



MASTER EN INGENIERÍA DE AUTOMOCIÓN

ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

TRABAJO FIN DE MÁSTER

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA MEDIANTE CFD PARA EL PROCESO DE COMBUSTIÓN EN UNA BOMBA A VOLUMEN CONSTANTE

Autor: D^a. Alexandra Lisbeth Camaño Camaño

Tutor: Dr. Francisco Vicente Tinaut Fluixá

Valladolid, Septiembre de 2016

Escuela Ingenierías Industriales

Depto. Ing^a Energética y Fluidomecánica

Paseo del Cauce 59

47011Valladolid
(España)



Fundación Cidaut

Parque Tecnológico de Boecillo, 209

47151 Boecillo (Valladolid)

España



DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA MEDIANTE CFD PARA EL PROCESO DE COMBUSTIÓN EN UNA BOMBA A VOLUMEN CONSTANTE

RESUMEN BREVE

La finalidad de este TFM es reproducir mediante un código CFD (Computational Fluid Dynamics) los experimentos de combustión realizados en la bomba a volumen constante del Laboratorio de Motores Térmicos de la UVA, validando la metodología con experimentos. En el capítulo 1 se realiza una introducción, para seguidamente presentarse los fundamentos teóricos de combustión requeridos para el desarrollo del modelado CFD. También se muestra la información de la bomba de combustión experimental. En el capítulo 3, se explica la aplicación de la metodología del código CFD para el proceso de combustión y su implementación en la geometría de la bomba de combustión. En los capítulos 4 y 5 se realiza el análisis de los resultados obtenidos, como presión, temperatura, avance de frente de llama, concentraciones máxicas obtenidas y una comparación entre los resultados de las simulaciones con los datos experimentales. Finalmente se recogen las conclusiones que se obtienen del trabajo desarrollado.

DEVELOPMENT OF A METHODOLOGY FOR USING CFD COMBUSTION PROCESS IN PUMP CONSTANT VOLUME

SHORT ABSTRACT

The purpose of this TFM is to reproduce by using a CFD code (Computational Fluid Dynamics) combustion experiments conducted in the constant volume bomb, located at the Thermal Engines Laboratory (UVa), validating the methodology with experiments. In Chapter 1 an introduction is made, to then present the theoretical foundations of combustion required for the development of CFD modeling. Information bomb experimental combustion is also shown. In Chapter 3, the application of the methodology of CFD code for the combustion process and its implementation in the geometry of the combustion bomb explained. In chapters 4 and 5 the analysis of the results, such as pressure, temperature, advancing flame front, mass concentrations obtained and a comparison between simulation results with experimental data is performed. Finally the conclusions obtained from the work performed are presented.

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA MEDIANTE CFD PARA EL PROCESO DE COMBUSTIÓN EN UNA BOMBA A VOLUMEN CONSTANTE

RESUMEN EJECUTIVO

La finalidad de este trabajo es reproducir mediante la utilización de CFM (Computational Fluid Dynamics), los experimentos de combustión realizados en la bomba de combustión a volumen constante, que se encuentra en el laboratorio de motores de la UVA, de tal manera que nos permita predecir datos aproximados para futuros experimentos.

En el primer capítulo hay una pequeña introducción y antecedentes, los cuales se enmarcan en el porqué de los estudios sobre los combustibles alternativos como reemplazo de los tradicionales, sumado a lo anterior se presenta el objetivo principal, así como también la justificación y las actividades que se llevaran a cabo para finalizar con éxito el trabajo. Seguidamente en el capítulo 2, se presentan los fundamentos teóricos básicos de combustión requeridos para el desarrollo del modelado de combustión en una bomba a volumen constante. De igual manera se muestra la información del banco de pruebas del cual se obtuvo la data experimental.

Luego en el capítulo 3 uno de los principales del trabajo, explica paso a paso lo que es el desarrollo de la metodología del modelo CFD para el proceso de combustión y su implementación en un modelo tipo CAD de la bomba a volumen constante, el tipo de mallado (cuadrado), la cantidad de nodos (136000) así como algunos fundamentos básicos del software ANSYS FLUENT. En este capítulo también se definen las condiciones iniciales ($P_i=0.5, 1.0, 1.5 \text{ bar @ } T_i=300\text{K}$) y de fronteras del modelo ($T_{iw}=300\text{K}$), el modelo de turbulencia que fue el estándar k- ϵ , el modelo de combustión para el cual se utilizó los modelos Eddy-Dissipation y Finte-Rate, presentándose la mayoría de los resultados con este último, ya que con el primero las velocidades obtenidas fueron muy altas. Se definió además los monitores de visualización de los resultados durante el proceso y el post-proceso, además de los

datos para dar inicio a la ejecución del modelo como lo es el tamaño de paso de tiempo $t_s=5e-07s$, el número de iteraciones por paso de tiempo (25 iteraciones), y la cantidad de paso de tiempo para quemar todo el combustible dentro de la esfera.

En el capítulo 4 se describe el ensayo experimental que fue utilizado de referencia para el desarrollo del modelo CFD, así como los dos métodos para el cálculo de la velocidad de combustión (modelo de dos zonas 2-Z del ensayo experimental y el modelo de Lewis y von Elbe para los datos de simulaciones CFD). Seguidamente en el capítulo 5 se realiza el análisis de los resultados obtenidos, así como lo es la temperatura, el avance de frente de llama, las concentraciones máxicas obtenidas, por los dos modelos de combustión utilizados, las velocidades de combustión obtenidas por medio de las medidas de presión y sus respectivas derivadas en el tiempo, bajo el método de simplificado de Lewis y von Elbe. También se presenta una comparación de los parámetros de presión y velocidad de combustión de los datos del ensayo experimental con los datos obtenidos con el modelo CFD, en las cuales se pudo observar que pese a que el proceso se da muy rápido, se alcanzan a conseguir las presiones finales similares a las experimentales, pero que no sucede lo mismo con la velocidad de combustión ya que al valor más bajo que se llegó fue de 2.6 m/s, mientras que para el experimental este parámetro está por debajo de 1 m/s durante todo el proceso.

Finalmente en el capítulo 6 se plantean las conclusiones que se obtienen del trabajo desarrollado. Dentro de los **modelos de combustión** para transporte de especies utilizados fueron Eddy-Dissipation y Finite-Rate, siendo el Finite-Rate el que proporciona las velocidades más próximas a los valores experimentales. Se incluyen también algunas sugerencias de trabajos futuros. También se enlistan las referencias y bibliografías utilizadas para el desarrollo del trabajo, como para la redacción de la memoria.

DEVELOPMENT OF A METHODOLOGY FOR USING CFD COMBUSTION PROCESS IN PUMP CONSTANT VOLUME

EXECUTIVE ABSTRACT

The purpose of this work is to reproduce by using CFM (Computational Fluid Dynamics), the combustion experiments conducted in the constant volume bomb combustion, located at the Thermal Engines Laboratory (UVa), so that allow us predict approximate data for future experiments.

The first chapter is a brief introduction and background, which are part of why studies on alternative fuels as a replacement of traditional, added to the above, the main objective is presented, as well as the rational and activities that will take place for successful completion of the work. Then in chapter 2, the basic theoretical fundamentals of combustion required for the development of modeling combustion in a constant volume bomb are presented. Similarly, the test information which was obtained experimental data shown.

Then in chapter 3 one of the main work, explains step by step what is the development of methodology CFD model for the combustion process and its implementation in a type CAD model of the constant volume bomb, type of meshing (square), the number of nodes (136,000) as well as some basic fundamentals of ANSYS FLUENT software. This chapter describes the initial conditions ($P_i = 0.5, 1.0, 1.5$ bar @ $T_i = 300K$) and model boundaries ($T_{iw} = 300K$), the turbulence model was the standard also defines $k-\epsilon$, the combustion model for which the Eddy-Dissipation-Rate and Finite used models, appearing most results with the latter, because with the first velocities obtained were very high, display monitors the results are further defined during the process and post-process, in addition to data to begin model execution as is the step size t_s time = $5e-07s$, the number of iterations by passage of time (25 iterations), and the step amount of time to burn all the fuel inside the sphere.

In chapter 4 the experimental test that was used as a reference for the development of CFD model and the two methods for calculating the combustion speed (model two zones 2-Z of experimental trial and Lewis and von Elbe model described data for CFD simulations). Then in Chapter 5 the analysis of the results is made, as well as the temperature, the advance of the flame front, the mass concentrations obtained by the two combustion models used, the burning rates obtained through the pressure measurements and their time derivatives, under the simplified method of Lewis and von Elbe. It also presents a comparison of the parameters of pressure and burning rate data experimental test data obtained with the CFD model, in which it was observed that although the process occurs very quickly, are reached get similar to experimental final pressures, but not so with the combustion rate as the lowest value reached was 2.6 m/s, while for experimental this parameter is below 1 m/s During all the process.

Finally, in Chapter 6 the conclusions obtained from the developed work arise. Within combustion models for transport of species used were Eddy-Dissipation and Finite-Rate, being the Finite-Rate which provides closer to the experimental values speeds. Some suggestions for future work are also included. References and bibliographies used for development work and for the drafting of the memory is also listed.

AGRADECIMIENTOS

A Dios, por permitirme la oportunidad de poder realizar un grado de estudios superiores fuera de las fronteras de mi patria.

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.

A mis mejores amigos, que siempre han estado anuentes a mi bienestar pese a la distancia que nos separa.

A mi tutor, por guiarme y ayudarme en cada paso a lo largo del desarrollo del trabajo.

A mis amigos de España, por hacer de mi estancia aquí en Valladolid más amena.

A todos ellos, ¡muchísimas gracias!

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Antecedentes.....	1
1.2. Objetivos.....	2
1.3. Planteamiento del trabajo.....	3
1.4. Justificación	4
2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS DE LA COMBUSTIÓN	7
2.1. Concepto de combustión	7
2.1.1. Características del proceso de combustión	7
2.1.2. Combustión en una bomba a volumen constante	10
2.2. Combustibles.....	11
2.3. Modelado CFD.....	12
Fundamentos matemáticos de CFD.....	13
2.4. Descripción de la instalación experimental	16
Cámara de combustión a volumen constante	17
Sistema de encendido	18
3. METODOLOGÍA DEL MODELADO CFD.....	19
3.1. Desarrollo de la metodología a implementar	19
3.1.1. Geometría y mallado	19
3.1.2. Condiciones de contorno	19
3.1.3. Modelo de turbulencia	20
3.1.4. Modelo de combustión	21
3.1.5. Iniciación del modelo	24
3.1.6. Monitores de cálculo	25

3.1.7.	Cálculos y post-proceso.....	26
4.	ENSAYO DE REFERENCIA PARA EL MODELADO CFD.....	29
4.1.	Información del ensayo de referencia.....	29
4.2.	Método simplificado de Lewis y von Elbe para el cálculo de velocidad de combustión.....	31
5.	ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS DE SIMULACIÓN CFD	33
5.1.	Cálculos de condiciones iniciales, finales y aumento de presión.....	33
5.2.	Ejecuciones realizadas con el código CFD.....	35
5.2.1.	Modelo de reacción EDDY DISSIPATION.....	36
5.2.2.	Modelo de reacción FINITE-RATE	40
5.3.	Comparación de resultados CFD con datos experimentales	47
6.	CONCLUSIONES.....	53
6.1.	Conclusiones	53
6.2.	Principales aportaciones del TFM.....	55
6.3.	Sugerencias para trabajos futuros	55
7.	REFERENCIAS Y BIBLIOGRAFÍA	57
7.1.	Referencias	57
7.2.	Bibliografía.....	58
8.	ANEXOS.....	59

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Parámetros de definición de la chispa	23
Tabla 2: Fracciones másicas de los reactivos en la iniciación de la simulación	24
Tabla 3: Condiciones iniciales del modelo	31
Tabla 4: Valores calculados de masa, fracciones másicas, masa real en la esfera	32
Tabla 5: Valores de aumento y presión final.....	32
Tabla 6: Rango de temperaturas calculadas.....	33
Tabla 7: Valores empíricos de mixing rate, datos de FLUENT	34
Tabla 8: Valores de parámetros de la ecuación de Arrhenius, datos de FLUENT	39
Tabla 9: Valores a los cuales se disminuye los parámetros de Arrhenius.....	48

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Propagación de llama y característica del frente de llama	8
Figura 2: Frente de llama con características de turbulencia débil e intensa.....	9
Figura 3: Ecuaciones de Navier – Stokes	13
Figura 4: Vista general de la instalación donde se muestra la zona de almacenamiento de gases, panel de control de suministro, bomba de combustión y computador de control del sistema	15
Figura 5: Bomba de combustión a volumen constante	16
Figura 6: Esquema de la bomba de combustión a volumen constante	17
Figura 7: Esquema de electrodos y chispa	17

Figura 8: Geometría y mallado de la bomba de combustión, entorno GAMBIT	19
Figura 9: Evolución de la presión frente al tiempo para tres experimentos realizados con la mezcla estequiométrica CH ₄ – aire	27
Figura 10: Evolución de la velocidad de combustión y presión frente a la temperatura de la mezcla fresca, método de dos zonas	28
Figura 11: Comparación de velocidad de combustión de datos experimentales entre el método de dos zonas y el método LVE.....	30
Figura 12: Evolución de la presión frente al tiempo para las tres presiones iniciales con la mezcla estequiometrica de CH ₄ – aire	35
Figura 13: Evolución de la temperatura frente al tiempo.....	36
Figura 14: Evolución de la velocidad de combustión y presión frente a la temperatura de la mezcla fresca.....	37
Figura 15: Concentración de masa quemada frente al tiempo	38
Figura 16: Pares de presión – tiempo	39
Figura 17: Avance del frente de llama en el tiempo	40
Figura 18: Velocidad de combustión y evolución de la presión frente a la temperatura de la mezcla fresca.....	41
Figura 19: Avance de concentración de CH ₄ quemado.....	42
Figura 20: Curvas de fracción de masa quemada y sin quemar	43
Figura 21: Velocidad de combustión en función de la fracción de masa quemada.....	43
Figura 22: Evolución del radio de frente de llama en el tiempo.....	44
Figura 23: Comparación de la FMQ obtenida con FLUENT y la obtenida a partir de $FMQ=(P-P_0)/(P_f-P_0)$	25
Figura 24: Comparación de avance de presión en el tiempo entre datos de FLUENT y datos experimentales	26

Figura 25: Comparación entre datos de simulación CFD y datos experimentales bajo el método de LVE.....	46
Figura 26: Velocidad de combustión para diferentes valores de coeficiente pre-exponencial.....	29
Figura 27: Variación de la velocidad de combustión frente al porcentaje de disminución del coeficiente pre-exponencial a n 50% de FQM.....	48
Figura 28: Variación de la velocidad de combustión frente al porcentaje de disminución de la energía de activación a 450K de T_{sq}	49

NOMENCLATURA

Capítulo 1

TFM: Trabajo de fin de máster

CFD: Computational Fluid Dynamics

MEP: Motor de encendido provocado

ANSYS, Inc.: Analysis Systems, Inc.

F: Dosado

P: Presión

T: Temperatura

Capítulo 2

MCIA: Motor de combustión interna alternativo

DNS: Direct Numerical Simulation

RANS: Reynolds Averaged Navier Stokes

LES: Large Eddy Simulation

CH₄: Metano

H₂: Hidrógeno

CO: Monóxido de carbono

N₂: Nitrógeno

CO₂: Dióxido de carbono

Capítulo 3

D: Diámetro

r: Radio

k: Energía cinética turbulenta

ϵ : Razón de disipación de energía cinética

T_i : Temperatura inicial

P_i : Presión inicial

T_{iw} : Temperatura inicial de pared

M: Masa atómica

m: Masa

Y: Fracción másica

t_s : Tiempo de paso de cálculo

Capítulo 4

Fr: Dosado relativo

q: Productos quemados

sq: Productos sin quemar

LVE: Método de Lewis y von Elbe

2-z: Método de dos zonas

Capítulo 5

X: Fracción molar

f: Combustible

a: aire

e: esfera

Fe: Dosado estequiometrico

C_v : Coeficiente de calor específico a volumen constante

C_p : Coeficiente de calor específico a presión constante

γ : Coeficiente gamma de la tasa de cambio entre C_p y C_v

FMQ: Fracción de masa quemada

FMSQ: Fracción de masa sin quemar

A: Coeficiente pre-exponencial de Arrhenius

EA: Energía de activación de Arrhenius

1. INTRODUCCIÓN

1.1. *Antecedentes*

La demanda masiva que existe hoy en día respecto al consumo de combustibles líquidos derivados del petróleo y la prevista disminución de la producción en un futuro del mismo, hace necesario mirar hacia posibles alternativas que cubran la demanda y garanticen un suministro energético seguro. Aunado a ello está la necesidad que se tiene por preservar el medio ambiente, razón por las cuales entidades del mundo de la automoción, han ido evolucionando cada vez más y con ellos la restricción de la cantidad de emisiones de productos contaminantes de los gases de escape, haciendo cada vez mayor la cantidad de sistemas de tratamientos de estos gases que se instalan en los vehículos llevando consigo un sobre coste.

Estos son algunos de los aspectos que llevan a la industria del automóvil a considerar alternativas a los combustibles tradicionales como los biocombustibles o los combustibles gaseosos, que a pesar de ofrecer interesantes ventajas, aún no están lo suficientemente desarrollados para sustituir plenamente a los convencionales. Al considerar alternativas que sean amigables con el medio ambiente, entra en juego los productos residuales (biomasa), los cuales no tiene un valor como residuo orgánico, ya que crea inmediatamente tres tipos de problemas: la acumulación, el transporte y la eliminación, que es necesaria para la buena preservación del ambiente [Lafuente, 2008]. La variabilidad y la dispersión que caracteriza este tipo de residuo de biomasa suponen que suelen tener un bajo aprovechamiento energético.

Estos residuos (principales fuentes: residuos agrícolas, forestales, ganaderos, industriales y urbanos), se pueden transformar en combustibles gaseosos, para su utilización en motores de encendido provocado (MEP), empleando procesos como la gasificación y la fermentación anaerobia.

Algunas de las principales ventajas que ofrecen los combustibles gaseosos, como el gas natural o el hidrogeno son: la reducción de emisiones contaminantes, el precio y que son recursos relativamente abundantes y mejor distribuidos en el mundo del petróleo. Por el contrario, la infraestructura del suministro es escasa, la autonomía es menor y se requiere de un mayor conocimiento acerca de su comportamiento. Razones por las cuales el uso de los combustibles alternativos no está generalizado actualmente.

De lo expuesto arriba, se deriva el interés por generar una base de conocimiento sobre el funcionamiento de MEP alimentado con estas mezclas de gases combustibles de composición variable y la aplicación de diferentes estrategias de control en los mismos. Para ello se realizan ensayos experimentales que proporcionan datos necesarios para analizar el comportamiento de estos gases dentro de la cámara de combustión y conseguir soluciones técnicas viables.

Un ejemplo de lo mencionado, son los estudios experimentales que se han realizado en el laboratorio de motores de la Uva [Lafuente, 2008; Iglesias 2015], en los cuáles se han desarrollado estudios de diferentes tipos de combustibles alternativos en una bomba de combustión a volumen constante, y en los mismos se han llegado a resultados aceptables para los parámetros que se han especificado en cada estudio. De forma paralela las herramientas de modelados con CFD, nos permiten simular modelos representativos con la misma finalidad, pero a un coste mucho más bajo.

Estudios realizados [Simancas, 2015] en la misma línea de los biocombustibles utilizando la alternativa CFD para un motor monocilíndrico de encendido provocado abren una puerta a la implementación de esta herramienta.

1.2. Objetivos

El **objetivo general** de este trabajo es el desarrollo de una metodología, mediante la utilización de CFD (Computational Fluid Dynamics), en la cual se pueda simular el proceso de combustión de la bomba existente en el laboratorio y que la misma

permita representar el comportamiento de los parámetros y variables, para ser validados con la data experimental existente.

Para cumplir con el objetivo principal, se llevarán a finalidad algunos **objetivos específicos** necesarios.

- Familiarizarse con el código de cálculo disponible para la simulación del proceso de combustión en la bomba de combustión.
- Establecer las condiciones iniciales de la mezcla aire-combustible, en cuanto a composición, dosado, presión y temperatura.
- Obtener una geometría lo más próxima a la real, con el mallado que mejor se acople tanto a la geometría como al proceso a estudiar.
- Desarrollar un procedimiento para simular el encendido de la mezcla, ya que en el encendido real se hace con electrodos.
- Obtener resultados del proceso de combustión y establecer una validación con datos experimentales.

1.3. Planteamiento del trabajo

Para llevar a finalidad este trabajo se llevó a cabo una serie de fases, las cuales se detallan brevemente.

- Se comienza con una revisión bibliográfica para enmarcar y definir el trabajo. Una vez definido el trabajo se continúa con el estudio y aprendizaje de utilización de los códigos a utilizar FLUENT y GAMBIT. Para mayor entendimiento de estos se han ejecutado los tutoriales sobre combustión que vienen incluidos en la ayuda del software.
- Una vez entendido el funcionamiento de los códigos, se pasa a crear la primera geometría para el desarrollo de la metodología. Para crear la geometría se ha utilizado el software GAMBIT, que tiene un entorno más amigable en cuanto a construcción de geometrías se refiere, para posteriormente proceder a mallar la geometría y definir las fronteras.

- Construido y mallado el modelo, se procede a probar un modelo inicial, el cual se define lo más sencillo posible, de tal manera que permita observar y probar el número de iteraciones por paso de tiempo, y el tamaño de paso de tiempo, entre otros.
- Para la puesta a punto del modelo, se ha considerado la manera más real posible las condiciones iniciales (F, P, T) para las cuales se tienen ensayos experimentales tomados de la tesis doctoral del Ing. Álvaro Lafuente [Lafuente, 2008]. Estos datos corresponden tanto a la presión experimental como a la velocidad de combustión.
- A partir de los valores calculados por el modelo CFD, se ha implementado un método aproximado para obtener los correspondientes valores de la velocidad de combustión calculada, de manera que la comparación con los valores experimentales se pueda realizar de manera directa.
- Partiendo de esas condiciones de referencia, la metodología de trabajo de puesta a punto ha consistido en variar diversos parámetros del método de cálculo, modelos de reacción, energía de ignición, etc.
- Toda esta metodología de validación y optimización del modelo se ha explicado de forma detallada, partiendo de las diferentes simulaciones y analizando sus resultados, para identificar los mejores valores de los parámetros y modelos de cálculo.

1.4. Justificación

La justificación de este trabajo se enmarca en la utilización de los modelos de simulación CFD, por las ventajas que presentan en relación con los ensayos experimentales, pero que curiosamente siempre debe ser validada con estos últimos, para una mayor fiabilidad del modelado.

Entre esas ventajas se pueden citar:

- Coste considerablemente menor al coste de las investigaciones experimentales.

- Obtención completa y detallada de la información en un tiempo menor, pudiéndose obtener información acerca de variables relevantes que en un cálculo experimental sería más difícil de observar, sumado a la capacidad de proporcionar resultados visuales durante el desarrollo del mismo que permiten ver, si el modelo se encamina a lo deseado.
- Capacidad de simulaciones diversas, lo que es decir, variar parámetros, como lo son las condiciones iniciales, las condiciones de contorno, que en un ensayo experimental implicaría muchas veces hasta cambio de las instalaciones. Sumado a ello la capacidad de descartar variables que no tenga una influencia relevante en el estudio.

Por ello, llegar a desarrollar una metodología robusta y generalizada de la bomba de combustión a volumen constante es un paso muy importante para el estudio del comportamiento de diferentes tipos de combustibles alternativos en un motor de encendido provocado MEP.

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS DE LA COMBUSTIÓN

2.1. *Concepto de combustión*

La combustión es el proceso de oxidación del combustible por el aire mediante el cual se consigue transformar la energía química del combustible en energía térmica. Se trata de una reacción exotérmica que en los motores, tiene lugar dentro del cilindro de tal manera que se produce un incremento de presión que permite extraer energía mecánica mediante el movimiento lineal del pistón. [Simancas, 2015]

El mecanismo de la combustión y las condiciones en las que se produce dependen en gran parte de las características del combustible, de las del aire y de la mezcla de ambos. La cantidad de combustible que se puede oxidar depende de la estequiometría de la reacción, de tal forma que para poder quemar todo el combustible disponible necesitamos una cantidad determinada de oxígeno.

La cinética química de la combustión caracteriza como se desarrolla la reacción en el tiempo, es decir, las fases detalladas en las que se divide la reacción y la velocidad con la que se desarrolla la misma. Esta velocidad de reacción viene condicionada por el balance molar entre reactantes y productos la concentración molar y la velocidad específica de reacción que normalmente se define mediante la ecuación de Arrhenius.

2.1.1. **Características del proceso de combustión**

Entre los aspectos generales de la combustión se destacan los siguientes [Fygueroa, 2005]:

- **Proceso físico-químico:** es un proceso en el cual se consume una cantidad de mezcla fresca de combustible y aire que se transforma en productos produciéndose elevadas presiones y temperaturas. El surgimiento y desarrollo de este proceso depende de las siguientes características para mantener su

supervivencia: velocidad de la reacción química, transferencia de calor y masa de la zona de llama y pérdidas de calor hacia las paredes.

- **Fase gaseosa:** para una mezcla combustible aire se refiere a que si el combustible está en fase gaseosa, esto permite el desarrollo del proceso de combustión en forma más rápida ya que se aumenta la velocidad de reacción y hay mayor homogeneidad. Las mezclas no homogéneas dependen mayormente de la difusión combustible aire.
- **Reacciones de oxidación:** son reacciones de combustión que se realizan en varias etapas y con formación de productos intermedios. Para la mayoría de las reacciones esta secuencia de etapas no es bien conocida, y son altamente dependiente de la presión, temperatura y la concentración.
- **Auto-inflamación:** fenómeno que se presenta cuando la velocidad de desprendimiento de calor supera su velocidad de extracción.
- **Límites de inflamación:** son la mínima y máxima concentración de combustible en aire para que la mezcla se auto-inflame, por encima del superior no hay propagación de llama y por debajo del inferior hay extinción.
- **Propagación de la llama:** en el estudio de la combustión, la reacción química tiene lugar en una zona muy delgada denominada frente de llama, la cual presenta dos zonas: de precalentamiento y de reacción. En la zona de precalentamiento se prepara la mezcla para poder iniciar el proceso de combustión una vez alcanzada la temperatura de encendido, las reacciones químicas son lentas y la pequeña cantidad de mezcla quemada hace que las temperaturas alcanzadas no sean muy elevadas. La existencia del frente de llama depende de los procesos de transmisión de calor y de difusión y para su estudio, el mismo puede considerarse fijo o móvil, *figura 1*

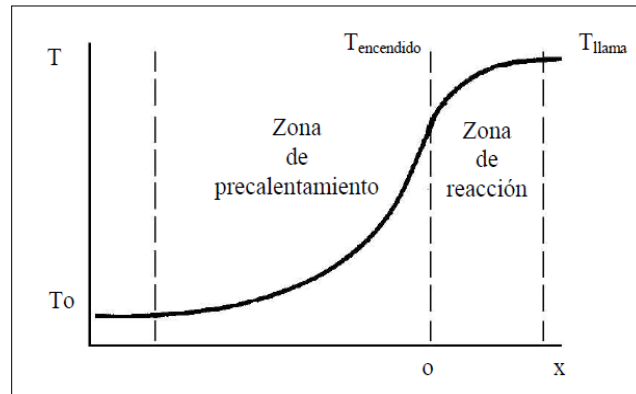


Figura 1. Propagación de llama y características del frente de llama. [Simancas, 2015]

- Velocidad de combustión laminar:** en procesos controlados empleando varias mezclas de combustible con aire, se ha determinado que el frente de llama se mueve a velocidades predecibles dependiendo de la riqueza de la mezcla, presión y temperatura.
- Velocidad de combustión turbulenta:** en MCIA para que los procesos de combustión ocurran a alta velocidad y permitan la ejecución del ciclo lo más rápido posible, se necesitan diseños de cámara de combustión y sistemas de admisión que generen alta turbulencia en la mezcla. Esto permite un mezclado más eficiente en tiempos más cortos y distorsiona el frente de llama aumentando su espesor y por tanto su área de quemado. El aumento del grado de turbulencia físicamente rompe el frente de llama en varios puntos de inflamación acelerando la velocidad del proceso. Los modelos para el estudio de la velocidad de combustión en cámaras son complicados, sin embargo una forma de visualizar su efecto es considerando la influencia de la turbulencia como un término que adiciona un incremento de velocidad a la denominada velocidad de combustión laminar, *figura 2*.

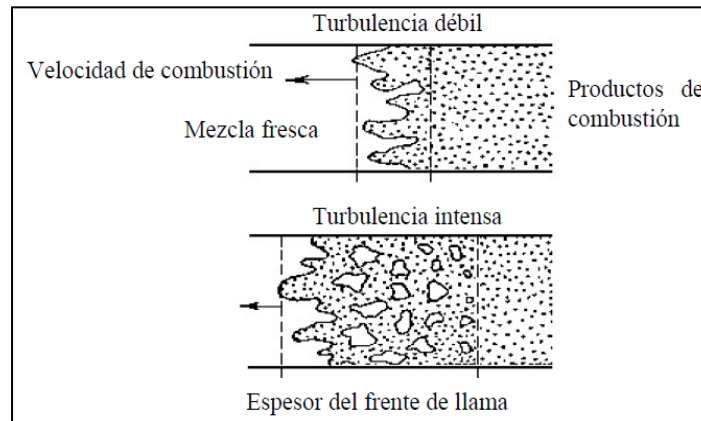


Figura 2. Frente de llama con características de turbulencia débil e intensa. [Simancas, 2015]

2.1.2. Combustión en una bomba a volumen constante

El proceso de combustión en una bomba de combustión a volumen constante es similar al de un motor de encendido provocado (MEP), si bien el fluido está en reposo y en general la presión y la temperatura iniciales son menores. En ambos casos la combustión se inicia por un agente externo, habitualmente una chispa procedente de una bujía. Este hecho impone un requisito claro al combustible a usar en este tipo de motores, y su resistencia a la auto-inflamación, para que no ocurra el encendido espontáneo de la mezcla durante el desarrollo de la combustión.

En la bomba de combustión desde el momento en que ocurre el salto de la chispa, se forma un **frente de llama**, que divide el volumen de la cámara en dos zonas bien definidas: una zona de mezcla quemada donde la presión y temperatura son muy elevadas y otra zona donde se encuentra la mezcla fresca, que desde el inicio de la combustión es continuamente comprimida por los productos de combustión. Fijar límites para el proceso de combustión es difícil debido a la velocidad con la que cambian las características del proceso y a que no se pueden fijar límites físicos permanentes.

En condiciones normales, el proceso de combustión se inicia tras una chispa eléctrica en el centro del volumen de la mezcla. En una primera fase de combustión, la frontera de ese volumen se va propagando, inicialmente poco a poco, hacia el resto de la

mezcla sin quemar que lo envuelve. Transcurrido un determinado tiempo, el tamaño de la región quemada empieza a ser ya importante, y el efecto de la combustión empieza a percibirse en la presión que se registra en el interior de la esfera de combustión. A partir de ese momento se inicia una segunda fase de combustión, ya mucho más rápida debido al efecto combinado de mayor superficie del frente de llama, mayores temperaturas en la mezcla sin quemar e incremento de la velocidad de combustión, por lo que la presión crece de manera muy sensible. Durante esta segunda fase se quema la mayor parte de la mezcla. Esta fase finaliza cuando el frente de llama se acerca a las paredes de la bomba de combustión, ralentizándose su propagación. A partir de ese momento se inicia la tercera y última fase del proceso de combustión, que se desarrolla hasta que finaliza por completo dicho proceso [Payri, 2014].

2.2. Combustibles

Los combustibles son sustancias capaces de reaccionar exotérmicamente con el oxígeno, transformando por tanto la energía asociada a su estructura molecular en energía térmica [Fygueroa, 2005]. Los mismos pueden ser sólidos, líquidos y gaseosos. En el mundo de los MCIA, se descartan o dejan de ser interesantes los combustibles sólidos, debido a las exigencias de velocidad de mezcla y reacción. Siendo los combustibles líquidos o gaseosos los más utilizados pese a que se necesitan sistemas para facilitar la evaporización y la mezcla con el oxidante, dado que la combustión tiene lugar en la fase gaseosa, pero estos tienen la gran ventaja de su densidad energética (poder calorífico), la cual asegura una gran autonomía, la cual reduce la frecuencia de repostaje y su seguridad de manejo. Los combustibles gaseosos tienen la ventaja de su buena capacidad para mezclarse homogéneamente con el oxidante y para quemarse con reducidas emisiones, pero posee la desventaja de un alto volumen específico lo cual reduce las opciones de almacenamiento y por ende su autonomía.

Puesto que los experimentos disponibles estaban realizados con **metano** (CH₄), se comentan a continuación algunas de sus características. Se trata de un gas incoloro,

inodoro y muy inflamable, más ligero que el aire, en la naturaleza se produce por la descomposición de la materia orgánica, especialmente en los pantanos, se desprende del gas del petróleo, del gas de las turberas, del grisú de las minas de carbón, entre otros. Se emplea como combustible y para producir cloruro de hidrógeno, amoníaco, acetileno y formaldehído. Se puede transportar a presión (típicamente a 200 bar), y también en forma líquida a baja temperatura.

Es el principal componente del gas natural (entre un 70%-98%). Destaca en su composición y se acompaña de elementos de muy baja proporción como el etanol, propano, butano, dióxido de carbono, nitrógeno, vapor de agua, helio, argón entre otros. En conjunto con los demás gases que forman el gas natural, como combustible su principal ventaja es la reducción de emisiones contaminantes pese a que como individual es un gas de efecto invernadero.

2.3. Modelado CFD

La dinámica de fluido computacional (CFD) es una de las ramas de la mecánica de fluidos que utiliza los métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar problemas sobre el flujo de fluidos, la cual está gobernada por las ecuaciones de Navier-Stokes, que es un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento del fluido. Hoy en día se han agregado a estos métodos numéricos las ecuaciones de transferencia de calor, masa y reacción en diferentes medios.

CFD es una herramienta de modelado numérico que permite obtener una visión más aproximada y realista de los fenómenos de transporte de un fluido, a través de la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes, acopladas con los balances de masa, energía y un modelo de turbulencia si es necesario, aplicadas al dominio de cálculo, obteniéndose los perfiles de velocidad, presión y temperatura de un fluido, y/o la concentración de una especie en cualquier punto de la geometría. [Gómez, 2009]

El costo de la potencia de cálculo para simulación es una desventaja de esta técnica, pero que se ha reducido de una forma considerable por el avance exponencial de los

procesadores. Actualmente el uso de las simulaciones con CFD ha tenido un crecimiento rápido en varios ámbitos.

La técnica CFD comenzó 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 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, las simulaciones con CFD, se ha expandido a muchas ramas de la industria, tales como: la química, aeroespacial, estructural, predicciones de movimiento de aire, análisis de fenómenos termofluídicos, en el ámbito medio ambiental para el cálculos de contaminación ambiental, fenómenos pluviales, vertidos de ríos y suelos.

Fundamentos matemáticos de CFD

CFD calcula numéricamente el movimiento de los fluidos a través de un computador, 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 atrás [Gómez, 2009]. Estas ecuaciones derivan directamente de las leyes del movimiento Newton y son ecuaciones en derivadas parciales no lineales, *figura 3*. 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.

Continuity:	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0$
X - Momentum:	$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re_r} \left[\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} \right]$
Y - Momentum:	$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re_r} \left[\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} \right]$
Z - Momentum:	$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re_r} \left[\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right]$
Energy:	$\frac{\partial(E_T)}{\partial t} + \frac{\partial(uE_T)}{\partial x} + \frac{\partial(vE_T)}{\partial y} + \frac{\partial(wE_T)}{\partial z} = -\frac{\partial(u p)}{\partial x} - \frac{\partial(v p)}{\partial y} - \frac{\partial(w p)}{\partial z} - \frac{1}{Re_r Pr_r} \left[\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right] + \frac{1}{Re_r} \left[\frac{\partial}{\partial x} (u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + w \tau_{xz}) + \frac{\partial}{\partial y} (u \tau_{xy} + v \tau_{yy} + w \tau_{yz}) + \frac{\partial}{\partial z} (u \tau_{xz} + v \tau_{yz} + w \tau_{zz}) \right]$

Figura 3. Ecuaciones de Navier-Stokes

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 fluido computacional o CFD. Hoy en día la complejidad del cálculo y las limitaciones de las supercomputadoras más potentes, hacen que sea absurdo intentar utilizar las técnicas de CFD en los casos en que otras técnicas ha logrado simplificaciones adecuadas, también resulta impracticable para procesos muy extensos, como por ejemplo la simulación global de una planta química.

CFD se basa en la resolución de las ecuaciones de continuidad, momento y energía, sobre volúmenes de control (mallas) definidos dentro del sistema. De acuerdo a las necesidades, CFD permite agregar más modelos, como por ejemplo reacción, combustión, turbulencia, etc.

Centrándonos en los que es el área de combustión, el flujo en los motores se desarrolla en un entorno fluido-dinámico turbulento, por lo que la resolución del modelo se complica. Es por eso 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 obteniendo como resultado valores promedio de las magnitudes. Por otro lado, el método LES, 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 [Simancas, 2015].

El cálculo de un motor completo mediante un modelo multidimensional o CFD es inviable debido a su excesivo tiempo de cálculo, por lo que el uso de CFD se limita a elementos del motor en concreto. 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.

El conjunto de problemas físico-químico 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 difícilmente es extraíble de un ensayo experimental hace que los modelos multidimensionales se abran un hueco en el campo de los MCIA.

Para el desarrollo de este trabajo se utilizó como herramienta de cálculo CFD, el software ANSYS FLUENT, el cual nos permite definir paso a paso las fases de diseño antes mencionadas.

2.4. Descripción de la instalación experimental

En esta sección del capítulo, se hará una breve descripción de la instalación experimental, en la cual se basa el estudio de este trabajo [Lafuente, 2008].

La instalación está ubicada en el Laboratorio de Máquinas y Motores Térmicos del Departamento de Ingeniería Energética y Fluido-mecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Valladolid, Sede Paseo del Cause, *figura 4*.



Figura 4. Vista general de la instalación donde se muestra la zona de almacenamiento de gases, panel de control de suministro, bomba de combustión, y computador de control del sistema [Lafuente, 2008].

Dicha instalación consiste de una bomba de combustión a volumen constante y una serie de sistemas auxiliares, que en conjunto permiten experimentar con mezclas gaseosas de combustibles formadas por CH_4 , H_2 , CO , N_2 , CO_2 y aire para obtener su velocidad de combustión en amplios rangos de presión y temperatura. También se pueden realizar tareas como: sintetizar en el interior de la bomba una mezcla gaseosa combustible de una composición determinada a una presión y temperaturas dadas, encender la mezcla y registrar la evolución de la presión frente al tiempo durante el desarrollo de la combustión.

Cámara de combustión a volumen constante

La cámara de combustión a volumen constante o bomba de combustión es el elemento central de la instalación. Tiene un diámetro de 200 mm y un volumen aproximado de 4.19 litros. El encendido de la mezcla se origina en el centro geométrico de la esfera mediante una chispa que salta entre dos electrodos. De esta forma se permite el desarrollo concéntrico de la llama respecto a la bomba durante el proceso de combustión sin inferir en las paredes.

Constructivamente consta de una base y una tapa, y en cada una de las cuales hay labradas sendas cavidades semiesféricas. La tapa va atornillada a la base y una junta anular, situada entre ambas, sella la unión. En la *figura 5*, se muestra una imagen de la bomba y en *figura 6*, se muestra un esquema de los detalles más importantes de la bomba.

Construida en acero inoxidable, la bomba de combustión está diseñada para soportar presiones durante una combustión de hasta 200 bares y se puede precalentar hasta una temperatura de 600 K.



Figura 5. Bomba de combustión a volumen constante [Lafuente, 2008].

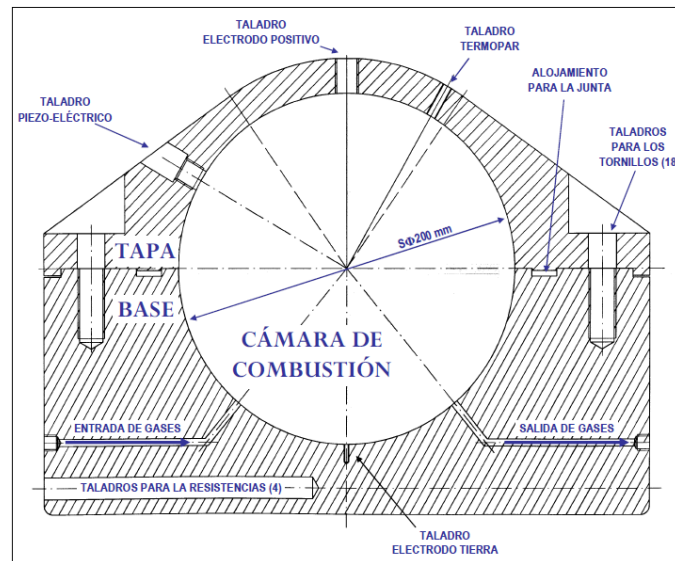


Figura 6. Esquema de la bomba de combustión a volumen constante [Lafuente, 2008].

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. 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, *figura 7*.

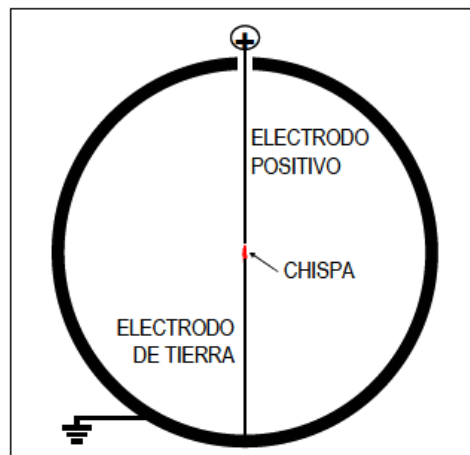


Figura 7. Esquema de electrodos y chispa [Lafuente, 2008].

3. METODOLOGÍA DEL MODELADO CFD

En este capítulo se explicará paso a paso las distintas fases en las que consiste la metodología que representa el proceso de combustión en una bomba de combustión a volumen constante alimentado por metano, utilizando un modelo CFD.

3.1. *Desarrollo de la metodología a implementar*

A continuación se describe cada una de las fases en las que se divide la metodología.

3.1.1. Geometría y mallado

Se inició construyendo la geometría de la bomba, teniendo como referencia la información de los planos existentes de la misma. Para ello se utilizó el software de dibujo GAMBIT, el cual tiene un entorno de dibujo más amigable. Dibujamos la esfera como una esfera perfecta de $D=0.2\text{ m}$, al ser esta una esfera perfecta por simetría se llevó a una semiesfera con $r=0.1\text{ m}$, lo cual ahorraría tiempo en cuanto a mallado y cálculos. Es importante resaltar que la geometría se creó lo más parecida a la real, teniendo en cuenta que a la misma no se le realizaron entradas ni salidas de gases. Ya que se optó por iniciar los cálculos con la geometría más sencilla y posteriormente modificarla.

Terminada la geometría, el siguiente paso fue el discretizarla. Para ello se utilizaron elementos cuadrados que permitían una convergencia más rápida. Quedando la geometría discretizada en elementos, como se muestra en la *figura 8*.

3.1.2. Condiciones de contorno

Una vez mallada la geometría, GAMBIT permite identificar los contornos de la geometría de tal manera que cuando se exporte el archivo a ANSYS FLUENT, éste reconozca dichos contornos. Para el caso en estudio se han definido tres contornos de superficie y uno de volumen.

- **Wall (Pared):** Se ha definido el arco de la bomba como pared, ya que es la superficie que delimita el fluido, también se define el material de la misma, la transmisión de calor que para este caso es adiabático.
- **Interior:** Se define con este contorno lo que es el interior de la bomba.
- **Axis:** Se define como axis, el contorno del eje de simetría de la bomba.
- **Fluid:** Se define como contorno fluid, la mezcla de combustible CH₄-aire. Contorno de volumen.

Definidos los contornos en el software GAMBIT, ya se puede exportar el modelo al software ANSYS FLUENT, que es con el que se trabajara de este punto en adelante. Una vez se exporta el modelo se procede a escalar el mismo, y a revisar que no exista problema del mallado.

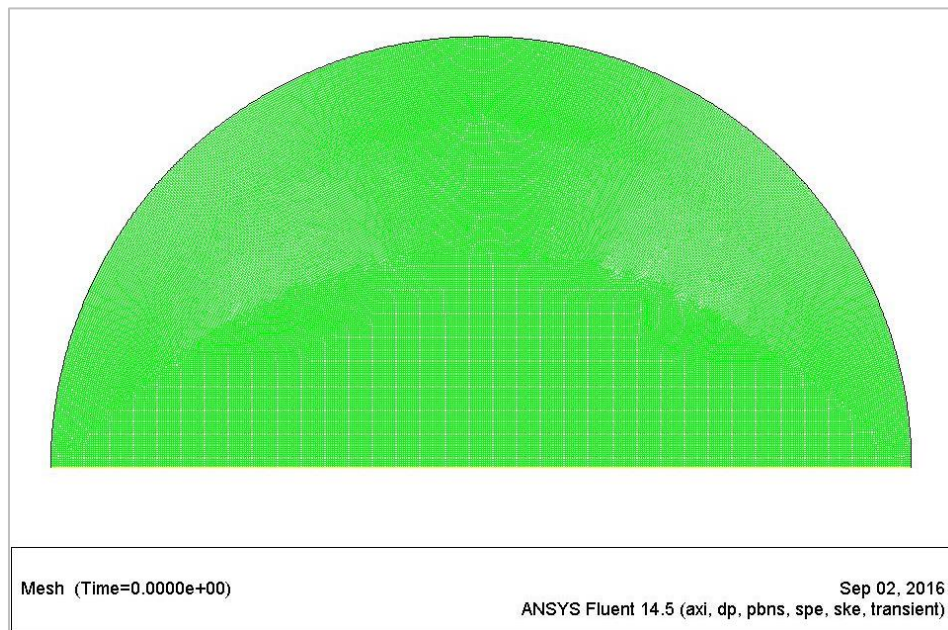


Figura 8. Geometría y mallado de la bomba de combustión. Fuente: Elaboración propia.

3.1.3. Modelo de turbulencia

Seguidamente se inicia la fase de elegir el modelo de Turbulencia. Para ello se eligió el *Estándar k-ε*, ya que es la que suele utilizarse en aplicaciones industriales y el que requiere menos capacidad computacional, y se ajusta bien al modelo en estudio. Este

modelo se basa en las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta (k) y la razón de disipación de la energía cinética (ϵ).

3.1.4. Modelo de combustión

Dependiendo de las características del sistema que se quiera simular, existen diferentes modelos de combustión. FLUENT permite con los modelos de combustión simular el funcionamiento de sistemas en los que se produce la reacción exotérmica y obtener datos sobre los productos de la combustión.

- **Transporte de especies:** permite modelar la mezcla y el transporte de especies químicas mediante la resolución de las ecuaciones de conservación, así como los fenómenos de convección y difusión. Además que permite modelar múltiples reacciones químicas como reacciones volumétricas, reacciones en paredes o partículas y en regiones porosas [ANSYS, 2014a].
- **Combustión no mezclada:** este modelo se aplica para sistemas en los que el combustible y el oxidante entran a la zona de reacción por separado, como es el caso de los MCI DIESEL. Se puede decir que la termoquímica en este modelo se caracteriza por la fracción másica de combustible quemado y no quemado [ANSYS, 2014a].
- **Combustión premezclada:** en este tipo de combustión, el combustible y el oxidante se mezclan a nivel molecular antes de entrar en la zona de reacción y, por lo tanto, antes de ignición. La combustión ocurre mediante un frente de llama desde los productos quemados hacia la mezcla fresca. Es uno de los indicados para el modelado de motores de encendido provocado [ANSYS, 2014b].
- **Combustión parcialmente premezclada:** este modelo calcula llamas premezcladas no uniformemente de combustible-oxidante. Se trata de una combinación entre el modelo de combustión premezclada, el de no premezclada en el que la variable de reacción determina la posición del frente de llama [ANSYS, 2014b].

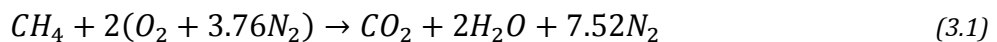
Para nuestro caso, al tratarse de un sistema de combustión premezclada, se podía elegir entre los modelos de combustión premezclada y transporte de especies, eligiendo así, el modelo de combustión de transporte de especies ya que es el único que nos permite definir manualmente los pasos de las cinéticas de reacción y controlar las fracciones másicas de las especies.

3.1.4.1. Definición de la mezcla

La mezcla utilizada fue Metano-Aire, cuyas propiedades fueron definidas mediante la base de datos de FLUENT. Se eligió esta mezcla porque corresponde a los ensayos experimentales que se han considerado de referencia en este TFM, con posibilidad de complicar el modelo a medida que se avance en el mismo.

3.1.4.2. Reacción de combustión

Como se mencionó anteriormente, el modelo de combustión que se eligió fue el de transporte de especies, ya que este nos permite configurar manualmente la reacción. Esta reacción viene definida por la cinética química correspondiente a la mezcla que se quiere quemar. Para el caso de la mezcla metano-aire existen extensas bibliografías acerca de sus cinéticas de reacción en las que se detallan las fases por la que pasa la reacción de combustión de metano. Haciendo uso de la reacción metano-aire de **un solo paso** de la base de FLUENT, tenemos:



Como se puede ver, el nitrógeno que el aire contiene no reacciona y FLUENT considera que la fracción másica de nitrógeno antes y después de la reacción es la misma, es decir, es un gas inerte que no actúa en la combustión.

Para el transporte de las especies, se han utilizado los modelos *Finite-Rate* y *Eddy-Dissipation*. El primer modelo incluye la cinética química con la expresión empírica de Arrhenius (*Finite-Rate*), mientras que el segundo (*Eddy-Dissipation*) supone que las

características que definen las reacciones de la combustión también están influenciadas por la turbulencia.

La velocidad específica de reacción se expresa mediante la ecuación empírica de Arrhenius como:

$$k = AT^m e^{-\frac{E_A}{RT}} \quad (3.2)$$

Donde:

- k , es la velocidad específica de reacción ($kmol/m^3 \cdot s$).
- A , es el coeficiente pre-exponencial.
- T , es la temperatura en Kelvin.
- M , es el exponente experimental de la temperatura, que generalmente es 0.
- E_A , es la energía de activación de la reacción en ($J/kmol$).
- R , es la constante universal de los gases en ($J/kmol \cdot K$).

3.1.4.3. Definición de la chispa de encendido

La chispa de los MEP en FLUENT se reproduce por medio de la herramienta *spark ignition*. Esta permite definir el tipo de la chispa (fija o móvil), la posición en la cámara de combustión, su tamaño y los parámetros de cantidad de energía, duración, instante de cuando inicia. Teóricamente, el encendido de la chispa para el CH_4 se produce con una energía entre los 30 y 150 mJ durante 1ms. En el modelo, este parámetro ha sido uno de los que más problema ha dado para encender la chispa, por lo que fue necesario realizar un gran número de pruebas para encontrar un valor de energía que activara la reacción de combustión. En la *tabla 1*, se muestran los valores de los distintos parámetros que se utilizaron para definir la chispa.

Tabla 1. Parámetros de definición de la chispa.

Magnitud	Valor
Energía (J)	0.1
Duración (s)	1e-05
Instante de inicio (s)	0
Tiempo de difusión	1e-05
Tipo de chispa	Fija
Radio de chispa (m)	0.005
Posición (m)	X=0; Y=0

3.1.5. Iniciación del modelo

Como su nombre lo indica, consiste en dar los valores iniciales al modelo para las principales magnitudes como presión, temperatura, fracciones másicas, condiciones iniciales de frontera, de tal manera que la simulación inicie desde un estado lo más real posible. A continuación detallaremos las condiciones iniciales para cada magnitud.

- **Temperatura inicial de la mezcla**, es la temperatura que posee la mezcla previamente a su encendido, para este parámetro se utilizó una $T_i = 300 K$. Se utilizó este valor, ya que como se trata de reproducir el ensayo experimental, era el valor de T_i que se usó.
- **Presión inicial de la mezcla**, al igual que la temperatura, se utilizó los valores iniciales de presión del ensayo experimental, se realizaron las simulaciones para tres valores de presión inicial, $P_i = 0.5, 1.0, 1.5$ bar.
- **Condiciones de frontera**, como se mencionó anteriormente, tenemos en el contorno definido como pared la condición de frontera es de temperatura con un valor igual al de la mezcla de $T_{iw} = 300K$.
- **Fracciones másicas**, la combustión en la bomba, en este caso viene determinada por las condiciones de la mezcla en su interior, previo a su encendido. Esta condición inicial se define a través de la composición de la

mezcla, su presión y temperatura inicial. La composición de la mezcla a su vez, mediante la composición del combustible y el dosado relativo.

- **Composición del combustible**, para expresar las proporciones de los gases que forman el combustible se va a emplear la fracción molar, X_j . Partimos de la ecuación de reacción de estequiometría del metano, teniendo en cuenta que se trabaja con un dosado relativo, $F_r=1$. *Tabla 2.*

Tabla 2. Fracciones másicas de los reactivos en la iniciación de la simulación.

Parámetro	Valor numérico
M_H (g/mol)	1.00794
M_C (g/mol)	12.0107
M_O (g/mol)	15.9994
M_N (g/mol)	14.0067
m_{ch4}	16.0425
m_{o2}	63.9976
m_{n2}	210.6608
m_{tsq}	290.7008
Y_{ch4}	0.0552
Y_{o2}	0.2201
Y_{n2}	0.7247

3.1.6. Monitores de cálculo

Los monitores son herramientas que permiten visualizar las simulaciones durante el transcurso y avance de las mismas, éstos permiten guardar los datos del cálculo en cada paso de tiempo o iteración. Los datos almacenados en los monitores son los que nos permiten determinar si la solución converge y representar gráficamente luego en el post proceso dichos resultados.

En el modelo se definieron dos tipos de monitores: **de superficie**, los cuales permiten monitorear el cálculo en un punto sobre la superficie, este punto lo definimos en el centro de la semiesfera; **de volumen**, son los monitores que permiten visualizar los

cálculos en el volumen de la mezcla o semiesfera. A continuación se listan los monitores definidos.

- De superficie en el punto 1 (*vertex average*), por paso de tiempo
 - Presión media.
 - Temperatura media.
 - Fracción másica de CH_4 media.

- De volumen en la mezcla (*volumen average*), por paso de tiempo
 - Presión media
 - Temperatura media
 - Fracción másica de CH_4 media
 - Fracción másica de O_2 media
 - Fracción másica de CO_2 media
 - Fracción másica de H_2O media
 - Velocidad media de expansión

3.1.7. Cálculos y post-proceso

Antes de dar inicio al arranque de los cálculos, se definen los parámetros del mismo, como lo son el paso del tiempo (tamaño y número) y número de iteraciones por paso de tiempo. Es este uno de los puntos con alta importancia en el desarrollo del modelo, ya que el paso del tiempo debe ser lo suficiente que permita la convergencia al igual que el número de iteraciones, estas últimas deben ser un número suficiente que permitan la convergencia de la solución y que no comprometa el tiempo de duración de la misma. Sumado a ello también se define el tiempo de auto guardado del modelo.

Para el modelo se definió un tamaño de paso de tiempo de $t_s = 5e-07 s$, con un número de paso de tiempo para la finalización completa del proceso (quema total del combustible en la semiesfera) de $26000t_s$. De igual manera se definieron a **25 iteraciones** por paso de tiempo. Cabe resaltar que estos son los valores máximos de

tiempo y mínimos de iteraciones que permiten la convergencia de la solución, es decir, que se puede reducir aún más el paso de tiempo y aumentar el número de iteraciones por cada paso de tiempo, para conseguir mejor atenuación de rizado en los gráficos, pero teniendo en cuenta que por el tipo de proceso que es, son simulaciones que duran días y que al final de cuentas la calidad vs tiempo (días) de cálculos no lo compensa.

Definido lo anterior escrito, ya se puede dar inicio a los cálculos, e ir monitoreando las simulaciones, corrigiendo errores e ir poco a poco puliendo el modelo.

Finalmente para el post proceso del modelo, que es donde se puede ver el resultado de todo lo antes expuesto, sumado a los monitores, FLUENT posee otras herramientas más llamativas visualmente, como lo son imágenes de contornos para las distintas magnitudes involucradas en el proceso, con éstas, también se pueden generar videos, los cuales permiten tener una idea aún más visual de cómo se desarrolla el proceso.

4. ENSAYO DE REFERENCIA PARA EL MODELADO CFD

En este capítulo se presenta el ensayo de referencia utilizado para el modelado, al igual que el método simplificado de Lewis y von Elbe para el cálculo de velocidad de combustión de los datos simulados.

4.1. Información del ensayo de referencia

Los datos del ensayo experimental se han tomado de la tesis doctoral de Álvaro Lafuente [Lafuente, 2008]. Se tomó como referencia el ensayo con condiciones iniciales de $T_i = 300K$, $P_i = 0.5, 1.0$ y 1.5 bar y $F_r = 1$. Los resultados se recogieron como un fichero de Excel, en el cual aparecían una serie de datos de variaciones de presión y temperatura en el tiempo. De igual manera un gráfico de los datos antes mencionado, sumado a ello un documento con las dimensiones principales de la bomba. En la figura 8, se muestra el gráfico que se utilizó de referencia en el modelo con CFD.

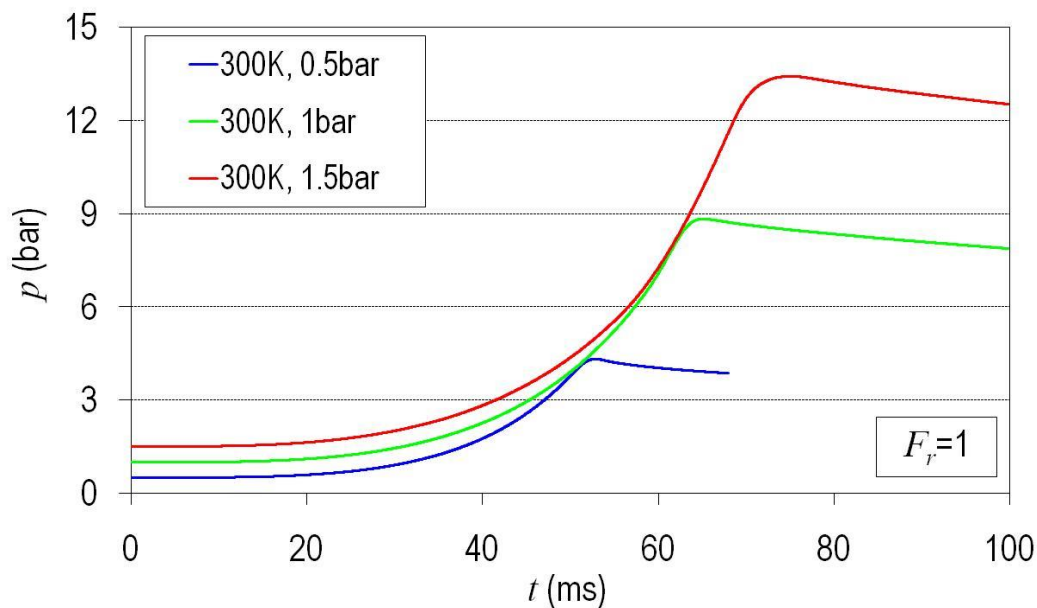


Figura 9. Evolución de la presión frente al tiempo para tres experimentos realizados con la mezcla estequiométrica CH_4 -aire [Lafuente, 2008].

Para obtener la velocidad de combustión del ensayo experimental se utilizó un modelo de diagnóstico de la combustión de dos zonas (zona de mezcla sin quemar y

zona de mezcla quemada). El mismo tiene como entrada el registro experimental de la evolución 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, y se expresa mediante la siguiente ecuación [Lafuente, 2008].

$$S_L = \frac{\dot{m}_{sq \rightarrow q}}{\frac{p}{R_{sq} \cdot T_{sq}} \cdot A_f} \quad (4.1)$$

Como se puede ver en la expresión, la ecuación de los gases ideales es utilizada como ecuación térmica de estado para cada zona. Sumado a lo anterior, se tiene que la evolución temporal del frente de llama, dada por el radio, determina la velocidad del mismo, y la superficie de éste permite determinar la velocidad de combustión. En la *figura 10* se muestra la representación gráfica de la velocidad de los tres ensayos experimentales.

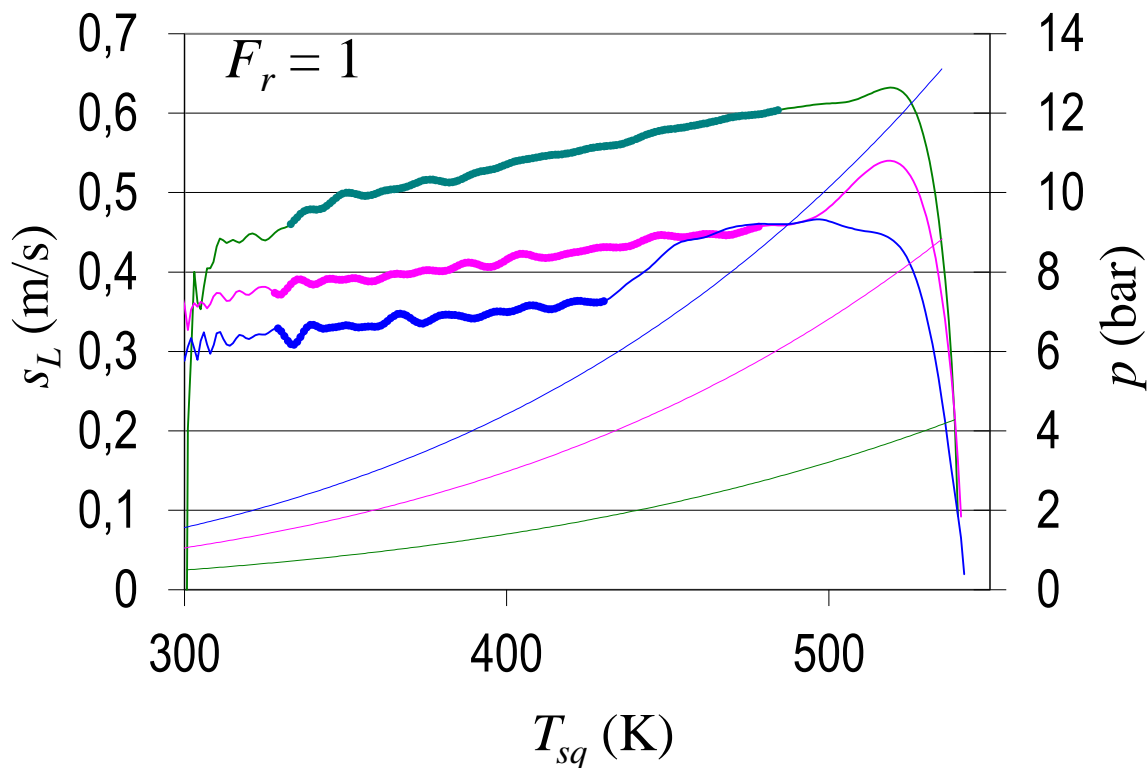


Figura 10: Evolución de la velocidad de combustión y presión frente a la temperatura de la mezcla fresca, método de dos zonas [Lafuente, 2008].

4.2. Método simplificado de Lewis y von Elbe para el cálculo de velocidad de combustión.

Este método es un estudio realizado por los doctores Lewis y von Elbe, quienes lo desarrollaron para el cálculo de velocidades de combustión en una cámara de combustión esférica a volumen constante de una forma más simplificada.

Las entradas de este método son las medidas de presiones en el tiempo, como sus derivadas. Este método está basado en las siguientes hipótesis:

- 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 fracción de masa quemada, γ_q , está en equilibrio termodinámico y químico local. Y los gases sin quemar son comprimidos isentrópicamente.
- 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 se iguala en toda la cámara.

La siguiente ecuación es la que rige este método:

$$u_{lq} = \frac{R \left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{1}{\gamma_{sq}}} \frac{dp}{dt}}{3(p_f - p_0) \left[1 - \left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{1}{\gamma_{sq}}} \left(\frac{p_f - p}{p_f - p_0}\right) \right]^{\frac{2}{3}}} \quad (4.2)$$

Como se puede ver en la expresión, la velocidad de combustión es proporcional a la derivada de la presión. Además como está basada en las medidas de presión no tiene en cuenta los efectos de del espesor de llama y la tasa de stretch resultante [Iglesias, 2015].

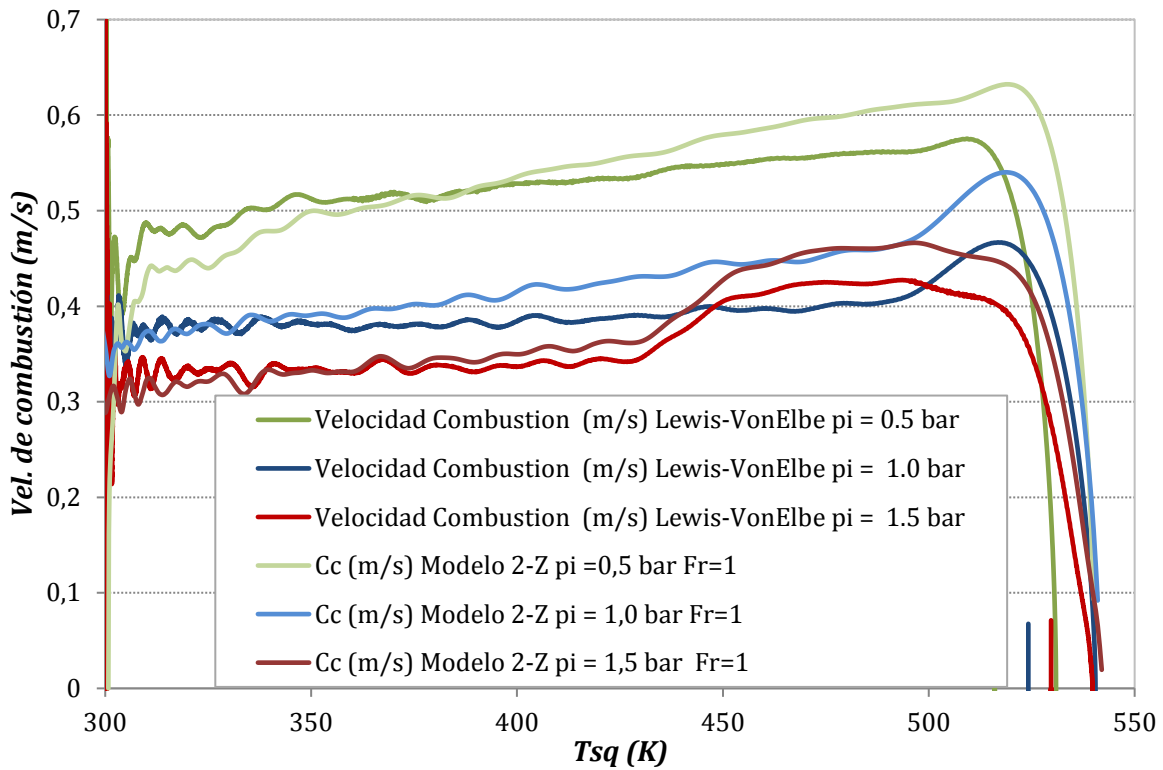


Figura 11. Comparativa de velocidad de combustión de datos experimentales entre el método de dos zonas y el método LVE.

Debido a que el método de LVE, sería el utilizado para el cálculo de las velocidades de combustión del modelo, se realizó una representación gráfica de los datos del ensayo experimental de referencia, para ver cuán aproximado era éste método simplificado con respecto al de dos zonas. En la *figura 11* se muestra el gráfico de la velocidad de combustión bajo los dos métodos, en donde se observa que la tendencia de los dos métodos para cada par de ensayo es similar con cierto desfase entre las curvas de un mismo par de ensayo.

5. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS DE SIMULACIÓN CFD

En este capítulo se hace el análisis de los resultados obtenidos en las simulaciones CFD realizadas. Es importante mencionar que se realizó un gran número de ejecuciones de simulaciones y que muchas de ellas o no convergían o no llegaban a datos coherentes, por lo cual en este capítulo se presentan solo aquellas que llegaron a acercarse a los datos del ensayo experimental.

5.1. Cálculos de condiciones iniciales, finales y aumento de presión

Partiendo de la información del capítulo anterior (ensayo de referencia), se realizaron cálculos de las condiciones iniciales y finales del modelo, para tener una referencia válida a la cual se debería llegar en las simulaciones. Se partió de la ecuación de estequiometría del metano, ecuación 1, y de las condiciones iniciales, *tabla 3*, de presión, temperatura y dosado de la mezcla, para calcular la masa real existente en la esfera, las fracciones másicas, el calor específico a volumen constante de los productos y los reactivos, de igual manera se calcularon las presiones y temperaturas finales a las cuales se debería llegar, *tabla 4*, bajo las condiciones iniciales. Para las temperaturas finales se realizaron varios cálculos de las mismas, ya que éstas dependen del calor específico de los productos quemados y no se encontró en las referencias bibliográficas un valor exacto de éste parámetro para los productos sin quemar, se optó por hacer el cálculo para diferentes temperaturas iniciales y sus respectivos calores específicos para tener un rango de las temperaturas finales a las cuales se tendrían que aproximar los datos simulados, *tablas 5 y 6*.

Tabla 3. Condiciones iniciales del modelo.

Fr	Pi (Pa)	Ti (K)	R esfera (m)	Vol Esfera (m ³)	R Cte de los gases (J/kmol-K)
1.00	5.00E+04	300	0.1	0.0042	8314.34

Es importante resaltar que el parámetro de presión es la única condición inicial que se ha variado hasta el momento. En esta sección solo se colocará los valores obtenidos para dichos parámetros y en el anexo de la memoria se incluirán las expresiones y/o ecuaciones utilizadas.

Tabla 4. Valores calculados de masa, fracciones máscas, masa real en la esfera.

		CH4 (CnHmOpSz)			
				$M_{Ch4}(g/mol)$	16.04246
	n		1	$M_H(g/mol)$	1.00794
	m		4	$M_C(g/mol)$	12.0107
	p		0	$M_O(g/mol)$	15.9994
	z		0	$M_N(g/mol)$	14.0067
$Xfsq$	0.0951			$mo2$	63.9976
$Xasq$	0.9049			$mn2$	210.6608
Mfe	16.042			$mtsq$	290.7008
Mae	28.84	valor fijo		$Ych4$	0.0552
$Mmesq$	27.62	kg/kmol		$Yo2$	0.2201
$Rmsq$	301.0			$Yn2$	0.7247
$Mmsq$	0.00232	kg		$Cvch4(J/kg.K)$	1707.9
Fe	0.0583	17.16		$Cvo2(J/kg.K)$	1318.8
$Yfsq$	0.0551			$Cvn2(J/kg.K)$	742.5
$Mfsq$	0.000128	kg		$Cvsq$	922.65
$Masq$	0.00219	kg		$Cpsq$	1223.64
$Yasq$	0.94493			γsq	1.326

Tabla 5. Valores de aumento de presión relativos a la presión inicial.

Pi (Pa)	Ti (K)	Ufc (J/kg)
1.00E+05	300	5.00E+07
$Rmsq$	301.0	
γq	1.24	1.35
F	0.0583	0.0551
Fr	1.00	
$\Delta P/Pi$	7.32	10.67
ΔP	731,804.6	1,067,215.0
$Pf(Pa)$	631,804.6	967,215.0
$Pf(bar)$	6.32	9.67

Tabla 6. Rango de temperaturas calculadas.

<i>F</i>	<i>Ufc (kJ/kg)</i>	<i>Ti (K)</i>	<i>Cvco2</i>	<i>Cvco2 (J/kg-K)</i>	<i>Cvh2o</i>	<i>Cvh2o (J/kg-K)</i>
0.0583	5.00E+07	300	28.90	656.68	25.96	1441.00
<i>Mmq</i>	27.6332	1000	45.99	1044.91	32.96	1829.34
<i>Rq (J/kg-K)</i>	300.9	1500	50.09	1138.16	38.79	2153.17
<i>Rcte (J/kmol-K)</i>	8314.34	2000	52.02	1182.02	42.89	2380.76
<i>mco2</i>	44.0095	2500	53.15	1207.69	45.58	2530.07
<i>mh2o</i>	36.0306	3000	53.91	1224.96	47.43	2632.77
<i>mn2</i>	210.6608	3500	54.48	1237.91	48.75	2706.04
<i>mtq</i>	290.7008	4000	54.94	1248.37	49.72	2759.88
<i>Yco2</i>	0.1514	4500	55.35	1257.68	50.47	2801.51
<i>Yh2o</i>	0.1239					
<i>Yn2</i>	0.7247					

<i>Cvn2</i>	<i>Cvn2 (J/kg-K)</i>	<i>Cvq (J/kg-K)</i>	$\gamma q (Ti)$	$\Delta Tq (K) 1^\circ$	<i>Tf (K) 1°</i>	$\Delta Tq (K) 2^\circ$	<i>Tf (K) 2°</i>
20.80	742.50	816.08	1.37	3373.80	3673.80	2632.22	2932.22
24.23	864.80	1011.62	1.30	2721.69	3721.69	2632.22	3632.22
26.22	935.84	1117.35	1.27	2464.14	3964.14	2632.22	4132.22
27.60	985.10	1187.89	1.25	2317.80	4317.80	2614.72	4614.72
28.47	1016.30	1232.90	1.24	2233.20	4733.20	2602.37	5102.37
28.95	1033.43	1260.66	1.24	2184.02	5184.02	2597.46	5597.46
29.17	1041.29	1277.39	1.24	2155.41	5655.41	2597.46	6097.46
29.23	1043.43	1287.20	1.23	2138.99	6138.99	2597.46	6597.46
29.26	1044.50	1294.54	1.23	2126.85	6626.85	2597.46	7097.46

5.2. Ejecuciones realizadas con el código CFD

Se han realizado un gran número de ejecuciones del modelo, ya que la primera dificultad que se encontró fue determinar un valor de energía para la chispa de ignición que permitiera el encendido de la mezcla. Posterior a ello, encontrar un paso de tiempo (*time step*) adecuado, para que se llegara a la convergencia total de la solución, y al ser el proceso de combustión en la realidad un proceso tan rápido, obviamente tenían que ser valores de paso de tiempo del orden de los micro segundos, entrando en juego el tiempo computacional (*en días*), para cada prueba. También se encuentran casos donde se lograba arrancar el modelo, es decir, que se iniciara la chispa, pero cuando se iba a mitad de simulación el modelo no convergía

por causas de que se disparaba los límites de turbulencia y en algunos casos de temperatura. Finalmente después de tantas pruebas se han llegado a algunos resultados, pero que aún están un poco lejos de los esperados.

Se presentan resultados correspondientes a dos formas de calcular el proceso de reacción de la mezcla metano-aire: el denominado **Eddy Dissipation Rate** y el denominado **Finite Rate**, de acuerdo con lo explicado en el apartado 3.1.4.2.

5.2.1. Modelo de reacción EDDY DISSIPATION

Estos resultados se han calculado con los valores de los parámetros del modelo **Eddy Dissipation Rate** que aparecen por defecto en el código FLUENT, *tabla 7*. Por su parte, las condiciones iniciales de la mezcla metano-aire son los que se han indicado en el apartado anterior.

Tabla 7: Valores empíricos de mixing rate, datos de FLUENT.

Valores empíricos de Mixing Rate	
A	4
B	0.5

Es importante resaltar que con el modelo de reacción **Eddy-Dissipation**, se obtuvieron los primeros resultados para el proceso de combustión completo. Aun así, se ha encontrado que el proceso de combustión se produce muy rápido, es decir que el combustible se quema en su totalidad muy de prisa y por ende las velocidades de reacción que se obtienen son **100 veces** más rápidas que las esperadas. Como ejemplo de los resultados, se presentan a continuación figuras de la evolución de la presión, la temperatura, la concentración de metano y la velocidad de combustión que se calcula a partir de la presión.

En la *figura 12* se muestran los resultados calculados de **presión** frente al tiempo de las tres combustiones a dosado estequiométrico. Se puede observar que cuanto mayor es la presión inicial, mayor es el valor máximo de presión en la combustión.

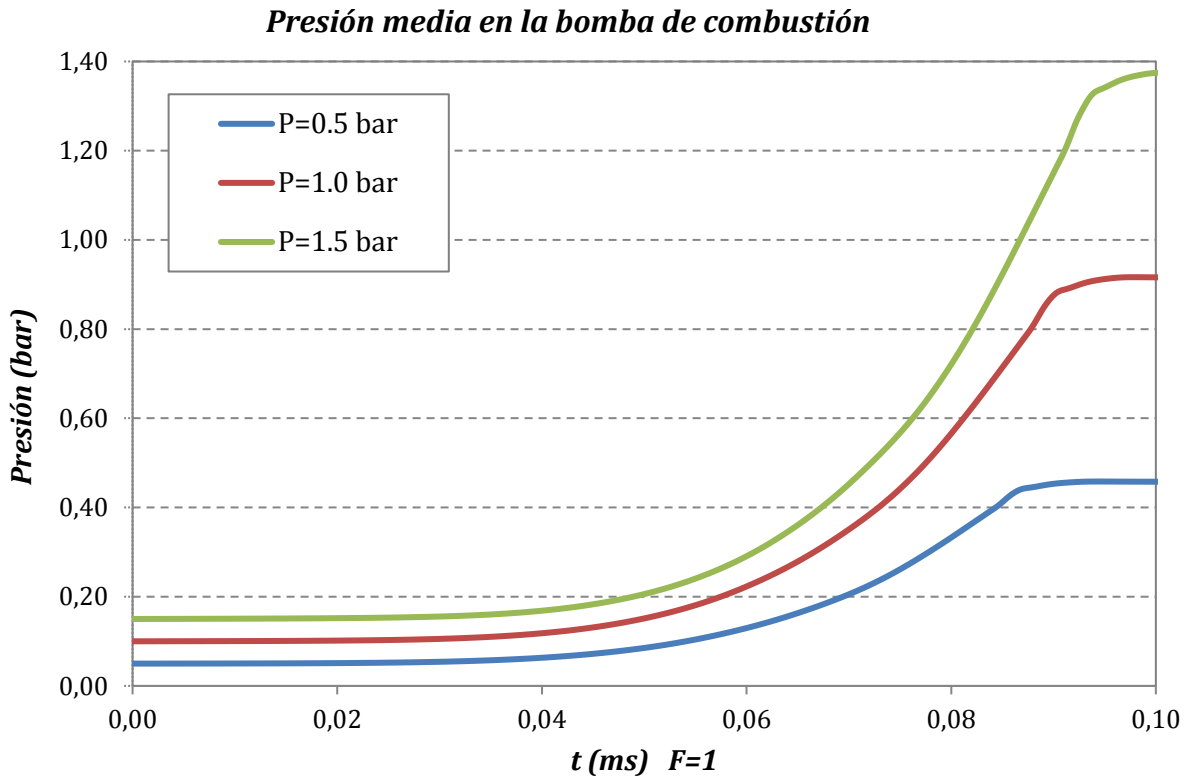
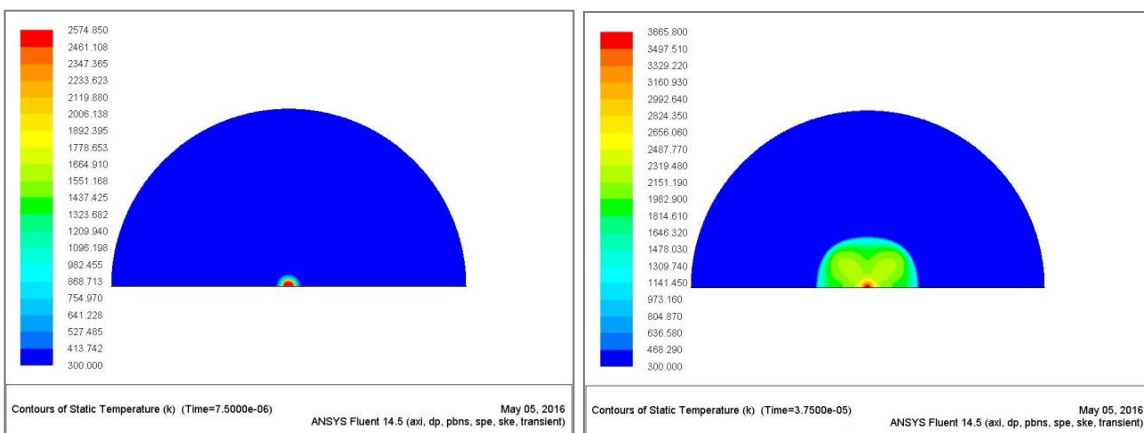


Figura 12. Evolución de la presión frente al tiempo para las tres presiones iniciales con la mezcla de estequiometría de CH_4 -aire.

En la *figura 13* se representa la **propagación del frente de llama esférico** correspondiente al dosado estequiométrico de CH_4 . Bajo cada imagen se muestra el tiempo transcurrido desde el encendido.



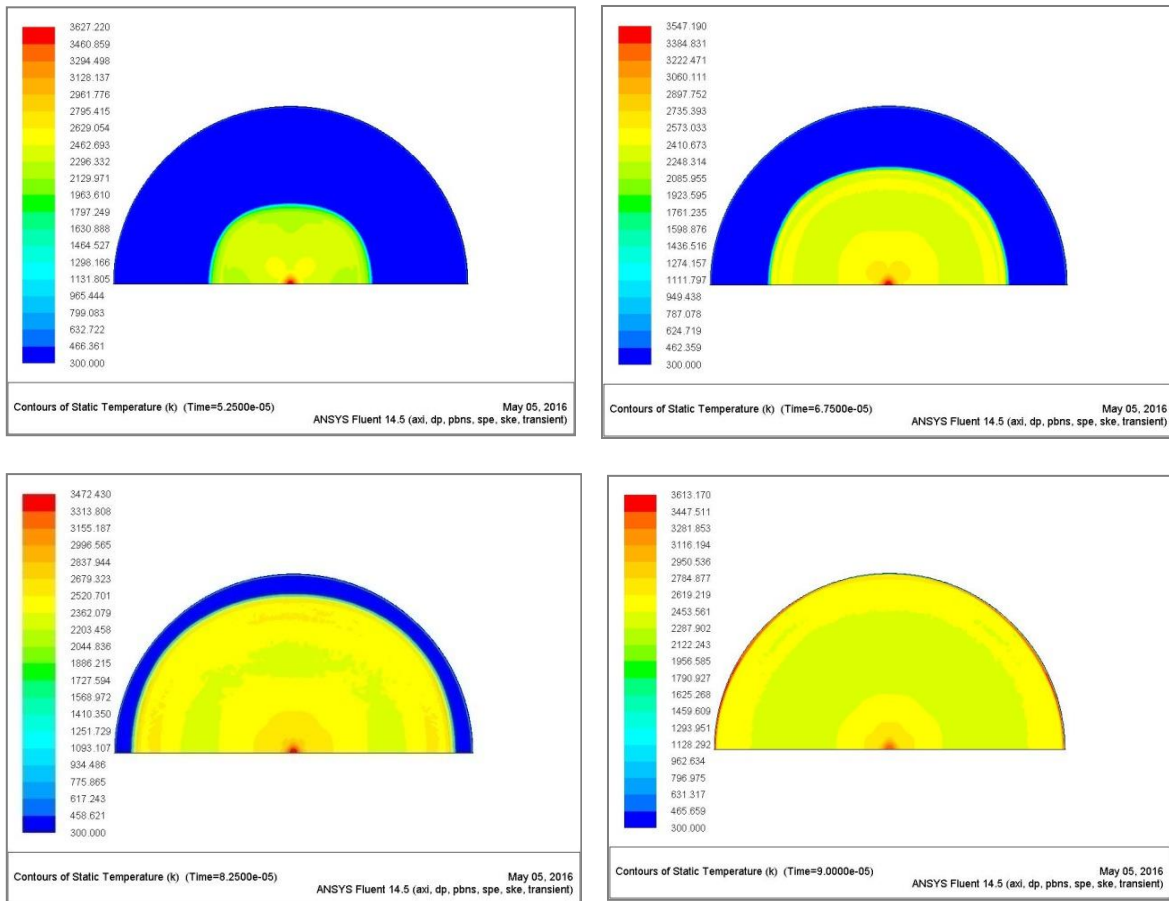


Figura 13. Evolución de la temperatura frente al tiempo.

En la *figura 14* se representa la **evolución de la presión y la velocidad de combustión** (calculada con el método de Lewis y von Elbe) frente a la temperatura de la mezcla fresca. Los colores en el gráfico están emparejados es decir *azul* para $P_i=0.5$ bar, *rojo* para $P_i=1.0$ bar y *verde* para $P_i=1.5$ bar. Puede verse que, a pesar de que la presión varía de forma importante, las velocidades de combustión son casi coincidentes.

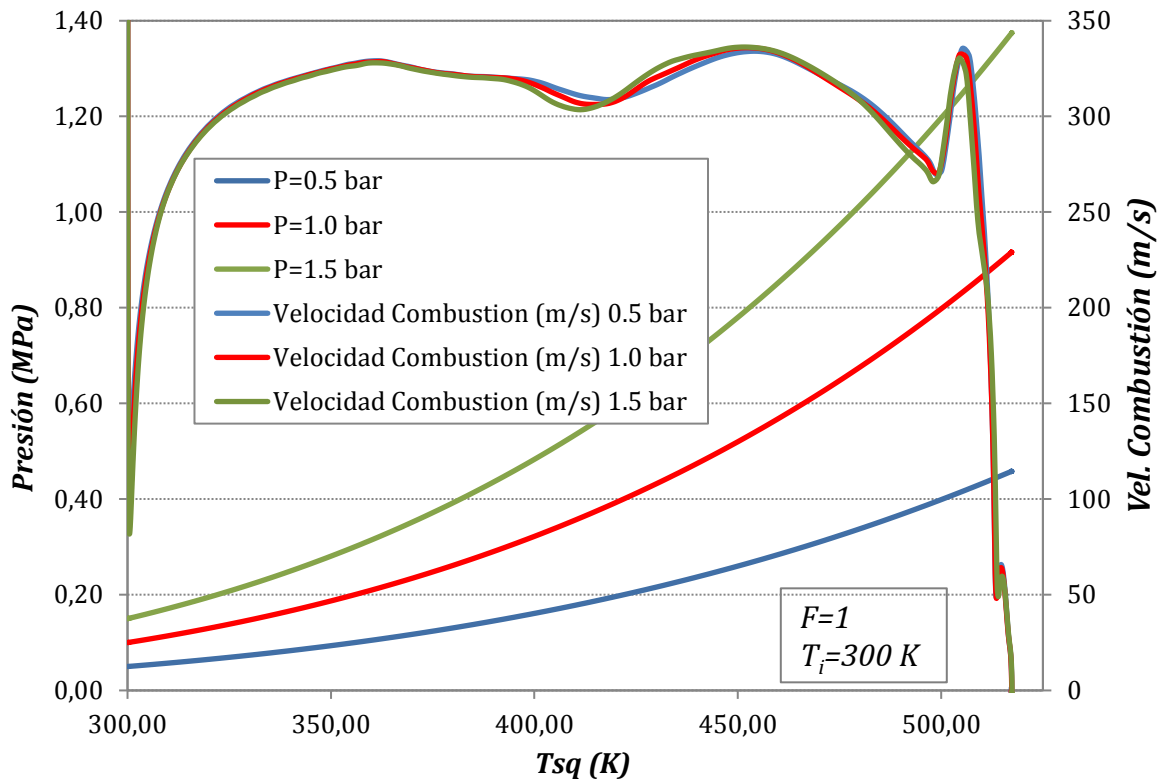
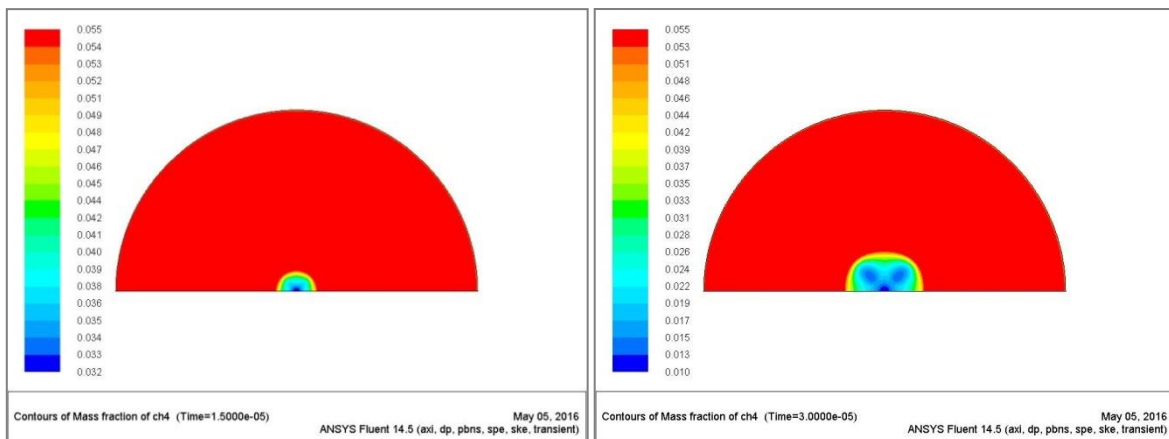


Figura 14. Evolución de la velocidad de combustión y presión frente a la temperatura de la mezcla fresca.

En la *figura 15* se observa cómo evoluciona la concentración de masa quemada (en azul) y como va disminuyendo la mezcla fresca (metano, en rojo) frente al tiempo, el cual se muestra bajo cada imagen.



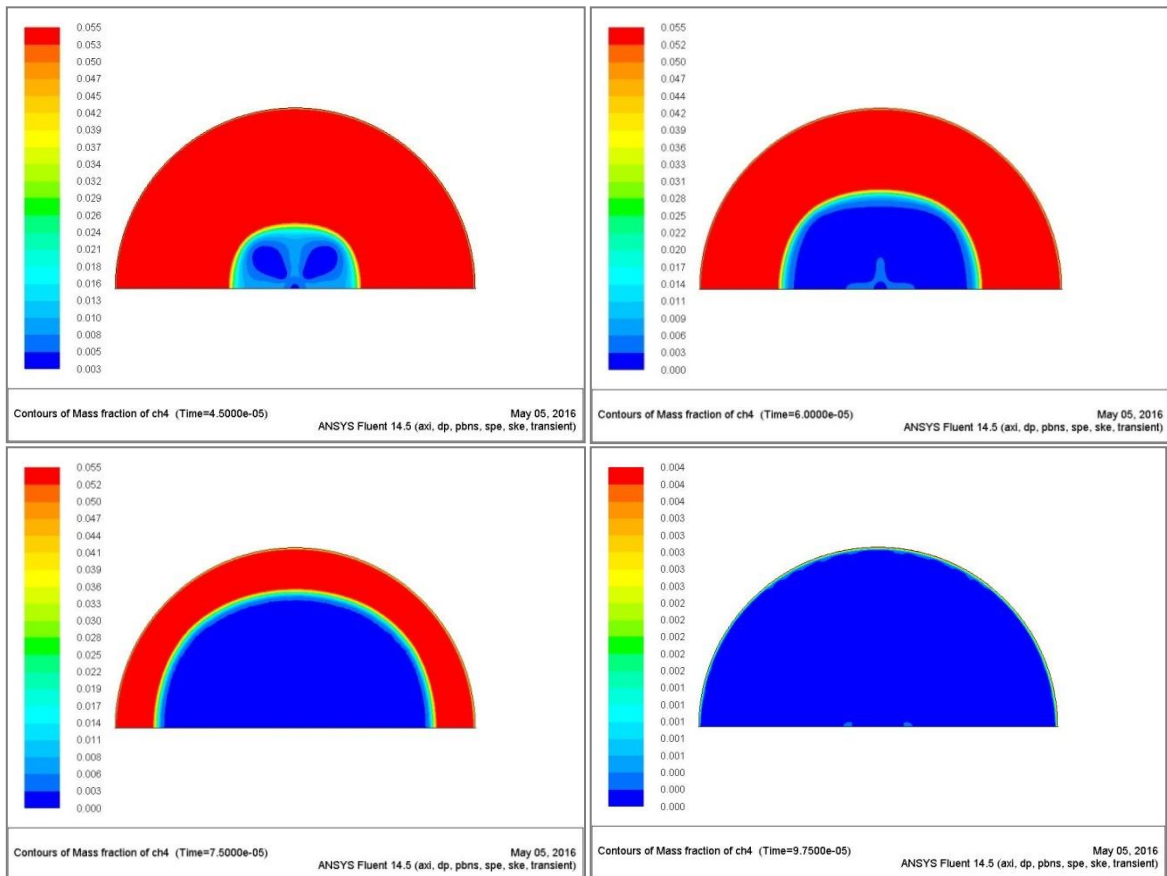


Figura 15. Concentración de masa quemada de CH4 frente al tiempo.

5.2.2. Modelo de reacción FINITE-RATE

Con los resultados obtenidos con el modelo de reacción anterior, que estaban lejos de los esperados, se optó por probar el modelo de reacción *Finite-Rate* para intentar disminuir la velocidad de combustión. Este modelo se basa en la ecuación de Arrhenius, para ejecución del mismo se utilizaron los datos por defectos del FLUENT *tabla 8*, así como también se probó con algunos valores experimentales encontrados en la bibliografía para dichos parámetros, con estos últimos no se llegó a obtener resultados por problemas de convergencia del modelo.

Tabla 8. Valores de parámetros de la ecuación de Arrhenius de la base de datos de FLUENT.

Magnitud	Valor
Energía de activación - E_A - (J/kmol)	2.027E+07
Coefficiente pre-exponencial - A-	2.12E+11
Exponente de temperatura - m -	0

En la *figura 16* se muestra los nuevos pares de **presión-tiempo** de las tres combustiones a dosado estequiométrico. Se puede observar que cuanto mayor es la presión inicial en el modelo mayor es el valor máximo de presión en la combustión. Además este máximo se alcanza más tarde en el tiempo, indicando que aumenta la duración de la combustión y mostrando una primera evidencia de la relación opuesta entre velocidad de combustión y presión para esta mezcla.

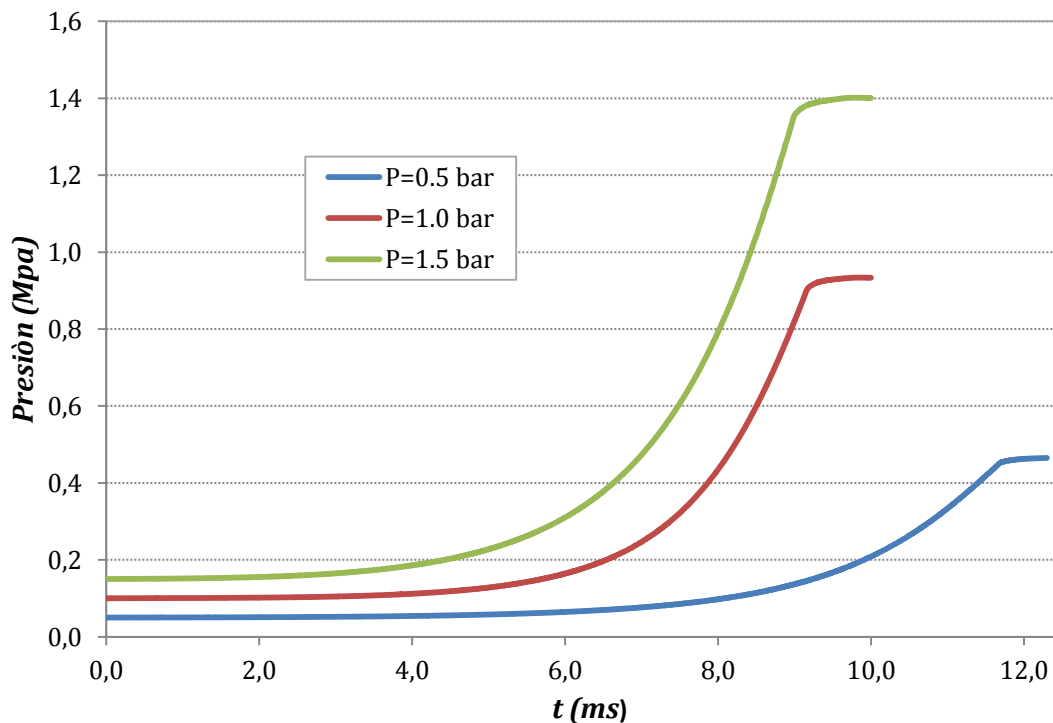


Figura 16. Pares de presión - tiempos.

En la *figura 17*, se muestra el avance de la llama en el tiempo, el cual se puede ver bajo cada imagen, y a diferencia del modelo anterior, la llama avanza más lenta.

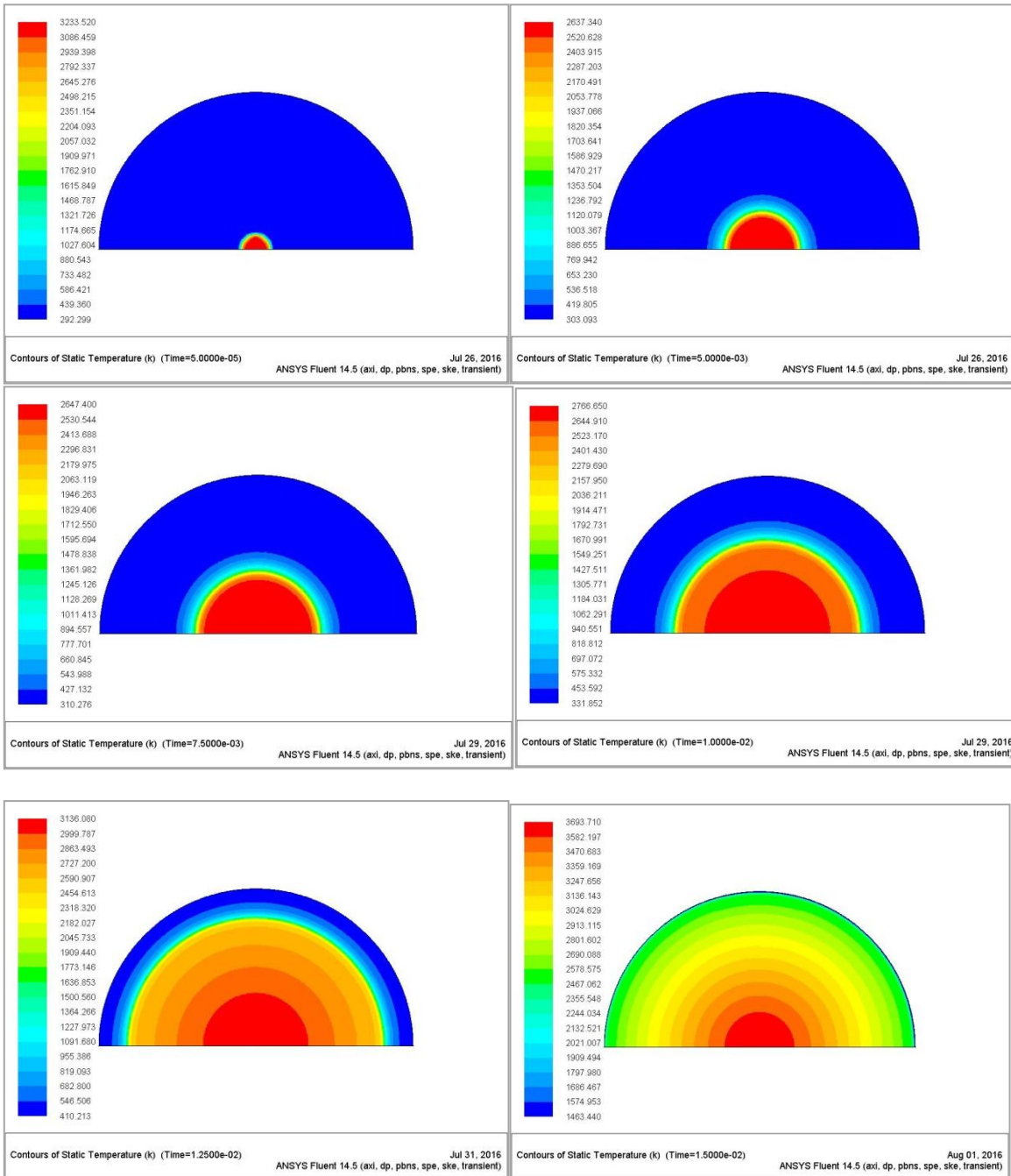


Figura 17. Avance del frente de llama en el tiempo.

En el gráfico, *figura 18*, se muestran los resultados de los tres ensayos realizados a dosado estequiométrico. En el cual se representa la evolución de la velocidad de combustión y de la presión frente a la temperatura de la mezcla sin quemar, las curvas con forma exponencial corresponden a la presión y su escala se muestra en el eje de

ordenada izquierdo. También se puede ver que cuanto mayor es la presión inicial menor es la velocidad de combustión, con excepción del ensayo con presión inicial de 0.5 bar, en el cual ocurre la combustión más tarde que en los de presión inicial superiores. El rizado que presentan las curvas de velocidad es debido al tamaño del tiempo de paso y el número de iteraciones por paso de tiempo durante las simulaciones.

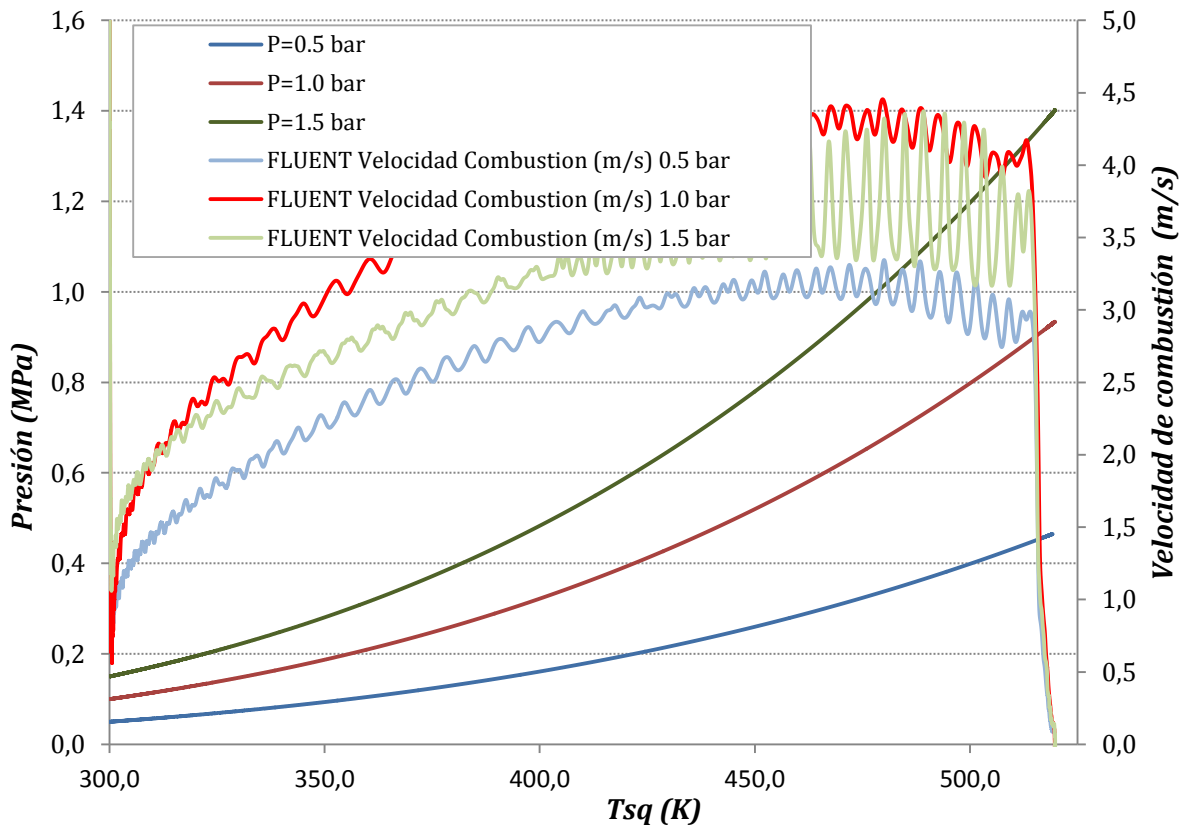


Figura 18. Velocidad de combustión y evolución de la presión frente a la temperatura de mezcla fresca.

Las figuras 19, 20, 21, 22 y 23 muestran los resultados obtenidos para las simulación con condiciones iniciales de $P=0.5$ bar, $T=300$ K y $Fr=1$. En las mismas se puede observar la evolución en el tiempo del radio de frente de llama, las fracciones de masa de metano quemada y sin quemar, la evolución de la velocidad de combustión frente a la fracción de masa quemada.

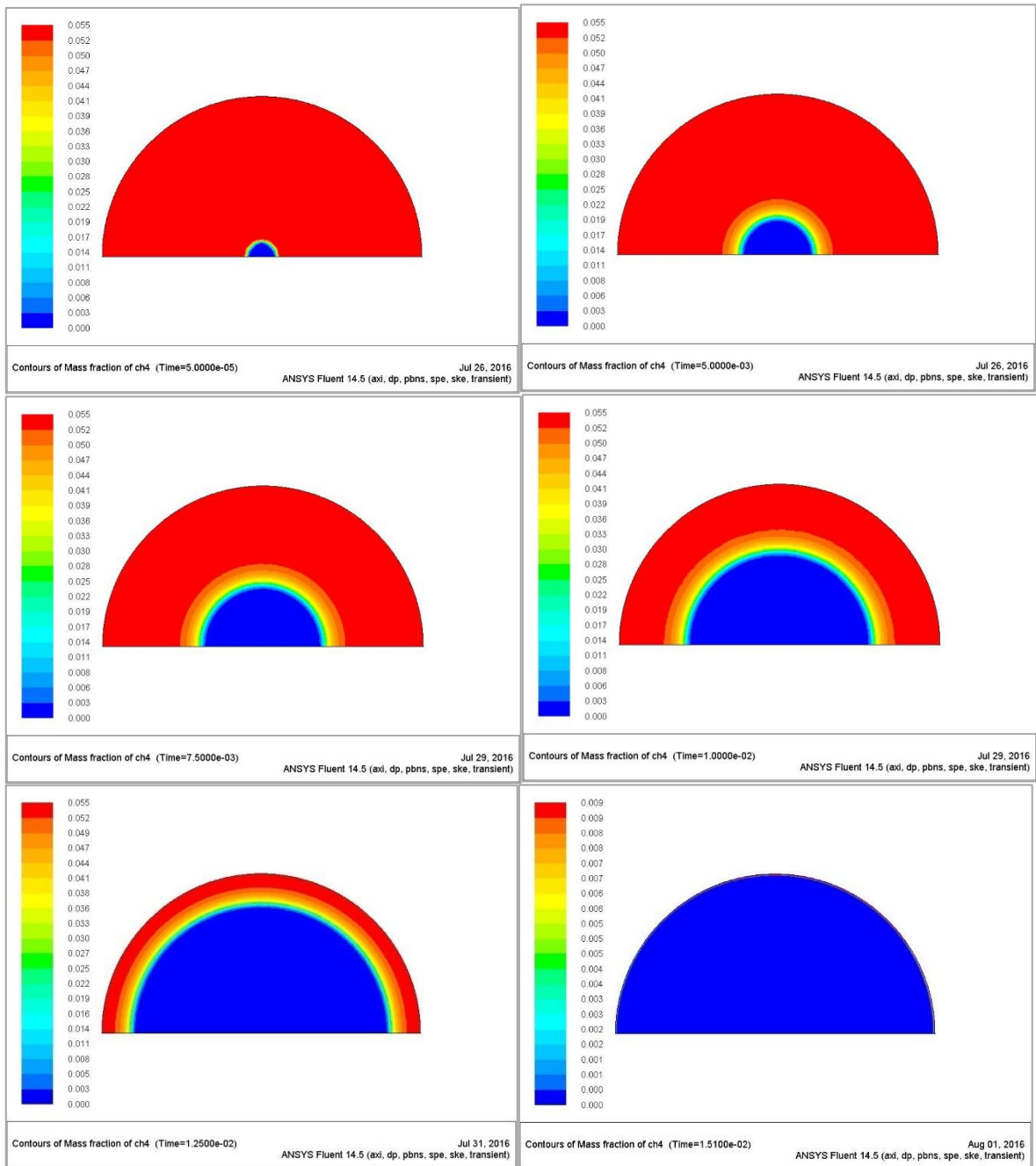


Figura 19. Evolución de concentración de CH₄ quemado.

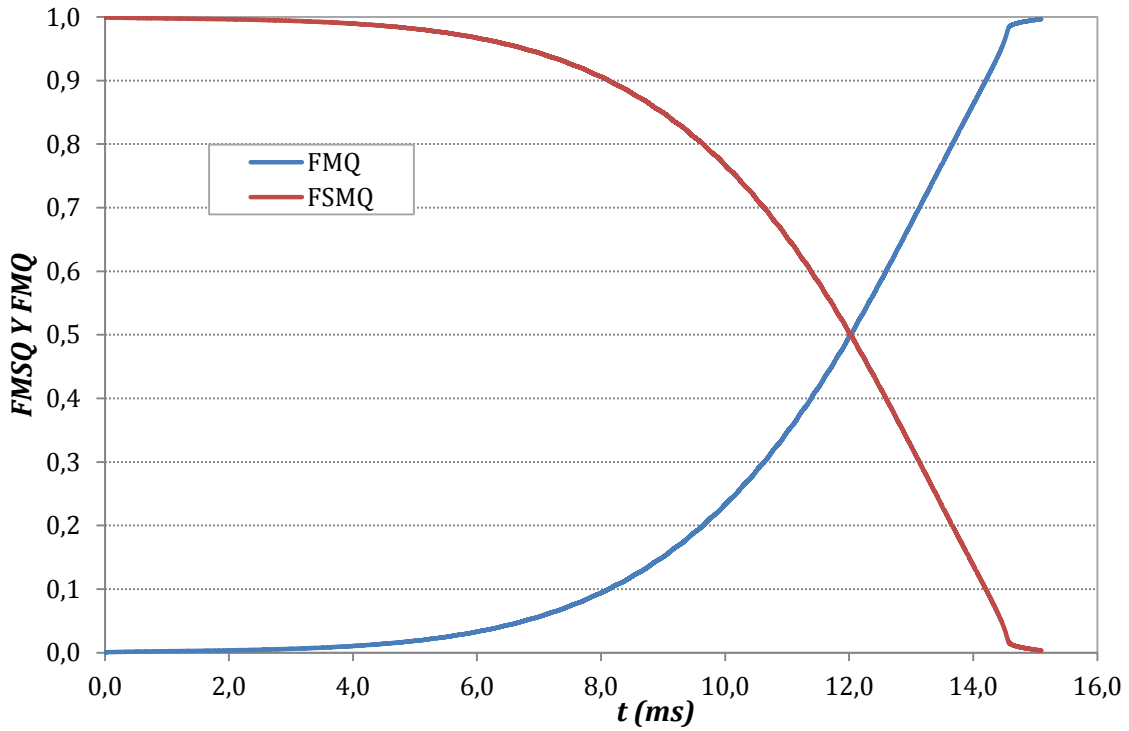


Figura 20. Curvas de fracción de masa quemada y sin quemar.

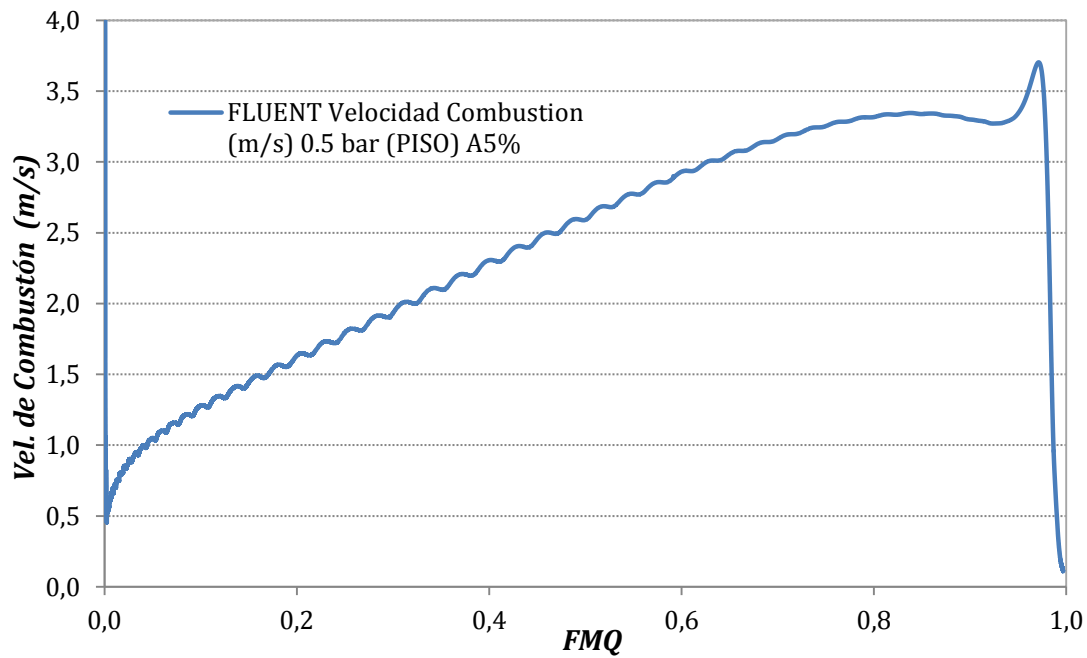


Figura 21. Velocidad de combustión en función de la fracción de masa quemada.

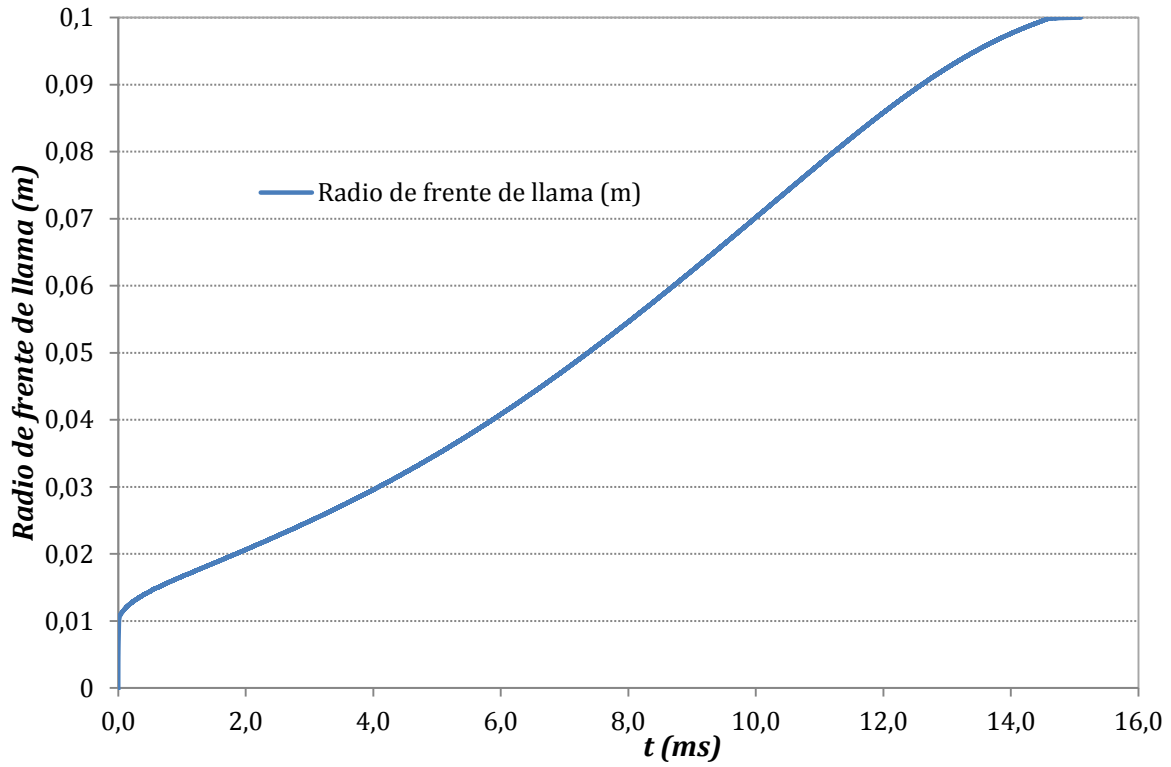


Figura 22. Evolución del radio de frente de llama en el tiempo.

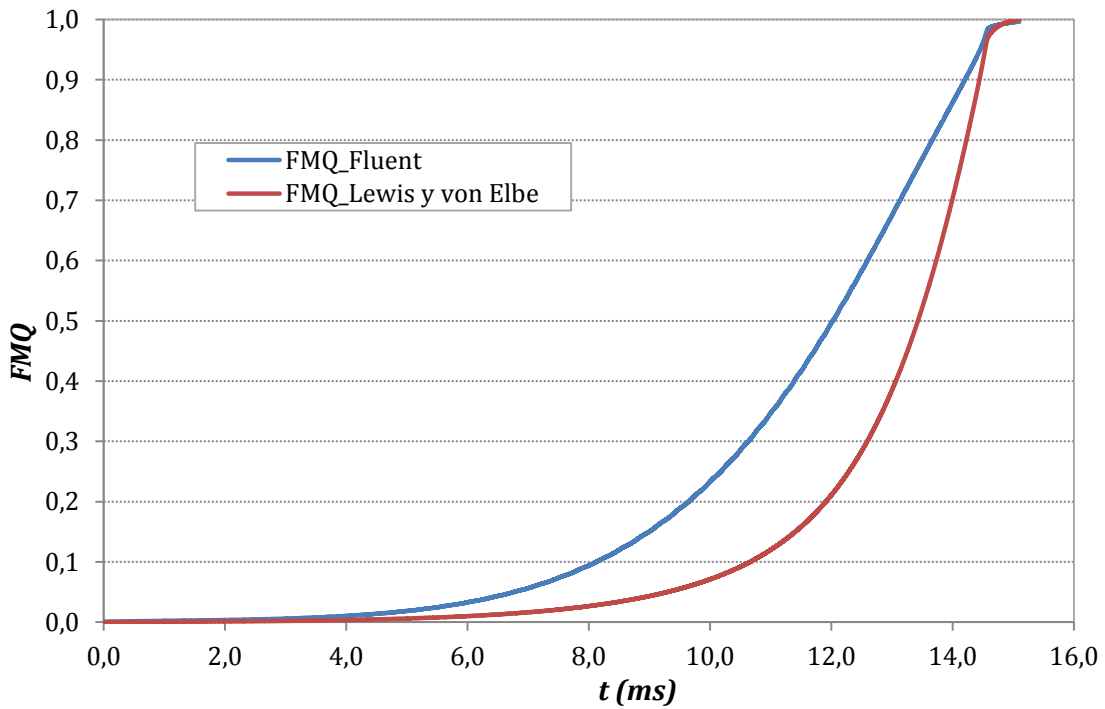


Figura 23. Comparación de la FMQ obtenida con FLUENT y la obtenida a partir de $FQM = (p-p0)/(pf-p0)$.

5.3. Comparación de resultados CFD con datos experimentales

Este capítulo se centrará en la comparación y validación de los resultados obtenidos con la metodología CFD implementada (modelo Finite-Rate) y los datos de ensayos experimentales existentes.

Esta comparativa se hace en base a dos parámetros, la presión final del proceso y la velocidad de combustión de mismo. Para la primera, representamos gráficamente los datos obtenidos directamente del FLUENT de **avance de presión en el tiempo**.

Como lo muestra claramente la *figura 24*, el proceso de combustión se da mucho más rápido en los datos simulados, pero pese a ello se obtienen aproximadamente las mismas presiones finales.

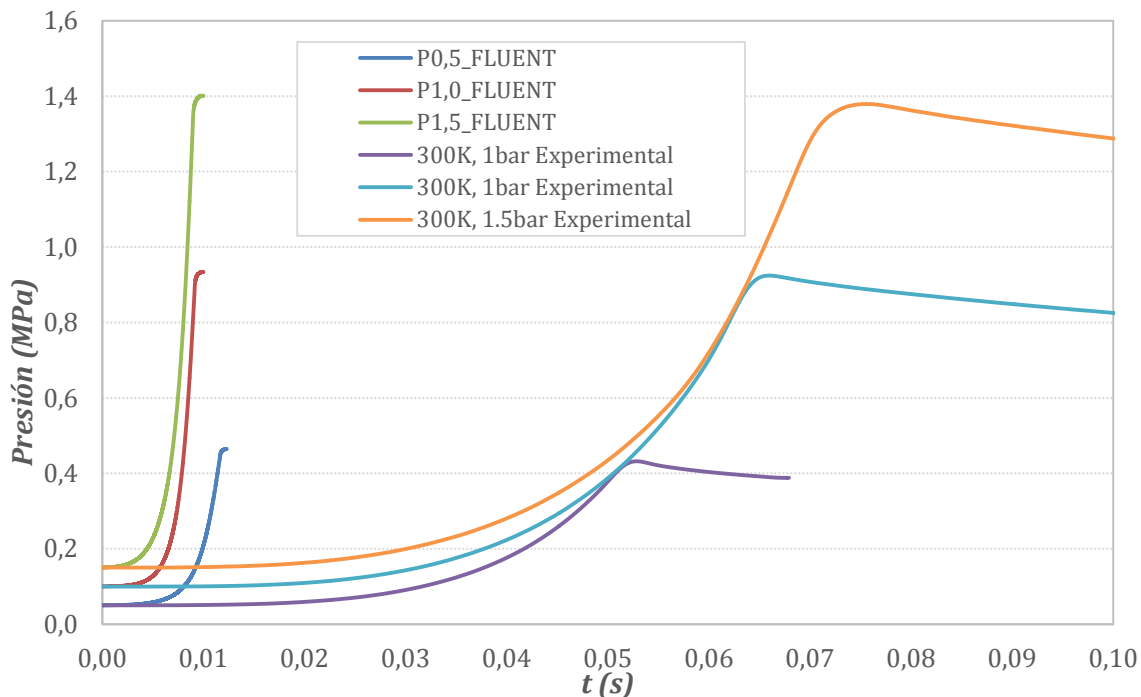


Figura 24. Comparación de avance de presión en el tiempo entre datos de Fluent y datos experimentales.

En el gráfico siguiente, (*figura 25*), se observa claramente que la **velocidad de combustión** de los datos de simulación CFD va mucho más rápido que los experimentales. Esta diferencia de velocidades en los datos simulados puede deberse a varios factores, como lo son: el modelo de turbulencia, el modelo de reacción, en

este último entra en juego los parámetros de la ecuación de Arrhenius ya que el coeficiente pre-exponencial (A) de la ecuación, es directamente proporcional a la velocidad de combustión y como se dijo en capítulos anteriores los datos que se utilizaron de este parámetro fue el de la base de datos del FLUENT. Se intentó hacer pruebas para valores de estos parámetros encontrados en algunas bibliografías pero no se obtuvo resultados.

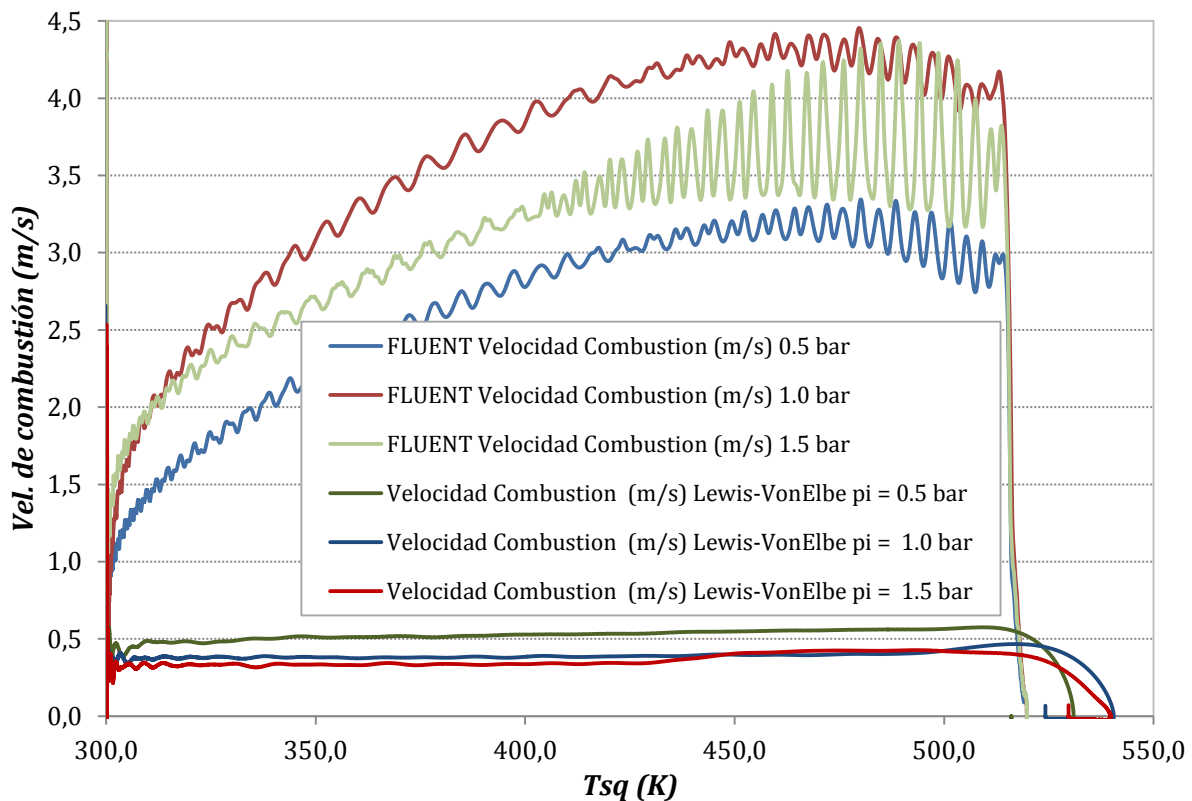


Figura 25. Comparación entre datos de velocidad de combustión de simulación CFD y datos experimentales, bajo el método de LVE.

Para intentar disminuir la velocidad de combustión, se realizaron simulaciones disminuyendo el valor por defecto del FLUENT del **coeficiente pre-exponencial** de la ecuación de Arrhenius del 100% al 80%, 10%, 5%, 0.2%, 0.02%, así como también de la energía de activación.

En estas pruebas realizadas, *figura 26*, se muestra que al ir disminuyendo de su valor inicial (coeficiente pre-exponencial), va disminuyendo la velocidad de combustión.

Pero se encontró con el inconveniente de que cuando se llegaba a disminuir el coeficiente a 0.2% de su valor inicial, el valor de la energía de activación (parámetro de ecuación de Arrhenius), no daba inicio al proceso de combustión para éste valor encendía pero seguidamente se apagaba sin dar tiempo a que se iniciara el proceso. Para corregir esta situación se optó por también disminuir el valor inicial de la energía de activación, pero una vez se graficaron los resultados se observó que nuevamente había aumentado la velocidad de combustión, y al disminuir aún más ambos parámetros la velocidad de combustión aumento (curvas naranja y celeste en la *figura 26*).

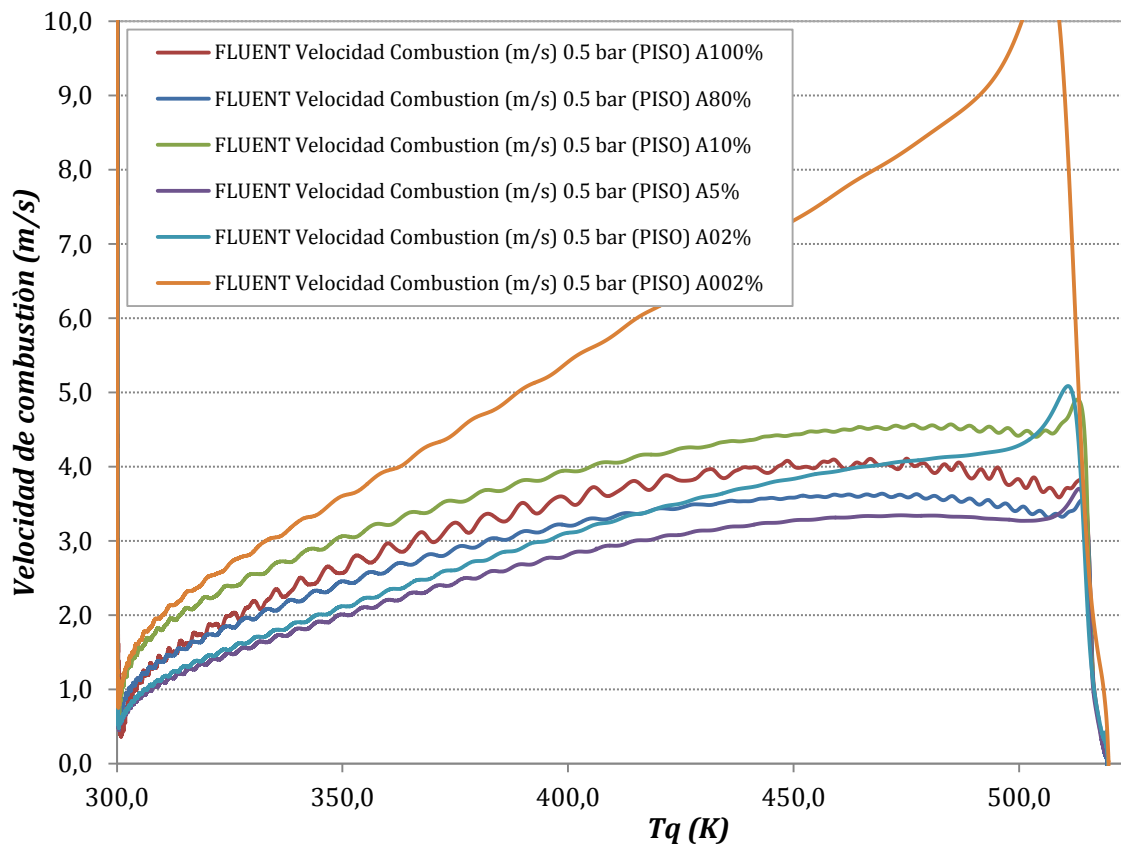


Figura 26. Velocidad de combustión para diferentes valores de coeficiente pre-exponencial.

En los gráficos (*figura 27 y 28*), se presenta la variación de la **velocidad de combustión** para los diferentes porcentajes de disminución de los parámetros de la ecuación de Arrhenius, medidos a un 50% de la fracción de masa quemada y a 450 K de

temperatura sin quemar . En los mismos se puede ver que la velocidad presenta una tendencia decreciente cuando se disminuye el porcentaje del coeficiente pre-exponencial y se mantiene el porcentaje de energía de activación, (círculos naranja, 100% y 80%), sin embargo al disminuir la EA a porcentajes de 55% y 40% y disminución de A (0.2% y 0.02%) respectivamente, esta tendencia no se mantiene por el contrario la velocidad aumenta considerablemente, lo que es decir que si se disminuye el coeficiente pre-exponencial, la velocidad de combustión disminuye siempre que se mantenga fijo el valor de la energía de activación (*tabla 8*).

Tabla 8: Valores a los cuales se disminuyó los parámetros de Arrhenius.

Porcentaje disminución de A	Factor Pre-exponencial A	Porcentaje disminución de EA	Energía Activación EA	Velocidad Combustión @450K T _{sq}	Velocidad Combustión@ 50%FMQ
100%	2,12E+11	100%	2,03E+08	4,0	5,2
80%	1,70E+11	100%	2,03E+08	3,6	3,0
10%	2,12E+10	80%	1,62E+08	4,4	3,7
5%	1,06E+10	80%	1,62E+08	3,3	2,6
0,20%	4,24E+08	55%	1,11E+08	3,8	2,8
0,02%	4,24E+07	40%	8,11E+07	7,3	4,7

Dado que no ha sido posible llegar a las velocidades obtenidas en el ensayo experimental, debido a que no se han encontrado los valores exactos de los parámetros de la ecuación de Arrhenius, y por el tiempo de cálculo (días) que requiere el proceso. Al momento de entrega de este TFM, se puede decir que la metodología con CFD funciona y para llegar a la finalidad del estudio, en apartados siguientes se hace sugerencia de futuras líneas de trabajo referentes al mismo.

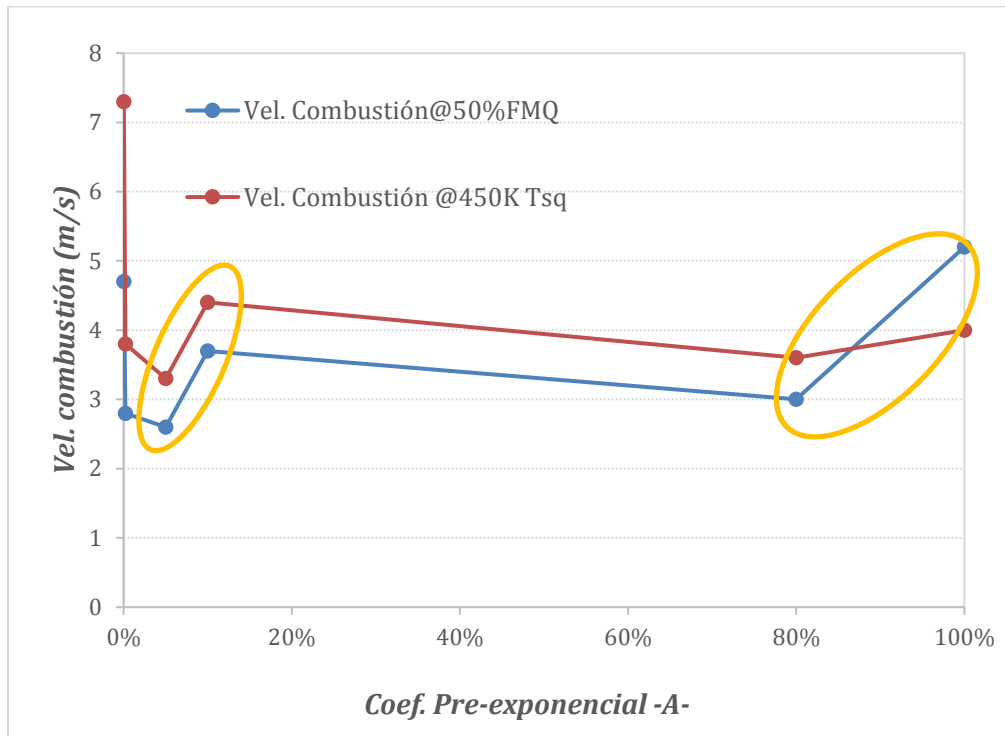


Figura 27: Variación de la velocidad de combustión frente a el porcentaje de disminución del coeficiente pre-exponencial a un 50% de FMQ.

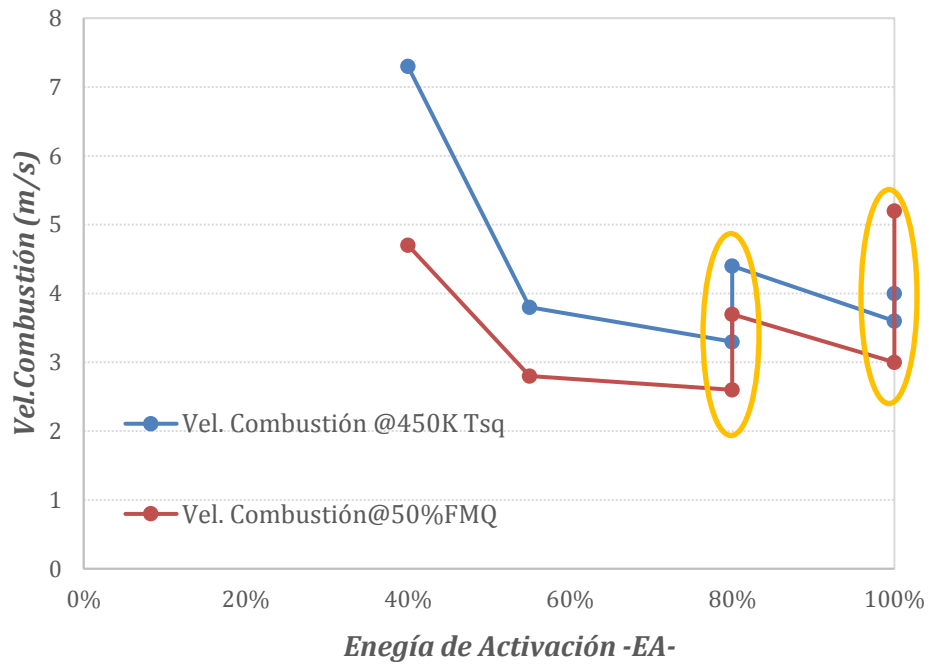


Figura 28: Variación de la velocidad de combustión frente a el porcentaje de disminución de la energía de activación a 450 K de Tsq.

6. CONCLUSIONES

6.1. Conclusiones

En este TFM se ha planteado inicialmente el desarrollo de una metodología para la aplicación de un código CFD para calcular el proceso de combustión en una bomba de volumen constante, de la que se dispone de ensayos experimentales realizados. Al finalizar este TFM, se puede decir que se ha cumplido dicho objetivo, si bien con una validación no completa del modelo CFD.

Del trabajo desarrollado se puede **concluir a nivel general** que el código CFD FLUENT utilizado presenta muchas ventajas en cuanto a costo, obtención y visualización de los resultados durante el proceso, además de la facilidad que brinda de poder detener el proceso si se observa que los resultados que se van obteniendo no son coherentes con los esperados y de poder variar condiciones iniciales, condiciones de frontera y demás parámetros importantes del proceso. Pero, pese a estas grandes ventajas tiene algunos inconvenientes como lo es la dependencia de los valores experimentales para validar los modelos, sumado a ello el tiempo de cálculo en días (5 días aproximadamente) que duran las simulaciones para el proceso completo de combustión en una bomba a volumen constante.

También se puede concluir que el método de Lewis y von Elbe (LVE), utilizado para el cálculo de las velocidades de combustión es un modelo simplificado el cual depende de las medidas de presión y de sus respectivas derivadas en el tiempo, siendo estas últimas proporcionales a la velocidad de combustión. En este modelo se asume además que el incremento de presión es proporcional a la fracción de masa quemada y que debido a que la velocidad se calcula a partir de las medidas basadas en la presión no se tiene en cuenta los efectos del espesor de la llama.

En cuanto a los resultados obtenidos se resaltan algunas **conclusiones específicas** que se consideran importantes.

- Del mallado de la geometría, se puede concluir que el **número mínimo de nodos** que es necesario utilizar es de aproximadamente de 136.000 nodos, distribuidos a cuatro nodos por elemento. Además el tipo de elemento utilizado ha sido cuadrado, teniendo la opción de utilizar elementos triangulares, los cuales presentaban una mayor calidad pero daban problemas de convergencia.
- Respecto al **encendido de la chispa**, se realizó con la herramienta spark ignition que incluye FLUENT para tratar de reproducir el proceso que en la bomba física se inicia por medio de electrodos. Fue necesario realizar una gran cantidad de ejecuciones del modelo, hasta llegar al valor mínimo de energía ($0.1 J$) que permitiera el inicio estable del proceso de combustión.
- En cuanto a los **modelos de combustión** para transporte de especies fueron utilizados Eddy-Dissipation y Finite-Rate, por los resultados obtenidos el que da las mejores aproximaciones es el último mencionado, ya que con éste se calcularon las velocidades más próximas a los valores experimentales. Es importante resaltar que los valores de los parámetros que gobiernan las ecuaciones de los modelos de combustión son puramente empíricos, razón por la cual se utilizaron los datos por defecto del programa, mencionando además que con los valores encontrados en algunas bibliografías no se llegó a obtener resultados. Sumado a lo anterior se resalta que la principal diferencia entre estos dos modelos es que el primero asume que las características de reacción están altamente influenciados por los efectos de la turbulencia, mientras que en el segundo el factor controlante es la cinética química mediante la expresión empírica de Arrhenius.
- Finalmente centrados en los parámetros del **modelo de combustión Finite-Rate**, es decir el coeficiente pre-exponencial y la energía de activación, se pudo ver en los diferentes resultados que si se disminuye el valor del primer parámetro, la velocidad de combustión disminuye siempre que se mantenga fijo el valor de la energía de activación. Sin embargo, si la energía de activación disminuye la velocidad de combustión aumenta. Estas tendencias se han representado gráficamente para poder visualizar el efecto de los parámetros.

6.2. Principales aportaciones del TFM

La principal aportación de este TFM consiste en que constituye las primeras bases del estudio del proceso de combustión en la bomba a volumen constante mediante la utilización de CFD, lo que da pie para continuar y ampliar esta metodología. Se han considerado con detalle las distintas opciones que ofrece ANSYS-FLUENT para realizar el modelado del proceso de combustión: submodelos de combustión, de turbulencia, de encendido, etc.

6.3. Sugerencias para trabajos futuros

Como se comentó al inicio, código CFD se ha aplicado al modelo físico de la bomba de combustión con los ajustes más reales posibles, pero buscando inicialmente la mayor simplicidad. Con el fin de validar en su totalidad el modelo, deben tomarse en cuenta todos los detalles que no fueron incluidos en estos primeros ensayos, de manera que se pueda reproducir los ensayos experimentales de la manera más realista posible. A continuación se listan algunas sugerencias para futuros trabajos.

- **Cinética de reacción:** la cinética de reacción utilizada es metano-aire de un solo paso para reducir el coste computacional. Con el fin de tener en cuenta una cadena de reacción más real, se plantea para futuro, modelar la combustión utilizando una cinética de reacciones más extensa que desarrolle las diferentes fases de la combustión.
- **Modelo de turbulencia:** aunque los costes de cálculo computacional que requiere un modelo de turbulencia más complejo son poco abordables, se plantea también, realizar pruebas con modelos de turbulencia más complejos para así determinar si la mejora es notable con respecto al modelo *standard k* - ϵ utilizado.
- **Estudios paramétricos:** en este trabajo solo se llegó a realizar cálculos para tres valores de presión inicial de la mezcla. Para tener una metodología más

robusta, se recomienda como trabajo futuro, realizar estudios paramétricos, como los son: variar el dosado relativo y por ende la fracción de masa, las temperaturas iniciales, el combustible, condiciones de fronteras (transferencia de calor) y así poder ver la influencia de cada uno de ellos en el modelo.

- **Geometría de la bomba:** como trabajo futuro, se sugiere incluir la admisión y escape de la bomba, para poder ver qué efectos pueden tener o no en los resultados, durante el proceso previo de llenado.

7. REFERENCIAS Y BIBLIOGRAFÍA

7.1. Referencias

- [1] A. Lafuente. Metodología para el diagnóstico de la velocidad de combustión laminar de mezclas de gases combustibles a partir de una medida de la presión instantánea en una bomba de combustión a volumen constante. Tesis Doctoral. Universidad de Valladolid, 2008.
- [2] Ansys Fluent Users Guide. ANSYS 14.5, Inc. 2014a.
- [3] Ansys Fluent Theory Guide. ANSYS 14.5, Inc. 2014b.
- [4] C. Gómez. Ventajas de la simulación CFD: Hidrodinámica de un horno reformador. Trabajo de Fin de Carrera. Universidad de Magallanes, Punta Arenas, Chile. 2009.
- [5] D. Iglesias. Caracterización de mezclas de combustibles para motores térmicos en una bomba de combustión a volumen constante. Tesis Doctoral. Universidad de Valladolid, 2015.
- [6] F. Payri, J. Desantes. Motores de Combustión Interna Alternativos. Libro. Editorial Reverté. 4ª Reimpresión. 2014.
- [7] S. Fygueroa, J. Araque. El proceso de combustión en motores de combustión interna. Consejo de estudios de Postgrado. Universidad de Los Andes Mérida, Venezuela. 1ra Edición, 2005.
- [8] V. Simancas. Modelado CFD de un motor de encendido provocado alimentado con gas natural. Trabajo de Fin de Máster. Universidad de Valladolid, España 2015.

7.2. Bibliografía

- C. Serrano. Estudio del comportamiento del gas de gasificación de biomasa en procesos de combustión. Tesis Doctoral. Universidad de Castilla – La Mancha, España. 2006.
- M. Reyes. Caracterización de la combustión y el autoencendido de combustibles líquidos en mezclas homogéneas para su uso en motores térmicos en modo HCCI. Tesis Doctoral. Universidad de Valladolid, España. 2008.
- Ashish J. Chaudhari, Niranjana Sahoo, Vinayak Kulkarni. Simulation models for spark ignition engine: A comparative performance study. ICAER 2013.
- H. Ender, K. Salih, U. Sitki, D. Nureddin, Y. Nuri. A case study of combustion modeling in a spark ignition engine using coherent flame model. 2014.
- F. Tinaut. Apuntes de sistemas de propulsión y combustibles alternativos. UVA, 2015.
- ANSYS FLUENT lecture: Combustion. ANSYS, Inc. 14.5. 2014.
- J. Rivera. Análisis tridimensional del proceso de combustión en quemado de energía cinética turbulenta. Trabajo de Fin de Master. Universidad Autónoma de Nuevo León, México. Diciembre 2011.
- H. Copete, A. Amell, F. Cadavid. Simulación numérica de una cámara de combustión de alta velocidad con dos configuraciones de inyección de combustible. Dyna, vol. 75, num. 156, noviembre 2008, pp 109-120.
- C. Gualtieri, A. López, J. Mora. Modelación computacional de la turbulencia en la cavidad de un cauce mediante una geometría cuadrada.

8. ANEXOS

En esta parte el TFM se enlistan los archivos que se entregan junto con la memoria en formato digital CD

1. Hojas de ensayo experimental 1 y 2: en estos ficheros de Excel se recogen los datos y gráficos del ensayo experimental.
2. Hoja de cálculos y resultados obtenidos en las simulaciones CFD.
3. Código CFD desarrollado, ficheros ANSYS FLUENT.