon and methanol flames. *Combust Flame*. 1997;108(3):349-56.
 27. Saeed K, Stone CR. Measurements of the laminar burning velocity for mixtures of methanol and air from a constant-volume vessel using a multizone model. *Combust Flame*. 2004;139(1-2):152-66.
 28. Groff EG. The cellular nature of confined spherical propane-air flames. *Combust Flame*. 1982;48(C):51-62.
 29. Gülder ÖL, Smallwood GJ, Wong R, Snelling DR, Smith R, Deschamps BM, et al. Flame front surface characteristics in turbulent premixed propane/air combustion. *Combust Flame*. 2000;120(4):407-16.
 30. Kristoffersen K, Vaagsaether K, Bjerketvedt D, Thomas GO. Propane-air pipe explosion experiments. Data for estimation of 1-D burning velocity in slow regimes.
-

- Exp Therm Fluid Sci. 2004;28(7):723-8.
31. Metghalchi M (Department OMEIOT, Keck JC (Department OMEIOT. Laminar Burning Velocity of Propane-Air Mixtures at High Temperature and Pressure. *Combust Flame*. 1980;38:143-54.
 32. Raezer SD, Olsen HL. Measurement of Laminar Flame Speeds of Ethylene- Air and Propane-Air Mixtures by the Double Kernel Method. *Appl Phys*. 1961;
 33. Zhou M, Garner CP. Brief Communication Direct Measurements of Burning Velocity of Propane-Air Using Particle Image Velocimetry. 1996;2180(96):0-4.
 34. Koroll GW, Kumar RK, Bowles EM. Burning velocities of hydrogen-air mixtures. *Combust Flame*. 1993;94(3):330-40.
 35. Kwon OC, Faeth GM. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames: Measurements and predictions. *Combust Flame*. 2001;124(4):590-610.
 36. Ono R, Nifuku M, Fujiwara S, Horiguchi S, Oda T. Minimum ignition energy of hydrogen-air mixture: Effects of humidity and spark duration. *J Electrostat*. 2007;65(2):87-93.
 37. Qin X, Kobayashi H, Niioka T. Laminar burning velocity of hydrogen-air premixed flames at elevated pressure. *Exp Therm Fluid Sci*. 2000;21(1-3):58-63.
 38. SMALLBONE A, TSUNEYOSHI K, KITAGAWA T. Turbulent and Stable/Unstable Laminar Burning Velocity Measurements from Outwardly Propagating Spherical Hydrogen-Air Flames at Elevated Pressures. *J Therm Sci Technol*. 2006;1(1):31-41.
 39. Zitoun R, Deshaies B. Burning velocities of rich H₂/O₂ flames under cryogenic conditions. *Combust Flame*. 1997;109(3):427-35.
 40. Ilbas M, Crayford AP, Yilmaz İ, Bowen PJ, Syred N. Laminar-burning velocities of hydrogen-air and hydrogen-methane-air mixtures: An experimental study. *Int J Hydrogen Energy*. 1 de septiembre de 2006;31(12):1768-79.
 41. Yusaf TF, Yusoff MZ, Hussein I, Fong SH. A Quasi One-dimensional Simulation of a 4 Stroke Spark Ignition Hydrogen Fuelled Engine. *Am J Appl Sci*. 1 de agosto de 2005;2(8):1206-12.
 42. Cuenot B, Egolfopoulos FN, Poinot T. Direct Numerical Simulation of Stagnation-Flow Premixed Flames: Transition from Planar to Bunsen Flames and the Direct Measurement of Laminar Flame Speeds*.
 43. Gu XJ, Haq MZ, Lawes M, Woolley R. Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane-air mixtures. *Combust Flame*. 2000;121(1-2):41-58.
 44. Liao SY, Jiang DM, Gao J, Huang ZH. Measurements of Markstein Numbers and Laminar Burning Velocities for Natural Gas-Air Mixtures. *Energy and Fuels*. 2004;18:316-26.
 45. Reyes M, Tinaut F V., Horrillo A, Lafuente A. Experimental characterization of burning velocities of premixed methane-air and hydrogen-air mixtures in a constant volume combustion bomb at moderate pressure and temperature. *Appl Therm Eng*. 2018;130:684-97.
 46. Fluixá FVT, Olavarría BG, Hoyos DI, Lawes M. Experimental determination of the burning velocity of mixtures of n-heptane and toluene in engine-like conditions.

- Flow, *Turbul Combust.* 2012;89(2):183-213.
47. Law CK, Jomaas G, Bechtold JK. Cellular instabilities of expanding hydrogen/propane spherical flames at elevated pressures: Theory and experiment. *Proc Combust Inst.* 2005;30(1):159-66.
 48. Lafuente A. 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. Universidad de Valladolid; 2008.
 49. Heywood JB. INTERNAL COMBUSTION ENGINE FUNDAMENTALS. McGraw-Hill, Inc.; 1988.
 50. Mayo Monge LM. Análisis de Conceptos y Expresiones de la Velocidad de Combustión Laminar en Aire de Hidrógeno y de Mezclas Hidrógeno - Gas Natural. Tesis doctoral. Universidad de Valladolid; 2015.
 51. Serrano C. Tesis Doctoral Estudio del comportamiento del gas de gasificación de biomasa en procesos de combustión. UNIVERSIDAD DE CASTILLA-LA MANCHA; 2015.
 52. Hinton N, Stone R, Cracknell R. Laminar burning velocity measurements in constant volume vessels – Reconciliation of flame front imaging and pressure rise methods. *Fuel.* 2018;211:446-57.
 53. K K. Principles of combustion. New York: Wiley;
 54. Bradley D, Gaskell PH, Gu XJ. Burning velocities, Markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames: A computational study. *Combust Flame.* 1996;104(1-2):176-98.
 55. Karlovitz B, Denniston DW, Knapschaefer DH, Wells FE. Studies on Turbulent flames. *Symp Combust.* 1953;4(1):613-20.
 56. Palm-Leis A, Strehlow RA. On the propagation of turbulent flames. *Combust Flame.* 1 de abril de 1969;13(2):111-29.
 57. Williams F, A. Combustion Theory. Second. California: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.; 1985.
 58. Bradley D, Hicks RA, Lawes M, Sheppard CGW, Woolley R. The measurement of laminar burning velocities and Markstein numbers for iso-octane-air and iso-octane-n-heptane-air mixtures at elevated temperatures and pressures in an explosion bomb. *Combust Flame.* 1998;115(1-2):126-44.
 59. Andrews GE, Bradley D. Determination of burning velocities: A critical review. *Combust Flame.* 1 de febrero de 1972;18(1):133-53.
 60. Hinton N, Stone R, Cracknell R. Laminar burning velocity measurements in constant volume vessels – Reconciliation of flame front imaging and pressure rise methods. *Fuel.* 2018;211(September 2017):446-57.
 61. Kelley AP, Law CK. Nonlinear effects in the experimental determination of laminar flame properties from stretched flames. Combustion Institute; 2007. p. 296-304.
 62. Chen Z. On the extraction of laminar flame speed and Markstein length from outwardly propagating spherical flames. *Combust Flame.* 1 de febrero de

- 2011;158(2):291-300.
63. Tahtouh T, Halter F, Mounaïm-Rousselle C. Measurement of laminar burning speeds and Markstein lengths using a novel methodology. *Combust Flame*. 1 de septiembre de 2009;156(9):1735-43.
 64. Halter F, Tahtouh T, Mounaïm-Rousselle C. Nonlinear effects of stretch on the flame front propagation. *Combust Flame*. 1 de octubre de 2010;157(10):1825-32.
 65. Bradley D, Lawes M, Mansour MS. Explosion bomb measurements of ethanol-air laminar gaseous flame characteristics at pressures up to 1.4 MPa. *Combust Flame*. julio de 2009;156(7):1462-70.
 66. Xiouris C, Ye T, Jayachandran J, Egolfopoulos FN. Laminar flame speeds under engine-relevant conditions: Uncertainty quantification and minimization in spherically expanding flame experiments. *Combust Flame*. 1 de enero de 2016;163:270-83.
 67. Varea E, Modica V, Vandel A, Renou B. Measurement of laminar burning velocity and Markstein length relative to fresh gases using a new postprocessing procedure: Application to laminar spherical flames for methane, ethanol and isooctane/air mixtures. *Combust Flame*. 1 de febrero de 2012;159(2):577-90.
 68. Clavin P. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Prog Energy Combust Sci*. 1985;11(1):1-59.
 69. Chen Z, Burke MP, Ju Y. Effects of compression and stretch on the determination of laminar flame speeds using propagating spherical flames. *Combust Theory Model*. 31 de marzo de 2009;13(2):343-64.
 70. Marshall SP, Taylor S, Stone CR, Davies TJ, Cracknell RF. Laminar burning velocity measurements of liquid fuels at elevated pressures and temperatures with combustion residuals. *Combust Flame*. 2011;158(10):1920-32.
 71. Karpov VP, Lipatnikov AN, Wolanski P. Finding the markstein number using the measurements of expanding spherical laminar flames. *Combust Flame*. 1997;109(3):436-48.
 72. Kwon S, Tseng L-K, Faeth GM. Laminar burning velocities and transition to unstable flames in H₂/O₂/N₂ and C₃H₈/O₂/N₂ mixtures. *Combust Flame*. 1 de septiembre de 1992;90(3-4):230-46.
 73. Kull HJ. THEORY OF THE RAYLEIGH-TAYLOR INSTABILITY. Vol. 206, Review Section of Physics Letters). 1991.
 74. Williams FA. *Combustion Theory: The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. Combustion and Flame. The Benjamin/Cummings Publishing Company; 1985.
 75. Ronney PD. A perspective on the role of microgravity in combustion research. *Combust Flame*. 1998;116(3):317-8.
 76. Matalon M. Intrinsic Flame Instabilities in Premixed and Nonpremixed Combustion. *Annu Rev Fluid Mech*. 2007;39(1):163-91.
 77. Pelce P, Clavin P. Influence of hydrodynamics and diffusion upon the stability limits of laminar premixed flames. *J Fluid Mech*. 1982;124:219-37.

-
78. Matalon M, Matkowsky BJ. ON THE STABILITY OF PLANE AND CURVED FLAMES. *SIAM J Appl Math.* 12 de julio de 1984;44(2):327-43.
 79. Frankel ML, Sivashinsky GI. The Effect of Viscosity on Hydrodynamic Stability of a Plane Flame Front. *Combust Sci Technol.* 1 de diciembre de 1982;29(3-6):207-24.
 80. Gong J, Jin C, Huang Z, Wu X. Study on laminar burning characteristics of premixed high-octane fuel-air mixtures at elevated pressures and temperatures. *Energy and Fuels.* 18 de febrero de 2010;24(2):965-72.
 81. Zeldovich YB. Structure and stability of steady laminar flame at moderately large Reynolds numbers. *Combust Flame.* 1 de enero de 1981;40(C):225-34.
 82. Bychkov V V., Liberman MA. Dynamics and stability of premixed flames. Vol. 325, *Physics Report.* Elsevier; 2000. p. 115-237.
 83. Bradley D, Lawes M, Liu K, Verhelst S, Woolley R. Laminar burning velocities of lean hydrogen-air mixtures at pressures up to 1.0 MPa. *Combust Flame.* abril de 2007;149(1-2):162-72.
 84. Dowdy DR, Smith DB, Taylor SC, Williams A. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures. *Symp Combust.* 1 de enero de 1991;23(1):325-32.
 85. Verhelst S, Woolley R, Lawes M, Sierens R. Laminar and unstable burning velocities and Markstein lengths of hydrogen-air mixtures at engine-like conditions. *Proc Combust Inst.* 1 de enero de 2005;30(1):209-16.
 86. Bradley D, Harper CM. The development of instabilities in laminar explosion flames. *Combust Flame.* 1 de diciembre de 1994;99(3-4):562-72.
 87. Groff EG. The cellular nature of confined spherical propane-air flames. *Combust Flame.* 1 de enero de 1982;48(C):51-62.
 88. Markstein GH. Cell structure of propane flames burning in tubes [5]. Vol. 17, *The Journal of Chemical Physics.* American Institute of Physics AIP; 1949. p. 428-9.
 89. Manton J, Von Elbe G, Lewis B. Nonisotropic propagation of combustion waves in explosive gas mixtures and the development of cellular flames. *J Chem Phys.* 23 de enero de 1952;20(1):153-7.
 90. Al-Shahrany AS, Bradley D, Lawes M, Liu K, Woolley R. Darrieus-landau and thermo-acoustic instabilities in closed vessel explosions. En: *Combustion Science and Technology.* Taylor & Francis Group ; 2006. p. 1771-802.
 91. Istratov AG, Librovich VB. On the stability of gasdynamic discontinuities associated with chemical reactions. The case of a spherical flame. *Astronaut Acta.* junio de 1969;14(5):453-67.
 92. Bechtold JK, Matalon M. Hydrodynamic and diffusion effects on the stability of spherically expanding flames. *Combust Flame.* 1 de enero de 1987;67(1):77-90.
 93. Addabbo R, Bechtold JK, Matalon M. Wrinkling of spherically expanding flames. *Proc Combust Inst.* 1 de enero de 2002;29(2):1527-35.
 94. Ernest Fiock BF, Marvin CF, Caldwell F, Roeder C. FLAME SPEEDS AND ENERGY CONSIDERATIONS FOR EXPLOSIONS IN A SPHERICAL BOMB. 1940.
 95. Lewis B, von Elbe G. *Combustion, flames and explosions of gases.* Second. London:
-

- Academic Press, Inc.; 1961.
96. Metghalchi M, Keck JC. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combust Flame*. 1980;38:143-54.
 97. HILL PG, HUNG J. Laminar Burning Velocities of Stoichiometric Mixtures of Methane with Propane and Ethane Additives. *Combust Sci Technol*. 27 de julio de 1988;60(1-3):7-30.
 98. Elia M, Ulinski M, Metghalchi M. Laminar Burning Velocity of Methane–Air–Diluent Mixtures. *J Eng Gas Turbines Power*. 2001;123(1):190.
 99. Saeed K, Stone CR. The modelling of premixed laminar combustion in a closed vessel. *Combust Theory Model*. 2004;8(4):721-43.
 100. Ferguson C, Kirkatrick A. Internal combustion engines. En: *Second*. New York: John Wiley & Sons, Inc.; 1985. p. 168-80.
 101. Raine RR, Stone CR, Gould J. Modeling of nitric oxide formation in spark ignition engines with a multizone burned gas. *Combust Flame*. 1 de agosto de 1995;102(3):241-55.
 102. Rallis CJ, Garforth AM. The determination of laminar burning velocity. *Prog Energy Combust Sci*. 1980;6(4):303-29.
 103. PARSINEJAD F, ARCARI C, METGHALCHI* H. FLAME STRUCTURE AND BURNING SPEED OF JP-10 AIR MIXTURES. *Combust Sci Technol*. abril de 2006;178(5):975-1000.
 104. Reyes Serrano M. Caracterización de la combustión y el autoencendido de combustibles líquidos en mezclas homogéneas para su uso en motores térmicos en modo HCCI. Universidad de Valladolid; 2008.
 105. Haber LC. An investigation into the origin, measurement and application of chemiluminescent light emissions from premixed flames. Virginia Tech; 2001.
 106. Bradley D, Lawes M, Morsy ME. Flame speed and particle image velocimetry measurements of laminar burning velocities and Markstein numbers of some hydrocarbons. *Fuel*. 1 de mayo de 2019;243:423-32.
 107. Oppenheim AK, Kuhl AL. Energy loss from closed combustion systems. *Proc Combust Inst*. 1 de enero de 2000;28(1):1257-63.
 108. Atzler F, and ML-P 14th ICOLA, 1998 undefined. Burning velocities in droplet suspensions.
 109. Bradley D, Sheppard CGW, Woolley R, Greenhalgh DA, Lockett RD. The development and structure of flame instabilities and cellularity at low Markstein numbers in explosions. *Combust Flame*. 1 de julio de 2000;122(1-2):195-209.
 110. Haq MZ, Sheppard CGW, Woolley R, Greenhalgh DA, Lockett RD. Wrinkling and curvature of laminar and turbulent premixed flames. *Combust Flame*. 1 de octubre de 2002;131(1-2):1-15.
 111. Agrawal DD. Experimental determination of burning velocity of methane-air mixtures in a constant volume vessel. *Combust Flame*. 1 de enero de 1981;42(C):243-52.
 112. Gabano JD, Kageyama T, Fisson F, Leyer JC. Experimental simulation of engine

- knock by means of a preheated static combustion chamber. Symp Combust. 1 de enero de 1989;22(1):447-54.
113. Manton J, von Elbe G, Lewis B. Burning-velocity measurements in a spherical vessel with central ignition. Symp Combust. 1 de enero de 1953;4(1):358-63.
 114. Singer JM, von Elbe G. Flame propagation in cylindrical tubes near the quenching limit. Symp Combust. 1 de enero de 1957;6(1):127-30.
 115. Bradley D, Lawes M, Mansour MS. The problems of the turbulent burning velocity. Vol. 87, Flow, Turbulence and Combustion. Springer; 2011. p. 191-204.
 116. Lewis B, Von Elbe G. Determination of the speed of flames and the temperature distribution in a spherical bomb from time-pressure explosion records. J Chem Phys. 3 de mayo de 1934;2(5):283-90.
 117. Fiock EF, Marvin CF. The measurement of flame speeds. Chem Rev. 1 de diciembre de 1937;21(3):367-87.
 118. Grumer J, Cook EB, Kubala TA. Considerations pertaining to spherical-vessel combustion. Combust Flame. 1 de enero de 1959;3(C):437-46.
 119. Dahoe AE. Laminar burning velocities of hydrogen-air mixtures from closed vessel gas explosions. J Loss Prev Process Ind. 1 de mayo de 2005;18(3):152-66.
 120. Farrell JT, Johnston RJ, Androulakis IP. Molecular structure effects on laminar burning velocities at elevated temperature and pressure. En: SAE Technical Papers. SAE International; 2004.
 121. Lindström F, Ångström H-E, Kalghatgi G, Möller CE. An Empirical SI Combustion Model Using Laminar Burning Velocity Correlations. Vol. 114, SAE Transactions. SAE International; 2005. p. 833-46.
 122. Stone R, Clarke A, Beckwith P. Correlations for the laminar-burning velocity of methane/ diluent/air mixtures obtained in free-fall experiments. Combust Flame. 1 de agosto de 1998;114(3-4):546-55.
 123. of GK-I. Fuel/Engine Interactions.(Book) SAE International 2014.
 124. Marshall SP, Stone R, Hegheş C, Davies TJ, Cracknell RF. High pressure laminar burning velocity measurements and modelling of methane and n-butane. Combust Theory Model. 2010;14(4):519-40.
 125. Hornillos A. Utilización de modelos multizonas para la predicción de emisiones contaminantes de escape en MEP. Universidad de Valladolid; 1998.
 126. Lewis B, von Elbe G. Theory of flame propagation. En 1948. p. 183-8.
 127. Rallis CJ, Garforth AM. The determination of laminar burning velocity. Prog Energy Combust Sci. 1 de enero de 1980;6(4):303-29.
 128. Dowdy D, Smith D, Taylor S, on AW-S (International), 1991 undefined. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures. Elsevier.
 129. Ravi K, Mathew S, Bhasker JP, Porpatham E. Gaseous alternative fuels for Spark Ignition Engines-A technical review.
 130. Yu G, Law CK, Wu CK. Laminar Flame Speeds of Hydrocarbon + Air Mixtures with Hydrogen Addition. Vol. 63, COMBUSTION AND FLAME. 1986.

131. Tseng LK, Ismail MA, Faeth GM. Laminar burning velocities and Markstein numbers of hydrocarbon air flames. *Combust Flame*. 1 de diciembre de 1993;95(4):410-26.
132. Sun CJ, Sung CJ, He L, Law CK. Dynamics of weakly stretched flames: Quantitative description and extraction of global flame parameters. *Combust Flame*. 1 de julio de 1999;118(1-2):108-28.
133. Hermanns RTE, Konnov AA, Bastiaans RJM, de Goey LPH. Laminar burning velocities of diluted hydrogen-oxygen-nitrogen mixtures. *Energy and Fuels*. julio de 2007;21(4):1977-81.
134. Qiao L, Kim CH, Faeth GM. Suppression effects of diluents on laminar premixed hydrogen/oxygen/ nitrogen flames. *Combust Flame*. 1 de octubre de 2005;143(1-2):79-96.
135. Milton BE, Keck JC. Laminar burning velocities in stoichiometric hydrogen and hydrogenhydrocarbon gas mixtures. *Combust Flame*. 1 de octubre de 1984;58(1):13-22.
136. Law CK, Kwon OC. Effects of hydrocarbon substitution on atmospheric hydrogen-air flame propagation. *Int J Hydrogen Energy*. 1 de julio de 2004;29(8):867-79.
137. Halter F, Chauveau C, Djebaili-Chaumeix N, Gökalp I. Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane-hydrogen-air mixtures. *Proc Combust Inst*. 1 de enero de 2005;30(1):201-8.
138. Scholte TG, Vaags PB. Burning velocities of mixtures of hydrogen, carbon monoxide and methane with air. *Combust Flame*. 1 de enero de 1959;3(C):511-24.
139. Liu Y, Lenze B. Investigation of flame-generated turbulence in premixed flames at low and high burning velocities. *Exp Therm Fluid Sci*. 1 de mayo de 1992;5(3):410-5.
140. Huang Z, Zhang Y, Zeng K, Liu B, Wang Q, Jiang D. Measurements of laminar burning velocities for natural gas-hydrogen-air mixtures. *Combust Flame*. 1 de julio de 2006;146(1-2):302-11.
141. Hu E, Huang Z, He J, Jin C, Zheng J. Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane-hydrogen-air flames. *Int J Hydrogen Energy*. 1 de junio de 2009;34(11):4876-88.
142. Hu E, Huang Z, He J, Miao H. Experimental and numerical study on laminar burning velocities and flame instabilities of hydrogen-air mixtures at elevated pressures and temperatures. *Int J Hydrogen Energy*. 1 de octubre de 2009;34(20):8741-55.
143. Bradley D, Lawes M, Mumby R. Burning velocity and Markstein length blending laws for methane/air and hydrogen/air blends. *Fuel*. 1 de enero de 2017;187:268-75.
144. Ji C, Wang D, Yang J, Wang S. A comprehensive study of light hydrocarbon mechanisms performance in predicting methane/hydrogen/air laminar burning velocities. *Int J Hydrogen Energy*. 6 de julio de 2017;42(27):17260-74.
145. Nilsson EJK, van Sprang A, Larfeldt J, Konnov AA. The comparative and combined effects of hydrogen addition on the laminar burning velocities of methane and its blends with ethane and propane. *Fuel*. 1 de febrero de 2017;189:369-76.
146. Mandilas C, Ormsby MP, Sheppard CGW, Woolley R. Effects of hydrogen addition on

- laminar and turbulent premixed methane and iso-octane-air flames. *Proc Combust Inst.* 1 de enero de 2007;31 I(1):1443-50.
147. Sankaran R, Im HG. Effects of hydrogen addition on the markstein length and flammability limit of stretched methane/air premixed flames. *Combust Sci Technol.* 1 de septiembre de 2006;178(9):1585-611.
 148. Chen Z. Effects of hydrogen addition on the propagation of spherical methane/air flames: A computational study. *Int J Hydrogen Energy.* 1 de agosto de 2009;34(15):6558-67.
 149. Okafor EC, Hayakawa A, Nagano Y, Kitagawa T. Effects of hydrogen concentration on premixed laminar flames of hydrogen-methane-air. *Int J Hydrogen Energy.* 4 de febrero de 2014;39(5):2409-17.
 150. Ji C, Wang S. Effect of hydrogen addition on lean burn performance of a spark-ignited gasoline engine at 800 rpm and low loads. *Fuel.* 1 de marzo de 2011;90(3):1301-4.
 151. Ji C, Dai X, Ju B, Wang S, Zhang B, Liang C, et al. Improving the performance of a spark-ignited gasoline engine with the addition of syngas produced by onboard ethanol steaming reforming. *Int J Hydrogen Energy.* 1 de mayo de 2012;37(9):7860-8.
 152. Lee HC, Jiang LY, Mohamad AA. A review on the laminar flame speed and ignition delay time of Syngas mixtures. Vol. 39, *International Journal of Hydrogen Energy.* Pergamon; 2014. p. 1105-21.
 153. Bouvet N, Chauveau C, Gökalp I, Halter F. Experimental studies of the fundamental flame speeds of syngas (H₂/CO)/air mixtures. *Proc Combust Inst.* 1 de enero de 2011;33(1):913-20.
 154. Dong C, Zhou Q, Zhao Q, Zhang Y, Xu T, Hui S. Experimental study on the laminar flame speed of hydrogen/carbon monoxide/air mixtures. *Fuel.* 1 de octubre de 2009;88(10):1858-63.
 155. Fu J, Tang C, Jin W, Thi LD, Huang Z, Zhang Y. Study on laminar flame speed and flame structure of syngas with varied compositions using OH-PLIF and spectrograph. *Int J Hydrogen Energy.* 6 de febrero de 2013;38(3):1636-43.
 156. Sun H, Yang SI, Jomaas G, Law CK. High-pressure laminar flame speeds and kinetic modeling of carbon monoxide/hydrogen combustion. *Proc Combust Inst.* 1 de enero de 2007;31 I(1):439-46.
 157. Hassan MI, Aung KT, Faeth GM. Properties of laminar premixed CO/H₂/air flames at various pressures. *J Propuls Power.* 23 de mayo de 1997;13(2):239-45.
 158. Natarajan J, Lieuwen T, Seitzman J. Laminar flame speeds of H₂/CO mixtures: Effect of CO₂ dilution, preheat temperature, and pressure. *Combust Flame.* 1 de octubre de 2007;151(1-2):104-19.
 159. Singh D, Nishiie T, Tanvir S, Qiao L. An experimental and kinetic study of syngas/air combustion at elevated temperatures and the effect of water addition. *Fuel.* 1 de abril de 2012;94:448-56.
 160. Jiang Y huan, Li G xiu, Li H meng, Zhang G peng, Lv J cheng. Experimental study on the Influence of Hydrogen Fraction on Self-acceleration of H₂/CO/air laminar

- premixed flame. *Int J Hydrogen Energy*. 13 de enero de 2019;45(3):2351-9.
161. Krejci MC, Mathieu O, Vissotski AJ, Ravi S, Sikes TG, Petersen EL, et al. Laminar flame speed and ignition delay time data for the kinetic modeling of hydrogen and syngas fuel blends. *J Eng Gas Turbines Power*. 1 de febrero de 2013;135(2).
 162. Kéromnès A, Metcalfe WK, Heufer KA, Donohoe N, Das AK, Sung CJ, et al. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures. *Combust Flame*. 1 de junio de 2013;160(6):995-1011.
 163. Álvarez Pérez E. ESTUDIO DE INESTABILIDADES Y CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE METANO-HIDRÓGENO-AIRE EN CONDICIONES CELULARES. Valladolid; 2019.
 164. Nieto Salinas M. CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN DE GAS DE SÍNTESIS EN BOMBAS DE COMBUSTIÓN A VOLUMEN CONSTANTE PARA SU UTILIZACIÓN EN MOTORES DE COMBUSTIÓN INTERNA ALTERNATIVOS. Valladolid; 2019.
 165. Tinaut F V., Reyes M, Melgar A, Giménez B. Optical characterization of hydrogen-air laminar combustion under cellularity conditions. *Int J Hydrogen Energy*. 17 de mayo de 2019;44(25):12857-71.
 166. Giménez B, Melgar A, Horrillo A, Tinaut F V. A correlation for turbulent combustion speed accounting for instabilities and expansion speed in a hydrogen-natural gas spark ignition engine. *Combust Flame*. 2021;223:15-27.
 167. Gómez Alvarado CO. VENTAJAS DE LA SIMULACION CFD: HIDRODINAMICA DE UN HORNO REFORMADOR - PDF Descargar libre. [Punta Arenas, Chile]: Universidad de Magallanes; 2009.
 168. Camaño A. DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA MEDIANTE CFD PARA EL PROCESO DE COMBUSTIÓN EN UNA BOMBA A VOLUMEN CONSTANTE. Valladolid; 2016.
 169. Tinaut F, Melgar A, Diez A, Hornillos A. Producción de energía eléctrica de origen renovable en pequeñas – medias potencias. En: XVI Congreso Nacional de Ingeniería Mecánica. León - España; 2004.
 170. Lapuerta M, Hornillo A, Hernández J, Diez A. Simulation of producer gas utilization from gasification of lignocellulosic biomass wastes in reciprocating internal combustion engines: effects on performances and pollutant emissions. En 2001. p. 1929-32.
 171. AVL LIST GmbH. Combustion Module AVL FIRE. Austria; 2017.
 172. Li HM, Li GX, Sun ZY, Zhai Y, Zhou ZH. Measurement of the laminar burning velocities and markstein lengths of lean and stoichiometric syngas premixed flames under various hydrogen fractions. *Int J Hydrogen Energy*. 13 de octubre de 2014;39(30):17371-80.
 173. Aung KT, Hassan MI, Faeth GM. Effects of pressure and nitrogen dilution on flame/stretch interactions of laminar premixed H₂/O₂/N₂ flames. *Combust Flame*. 1 de enero de 1998;112(1-2):1-15.
 174. Berger L, Kleinheinz K, Attili A, Pitsch H. Characteristic patterns of

-
- thermodiffusively unstable premixed lean hydrogen flames. *Proc Combust Inst.* 1 de enero de 2019;37(2):1879-86.
175. Liu DDS, MacFarlane R. Laminar burning velocities of hydrogen-air and hydrogen-airsteam flames. *Combust Flame.* 1 de enero de 1983;49(1-3):59-71.
176. Iijima T, Takeno T. Effects of temperature and pressure on burning velocity. *Combust Flame.* 1 de julio de 1986;65(1):35-43.
177. Taylor SC. *Burning velocity and the influence of flame stretch.* University of Leeds; 1991.
178. Vagelopoulos CM, Egolfopoulos FN. Laminar flame speeds and extinction strain rates of mixtures of carbon monoxide with hydrogen, methane, and air. *Symp Combust.* 1 de enero de 1994;25(1):1317-23.
179. Ma F, Wang Y, Liu H, Li Y, Wang J, Zhao S. Experimental study on thermal efficiency and emission characteristics of a lean burn hydrogen enriched natural gas engine. *Int J Hydrogen Energy.* 1 de diciembre de 2007;32(18):5067-75.
180. Heywood JB. *Internal Combustion Engine Fundamentals.* New York: McGraw-Hill Education; 1998.
181. Markstein GH. *Nonsteady Flame Propagation.* New York: Pergamon; 1964. 22 p.
182. Okafor EC, Nagano Y, Kitagawa T. Experimental and theoretical analysis of cellular instability in lean H₂-CH₄-air flames at elevated pressures. *Int J Hydrogen Energy.* 27 de abril de 2016;41(15):6581-92.
183. Han M, Ai Y, Chen Z, Kong W. Laminar flame speeds of H₂/CO with CO₂ dilution at normal and elevated pressures and temperatures. *FUEL.* 2015;148:32-8.
184. Reyes M, Tinaut FV, Giménez B, Camaño A. Combustion and Flame Front Morphology Characterization of H₂-CO Syngas Blends in Constant Volume Combustion Bombs. *Energy & Fuels.* 28 de enero de 2021;
185. Burke MP, Chen Z, Ju Y, Dryer FL. Effect of cylindrical confinement on the determination of laminar flame speeds using outwardly propagating flames. *Combust Flame.* 1 de abril de 2009;156(4):771-9.

ANEXO I

ESTIMACIÓN DE LA PRESIÓN FINAL DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN ADIABÁTICA A VOLUMEN CONSTANTE

Partiendo de las ecuaciones de conservación para un volumen cerrado:

- Ecuaciones de conservación

	Inicial (p_i)	=	Final (p_f)
Masa:	$m_f + m_a$	=	m_q
Energía:	$m_f \cdot u_{fi} + m_a \cdot u_{ai}$	=	$m_q \cdot u_{qf} + Q_{trans} + W$
			$Q_{trans} = 0$ (adiabático)
			$W = 0$ ($V = cte$)

Considerando la relación $F = \frac{m_f}{m_a}$, dividiendo la ecuación de conservación de la energía por m_a , se puede escribir:

$$F \cdot u_{fi} + u_{ai} = (1 + F)u_{qf}$$

$$u_{qf} = \frac{1}{1 + F} (F \cdot u_{fi} + u_{ai}) \quad [1]$$

Para las energías internas sensibles se considera una temperatura de referencia, T_{ref} , y se introduce el calor específico a $V = cte$

Estado inicial: $T = T_i$

Aire: $u_{ai} = C v_a (T_i - T_{ref})$ [2]

Combustible: $u_{fi} = C v_f (T_i - T_{ref}) + u_{fc}$ [3]

$$u_{fc} = \Delta U_c = \text{energía interna de combustión}$$

(poder calorífico a $V = cte$)

Estado final: $T = T_{qf}$

Productos de la $u_{qf} = C v_q (T_{qf} - T_{ref}) + u_{q_inq}$ [4]

combustión: $u_{q_inq} = \text{energía de los inquemados}$

A partir de la expresión [1], usando [2], [3] y [4], se puede calcular $\Delta T_{qf} = T_{qf} - T_{ref}$

$$\Delta T_{qf} = \frac{1}{1+F} \cdot \frac{1}{Cv_q} [Cv_a(T_i - T_{ref}) + FCv_f(T_i - T_{ref}) + F\Delta U_c - (1+F)u_{q_inq}] \quad [6]$$

Si: $T_i \equiv T_{ref} \rightarrow T_i - T_{ref} = 0$ y desaparecen los términos de energía sensible del aire y del combustible

$$\Delta T_{qf} = T_{qf} - T_i = \frac{1}{1+F} \cdot \frac{1}{Cv_q} [F\Delta U_c - (1+F)u_{q_inq}] \quad [7]$$

Por otro lado, suponiendo un comportamiento de gas ideal

$$pV = mRT \quad \Rightarrow \quad T = \frac{pV}{mR} \quad p = \frac{mR}{V} \cdot T \quad [8]$$

Sustituyendo en [7]

$$\Delta p = p_f - p_i = \frac{m_q \cdot R_q}{V} \cdot \frac{1}{Cv_q} \cdot \frac{F}{1+F} \left[\Delta U_c - \left(\frac{1+F}{F} \right) \cdot u_{q_inq} \right] \quad [9]$$

Si se considera una fracción de inquemados f_{inq} , entonces:

$$u_{q_inq} = f_{inq} \cdot \Delta U_{fc}$$

Además:

$$\frac{R_q}{Cv_q} = \frac{Cp_q - Cv_q}{Cv_q} = \gamma_q - 1$$

Sustituyendo en [9]

$$\Delta p = p_f - p_i = \frac{m_q}{V} (\gamma_q - 1) \cdot \frac{F}{1+F} \left[\Delta U_c - \left(\frac{1+F}{F} \right) \cdot f_{inq} \cdot \Delta U_{fc} \right] \quad [10]$$

Considerando que:

$$\frac{m_q}{V} = \frac{m_i}{V} = \frac{p_i}{T_i \cdot R_{sq}}$$

Con lo que:

$$\Delta p = p_f - p_i = \frac{p_i (\gamma_q - 1)}{T_i \cdot R_{sq}} \cdot \frac{F}{1+F} \cdot \Delta U_c \left(1 - \frac{1+F}{F} \cdot f_{inq} \right) \quad [11]$$

Considerando que:

$$\frac{p_i}{T_i \cdot R_{sq}} = \rho_i$$

Se obtiene:

$$\Delta p = p_f - p_i = (\gamma_q - 1) \cdot \frac{F}{1 + F} \cdot \rho_i \cdot \Delta U_c \left(1 - \frac{1 + F}{F} \cdot f_{inq} \right) \quad [12]$$

Siendo: $\rho_i \Delta U_c \rightarrow \frac{kg}{m^3} \cdot \frac{MJ}{kg} \Rightarrow \frac{MJ}{m^3}$ el poder calorífico por unidad de volumen del combustible gaseoso.

Si no hay inquemados $f_{inq} = 0$ y las expresiones [11] y [12] se pueden simplificar a:

$$\frac{p_f - p_i}{p_i} = \frac{(\gamma_q - 1)}{T_i \cdot R_{sq}} \cdot \frac{F}{1 + F} \cdot \Delta U_c \quad [13]$$

$$p_f - p_i = (\gamma_q - 1) \cdot \frac{F}{1 + F} \cdot \rho_i \cdot \Delta U_c \quad [14]$$

Conceptualmente la expresión [13] se puede escribir como:

$$\frac{\Delta p}{p_i} = f(T_i, F, \Delta U_c, \text{composición del combustible}) \quad [15]$$

Nota:

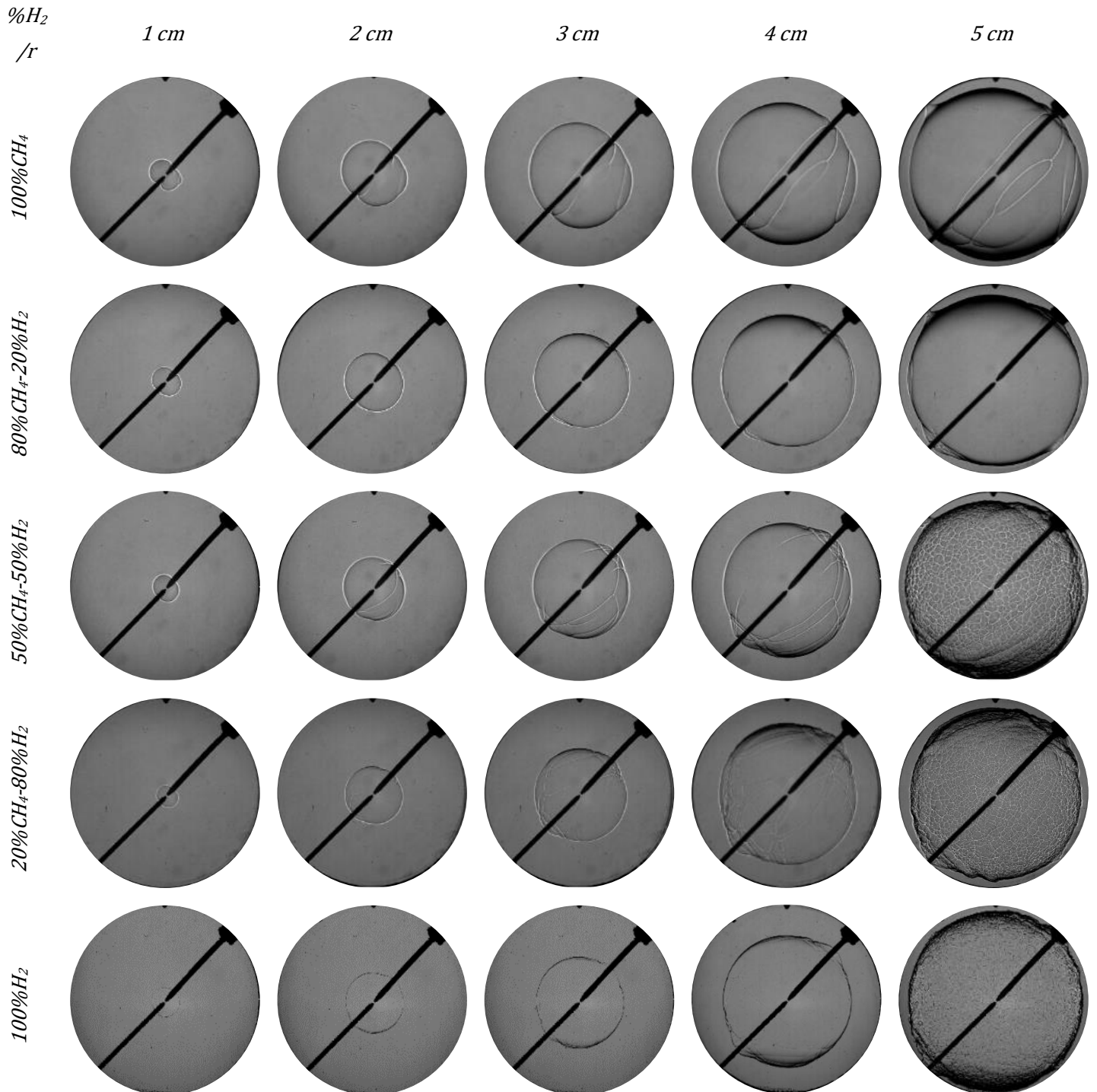
Estas expresiones son aproximadas, ya que parten de considerar unos valores medios del calor específico para expresar la energía interna en función de la temperatura, y en consecuencia del valor medio de γ_q .

No obstante, permiten obtener tendencias al variar el dosado, la temperatura inicial, la presión inicial o la energía de combustión.

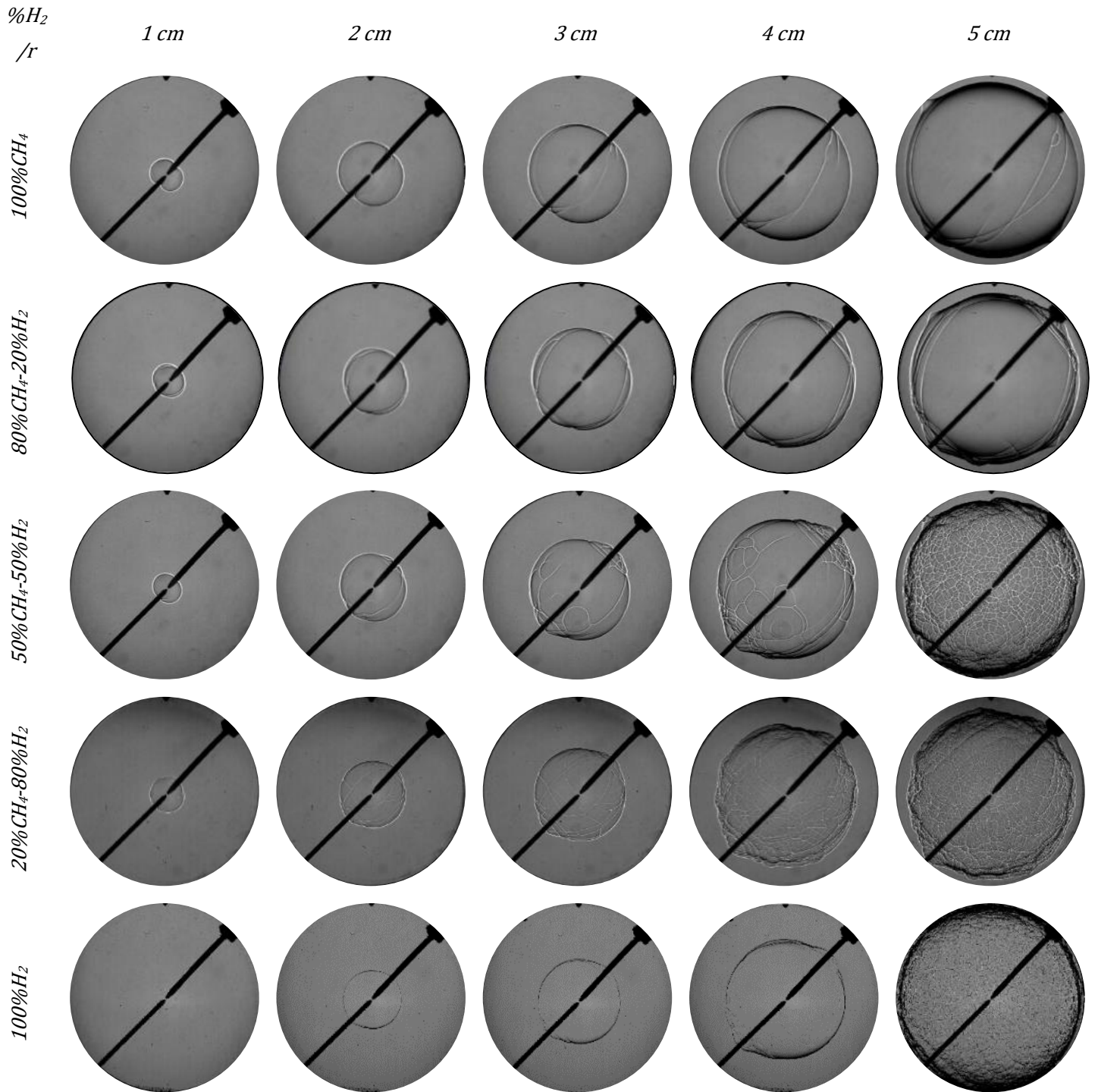
ANEXO II

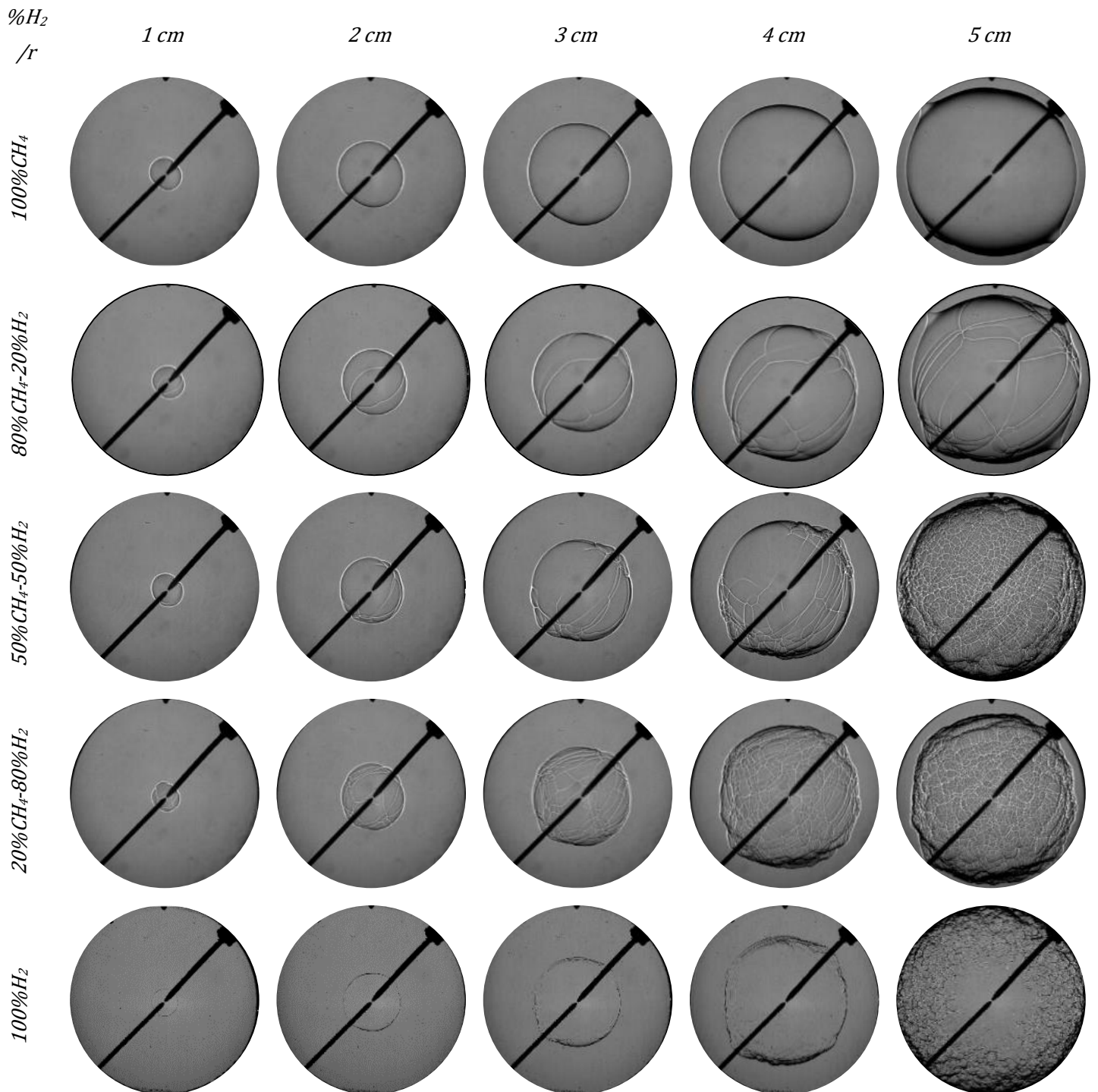
IMÁGENES SCHLIEREN PARA DIFERENTES DOSADOS

Fr = 1.0

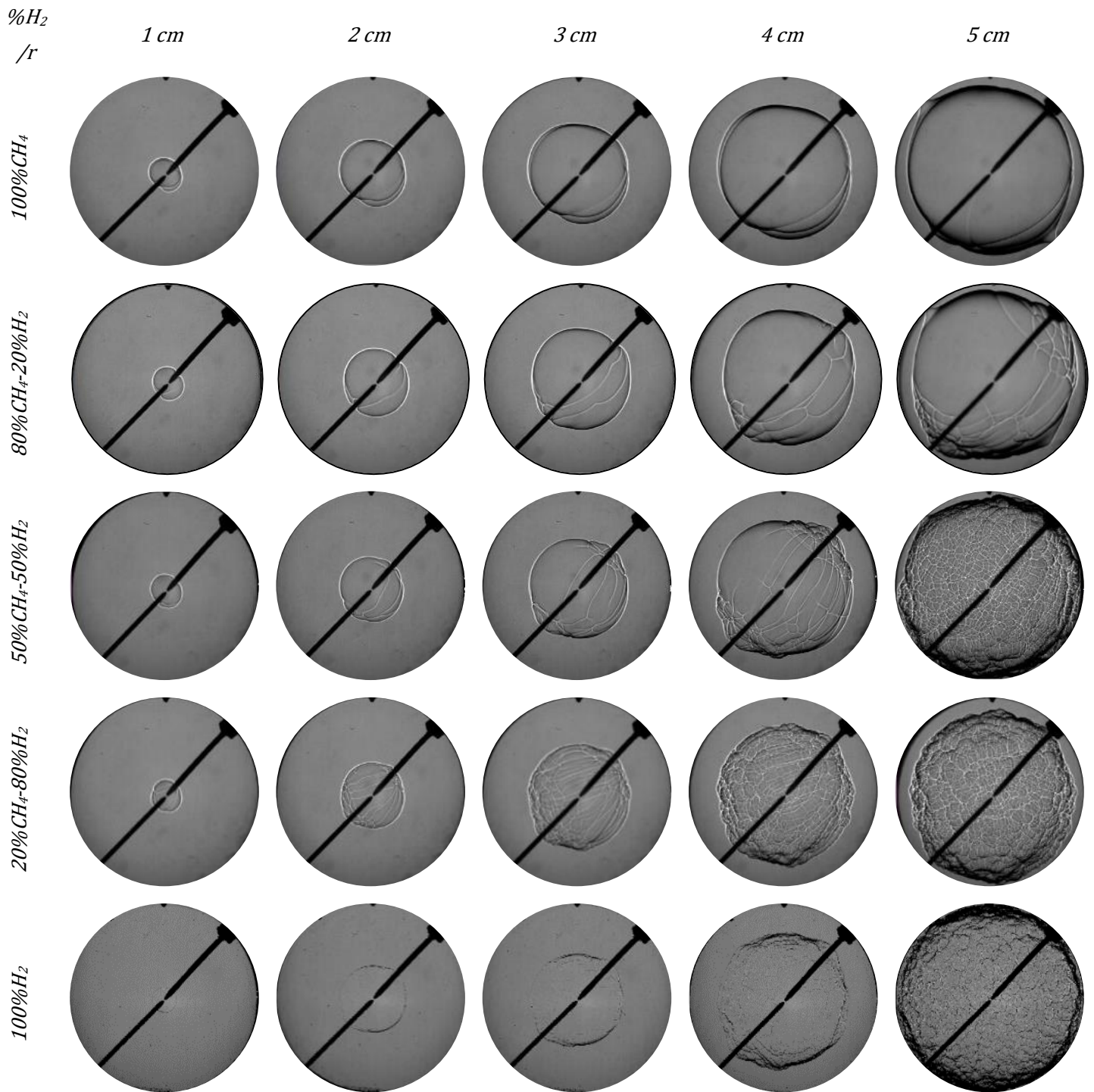


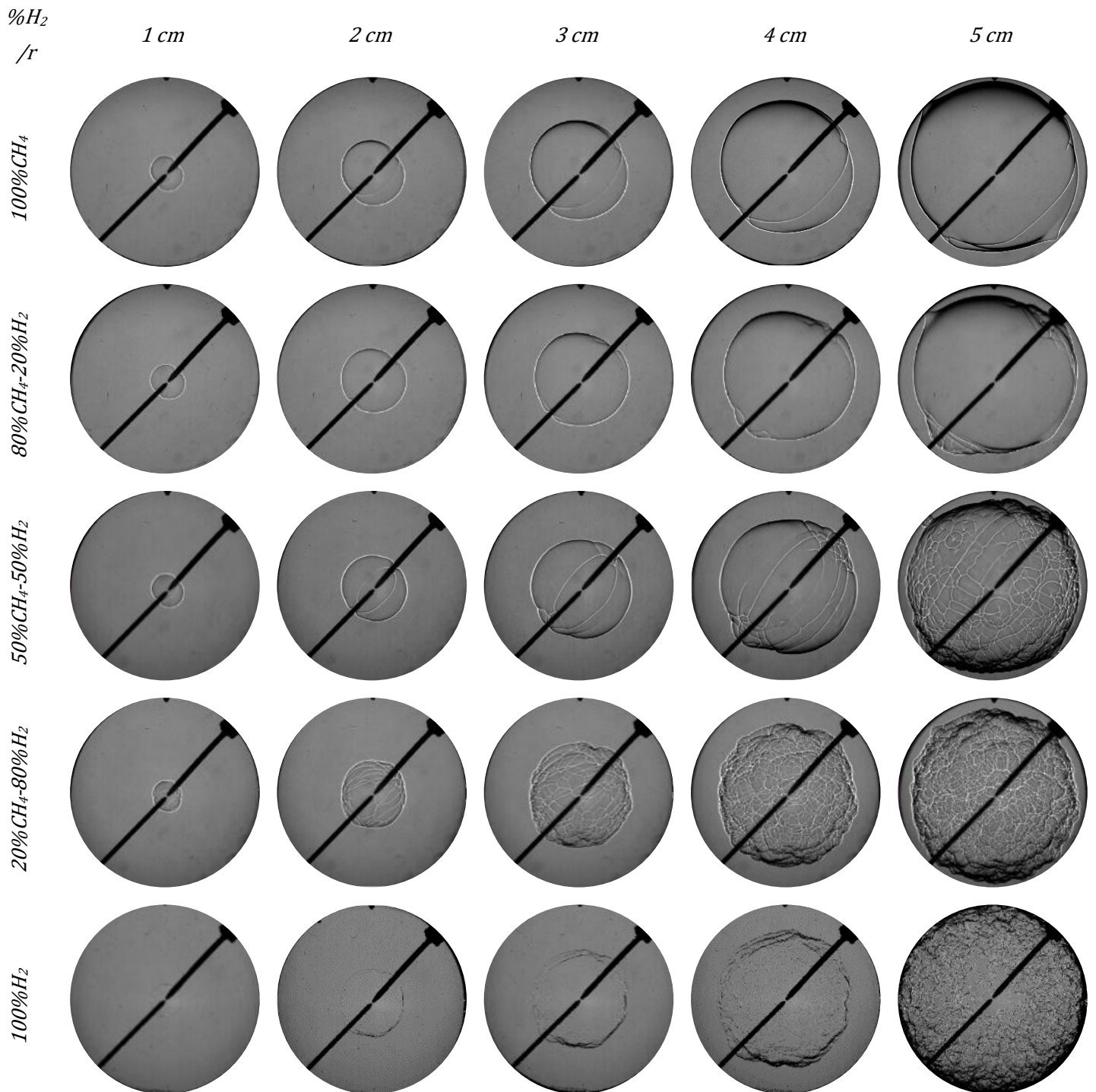
Fr = 0.9



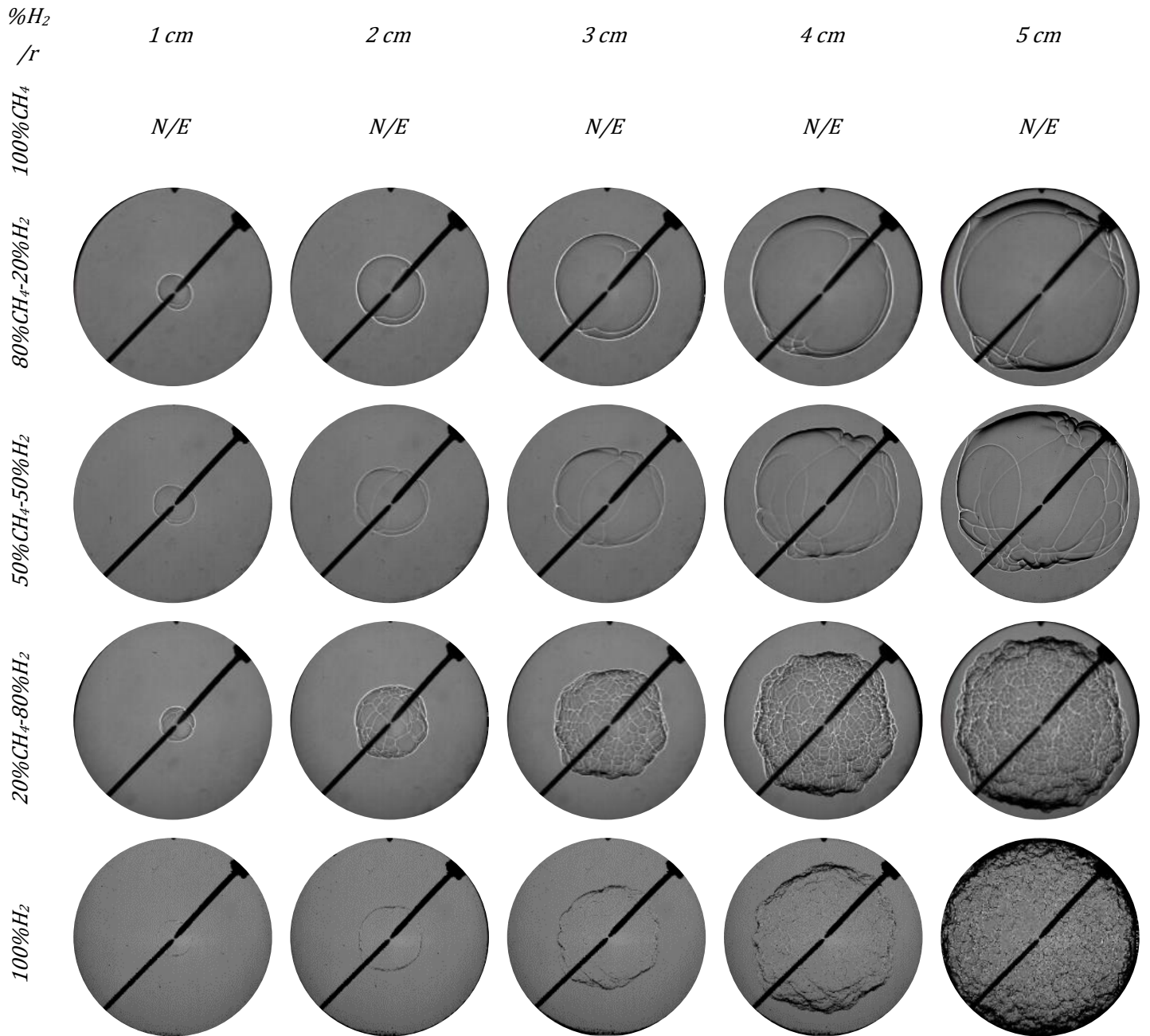
$Fr = 0.8$ 

Fr = 0.7



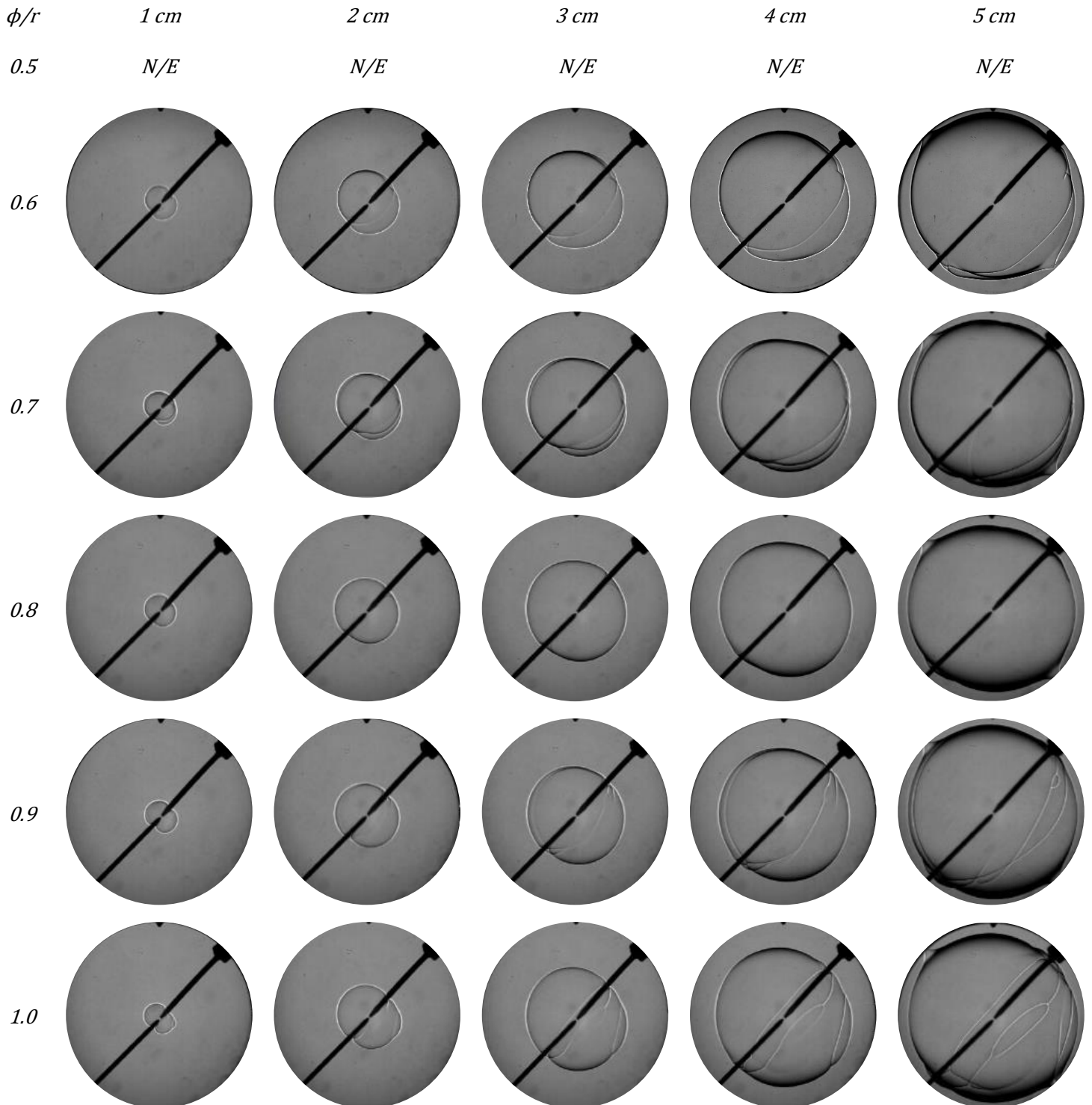
$Fr = 0.6$ 

Fr = 0.5

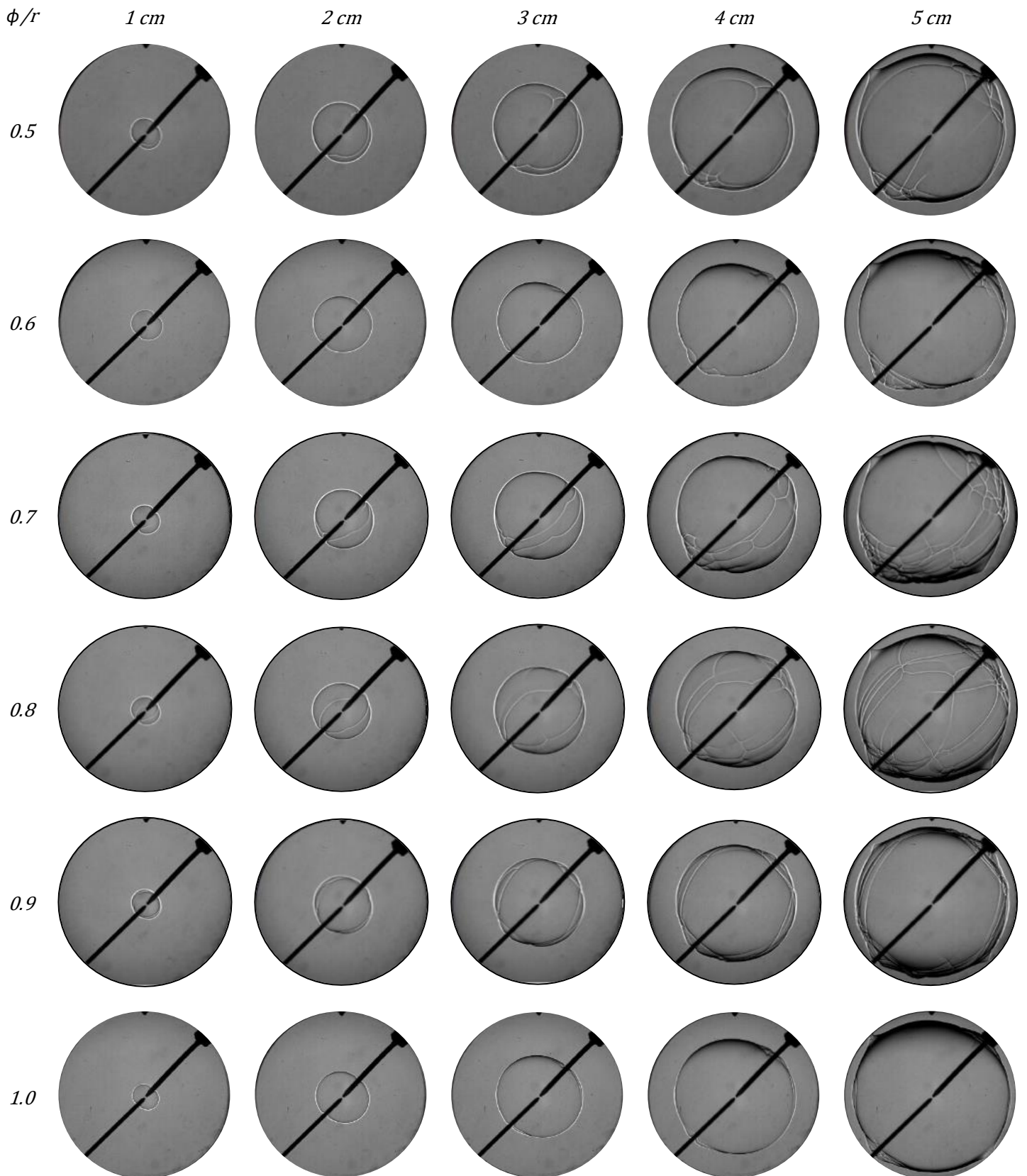


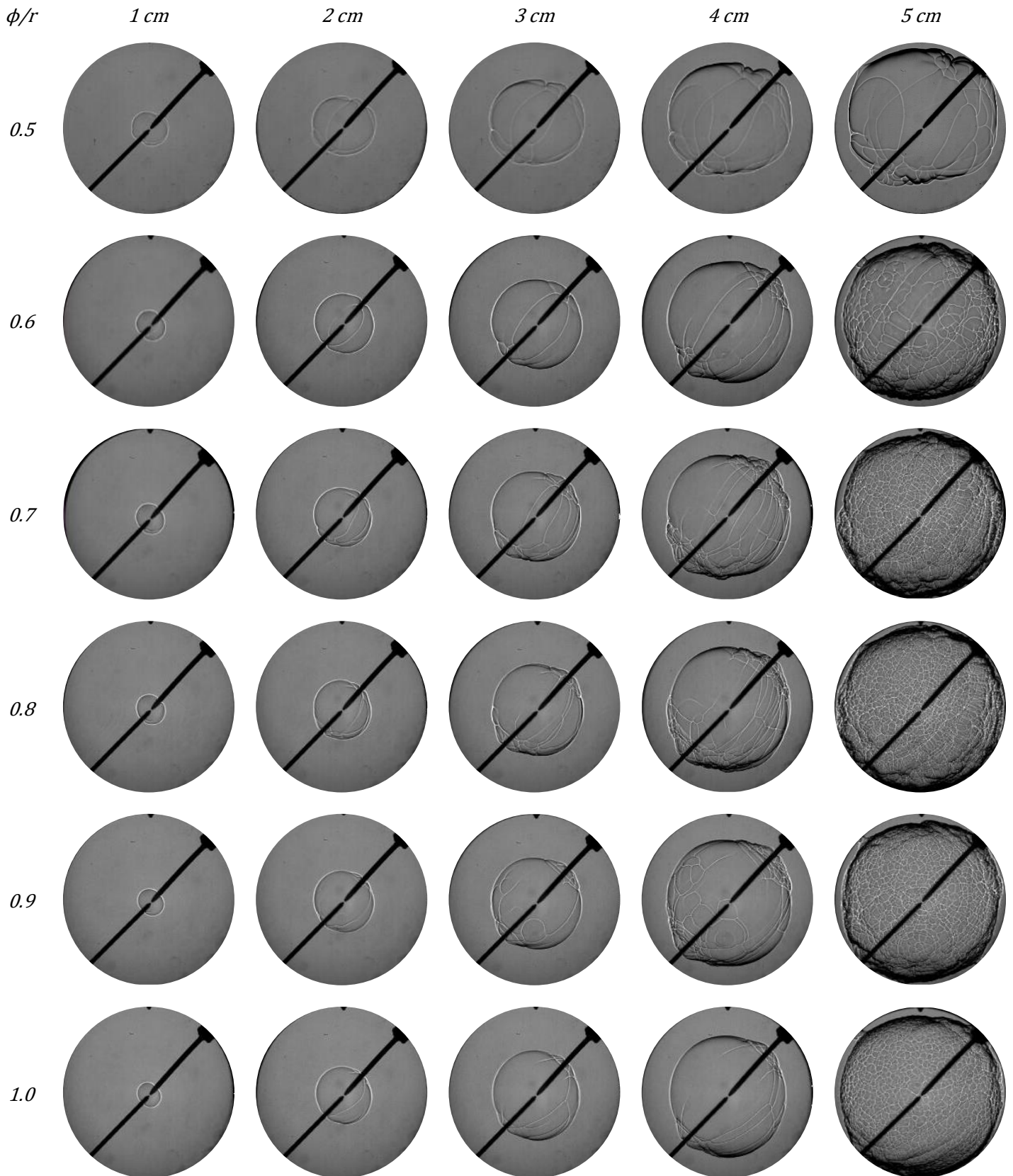
IMÁGENES SCHLIEREN PARA DIFERENTES MEZCLAS CON CONTENIDO DE H₂

100%CH₄

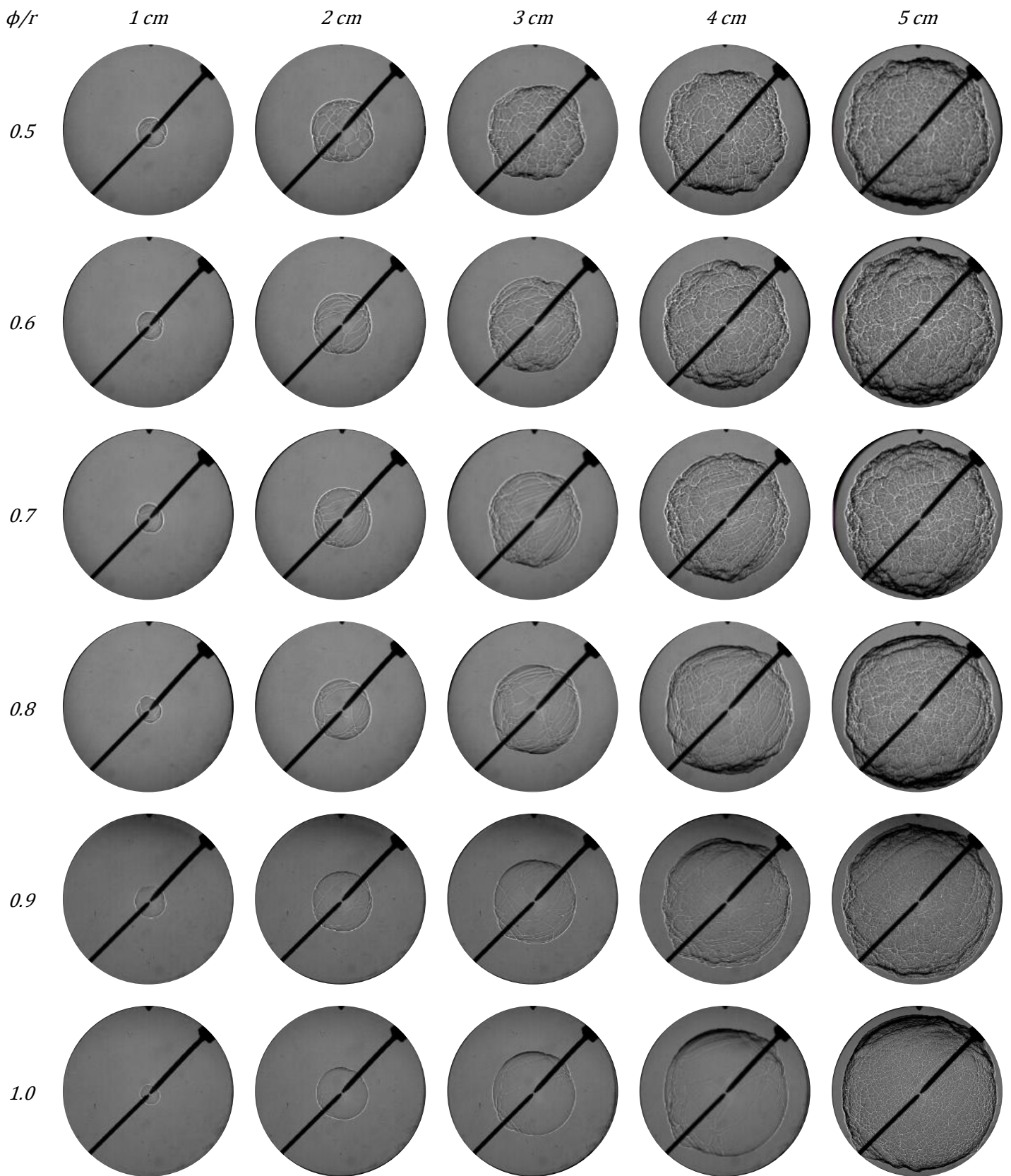


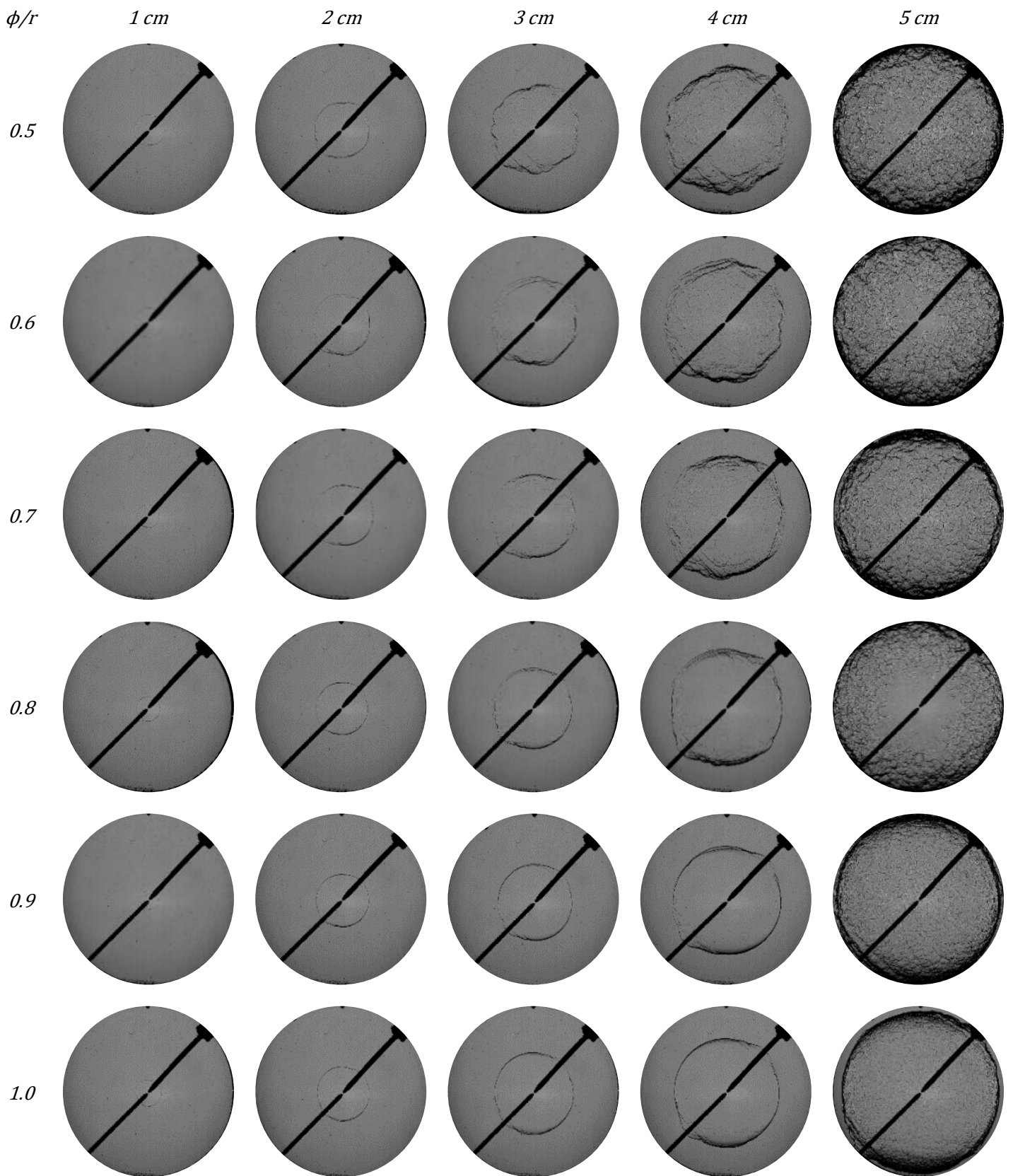
80%CH₄ - 20%H₂



50%CH₄ - 50%H₂

20%CH₄ - 80%H₂



100%H₂

ANEXO III

ARTÍCULOS PUBLICADOS Y CONFERENCIAS PRESENTADAS

Artículo 1

Article

Experimental Study of Premixed Gasoline Surrogates Burning Velocities in a Spherical Combustion Bomb at Engine Like Conditions

Miriam Reyes , Francisco V. Tinaut and Alexandra Camaño

Department of Energy and Fluid-Mechanics Engineering, University of Valladolid, Paseo del Cauce, 59, 47011 Valladolid, Spain; tinaut@eii.uva.es (F.V.T.); alexandra.lisbeth@gmail.com (A.C.)

* Correspondence: miriam.reyes@uva.es

Received: 10 June 2020; Accepted: 1 July 2020; Published: 3 July 2020



Abstract: In this work are presented experimental values of the burning velocity of iso-octane/air, n-heptane/air and n-heptane/toluene/air mixtures, gasoline surrogates valid over a range of pressures and temperatures similar to those obtained in internal combustion engines. The present work is based on a method to determine the burning velocities of liquid fuels in a spherical constant volume combustion bomb, in which the initial conditions of pressure, temperature and fuel/air equivalence ratios can be accurately established. A two-zone thermodynamic diagnostic model was used to analyze the combustion pressure trace and calculate thermodynamic variables that cannot be directly measured: the burning velocity and mass burning rate. This experimental facility has been used and validated before for the determination of the burning velocity of gaseous fuels and it is validated in this work for liquid fuels. The values obtained for the burning velocity are expressed as power laws of the pressure, temperature and equivalence ratio. Iso-octane, n-heptane and mixtures of n-heptane/toluene have been used as surrogates, with toluene accounting for the aromatic part of the fuel. Initially, the method is validated for liquid fuels by determining the burning velocity of iso-octane and then comparing the results with those corresponding in the literature. Following, the burning velocity of n-heptane and a blend of 50% n-heptane and 50% toluene are determined. Results of the burning velocities of iso-octane have been obtained for pressures between 0.1 and 0.5 MPa and temperatures between 360 and 450 K, for n-heptane 0.1–1.2 MPa and 370–650 K, and for the mixture of 50% n-heptane/50% toluene 0.2–1.0 MPa and 360–700 K. The power law correlations obtained with the results for the three different fuels show a positive dependence with the initial temperature and the equivalence ratio, and an inverse dependence with the initial pressure. Finally, the comparison of the burning velocity results of iso-octane and n-heptane with those obtained in the literature show a good agreement, validating the method used. Analytical expressions of burning velocity as power laws of pressure and unburned temperature are presented for each fuel and equivalence ratio.

Artículo 2

energy&fuels

pubs.acs.org/EF

Article

Combustion and Flame Front Morphology Characterization of H₂–CO Syngas Blends in Constant Volume Combustion Bombs

M. Reyes,* F.V. Tinaut, B. Giménez, and A. Camaño

 Cite This: <https://dx.doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c03598>

Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

ABSTRACT: The need to develop new, alternative, and bio-origin fuels for use in internal combustion engines has motivated the realization of this research, which aims to characterize the combustion process synthesis gas, represented by H₂–CO blends, which are its main constituents. Syngas can be considered a biofuel because it is a mixture of carbon monoxide, hydrogen, and other hydrocarbons, and it is formed by partial combustion of biomass. Experimental tests have been developed in two constant volume combustion bombs with spherical and cylindrical geometries to analyze the combustion process and the influence of the blend composition on the burning velocity. In the first one, the pressure registered during the combustion has been used to obtain the mass burning rate, temperatures, and burning velocities. The cylindrical bomb has two optical accesses through which the combustion process can be visualized and recorded with the Schlieren technique, and it has been used to characterize the morphology of the flame, the evolution of the flame front, or the laminar burning velocities, among other parameters of interest in the combustion process. For initial conditions of 0.1 MPa and 300 K, blends with different compositions and equivalence ratios have been studied. The introduction of hydrogen enhances combustion velocity and pressure, introducing also instabilities visible on flame front images, similar effects to those produced by increasing the equivalence ratio. Regarding the morphology of the flames, note that the tend to wrinkle and the cellularity increases as the hydrogen content of the mixture increases and the equivalence ratio decreases. The dependence of the numerical values of burning velocity has been expressed as a correlation on pressure and temperature. Finally, comparing the results of the burning velocities obtained in the spherical bomb and in the cylindrical bomb with those of different authors of the bibliography has checked the consistency and validity of them. Results of syngas blends are essential for the validation, optimization, and development of kinetic models for combustion development.

Artículo 3

CHARACTERIZATION AND MORPHOLOGIC STUDY OF THE PREMIXED COMBUSTION OF HYDROGEN/METHANE MIXTURES IN A COMBUSTION BOMB

M Reyes*, R. Sastre, P. Gabana and A. Camaño

Department of Energy and Fluid-Mechanics Engineering.

University of Valladolid. Paseo del Cauce, 59, E-47011 Valladolid, Spain

** miriam.reyes@uva.es,*

ABSTRACT

In this work, a characterization of the combustion process of methane/hydrogen-air mixtures under pre-mixed conditions and its morphology is presented. The study is developed using an experimental installation which consists of a constant volume combustion bomb, a two-zone thermodynamical model and a fluid-dynamic model to simulate hydrogen/methane flames.


The experimental study is made in an optical access cylindrical constant volume combustion bomb, which simulates the combustion chamber of an internal combustion engine. This bomb is equipped to register the instantaneous pressure during combustion and record the combustion process using high speed Schlieren optical technique. This provides straightforward information to compute the flame propagation speed and a direct evidence of the apparition of cells on the flame front. Through the images of the combustion process it is possible to made a morphological study of the process using a flame monitoring model, which allows determining: flame radius, flame front thickness, stretch rate, propagation speed flame, Markstein lengths and made a full study of the instabilities generated during the combustion process.

Simultaneously, by means of a 2-zone thermodynamical model, with the temporal evolution of pressure as the main intake, significant parameters are determined during the combustion process of different fuels under pre-mixed conditions: burning velocity, rate of combustion, burned mass fraction and rate of heat release between others.


In parallel with the experimental part, the same combustion process is studied in a fluid-dynamic model, CFD, in order to obtain, validate and verify all the parameters determined in the experimental data.

Results show that the percentage of hydrogen in the fuel mixture increases the burning velocity, and the cellularity of the flame front surface. At the same time, leaner mixtures, higher initial pressures and temperatures enhance the apparition of the onset of cellularity in the flames. Burning velocity increases with the increment of the initial temperature and the fuel/air mixture equivalence ratio. All the results obtained are validated with other data from authors found in the literature.

- Presentación




EII



gir
MyER
UVa

Universidad
de
Valladolid



Experimental Characterization of Burning Velocities of Premixed Iso-octane, n-Heptane and n-Heptane/Toluene in air mixtures in a combustion bomb at engine-like conditions

M. Reyes*, F.V.Tinaut, B. Giménez and A. Camaño

**MYER Group
University of Valladolid (Spain)
(*) miriam.reyes@eii.uva.es*

**11th Mediterranean
Combustion Symposium
Tenerife, Spain | 16-20 June 2019**

1

INDICE DE FIGURAS

Figura 1.1: Concentración de CO₂ en la atmósfera [1]..... 2

Figura 1.2: Contribución al calentamiento global de los distintos gases de efecto invernadero [2]. 3

Figura 1.3: Evolución de las leyes reguladoras de la reducción de emisiones contaminantes [4]..... 4

Figura 1.4: Límite de emisiones contaminantes para motor diésel y gasolina [4]. 5

Figura 2.1: Velocidad de combustión laminar ideal [50].13

Figura 2.2: Medidas de velocidad de llama a diferentes tasas de stretch [43].19

Figura 2.3: Inestabilidad hidrodinámica, Adaptada [3]25

Figura 2.4: Inestabilidad termo – difusiva. Adaptada de [48]26

Figura 2.5: Perturbación del frente de llama como consecuencia de los efectos termo – difusivos en función del número de Le [50].27

Figura 3.1: Principio físico de funcionamiento de la técnica óptica Shadowgraph. Adaptada de [101].39

Figura 3.2: Fotografía de una emisión de una llama de propano. Adaptada de [101].40

Figura 3.3: Esquema de un equipo óptico con la técnica LiF – PLIF. Adaptada de [101]. .40

Figura 3.4: Esquema de un equipo óptico para la técnica PIV. Adaptada de [103].41

Figura 3.5: Principio físico de funcionamiento de la técnica Schlieren. Adaptada de [101].42

Figura 3.6: Relación entre el incremento de presión y las imágenes Schlieren.....52

INDICE DE FIGURAS

Figura 3.7: Diagrama esquemático de los procedimientos de análisis de datos para ambas técnicas. (a) velocidad de combustión calculada a medida que aumenta la presión, (b) ajuste de la correlación global a los datos seleccionados de un solo experimento, (c) gráfico de muestra de la correlación resultante y (d) extrapolación de la velocidad de la llama a cero stretch desde la imagen de la llama. Adaptada de [60].	59
Figura 4.1: Esquema completo de la instalación experimental.	68
Figura 4.2: Bomba de combustión cilíndrica y cámara de alta velocidad.	69
Figura 4.3: Sensores de presión para la síntesis de la mezcla.	70
Figura 4.4: (a) Transductor piezoeléctrico y (b) amplificador Kistler.	71
Figura 4.5: Resistencias alrededor de la bomba (izquierda). Controlador PID (derecha).	71
Figura 4.6: Osciloscopio YOKOGAWA.	72
Figura 4.7: Centro geométrico de la cámara de combustión.	72
Figura 4.8: Sistema de electrodos.	73
Figura 4.9: Videocámara y Diodo LED.	73
Figura 4.10: Diodo emisor de luz.	74
Figura 4.11: Evolución del frente de llama de la zona de quemados a la zona de no quemados, [48].	77
Figura 4.12: Esquema general del procesamiento gráfico y de imágenes [162].	79
Figura 4.13: Evolución de la presión a lo largo del radio de la bomba e imágenes de la llama.	79
Figura 5.1: (a) Geometría y (b) mallado de modelo de bomba CFD.	86
Figura 5.2: Forma de frente de llama en un tiempo (t) dentro de la bomba cilíndrica.	92
Figura 5.3: Diferencial de volumen en el sistema.	93

Figura 6.1: Evolución temporal de la presión, valores calculados de velocidad de combustión (u_{fl}^p), fracción de masa quemada (FMQ), temperatura de la zona no quemada y radio del frente de llama versus tiempo, para una mezcla de aire-hidrógeno con dosado $\phi = 0.7$ y condiciones iniciales (0.1MPa y 300K).98

Figura 6.2: Evolución temporal de la presión para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y una variación de dosado $\phi = 0.5 - 1.0$99

Figura 6.3: Velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y una variación de dosado $\phi = 0.5 - 1.0$ 100

Figura 6.4: Evolución temporal de la presión para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de 315 K, $\phi = 0.7$ y $p_i = 0.1 - 0.3$ MPa. 101

Figura 6.5: Velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca para combustiones de H₂–aire con condiciones iniciales de 315 K, $\phi = 0.7$ y una variación de $p_i = 0.1$ a 0.3 MPa. 102

Figura 6.6: Evolución temporal de la presión para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de $\phi = 0.7$ y una variación de $T_i = 315$ y 373 K. (a) 0.1 MPa, (b) 0.2 MPa, (c) 0.3 MPa 103

Figura 6.7: Velocidad de combustión frente a la temperatura de la mezcla fresca para combustiones de H₂ – aire con condiciones iniciales de $\phi = 0.7$ y una variación de $T_i = 315$ y 373 K. (a) 0.1 MPa, (b) 0.2 MPa, (c) 0.3 MPa 104

Figura 6.8: Diferentes velocidades (S_n , u_l , u_n y u_{nr}) obtenidas por el método Schlieren para una combustión de H₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosado de $\phi = 0.5$ 106

Figura 6.9: (a) Espesor de llama crítico. (b) Radio de llama crítico. (c) Número de Peclet crítico para diferentes dosados de mezcla de H₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K. 108

Figura 6.10: Número de Lewis para diferentes dosados de mezcla de H₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K. 110

INDICE DE FIGURAS

Figura 6.11: Evolución del radio de frente de llama e imágenes para una combustión de H ₂ – aire con condiciones iniciales de 1 bar, 315 K y dosado de $\phi = 0.6$	111
Figura 6.12: Evolución de la densidad celular en función del radio de llama de una combustión de H ₂ – aire con condiciones iniciales de 1 bar, 315 K y dosado de $\phi = 0.6$	112
Figura 6.13: Imagen Schlieren de propagación de la llama de H ₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosados de $\phi = 0.5 - 1.0$	113
Figura 6.14: Densidad celular frente al radio de llama para una combustión de H ₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y dosados de $\phi = 0.5 - 1.0$	115
Figura 6.15: Imagen Schlieren del frente de llama para una combustión de H ₂ – aire a diferentes presiones iniciales (0.1 – 0.5 MPa), 315 K y dosado de $\phi = 0.5$	116
Figura 6.16: Densidad celular frente al radio de llama de H ₂ – aire a diferentes presiones iniciales (0.1 – 0.5 MPa), 315 K y dosado de $\phi = 0.5$	117
Figura 6.17: Imagen Schlieren para llamas a diferentes radios, variando presión y temperatura iniciales de H ₂ – aire a dosado de $\phi = 0.5$	118
Figura 6.18: Densidad celular para una mezcla de H ₂ – aire a dosado de $\phi = 0.5$, para tres valores de presión inicial y dos valores de temperatura inicial.....	119
Figura 6.19: Comparación de la velocidad de combustión con la obtenida por otros autores para combustiones de H ₂ – aire con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y una variación de dosado de $\phi = 0.5 - 1.0$	120
Figura 6.20: Velocidad de combustión aparente frente a la densidad celular para una mezcla de H ₂ – aire a 1bar, 315 K con una variación de dosado de $\phi = 0.5 - 1.0$	122
Figura 7.1: Evolución temporal de la presión instantánea, para mezclas con diferente contenido de H ₂ y dosados $\phi = 0.7$ y 1.0, con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K.....	129
Figura 7.2: Velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca, para mezclas con diferente contenido de H ₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K a $\phi = 0.7$ y 1.0.....	132

Figura 7.3: Velocidad de combustión laminar frente a las diferentes mezclas de hidrógeno. 133

Figura 7.4: Evolución de la presión frente al tiempo, para diferentes dosados. (a) 100%CH₄; (b) 20%H₂; (c) 50%H₂; (d) 80%H₂; (d) 100%H₂. 134

Figura 7.5: Evolución de la velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca, para diferentes dosados. (a) 100%CH₄; (b) 20%H₂; (c) 50%H₂; (d) 80%H₂; (d) 100%H₂. 135

Figura 7.6: Velocidad de combustión laminar para diferentes dosados. 136

Figura 7.7: Velocidad de combustión laminar según el rango de radios elegido para su determinación..... 138

Figura 7.8: Imágenes Schlieren de frente de llama para distintas mezclas con contenido de H₂, en condiciones iniciales de $p = 0.1$ MPa y $T = 315$ K a $\phi = 1.0$ 140

Figura 7.9: Imágenes Schlieren de frente de llama para distintas mezclas con contenido de H₂, en condiciones iniciales de $p = 0.1$ MPa y $T = 315$ K a $\phi = 0.7$ 141

Figura 7.10: Evolución temporal del radio de frente de llama, para diferentes mezclas con dosados de $\phi = 0.7$ y 1.0 142

Figura 7.11: Velocidad de propagación de frente de llama S_n versus radio de llama, para mezclas con diferente contenido de H₂ a condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K, para dosados 1.0 y 0.7. 143

Figura 7.12: Velocidad de propagación de frente de llama S_n versus tasa de stretch, para mezclas con diferente contenido de H₂ a 0.1 MPa y 315 K y dosados 1.0 y 0.7. 143

Figura 7.13: Velocidad de propagación de llama sin stretch para mezclas con diferente contenido de hidrógeno, con condiciones iniciales de 0.1 MPa 315 K y $\phi = 0.7$ y 1.0 144

Figura 7.14: Velocidad de combustión laminar sin stretch para mezclas con diferente contenido de hidrógeno y dosado con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K. 144

INDICE DE FIGURAS

Figura 7.15: (a) Velocidad de combustión con stretch y (b) velocidad de combustión másica frente a la tasa de stretch.	146
Figura 7.16: Longitud de Markstein para diferentes mezclas con diferentes contenidos de hidrógeno, con condiciones iniciales de 0.1MPa, 315 K y $\phi = 0.5$ y 1.0.	146
Figura 7.17: Número de Zel'dovich para mezclas con diferente contenido de hidrógeno, con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.5$ y 1.0.	147
Figura 7.18: Morfología de evolución del frente de llama para una llama 100%CH ₄ para diferentes dosados.	149
Figura 7.19: Morfología de evolución del frente de llama para una llama 20%H ₂ para diferentes dosados.	150
Figura 7.20: Morfología de evolución del frente de llama para una llama 50%H ₂ para diferentes dosados.	151
Figura 7.21: Morfología de la evolución del frente de llama para una mezcla con 80%H ₂ y diferentes dosados.	152
Figura 7.22: Morfología de evolución del frente de llama para una mezcla 100%H ₂ y diferentes dosados.	153
Figura 7.23: Evolución temporal del radio de llama para distintas mezclas de H ₂ y dosados. (a) 0%H ₂ , (b) 20%H ₂ , (c) 50%H ₂ , (d) 80%H ₂ , (e) 100%H ₂ , $\phi=0.5 - 1.0$	154
Figura 7.24: Velocidad de propagación de llama S_n frente al radio de llama para distintos porcentajes de H ₂ . (a) 0%H ₂ ; (b) 20%H ₂ ; (c) 50%H ₂ ; (d) 80%H ₂ ; (e) 100%H ₂ , y dosados $\phi=0.6-1.0$	155
Figura 7.25: Velocidad de propagación de llama frente a la tasa de stretch para distintos porcentajes de H ₂ . (a) 0%H ₂ ; (b) 20%H ₂ ; (c) 50%H ₂ ; (d) 80%H ₂ ; (e) 100%H ₂ . Dosado $\phi=0.5 - 1.0$	157
Figura 7.26: Velocidad propagación de llama frente la tasa de stretch, para una mezcla con 80%H ₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.9$	158

Figura 7.27: Velocidad propagación de llama libre de stretch para diferentes mezclas con contenido de H₂ con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.5 - 1.0$ 158

Figura 7.28: Velocidad de combustión laminar sin stretch frente al dosado para diferentes fracciones de hidrógeno. 159

Figura 7.29: Variación de la velocidad de combustión con stretch u_n con la tasa de stretch para distintas mezclas con contenido de H₂ y dosados. (a) 0%H₂; (b) 20%H₂; (c) 50%H₂; (d) 80%H₂; (e) 100%H₂ y $\phi=0.5 - 1.0$ 160

Figura 7.30: Variación de la velocidad de combustión másica con stretch u_{nr} , frente a la tasa de stretch para distintas mezclas con contenido de H₂. (a) 0%H₂; (b) 20%H₂; (c) 50%H₂; (d) 80%H₂; (5) 100%H₂ y dosado $\phi=0.5 - 1.0$ 161

Figura 7.31: Velocidad de combustión sin stretch u_l , velocidad de combustión con stretch u_n , y velocidad de combustión másica u_{nr} frente a la tasa de stretch. 162

Figura 7.32: Longitud de Markstein frente al dosado para diferentes mezclas con contenido de H₂. 163

Figura 7.33: Velocidad de propagación de llama sin stretch S_l y longitud de Markstein L_b calculadas usando diferentes rangos del radio del frente. 164

Figura 7.34: Número de Zel'dovich frente al dosado para mezclas con diferente contenido de H₂. 165

Figura 7.35: Número de Karlovitz para diferentes mezclas con contenido de H₂ a diferentes dosados. 165

Figura 7.36: (a) Radio de llama crítico, (b) espesor de llama crítico, (c) tasa de stretch crítica en función del dosados para mezclas con diferente contenido de hidrógeno. 166

Figura 7.37: Comparación de la velocidad de combustión laminar para una mezcla de 100%CH₄ – aire para diferentes dosados. 168

Figura 7.38: Comparación de la velocidad de combustión laminar para mezclas de 20%, 50 y 80% H₂ – aire para diferentes dosados. 169

INDICE DE FIGURAS

Figura 7.39: Comparación de la velocidad de combustión laminar para una mezcla de 100% H_2 – aire para diferentes dosados.....	168
Figura 7.40: Comparación de la velocidad de combustión laminar para diferentes fracciones de H_2 – aire para un dosado de $\phi=0.8$	170
Figura 7.41: Tasa de crecimiento de Darrieus–Landau para diferentes mezclas con contenido de hidrógeno con condiciones iniciales de 0.1 MPa, 315 K y $\phi = 0.5 - 1.0$	172
Figura 7.42: Número de Markstein en función del contenido de hidrógeno, para distintos dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.....	174
Figura 7.43: Dependencia del espesor de frente de llama con el contenido de hidrógeno para mezclas con diferentes dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones iniciales 0.1 MPa y 315 K.....	174
Figura 7.44: Número de Peclet crítico en función del contenido de hidrógeno para mezclas con diferentes dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones iniciales de 0.1 MPa y 315 K.....	175
Figura 7.45: Número de Lewis en función del contenido de hidrógeno para mezclas con diferentes dosados $\phi = 0.5 - 1.0$, con condiciones de iniciales de 0.1 MPa y 315 K.....	176
Figura 7.46: Dependencia con el dosado del parámetro ω_{DL} asociado a la tasa de crecimiento de Darrieus–Landau para diferentes contenidos de hidrógeno.....	177
Figura 7.47: Dependencia del número de Markstein con el dosado, para diferentes proporciones de hidrógeno.....	178
Figura 7.48: Variación del espesor de frente de llama para diferentes dosados.....	178
Figura 7.49: Número de Peclet crítico para diferentes dosados.....	179
Figura 7.50: Número de Lewis para diferentes dosados.....	180
Figura 8.1: Evolución temporal de la presión para diversas mezclas con composición variables de la mezcla para 0, 6.7, 25, 50 y 100 % H_2 con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K, y dosado estequiométrico.....	186

Figura 8.2: Velocidad de combustión laminar frente a la temperatura de la mezcla fresca para diferentes mezclas H₂/CO con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K y dosado estequiométrico..... 187

Figura 8.3: Influencia del dosado en la evolución temporal de la presión para mezclas de 6.7, 25, y 50% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K y una variación de $\phi = 0.5 - 1$ 188

Figura 8.4: Influencia del dosado en la velocidad de combustión para mezclas de 6.7, 25, y 50% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K y una dosado $\phi = 0.5 - 1$ 189

Figura 8.5: Imagen Schlieren para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones atmosféricas (0.1 MPa y 300K) a dosado estequiométrico..... 192

Figura 8.6: Evolución temporal del radio de frente de llama para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K a dosado estequiométrico..... 193

Figura 8.7: Velocidad de propagación de frente de llama para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa, 300K y $\phi = 1.0$. (a) frente al radio de llama. (b) frente a la tasa de stretch. (c) zoom de gráfico de S_n frente α 194

Figura 8.8: Velocidad de propagación de llama libre de stretch S_1 para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales (0.1 MPa y 300K) a dosado estequiométrico..... 196

Figura 8.9: Velocidad de combustión laminar libre de stretch u_l^0 para mezclas de 0 - 100% H₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K y a dosado estequiométrico..... 197

Figura 8.10: Imagen Schlieren para mezclas de 6.7% H₂ - 93.3%CO con condiciones iniciales de (0.1 MPa y 300K) y variación de dosado de $\phi = 0.5 - 1.0$ 200

Figura 8.11: Imagen Schlieren para mezclas de 25% H₂ - 75% CO con condiciones iniciales de (0.1 MPa y 300K) y variación de dosado de $\phi = 0.5 - 1.0$ 201

Figura 8.12: Imagen Schlieren para mezclas de 50% H₂ - 50% CO con condiciones iniciales de (0.1 MPa y 300K) y variación de dosado de $\phi = 0.5 - 1.0$ 202

Figura 8.13: Evolución temporal del radio de frente de llama para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales (0.1 MPa y 300K). (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H₂. 203

INDICE DE FIGURAS

Figura 8.14: Velocidad de propagación de frente de llama en función del radio de llama para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K y proporciones. (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H ₂	205
Figura 8.15: Velocidad de propagación de frente de llama versus la tasa de stretch para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300 K. (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H ₂	206
Figura 8.16: Velocidad de propagación de frente de llama SI en función del dosado para distintas proporciones de H ₂ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K. (a) 6.7, (b) 25 y (c) 50% H ₂	207
Figura 8.17: Velocidad de combustión sin stretch u_1^0 función del dosado, con distintas proporciones de H ₂ y con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K.....	208
Figura 8.18: Comparación de la velocidad de combustión obtenidas por método de las presiones y de las imágenes. para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K.	209
Figura 8.19: Comparación de la velocidad de combustión obtenida por método de las presiones y de las imágenes con otros autores para $\phi = 0.5 - 1.0$ con condiciones iniciales 0.1 MPa y 300K con distintas proporciones de H ₂ - CO.	212
Figura 9.1: Pruebas de porción de geometría y tamaño de malla. (a) un octavo de bomba; (b) un dieciseisavo de bomba.....	217
Figura 9.2: Evolución temporal de la presión media para el modelado CFD.	219
Figura 9.3: Evolución temporal de la presión media para el modelado CFD.	220
Figura 9.4: Velocidad de combustión de simulación CFD frente a la temperatura de la mezcla fresca.	221
Figura 9.5: Seguimiento de la posición del frente de llama por el algoritmo desarrollado.	223
Figura 9.6: Evolución temporal del radio de frente de llama en dirección axial y radial.	225

Figura 9.7: Evolución de la forma del frente de llama ajustado dentro de la bomba cilíndrica.	226
Figura 9.8: Área de frente de llama y volumen de la mezcla quemada frente al tiempo.	227
Figura 9.9: Volumen de la mezcla quemada, no quemada y volumen experimental frente al tiempo.	228
Figura 9.10: Volumen de la mezcla quemada, y volumen experimental frente al radio R_0 y Z_0	228
Figura 9.11: Masa quemada y no quemada frente al tiempo.	229
Figura 9.12: Comparación de la evolución temporal de la fracción de masa quemada frente al tiempo.	229
Figura 9.13: Comparación de la evolución temporal de la temperatura de la mezcla no quemada.	230
Figura 9.14: Velocidad de combustión laminar frente al tiempo y a la temperatura de la mezcla fresca.	231
Figura 9.15: Velocidad de combustión representada en función de los radios R_0 y Z_0	231

INDICE DE TABLAS

Tabla 3.1: Métodos para la determinación de la velocidad de combustión. Adaptada de [3].
.....38

Tabla 3.2: Tabla resumen de variables relevantes para el cálculo de la velocidad de
combustión.....56

Tabla 6-1: Tabla de condiciones iniciales de los experimentos para hidrógeno puro en aire.
.....97

Tabla 7.1: Condiciones de los experimentos realizados para las mezclas de CH₄-H₂/aire.
..... 126

Tabla 8-1: Experimentos con mezclas de H₂-CO 185

