



Universidad de Valladolid

**PROGRAMA DE DOCTORADO EN INGENIERÍA INDUSTRIAL /
DOCTORAL PROGRAM IN INDUSTRIAL ENGINEERING**

TESIS DOCTORAL / DOCTORAL THESIS:

**CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN
DE MEZCLAS DE HIDRÓGENO/METANO/AIRE Y
ETANOL/AIRE MEDIANTE LAS INESTABILIDADES
GENERADAS EN LA PROPAGACIÓN DE LLAMAS ESFÉRICAS**

**CHARACTERIZATION OF THE COMBUSTION PROCESS
OF HYDROGEN/METHANE/AIR AND ETHANOL/AIR
MIXTURES THROUGH INSTABILITIES GENERATED
IN EXPANDING SPHERICAL FLAMES**

Presentada por / Submitted by:

Dña. Rosaura Sastre Zamora

para optar al grado de / in fulfillment of the requirements for:

Doctora por la Universidad de Valladolid (España) /
PhD Degree from the University of Valladolid (Spain)

Dirigida por / Supervised by:

Dra. Miriam Reyes Serrano

RESUMEN

El estudio y la caracterización del proceso de combustión mediante el análisis de las inestabilidades generadas durante la propagación de la llama son fundamentales para garantizar la seguridad y el control de dichos procesos. Una combustión con excesivas inestabilidades en su frente de llama puede alterar su desempeño, dando lugar a comportamientos no deseados.

En esta Tesis Doctoral se abordan dos aspectos clave. En primer lugar, se realiza un “estudio de estabilidad del proceso de combustión”, enfocado en analizar el origen y la naturaleza de las inestabilidades intrínsecas a procesos de combustión de mezclas con diferentes proporciones de hidrógeno y metano. Los experimentos, llevados a cabo con frentes de llama de geometría esférica, se ejecutaron en una bomba de combustión a volumen constante (BCVC), utilizando fotografía Schlieren para registrar el proceso. En segundo lugar, se desarrolla un “estudio de estabilidad de la llama” en mezclas de etanol y aire, cuyo objetivo es analizar las consecuencias medibles del crecimiento de las inestabilidades en el proceso de combustión. Estas consecuencias incluyen la aceleración del proceso de combustión (incremento en la velocidad de combustión) debido al aumento de la superficie de la llama, así como la alteración de la morfología del frente de llama (un fenómeno conocido como “celularidad”). Ambos efectos son atribuibles al crecimiento de las inestabilidades, que pueden ser observadas y cuantificadas.

Para llevar a cabo ambos estudios, se presenta inicialmente una revisión bibliográfica que aborda los conceptos y parámetros empleados en investigaciones actuales sobre inestabilidades en llamas esféricas, además de su explicación física y las relaciones existentes entre estos.

La metodología para el “estudio de estabilidad en procesos de combustión” se centra en determinar cómo la proporción de los combustibles influye en el origen y desarrollo de las inestabilidades del frente de llama. También se analiza de manera independiente el comportamiento de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo propios de la combustión, así como sus contribuciones a la tasa de crecimiento de las inestabilidades, lo que permite identificar la naturaleza del proceso de combustión. Finalmente, se realiza un análisis cualitativo del fenómeno de celularidad (cuando las inestabilidades se desarrollan completamente en el frente de llama) y se identifican parámetros que podrían influir en su aparición. Por otro lado, para el “estudio de estabilidad de la llama” se propone un modelo basado en la herramienta estadística de “Diseño de experimentos” (diseño I-Óptimo), diseñado para predecir la aparición de celularidad en llamas de etanol. Los resultados obtenidos a partir de este modelo se comparan con estudios previos, con resultados experimentales y con imágenes obtenidas mediante fotografía Schlieren.

Palabras clave: combustión, inestabilidades, efecto termo-difusivo, efecto hidrodinámico, frente de llama, curvas de estabilidad neutra, celularidad, tasa de crecimiento de inestabilidades, número de Peclet, número de Lewis, fotografía Schlieren, Diseño Óptimo de Experimentos, velocidad de combustión.

ABSTRACT

The study and characterization of the combustion process through the analysis of instabilities generated during flame propagation are fundamental to ensuring the safety and control of such processes. Combustion with excessive instabilities in its flame front can alter its performance, leading to undesired behaviors.

This Doctoral Thesis addresses two key aspects. First, a "stability study of the combustion process" is conducted, focusing on analyzing the origin and nature of the intrinsic instabilities in combustion processes of mixtures with different proportions of hydrogen and methane. The experiments, carried out with flame fronts of spherical geometry, were performed in a constant-volume combustion bomb (CVCB), using Schlieren photography to record the process. Secondly, a "stability study of the flame" is developed for ethanol-air mixtures, aimed at analyzing the measurable consequences of the growth of instabilities during the combustion process. These consequences include the acceleration of the combustion process (increase in burning velocity) due to the increase in flame surface area, as well as alterations in the flame front morphology (a phenomenon known as "cellularity"). Both effects are attributable to the growth of instabilities, which can be observed and quantified.

To conduct both studies, an initial literature review is presented, addressing the concepts and parameters used in current research on instabilities in spherical flames, as well as their physical explanation and the relationships between them.

The methodology for the "stability study of combustion processes" focuses on determining how the fuel ratio influences the origin and development of flame front instabilities. The independent behaviors of the hydrodynamic and thermo-diffusive effects of combustion are also analyzed, as well as their contributions to the growth rate of instabilities, allowing the nature of the combustion process to be identified. Finally, a qualitative analysis of the cellularity phenomenon (when instabilities fully develop in the flame front) is conducted, and parameters that may influence its appearance are identified. On the other hand, for the "stability study of the flame," a model based on the statistical tool "Design of Experiments" (I-Optimal Design) is proposed, designed to predict the onset of cellularity in ethanol flames. The results obtained from this model are compared with previous studies, experimental results, and images obtained using Schlieren photography.

Keywords: combustion, instabilities, thermo-diffusive effect, hydrodynamic effect, flame front, neutral stability curves, cellularity, instability growth rate, Peclet number, Lewis number, Schlieren photography, Optimal Design of Experiments, burning velocity.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, quiero agradecer a mi directora, la Dra. Miriam Reyes Serrano, la constante dedicación y apoyo que me ha brindado, así como su inestimable ayuda en las correcciones y explicaciones requeridas durante la elaboración de este trabajo. También me gustaría dar las gracias los doctores Andrés Melgar Bachiller y Blanca Giménez Olavarría, tanto por el interés mostrado en todo momento por el avance del trabajo, como por las sugerencias y aportaciones propuestas para la mejora del mismo. Así mismo, muestro mi agradecimiento al Grupo de Investigación Reconocido MYER, de la Universidad de Valladolid, por la oportunidad brindada de realizar la Tesis Doctoral con ellos.

De la Universidad de Salamanca, expreso mi más sincero agradecimiento al doctor Juan Manuel Rodríguez Díaz por su apoyo y colaboración, en especial por su valiosa ayuda en la elaboración del modelo estadístico basado en el Diseño de Experimentos empleado en esta Tesis. Extiendo mi reconocimiento a la Universidad KU Leuven, en Lovaina (Bélgica), y particularmente al doctor Joshua Lacey, quien fue mi tutor durante la estancia en el extranjero que realicé en dicha institución. Le agradezco profundamente todas las correcciones, consejos y el apoyo incondicional que me brindó durante esos meses en Bélgica, los cuales representaron un aprendizaje y una experiencia de gran valor para mí.

Quiero destacar la ayuda que he recibido de todos mis compañeros de laboratorio, en especial de Pedro Gabana Molina y de Iván Velázquez Palencia (ambos doctorandos de esta Universidad), los cuales han puesto a mi servicio sus conocimientos de programación para la resolución de los problemas surgidos en este campo. También agradezco sus consejos y el ambiente de trabajo creado durante estos años de doctorado.

Considero de especial importancia recalcar todo el apoyo que he recibido de mis padres, hermanos y familiares, así como de mis amigos, los cuales han mostrado un gran interés durante el desarrollo de este trabajo. Quiero hacer una mención particular, dentro de este grupo, a dos personas muy especiales. En primer lugar, a mi esposo, pilar fundamental en este camino, Pablo Panadero Meseguer, cuyo apoyo diario y ánimo constante han sido esenciales para que este trabajo haya podido ver la luz. En segundo lugar, querría rendir homenaje a mi madre, la doctora en Filología Clásica M.^a del Henar Zamora Salamanca, la cual falleció el 12 de diciembre de 2023. Su partida ha dejado un hueco inmenso en nuestras vidas. Ella, a pesar de pertenecer a un ámbito académico completamente diferente al mío, siguió siempre con interés y entusiasmo todos mis avances en la investigación. Leyó y corrigió con infinita paciencia todos los textos científicos que he ido elaborando a lo largo de estos años de formación. Gracias, mamá por tu dedicación y amor, siempre estarás con nosotros.

Por último, no quiero dejar de mencionar a toda esa “multitud que nadie podía contar” de personas que siempre han estado apoyándome tanto personal como académicamente. A todos vosotros, gracias, sin vuestra ayuda, no me habría sido posible llevar a término esta Tesis Doctoral.

*A mi familia y en memoria de mi madre, la profesora y doctora M.^a del Henar Zamora
Salamanca (1961-2023). Sigue sonriéndonos desde el Cielo.*

ABBREVIATIONS AND NOMENCLATURE

Latin symbols

a	Non-dimensionalised amplitude of the perturbation ($a = A/r$)
a	Thermal expansion-dependent coefficient, σ , and dimensionless wavenumber, n
A_f or A	Flame front area
b	Thermal expansion-dependent coefficient, σ , and dimensionless wavenumber, n
c	Thermal expansion-dependent coefficient, σ , and dimensionless wavenumber, n
D	Mass diffusivity
E_a	Activation energy
e	Electron
g	Gravity acceleration (9.8 m/s^2)
h	Specific enthalpy
K	Stretch rate of a spherical flame
K_s	Contribution of the flame strain to the stretch rate
m	Mass
p	Instantaneous pressure or initial pressure
Q	Heat
Q_1	Coefficient related to thermal conduction dependent on thermal expansion, σ , and the dimensionless wave number, n
Q_2	Coefficient related to molecular diffusion dependent on thermal expansion, σ , and the dimensionless wave number, n
Q_3	Coefficient related to the effect of viscosity dependent on thermal expansion, σ , and the dimensionless wave number, n
R	Ideal gas constant (8.3145 J/molK)

R	Chemical radical
R	Relative radius of the spherical flame front
R_f or r	Spherical flame front radius
r_{cell}	Cellular radius
S_l	Laminar flame speed
S_n	Instantaneous flame speed
T	Temperature
t	Time
t_{comb}	Combustion time or combustion duration
t_{max}	Time of maximum cellular influence
$t_{\text{trigg_cell}}$	Cellular trigger time
U	Internal energy
u_1^0	Laminar burning velocity of an ideal flat flame
u_1	Laminar burning velocity in general
u_n	Instantaneous burning velocity
W	Work
y	Concentration of a chemical species

Greek Symbols

α	Thermal diffusion
β	Zeldovich number
γ_1	Coefficient depending on the thermal conductivity, $\tilde{k}(x)$, associated with Q_1
γ_2	Coefficient depending on the thermal conductivity, $\tilde{k}(x)$, associated with Q_2

γ_3	Coefficient depending on the thermal conductivity, $\tilde{k}(x)$, associated with Q_3
Δ	Parameter dependant on the coefficients a, b y c
δ_l	Flame front thickness
λ	Wave length
ν	Kinematic viscosity
ν	Frequency
ρ	Density
Σ	Instabilities growth rate at the flame front
σ	Thermal expansion coefficient
τ	Growth time of an instability
ϕ	Equivalence ratio
Ω	Coefficient dependent on thermal expansion, σ , and the dimensionless wavenumber, n. Associated with the thermo-diffusive effect
ω	Contribution of the hydrodynamic effect to the instabilities growth rate, Σ

Subscripts

0 o i	Initial moment of the combustion process
c o cr	Referred to the critical moment when $\Sigma=0$
cl or cell	Referred to the critical moment when the flame front becomes cellular
D o def	Reactant in deficiency
E o exc	Reactant in excess
max	Maximum value of the parameter.
min	Minimum value of the parameter.
b	Referred to the burned zone
u	Referred to the unburned zone

Superscripts

*	Excited electron, molecule, or radical
0	Referred to the ideal flat flame (one-dimensional)
κ	Referred to a variable that is evaluated with a stretch rate

Números adimensionales

Le	Lewis number
Le _{eff}	Effective Lewis number
Le _{eff} [*]	Critical Lewis number
Ma	Markstein number
n	Dimensionless wave number
Pe	Peclet number
Ze o β	Zeldovich Number

Symbols with Special Characters

A	Measure of the solidity of a fuel mixture, in Le _{eff}
Φ	Coefficient between the volume of the excess reactant and the volume of the limiting reactant
h	Planck constant ($4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$)
\mathcal{L}	Markstein length
\mathcal{L}_s	Markstein length referred to <i>strain</i>
\mathcal{L}_c	Markstein length referred to curvature
$\tilde{k}(x)$	Thermal conductivity expressed in terms of the dimensionless temperature T/T_u
v	Specific Volume
w	Reaction rate

Acronyms

CCS	Cellular Combustion Stage
CVCB	Constant Volume Combustion Bomb
LIF	Laser Induced Fluorescence
ICE	Internal Combustion Engine
MYER	Recognized Research Group on Thermal Engines and Renewable Energies (<i>Grupo de Investigación Reconocido de Motores Térmicos y Energías Renovables</i>)
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
SCD	Stage of Cellular Dominance

ÍNDICE (*TABLE OF CONTENTS*)

1. Introduction and Objectives.....	3
1.1. Introduction	3
1.2. Objectives of the Doctoral Thesis	5
1.3. Structure of the Thesis Document.....	6
2. State of the Art	13
2.1. Concepts of Combustion.....	13
2.1.1. Combustion in reciprocating internal combustion engines (ICE)	13
2.2. Ideal Flames: Flame Structure, Flame Geometry, and Characteristic Velocities of the Combustion Process.....	14
2.2.1. Ideal Planar Flame: Structure and characteristic velocities	14
2.2.2. Spherical Flame: characteristic velocities.....	16
2.3. Characterization of the Combustions Process Through Its Velocities	18
2.3.1. Optical techniques for Characterizing the Combustion Process	19
2.3.2. Model for measuring the Burning Velocity or the Flame Speed of a Combustion Process	24
2.4. Instabilities in the Combustion Process: Concept of Cellularity.....	25
2.4.1. Types of Instabilities and Their Origin	26
2.4.2. Instabilities in Spherical Flames	32
2.4.1. Theory of Instabilities and Cellularity Applied in Alternative Fuels	44
3. Instalación, metodología experimental y tratamiento de datos.....	53
3.1. Descripción de la instalación experimental y la instrumentación	53
3.1.1. Instrumentación bomba de combustión a volumen constante (BCVC) para la captación de los datos de presión	55
3.1.2. Instrumentación bomba de combustión a volumen constante (BCVC) para la captación de los datos de imágenes con la técnica Schlieren	57

3.2.	Metodología experimental.....	59
3.3.	Herramienta para el tratamiento de las imágenes Schlieren.....	63
3.4.	Herramienta para el tratamiento de los datos de presión: modelo de diagnóstico termodinámico de dos zonas.....	64
3.5.	Estudio de inestabilidades empleando el modelo de diagnóstico.....	67
3.5.1.	Función “CompruebaMaximo”.....	68
3.5.2.	Función “BuscaMaximo”.....	72
3.5.3.	Funciones “BuscaCorteIzquierda” y “BuscaCorteDerecha”.....	76
4.	Metodología del cálculo de inestabilidades	87
4.1.	Metodología del cálculo de la velocidad de combustión	88
4.1.1.	Metodología del cálculo de la velocidad de combustión laminar con el método de la presión, <i>ulp</i>	88
4.1.2.	Método de las imágenes.....	91
4.1.3.	Simulación cinética	92
4.2.	Metodología del estudio de estabilidad del proceso de combustión.....	94
4.2.1.	Definición de los límites de estabilidad en combustiones de morfología global esférica	95
4.2.2.	Clasificación de la naturaleza de las combustiones.....	99
4.2.3.	Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) y aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo.....	101
4.2.4.	Estudio paramétrico de la celularidad	101
4.3.	Metodología del estudio de estabilidad de la llama	102
4.3.1.	Elección y definición del parámetro o parámetros que caractericen la celularidad en llamas: parámetros celulares.	103
4.3.2.	Acotación del área de interés para el estudio de la celularidad en llamas y serie piloto de experimentos.....	106
4.3.3.	Cálculo de los parámetros celulares para la serie piloto de experimentos.....	110
4.3.4.	Selección del diseño de experimentos para el estudio de la celularidad en llamas. Definición de los puntos experimentales de ensayo.....	117

5.	Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión.	127
5.1.	Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión en combustiones de H ₂ /CH ₄	127
5.1.1.	Definición de los límites de estabilidad en combustiones de H ₂ /CH ₄ de morfología global esférica.....	128
5.1.2.	Clasificación de la naturaleza de las combustiones.....	132
5.1.3.	Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) y aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo.....	138
5.2.	Estudio morfológico de combustiones de H ₂ /CH ₄ y desarrollo de la celularidad en sus llamas.....	157
6.	Resultados del estudio de estabilidad de la llama.....	165
6.1.	Desarrollo del modelo predictivo de cada uno de los parámetros celulares seleccionados	167
6.1.1.	Resultados del modelo para los parámetros celulares dimensionales	168
6.1.2.	Resultados del modelo para los parámetros celulares adimensionales	176
6.2.	Comparación del modelo de celularidad con los resultados experimentales	178
6.2.1.	Comparación de los resultados del modelo con la evolución de la velocidad obtenida para diferentes condiciones de presión inicial y dosado relativo	179
6.2.2.	Comparación de los resultados del modelo con los resultados proporcionados por las imágenes de las combustiones obtenidas	193
6.3.	Comparación del modelo de celularidad con otros autores.....	197
7.	Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama	203
7.1.	Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular	206
7.1.1.	Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular en puntos de dosado relativo pobre o ligeramente rico	206
7.1.2.	Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular en puntos de dosado relativo rico menor a 1.3	211
7.1.3.	Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular en puntos de dosado relativo muy rico	215

7.2.	Estudio morfológico de llamas de etanol	217
7.2.1.	Morfología del frente de llama en llamas con aceleración en una etapa o lineal	219
7.2.2.	Morfología del frente de llama de una combustión con aceleración de transición entre una etapa y dos etapas.....	220
7.2.3.	Morfología del frente de llama de una combustión con aceleración en dos etapas	221
7.2.4.	Morfología del frente de llama de combustiones con aceleración de transición entre dos etapas y etapas múltiples o de tipo progresivo.....	223
7.2.5.	Aceleración de etapas múltiples o progresiva.....	224
8.	Conclusions of the Thesis.....	233
8.1.	General Conclusions.....	233
8.2.	Specific Conclusions	235
8.2.1.	Specific conclusions from the "combustion process stability study" in hydrogen and methane combustion processes	236
8.2.2.	Specific conclusions from the "study of flame stability" in ethanol combustion processes	237
8.3.	Future work	240
9.	Bibliography	243

CHAPTER 1:

INTRODUCTION AND OBJECTIVES

1. INTRODUCTION AND OBJECTIVES

1.1. Introduction

Currently, the world is facing a widespread energy crisis primarily due to a nearly exclusive reliance on petroleum-derived fossil fuels and their significant environmental impact from emissions generated during combustion. The transportation sector is responsible for almost 30% of the total CO₂ emissions in the European Union (EU), with this gas being the main contributor to the greenhouse effect (see Figure 1.1). A potential solution lies in replacing high-carbon-content fuels, which are responsible for CO₂ generation in combustion products, with alternative fuels that have low or zero carbon content, such as hydrogen (H₂), natural gas (whose main component is methane CH₄), or ammonia (NH₃). These alternatives are more environmentally sustainable.

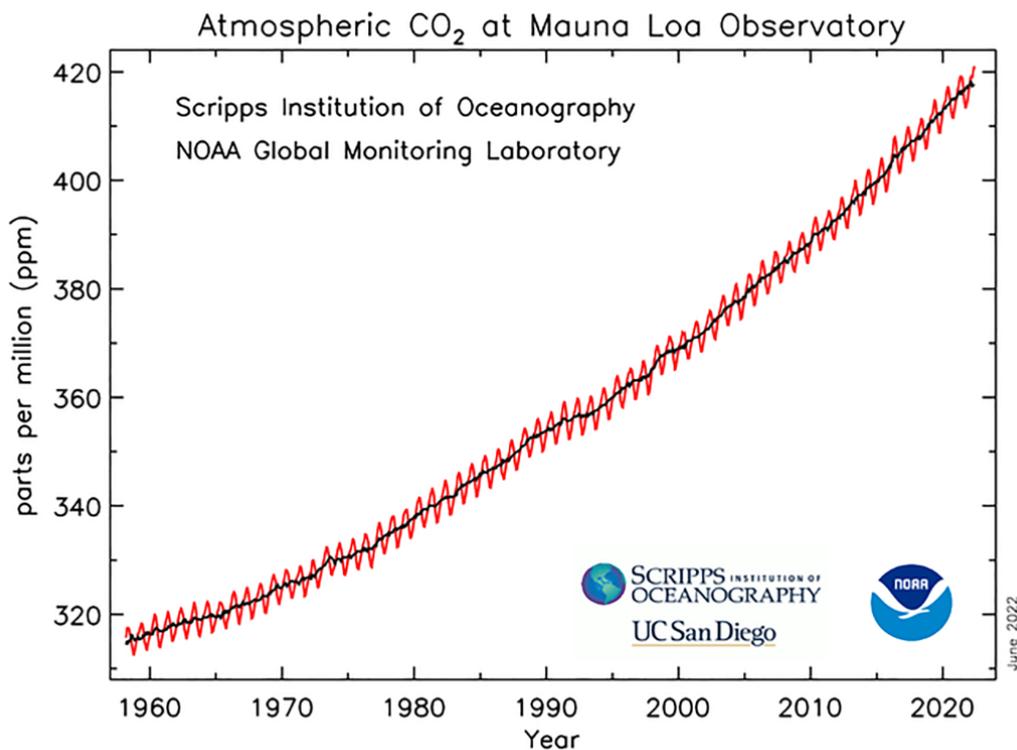


Figure 1.1. Average CO₂ accumulated in the atmosphere over the recent years¹

The transition to these fuels requires adaptations in internal combustion engines as well as in distribution systems. An intermediate solution is dual combustion, which combines highly polluting fuels like diesel with sustainable options such as hydrogen or ammonia, allowing for the gradual replacement of traditional fuels. Another path toward

¹ <https://www.noaa.gov/news-release/carbon-dioxide-now-more-than-50-higher-than-pre-industrial-levels> (accessed 2024 Dec.)

decarbonization includes the use of renewable carbon-based fuels, such as bioethanol, derived from biomass or organic waste.

Bioethanol, produced from cellulose-rich crops like sugarcane or corn, offers significant advantages for internal combustion engines (ICEs). This fuel achieves net-zero carbon emissions because the CO₂ released during combustion was previously absorbed by plants during their growth. This solution supports a circular economy while promoting the agricultural sector. Biomass is widely used as a clearly organic fuel source in rural settings for cooking and heat production. Instead of being used directly as fuel, which can lead to negative consequences like CO and particulate emissions, the combustion of this solid fuel is carried out in multiple stages. In the first stage, gasification transforms it into a gaseous fuel (biomass producer gas, BPG), which consists of CO, CO₂, H₂, CH₄, and C₂H₄ in varying proportions depending on the nature of the biomass. This gaseous fuel is then burned, making the process much more controlled and safer than traditional methods.

However, before introducing an alternative or new fuel into conventional engines (or any type of thermal engine or burner), it is crucial to study its behavior under controlled conditions to isolate external factors like turbulence caused by piston movement. Constant Volume Combustion Chambers (CVCCs) enable the analysis of mixtures under laminar flow, facilitating a detailed study of the fuel's properties and combustion processes.

A fundamental parameter for characterizing a fuel is the calculation of its burning velocity, which reflects the rate at which reactants are converted into products. Correlations and databases of laminar burning velocities for each fuel exist and are used as the basis for calculating turbulent burning velocities (as found in real engines) or as input for combustion process simulations. Therefore, determining the actual burning velocity in the absence of external turbulence is essential. In this context, the study of intrinsic instabilities in combustion processes becomes highly relevant.

Even when combustion occurs under laminar conditions, without external turbulence, spontaneous perturbations can arise due to various phenomena such as acoustic vibrations or pressure waves [1]. Intrinsic combustion effects can either amplify or dampen these perturbations, depending on the combined action of these effects [2], [3]. The phenomena that can cause instabilities in the flame front (under laminar conditions) of a premixed combustion process are threefold: volumetric forces, hydrodynamic effects, and thermo-diffusive effects [4]. Studying instabilities in combustion processes is particularly interesting when they reach a size significant enough to manifest physically, both thermodynamically and visually, in the combustion process (see Figure 1.2). This phenomenon is called "cellularity" and can significantly impact the burning velocity, a parameter that, as noted, is critical for fuel characterization.

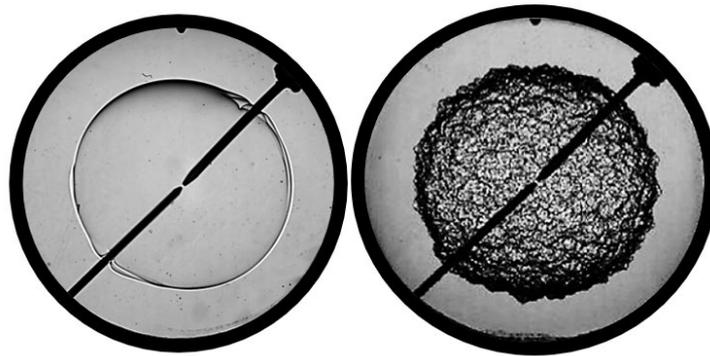


Figure 1.2. Spherical flame without visible instability development (left), spherical flame with visible instability development, cellular flame (right).

Chamber (CVCC) with a cylindrical geometry, aim to analyze the stability of the combustion process as well as flame stability. The stability analysis evaluates the development of combustion inherent instabilities, including their origin, nature (thermo-diffusive or hydrodynamic), and growth. Meanwhile, the flame stability analysis examines the measurable and visible consequences of these instabilities on the flame front. These factors are critical to ensuring safe and efficient combustion, particularly in ICE applications.

This PhD Thesis was conducted within the Recognized Research Group Thermal Engines and Renewable Energies (in Spanish *Motores Térmicos y Energías Renovables, MYER*) at the University of Valladolid. This research group has extensive experience in characterizing combustion processes in both engines and constant-volume combustion chambers (CVCCs). In recent years, the group has studied various alternative fuels, such as methane, hydrogen, synthesis gas, and producer gas.

One of the CVCC setups used by the MYER group features optical access, allowing the observation of flame front development during combustion processes with a high-speed camera. Morphologies like those shown in Figure 1.2 are observed in these images, depending on the instabilities generated.

1.2. Objectives of the Doctoral Thesis

This section defines the objectives pursued in this Doctoral Thesis, situated within the broader context of studying the combustion of alternative fuels for use in internal combustion (IC) engines. Specifically, it focuses on the study of laminar combustion, emphasizing the influence of intrinsic instabilities—those arising in the absence of external turbulence—that can significantly alter the behavior of the combustion process.

Within this framework, two primary objectives are established for this Doctoral Thesis. The first objective is to analyze and study the influence of hydrogen on the origin, development, and nature of instabilities that occur during the combustion process. The second primary objective is to quantitatively analyze the visible consequences of

instabilities in ethanol flames, focusing specifically on the study of the cellularity phenomenon in such flames.

To achieve these primary objectives, the following secondary objectives are established for this Thesis:

- Review of the state of the art in analyzing instabilities in spherical flames: parameters and concepts used in the most significant and recent research studies.
- Explanation of the physical meaning of these parameters and concepts specific to stability studies, as well as the possible relationships between them.
- Study of the origin and nature of instabilities developed in H_2/CH_4 /air combustions with varying H_2/CH_4 ratios.
- Analysis of the influence of hydrogen on the nature and development of these instabilities.
- Investigation of the parameters with the greatest influence on the emergence of a cellular flame front (when instability development becomes visible and modifies the flame morphology — cellularity — see Figure 1.2).
- Establishment of objective criteria for analyzing cellularity in flames and proposing a predictive model for cellularity in ethanol flames based on these criteria.
- Utilization of an analytical program capable of "measuring" cellularity in flames through experimentally obtained images.

1.3. Structure of the Thesis Document

This Doctoral Thesis is structured into 8 chapters, with the first chapter serving as the Introduction and outlining the objectives of the research, and the eighth chapter containing the bibliography consulted and studied for the development of the research. The first two chapters are written in English for more diffusion. Chapter 2 contextualizes the research conducted, providing a review of the state of the art, from general combustion concepts to more specific topics directly related to the objectives of this Thesis. This includes advanced and current theories and research on combustion instabilities, which are necessary for understanding and following the results obtained. The purpose of this chapter, which presents the state of the art, is also to provide explanations and physical interpretations of the concepts discussed throughout. Diagrams (many of which are original) are used to illustrate and establish relationships between the parameters and concepts explained, many of which are not explicitly found in the literature.

1. Introduction and Objectives

Chapters 3 to 7 are written in Spanish because the main information can be found in the papers already published and listed below. Chapter 3 describes the experimental setup used to carry out the combustion studies, as well as the experimental methodology followed and the equipment used for data acquisition. It also details the tools used for data analysis and the extraction of results.

Chapter 4 develops three methodologies aimed at studying different aspects of the combustion process. The first methodology describes different methods for determining laminar combustion velocity (a parameter whose importance has already been highlighted). The second methodology outlines the approach used to achieve the first primary objective of the Thesis: the study of the nature and origin of instabilities in combustion processes. Finally, the third methodology is focused on the second primary objective of the Thesis: the study of cellularity in flames (the measurable consequences of instabilities).

Chapters 5, 6, and 7 encompass the calculations, results, and conclusions obtained throughout the course of this Thesis. Chapter 5 presents the results of the second methodology, focusing on the study of the origin of instabilities and the nature of the combustions, while Chapters 6 and 7 present the results of the third methodology, which aimed to study the cellularity in flames. It is worth noting that the results of the first methodology, related to the combustion velocity, are not explicitly shown in the document, but are included in the articles appended to the main document, which were developed and published during the course of this Thesis. The results obtained during the preparation of this Thesis and presented in Chapters 5 and 6, except for those in Chapter 7, have been published in high-impact journals such as *Fuel* or *International Journal of Hydrogen Energy* (papers 1, 2, and 4 of the lists below). Some of the results in Chapter 7 were presented at two international conferences: Imeko (Hamburg) and the 2024 Meeting of the Spanish Section of the Combustion Institute (Madrid). The results of Chapter 7 are planned to be published in a high-impact scientific journal in the short term.

Chapter 8 presents the general and specific conclusions of the Doctoral Thesis. This chapter is written in English to ensure greater clarity and wider dissemination to an international audience. Finally, Chapter 9 gathers the bibliography cited along the document of this Thesis.

The papers appended to this Thesis and which support the results of Chapters (5 to 6) are listed (from the newest to the oldest):

Table 1.1. Papers published in journals as a result of the research conducted in this Thesis.

	Title	Authors	Year	Journal
1	<i>Characterization of cellular structure</i>	Sastre Zamora, Rosaura	2025	<i>Fuel</i>

1. Introduction and Objectives

	<i>appearance in ethanol expanding spherical flames</i>	Reyes Serrano, Miriam		
		Rodríguez Díaz, Juan Manuel		
		Lacey, Josh		
2	<i>Impact of cellularity in the flame front on the burning velocity of ethanol/air flame in constant volume combustion bomb</i>	Sastre Zamora, Rosaura	Accepted Jun 2024	<i>Measurement (journal of the International Measurement Confederation)</i>
		Reyes Serrano, Miriam		
		Do, Hong-Quan		
		Lefort, Benoîte (†)		
3	<i>Combustion performance and flame front morphology of producer gas from a biomass gasification-based cookstove</i>	Reyes Serrano, Miriam	2024	<i>Fuel</i>
		Pérez Bayer, Juan Fernando		
		Sastre Zamora, Rosaura		
4	<i>Study and characterization of the instabilities generated in expanding spherical flames of hydrogen/methane/air mixtures</i>	Reyes Serrano, Miriam	2022	<i>International Journal of Hydrogen Energy</i>
		Sastre Zamora, Rosaura		
		Tinaut Fluixá, Francisco Vicente		
		Rodríguez Fernández, José		
5	<i>Experimental, kinetic modeling and morphologic study of the premixed combustion of hydrogen/methane mixtures</i>	Reyes Serrano, Miriam	2022	<i>Energies</i>
		Sastre Zamora, Rosaura		
		Giménez Olavarría, Blanca		

1. Introduction and Objectives

Sesma Gutiérrez,
Clara

1. Introduction and Objectives

CHAPTER 2:

STATE OF THE ART

2. STATE OF THE ART

In this chapter, the state of the art in the investigation of various aspects of the combustion process is discussed. Specifically, key concepts of the combustion process in the laminar regime are presented, along with the methods by which they are studied.

Firstly, some of the crucial aspects of combustion are explained. Secondly, the flame structure is presented, including the different flame types and the velocities that characterize the process. Thirdly, some of the methods used in the literature to calculate burning velocity are discussed. The final two points of this chapter focus on the instability phenomena that occur in combustion processes and the tools utilized to study them.

2.1. Concepts of Combustion

2.1.1. Combustion in reciprocating internal combustion engines (ICE)

The combustion process is defined as an exothermic chemical reaction that occurs when a substance oxidizes in the presence of oxygen, releasing a significant amount of energy under specific conditions of pressure and temperature. These substances, known as fuels, can exist in various states of matter: solid, liquid, or gas [5], [6].

The significance of the combustion process lies in the potential applications of the released energy, which can be harnessed for producing heat, electricity, mechanical work, and the synthesis of various compounds [5]. This Doctoral Dissertation is developed within the context of combustion processes occurring in reciprocating internal combustion engines (IC engines), where the primary objective is to convert the chemical energy contained in the fuel into mechanical energy [7]. Based on the type of combustion within the engine, they can be classified into two main categories: compression-ignition engines (CI engines) and spark-ignition engines (SI engines) [5], which are explained in detail below.

In compression ignition engines (IC engines), combustion is not initiated by any external agent; instead, the necessary pressure and temperature conditions for the self-ignition of the mixture are sought within the thermodynamic cycle itself. This self-ignition marks the initial stage of this type of combustion. Following this first phase, new ignition nuclei develop, as well as pre-mixed combustion due to the advancement of different flame fronts, with both processes potentially occurring simultaneously. As a final stage, the characteristic diffusion combustion of this engine takes place [5], [6]. Due to its nature, this combustion exhibits both temporal discontinuities (due to self-ignition processes) and spatial discontinuities (due to local pre-mixed combustion) [5]. To control the initial self-ignition of the mixture, air without fuel is first introduced into the intake, compressed, and when ideal conditions for self-ignition are reached (at the end of the compression stroke), fuel is injected into the chamber. After a delay time, the oxidation process of the mixture begins [6]. Compression ignition engines have higher compression ratios than spark-

ignition engines because, in the former, it is necessary to achieve more extreme thermodynamic conditions for the initial self-ignition process to occur.

2.2. Ideal Flames: Flame Structure, Flame Geometry, and Characteristic Velocities of the Combustion Process

After introducing the concept of combustion, in this section the specific structure of the flame in a laminar combustion process is detailed. It starts with the simplest case, that of an ideal planar flame, and then it introduces aspects of real flames that can affect the combustion process and alter the flame structure.

2.2.1. Ideal Planar Flame: Structure and characteristic velocities

The ideal (laminar) planar flame is characterized by its one-dimensional propagation. The planar flame moves forward at a certain velocity, S_L^0 , referred to as the laminar flame speed. In analyzing the ideal flat flame, several simplifications and assumptions are made to isolate the dynamics of laminar combustion from other external factors. Figure 2.1 presents the structure of an ideal flat flame front, which serves as the boundary between the unburned (reactant) zone, denoted by the letter u , and the burned (product) zone, denoted by the letter b . Within this front, two distinct regions can be identified: the preheating zone, with a width h , where the reactants are heated from T_u to a temperature close to the adiabatic flame temperature, T_b^0 , and the reaction zone, significantly narrower than the preheating zone, with width r , where the exothermic reaction occurs, converting the reactants into products [5], [8]. A schematic of the described flame front is presented in Figure 2.1 following the indications found in the research made by Law et al. [9] in the year 2000.

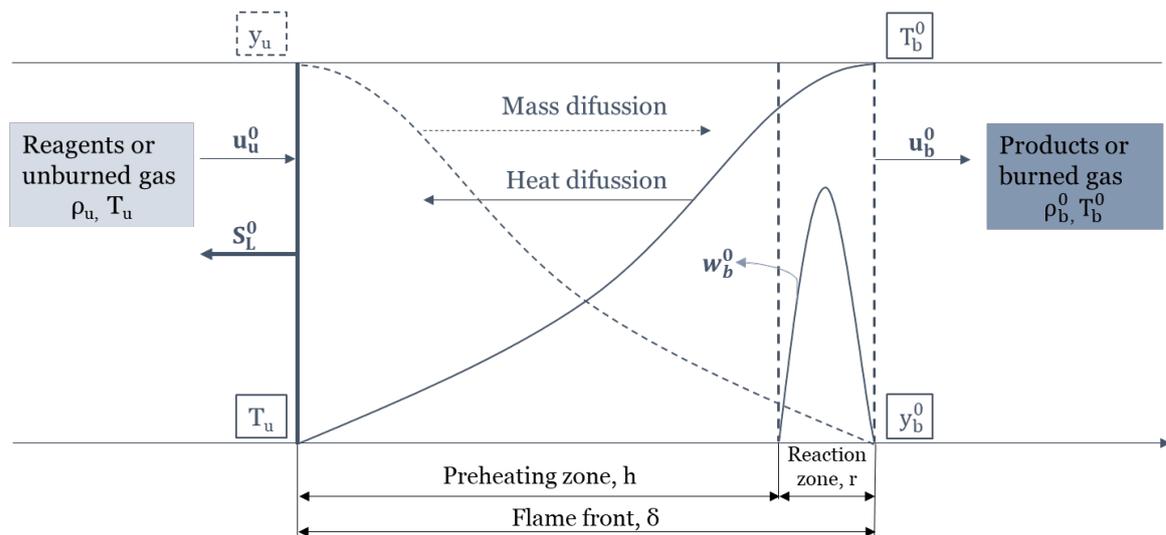


Figure 2.1. Flame structure of an ideal planar flame.

In the figure above, several velocities are represented, detailed as follows. The subscript "0" indicates that these values correspond to the ideal flame. First of all, and, as

previously mentioned, the flame travels at a speed of S_L^0 , taking the hypothetical “walls” of the chamber as the reference system. Furthermore, if the flame front is used as the reference system, the velocity at which the reactants or unburned gases approach the flame front is u_u^0 , which is also known as the ideal laminar burning velocity of a fuel, when referring to ideal planar flames (denoted as u_l^0); laminar burning velocity, when referring to a combustion process in laminar regime (planar or other geometries, u_l); or burning velocity, when referring to all the combustion process in general (u_n). Independently of what geometry or case it is considered, the general form of the burning velocity is expressed in Equation (2.1) (see [3], [10]).

$$u_n = \frac{\dot{m}_b}{\rho_u \cdot A_f} \quad (2.1)$$

It depends on the burned mass flow rate (\dot{m}_b [kg/s]), the density of the unburned gas (ρ_u [kg/m³]) and the flame front area (A_f [m²]), which is the area of mass exchange between the unburned gas and the burned gas.

Due to mass conservation at the flame front, the two velocities mentioned—the ideal laminar flame speed and the laminar burning velocity—are related by the densities of the two zones (burned and unburned) as shown in the following Equation (2.2).

$$\begin{aligned} \dot{m}_u = \dot{m}_b &\Rightarrow \rho_b \cdot u_b \cdot A_f = \rho_u \cdot u_u \cdot A_f \Rightarrow \\ \rho_b \cdot u_l^0 \cdot A_f &= \rho_u \cdot S_L^0 \cdot A_f \Rightarrow \left[u_l^0 = \frac{\rho_u}{\rho_b} S_L^0 \right] \end{aligned} \quad (2.2)$$

Inside the "flame front," in the preheating zone, heat and mass diffuse in opposite directions. On the one hand, mass diffusion flows from the unburned zone to the burned zone. The concentration of the limiting reactant in the unburned zone is y_u ; this concentration decreases through the preheating zone until, after passing through the reaction zone, it reaches $y_b^0 = 0$. On the other hand, heat diffusion flows from the burned gas zone—characterized by higher thermal energy due to the exothermic reaction (T_b^0)—towards the unburned gas zone, providing the latter with the appropriate conditions for the reaction to take place.

in the reaction zone, where conditions are made favorable by the preheating zone, the chemical reaction of oxidation (combustion) takes place. The reaction speed is denoted by w_b^0 . In the preheating zone, convection and diffusion dominate, while in the reaction zone, diffusion and chemical reactions are the primary processes at play. The reaction rate w_b^0 depends on the activation temperature and the adiabatic flame temperature. The activation energy is quantified by the Zeldovich number Ze or β , which compares the thermal energy available in the burned products—related to T_b^0 —to the energy required

for the combustion reaction to occur (i.e., the activation energy of the reaction, E_a). The Zeldovich number is expressed in Equation (2.3), where R is the ideal gas constant [11].

$$\beta = \frac{E_a(T_b^0 - T_u)}{R(T_b^0)^2} \quad (2.3)$$

The basic concepts regarding the flame front of a planar flame have been explained; the next section introduces and explains new concepts that emerge in the combustion process when the geometry of the flame is no longer planar but spherical.

2.2.2. Spherical Flame: characteristic velocities

A spherical flame is a type of flame in which combustion spreads uniformly in all directions from a central point, forming a spherical flame front. As the combustion process progresses, reactants in the outer region of this sphere are consumed as they pass through the flame front, transforming into products that are contained within the inner region of the sphere. Due to the high temperatures generated by combustion, the inner region expands as gases produced by the reaction increase in volume. Figure 2.2 provides an idealized view of flame propagation, though real-world factors like gravity and airflow can alter this perfect symmetry.

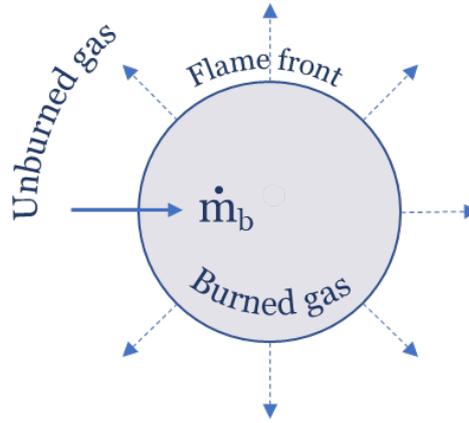


Figure 2.2. Outwardly expanding idealized spherical flame.

For the case of a spherical flame, the speed at which the flame front propagates is determined by the derivative of the radius of the sphere (r) with respect to time, as is explained in Equation (2.4).

$$S_L^K = \frac{dr}{dt} \quad (2.4)$$

For spherical flames, S_L^K is used instead of S_L^0 , as seen in the latter Equation, because K denotes the stretch term, which encompasses the influence of strain and curvature on

the development of the combustion process. In Equation (2.4), the laminar flame speed represented is “stretched” because it contains the strain and curvature effects. The relationship between the “stretched” flame front speed, S_L^K , and the “unstretched” speed (i.e., removing the influence of stretch, as in the ideal flat flame), S_L^0 , is shown in the following Equation (2.5). This relationship was first determined using the Markstein length (1964) [12], denoted by \mathcal{L} .

$$S_L^K = S_L^0 - \mathcal{L}K \quad (2.5)$$

On the one hand, the formula that defines stretch for a general geometry is presented in the following Equation (2.6), where A represents the area of the flame front [13].

$$K = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (2.6)$$

When applied to a spherical flame geometry, it takes the following form: $K = \frac{2}{r} \frac{dr}{dt}$

The two components of the stretch term are the curvature of the spherical flame front itself and the strain experienced due to the expansion caused by the products of the combustion process. Equation (2.7) shows the two contributions.

$$K = S_L^0 \kappa - K_s \quad (2.7)$$

Where, as explained, S_L^0 is the laminar flame speed of an ideal planar flame, κ is the curvature effect—which decreases with the radius—, and K_s represents the strain caused by the expansion of the flame.

On the other hand, the Markstein length—which could be defined as the sensitivity of flame propagation to stretch— can be non-dimensionalized by the thickness of the flame front (δ_l). This is known as the Markstein number (Ma) [14] as it shows Equation (2.8).

$$Ma = \frac{\mathcal{L}}{\delta_l} \quad (2.8)$$

The following Figure 2.3 shows the ratio of the stretched to the unstretched laminar flame speed depending on the Markstein length and the stretch, considering the Equation (2.6).

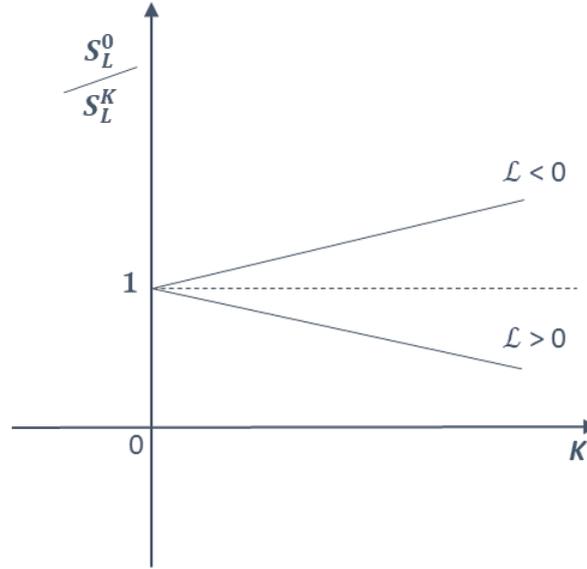


Figure 2.3. Influence of stretch on flame front speed.

In the previous figure, the influence of stretch on the flame front speed is observed depending on the value of the Markstein length, which in turn is a function of the fuel (for hydrocarbon-air mixtures, it typically has a positive value, while the sign changes for certain hydrogen-air combustion processes [15]).

In recent analyses of spherical flames, it has become common to distinguish between two Markstein lengths, one for each factor encompassing stretch (curvature and strain). Therefore, the relationship between the unstretched laminar flame speed (S_L^0) and the actual flame speed with stretch (S_L^K) is as follows in Equation (2.9). Where \mathcal{L}_s is the Markstein length representing the sensitivity of velocity to strain, and \mathcal{L}_c is that for curvature.

$$S_L^K = S_L^0 - \mathcal{L}_s K - \mathcal{L}_c S_L^0 \kappa \quad (2.9)$$

These two Markstein lengths are consequently associated with two Markstein numbers, identified as M_c for the curvature and M_s for the strain [16].

2.3. Characterization of the Combustions Process Through Its Velocities

Once the concept of combustion and the different velocities that characterize it have been introduced, this section explains the different ways to characterize this event. There are various ways to characterize a combustion process depending on the method and resources used, but all of them aim to determine the most significant parameters that define how a combustion is developing: thermodynamic conditions, combustion speeds, instabilities, etc. Below, the characteristics of different characterization techniques are

outlined, distinguishing them into two main groups: optical techniques (shadowgraph, Schlieren, LIF, PLIF, and chemiluminescence) and modeling techniques (predictive and diagnostic).

2.3.1. Optical techniques for Characterizing the Combustion Process

The optical techniques for characterizing different velocities of the combustion process are generally divided into conventional optical techniques and advanced optical techniques.

2.3.1.1. Conventional Optical Techniques

On the one hand, conventional optical techniques aim to define the combustion process by analyzing the morphology, position, and propagation of the flame front over time. To achieve this, these technologies measure the electromagnetic radiation emitted during combustion or the change in the distribution and refraction of a light beam passing through the chamber during fuel oxidation. The principle of operation of each of these technologies is summarized below.

In the first place, there is a technique that involves detecting a type of electromagnetic radiation, different from that generated by thermal emissions, emitted by molecules that are electronically excited during the combustion process as they return to their fundamental energy state. This radiation is referred to as chemiluminescence [17]. Molecules or atoms can absorb, store, and emit energy in various forms. When a molecule receives an energy input (whether thermal, photonic, or chemical in nature), this energy can be "stored" by exciting the electrons from their ground state (low energy level) to a higher energy state; it is then said that the electron, and consequently the molecule or atom, are in an "excited" state (excited chemical radical) [18]. The energy stored in that electron can be released in different ways: either by reacting or colliding with other chemical species, or through the spontaneous emission of a photon. In Figure 2.4, a very simplified and schematic representation is shown, illustrating the photonic emission that would occur spontaneously when the chemical radical returns to its lower energy (ground) state.

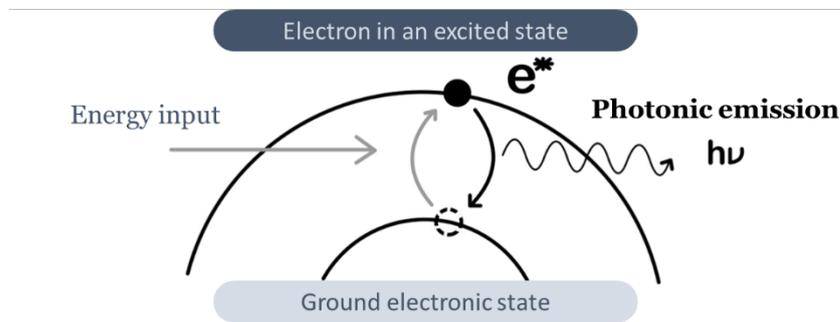


Figure 2.4. Spontaneous electronic emission.

Equation (2.10) shows another way to express this same spontaneous emission [19]:



Where R^* is the excited radical; R is the radical in its ground state; $h\nu$ is the photonic emission (energy of the photon released): h is the Planck's constant [$h = 4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$] and ν is the frequency [Hz].

If an excited molecule is the product of a chemical reaction, the spontaneous electromagnetic radiation it emits (in the form of a photon) as it releases absorbed energy is known as chemiluminescence [17]. In a combustion process, these chemical reactions (or formation mechanisms) mainly occur at the flame front. Each molecule in an excited state (excited chemical radical) produces chemiluminescent emission within a specific wavelength range, allowing it to be distinguished from other radicals. The chemical radicals of greatest interest in a combustion process are as follows: OH^* , CH^* , C_2^* y CO_2^* («*» indicates that is the excited state) [20]. The combustion process can be characterized by identifying the relationships between the chemiluminescent emissions of these radicals and thermodynamic or kinetic parameters.

As previously explained, once formed, these radicals can return to a lower energy state through various pathways. The most widely studied pathway in flame characterization is the spontaneous photon emission that occurs when radical concentrations exceed equilibrium (chemiluminescence). The other two mechanisms of energy loss, as already mentioned, are molecular collisions (quenching) and reactions with other species. However, this last mechanism is generally disregarded by most authors (see [20], [21], [22]).

Second, there are optical techniques based on the deviation of light in a heterogeneous medium. These techniques use methods such as recording, projection, and photography to characterize the flame's propagation, morphology, and inhomogeneities produced in the medium [20]. One of these technologies is shadowgraphy, which employs a light beam that directly passes through the study field and is projected onto a surface. The resulting image is a shadow of the medium of interest, in which the change in the direction of the light rays can be seen as they pass through this space. This deviation occurs due to a variation in the medium's density (such as the one produced during combustion, where the burnt products have a lower density than the unburned mixture), which leads to a change in the refractive index of the space of interest [23].

Figure 2.5 shows shadowgraph images captured on the projection surface when the beam passes through a uniform medium (a) and through a medium with non-homogeneous density due to combustion (b), illustrating the explanation provided above.

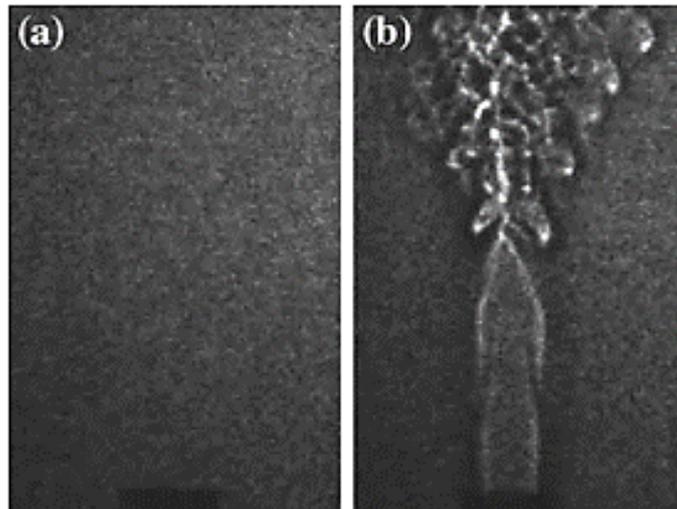


Figure 2.5. Example of the shadowgraph technique: (a) Initial image of a homogeneous medium with a uniform refractive index (before combustion). (b) Photograph of the shadow produced by the change in density due to the onset of combustion. Image obtained from [23].

The shadowgraph technique stands out for its simplicity, as it merely captures the resulting shadow of the system, without the need for any optical treatment of the light beam or the image. This makes the installation required for its application minimal. However, a disadvantage is the lack of sharpness and sensitivity, which makes it unsuitable for very detailed analysis of a flame front [24].

Following the line of the shadowgraph method, there is the Schlieren technique, which is currently the most widely used optical combustion imaging method. It is the main optical characterization technique for the combustions analyzed in this Thesis, it is explained in more detail in the following Section.

2.3.1.2. Schlieren Photography

Building on shadowgraph photography, as previously mentioned, the Schlieren technique enhances its predecessor by adding optical treatment and image sharpness (removing background light detected) without excessively complicating the installation required by the previous method [20], [24]. For this reason, it is one of the most widely used optical diagnostic techniques.

The precursor to what is now known as “Schlieren photography” was developed by Toepler, who, in 1864, created a photographic system to capture inhomogeneities in transparent media using a light source, a lens, and a camera. This setup, incorporating a knife-edge, captured only the rays deflected by changes in medium density, thus eliminating background radiation [17]. A schematic of Toepler’s setup is shown in Figure 2.2. Today, this configuration remains largely unchanged, with Toepler’s lens replaced by a pair of concave mirrors and a shutter functioning as the knife-edge.

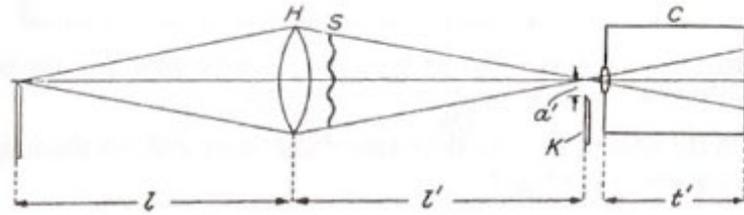


Figure 2.6. Toepler's Schlieren setup configuration. H: lens, S: study area, K: knife-edge, C: camera [17].

The basic operation of this technique applied in the combustion field is as follows: a light beam is generated, which passes through the rays perpendicularly to the study space (a combustion chamber), reaching an edge that eliminates the background radiation. Finally, the beam reaches the high-speed camera, which captures the shadow of the rays deflected due to their interaction with the flame front in the combustion process occurring in the chamber[25]. The light beam is generally not directed directly to the combustion chamber, but collimating mirrors are used to orient it perpendicularly to the study area

The Schlieren method is widely used for studying flames in combustion processes because it allows for high-clarity imaging. This technique makes it possible to capture the morphology, instabilities, and cellularity of the flame front, as well as its propagation speed, thus enabling the characterization of the fuel being used. Measuring these parameters would be very difficult, or even impossible, with techniques that do not allow combustion visualization.

Numerous studies use Schlieren imaging to investigate a flame front when its morphology resembles a sphere[2], [3], [4], [26], [27]; In this case, it is recalled that the flame front propagation speed is defined as the time derivative of the flame front radius $S_n = dr/dt$. To determine S_n using Schlieren photography, the difference in radii between two consecutive images is measured, over a known time interval, and the time derivative is approximated by the ratio of the differences, $\frac{\Delta R_f}{\Delta t}$.

An area of interest in the study of flames is determining the influence of different parameters on their morphology. Gu et al.[28] conducted a study where the morphology of a flame in a combustion process developed in Helen-Saw cells (a device consisting of two parallel plates with a very small separation gap, primarily used to study two-dimensional flows) was investigated using Schlieren imaging. In this study, the influence of the equivalence ratio and the plate separation on the development of the flame is determined; the variations in its morphology with changes to these two parameters are clearly visible thanks to the photographic technique used. Other studies extend the use of this technique beyond the general morphology of the flame, applying it for the characterization of the shape of a fuel jet, particularly for fuel injection in compression ignition engines (CIE) or direct injection engines (see [29], [30]).

In flat or spherical flames, the study of the morphology of the flame front focuses primarily on analyzing the instabilities that appear during combustion, which result in the wrinkling of the front (which would ideally be smooth). An example of this application is the research conducted by D. Bradley and C. Harper in 1994 [26], where Schlieren images of several explosions in a combustion chamber were studied to determine, among other things, the propagation speed of cracks or discontinuities generated in the flame front. According to the study, these cracks serve as the starting point for the propagation of instabilities across the entire area of the flame.

There are studies that, following the work of D. Bradley and C. Harper, aim to characterize the influence of different parameters on the appearance of these instabilities in the flame front. An example of such studies is that of Tinaut et al. [3], which seeks to establish a relationship between the initial thermodynamic conditions of combustion (pressure and temperature) and the appearance of a cellular front (non-smooth) as well as the surface density of these cells. Another example can be found in the research of Reyes et al. [2], which attempts to correlate the percentage of hydrogen and the fuel mixture ratio with the appearance of cellularity in the spherical flame front. Some of their images can be seen in Figure 2.7, where combustion with the highest cellularity occurs with a hydrogen percentage of 50% and a fuel mixture ratio of 0.9.

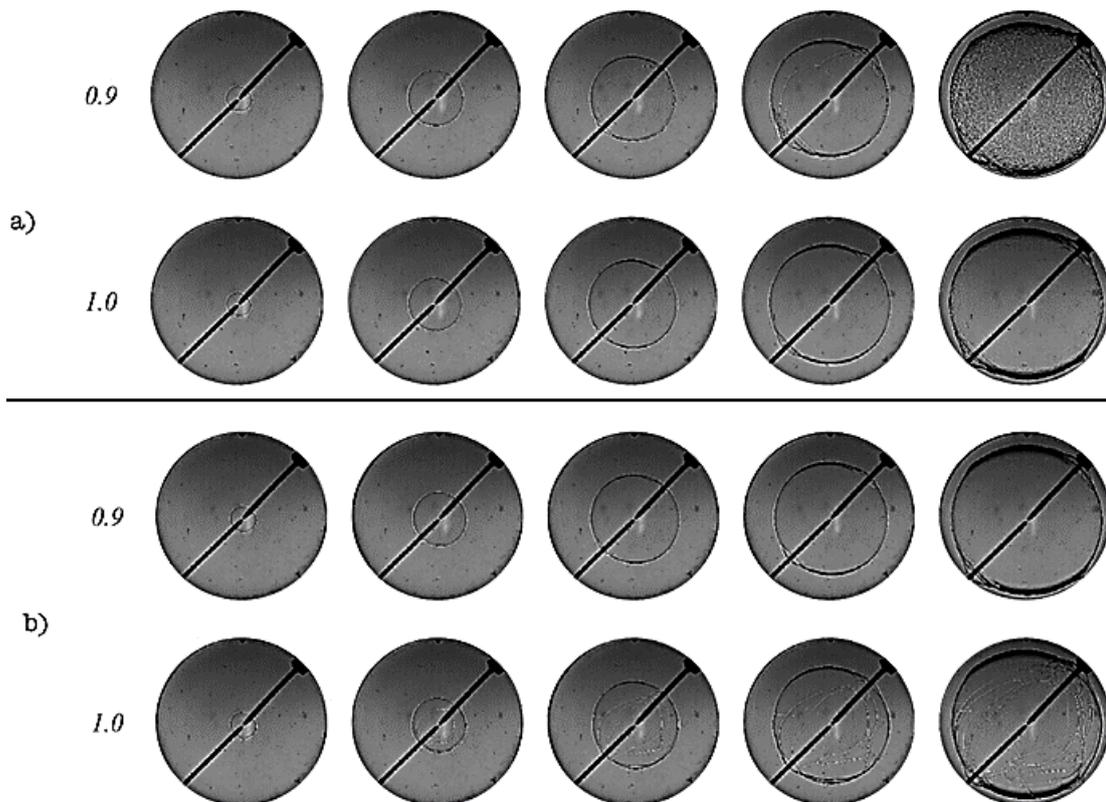


Figure 2.7. Schlieren photography of Syngas mixtures: a) 50% H_2 and 50% of CO; b) 15% H_2 and 75% of CO, for equivalence ratios equal to 0.9 and 1. Adapted from [2].

2.3.1.3. Advanced Optical Techniques

On the other hand, Advanced optical techniques refer to laser-induced fluorescence (LIF) and its application in a two-dimensional field: planar laser-induced fluorescence (PLIF) [20]. These techniques are used for the detection of molecular or atomic species in the gas phase. The principle behind this technique is as follows: a laser projects a beam of light onto the particles to be studied (in this context, the reactants and products of combustion), and the molecule or atom absorbs one or more photons from the beam. The energy of the photon excites one of the electrons in the particle from its ground state to an excited state (higher energy). Subsequently, the electron returns to its ground state by emitting a photon at a different frequency from the one initially absorbed [8], creating what is known as fluorescence [6].

The principle of this technique is quite similar to that of chemiluminescence introduced earlier; the main difference between the two is that chemiluminescence is a passive process: no external source is needed to excite the molecules, as the combustion process itself provides the energy. In contrast, in LIF and PLIF techniques, a laser is required to provide the necessary photon energy, making it an active detection process.

To apply these techniques, in addition to the aforementioned laser, a set of collimating lenses is needed to direct the beam to the study system, along with a detector that receives and properly processes the fluorescence to obtain relevant information, such as the concentrations of different species, their temperature, etc.

2.3.2. Model for measuring the Burning Velocity or the Flame Speed of a Combustion Process

Mathematical modeling techniques use thermodynamic equations to analyze the combustion process by examining pressure evolution in diagnostic models, or predictively, by projecting how combustion will proceed without prior experimentation. This section provides a general explanation of the two-zone diagnostic model, which is the approach used in this thesis. In both types of models, the calculation of thermodynamic conditions within the combustion chamber is based on the application of the first law of thermodynamics (energy balance). However, considering one or two zones in the energy balance provides, respectively, lower or higher precision when determining the heat released, combustion rate, and thermodynamic variables at each moment [5].

Typically, a two-zone thermodynamic model is used, which divides the volume into a burned-products zone and an unburned-gas zone. This model is based on the energy conservation equation for open, non-stationary systems, applied to each zone: the unburned gas zone (u, Equation (2.11)) and the burned products zone (b, Equation (2.12)). In the burned zone, only mass enters, and in the unburned zone, only mass gets out. [5], [31].

$$d(m_u u_u) = -p dV_u - h_u dm_b - dQ_u \quad (2.11)$$

$$d(m_b u_b) = -p dV_b + h_u dm_b - dQ_b \quad (2.12)$$

Various software programs are available for combustion analysis, serving either predictive or diagnostic functions, depending on the user needs. Examples of such programs include GT-Power and BOOST, which are well-known software tools in combustion analysis, specially applied to ICE (Internal Combustion Engines). Both can perform predictive simulations (estimating how a system will behave) and diagnostics (analyzing data from experiments), depending on user input. When provided with pressure and/or temperature data from the combustion process, these programs can generate detailed diagnostic reports, illustrating the evolution of the combustion process. Alternatively, with specific parameters, they can predict how a particular fuel will behave under user-defined conditions². The two-zone thermodynamic model applied in this thesis is explained in Chapter 3.

2.4. Instabilities in the Combustion Process: Concept of Cellularity

In the previous sections, flat and spherical flames were discussed, but both were assumed to have a smooth flame front, with the propagation velocity being perpendicular to the surface. However, in real flames, this is not always the case, as there are intrinsic effects within the combustion process that result in the "wrinkling" of the flame front. These effects are known as instabilities and have a positive effect on the combustion velocity. This section is dedicated to presenting the theoretical basis of these phenomena and their influence on the stability of flames in combustion processes.

In real flames, spontaneous waves or perturbations arise from a wide variety of causes (acoustic vibrations, mechanical vibrations, pressure waves, etc.); these may be amplified or dampened depending on the influence of various effects intrinsic to the combustion process, which have different origins and behaviors. When those waves or disturbances of different origins are influenced by those effects, they are referred to as "instabilities of the combustion process". In real combustion, combustions stability in that sense is determined by the combined action of several effects, which can have either a stabilizing (smoothing) or destabilizing (wrinkling) effect.

The first to theoretically evaluate the stability of a flat flame were Darrieus (1938) and Landau (1944), who, through independent studies, concluded that a flat flame is always unstable. However, this conclusion does not hold unconditionally for every case, as experimentally, under certain conditions, stable flames do exist—that is, flames with a smooth, wrinkle-free front [32]. This contradiction arises because the Darrieus-Landau theory does not account for the possible stabilizing effect of diffusion processes (and of stretch in the case of spherical combustion), focusing solely on hydrodynamic instabilities;

² The online manuals for GT-Power and BOOST are accessible at the following links:

- GT-Power: <https://www.gtisoft.com/gt-power/>
- BOOST: <https://www.boost.org/doc/>

These resources provide comprehensive documentation for each software

as will be shown later, these instabilities are always present and are unconditionally unstable [32], [33].

In real flames, however, it is the combined effect of various mechanisms that determines whether a flame is stable (smooth flame front) or not (wrinkled flame front); these mechanisms are detailed in the following sections.

2.4.1. Types of Instabilities and Their Origin

The phenomena that can cause instabilities in the flame front (in laminar regime) of a premixed combustion are three: volume forces, hydrodynamic effect, and thermo-diffusive effect [11]. The origin and development of each of these phenomena, as well as their influence on the stability or instability of the flame, are explained below.

2.4.1.1. Instabilities Due to Volume Forces

When a less dense fluid moves toward a denser fluid in the opposite direction of a volume force (such as gravity), an instability due to volume forces occurs, also known as Rayleigh-Taylor instability or buoyancy instability [34]. The opposite case would, therefore, result in a stabilizing effect. In a flame, this happens when the combustion products (which are less dense) move upward toward the fresh unburned mixture (which is denser), against gravity. This difference in density creates a buoyancy effect, where the warmer layers rise, and their upward movement generates an instability. The flame front is then considered as a density discontinuity [35]. The next Figure 2.8 shows a scheme and an experimental example of the instability.

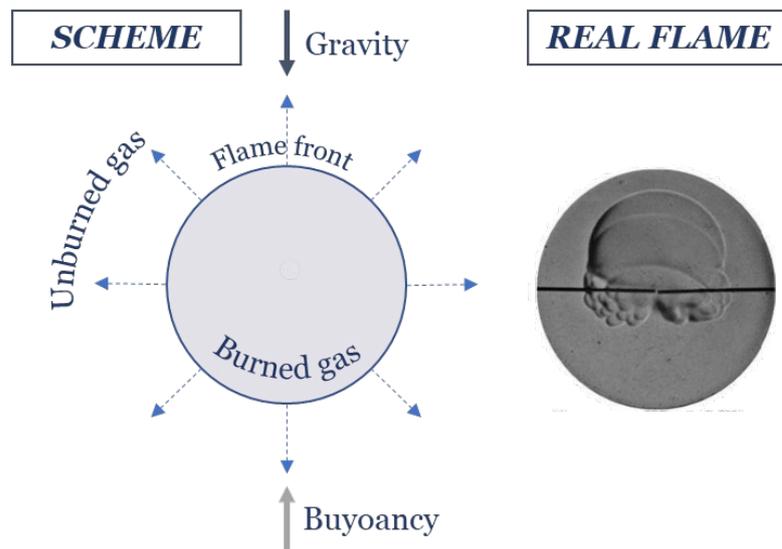


Figure 2.8. Scheme of the buoyancy instability and the effect on a real flame, adapted from [35].

The growth time of the instability formed in this situation is of the order of the relationship shown in the following Equation (2.13) [11]:

$$\tau \approx \frac{\sqrt{u_u \cdot u_b}}{g} \quad (2.13)$$

Where u_u is the flame speed term with respect to the unburned gases, as explained in the previous sections; u_b is the flame speed with respect to the burned gases; and g is the acceleration of Earth's gravity, $g \approx 9,8 \text{ m/s}^2$. Therefore, the higher the flame front velocity, the shorter the growth time of the instabilities caused by volume forces. Consequently, the effect of volume force instabilities is more noticeable in slower combustion processes.

2.4.1.2. Instabilities Due to the Hydrodynamic Effect

As introduced earlier, hydrodynamic instabilities (*i.e.*, instabilities due to the hydrodynamic effect) were independently studied by Darrieus and Landau (these instabilities are also known as Darrieus-Landau (DL) instabilities) [32], [33], and they concluded that, disregarding the flame front, volume forces, and the thermo-diffusive effect, the hydrodynamic effect makes flames unconditionally unstable.

The hydrodynamic effect is based on the density discontinuity that exists, for example, between the combustion products and the unburned reactants in the case of combustion, and is defined by the flame front. The difference in densities arises from the thermal expansion of the burned gases as their temperature increases by the exothermic reaction, compared to that of the unburned gases [11]. When a spontaneous undulation appears at the boundary of the discontinuity (the flame front in this case), the hydrodynamic effect amplifies this wave, generating an unstable flame when this mechanism is analyzed in isolation. This behavior is illustrated in Figure 2.9, which shows a perturbation already generated in the front. The process of generating this perturbation can be caused by numerous factors (volume force instabilities, mechanical or acoustic vibrations, etc.).

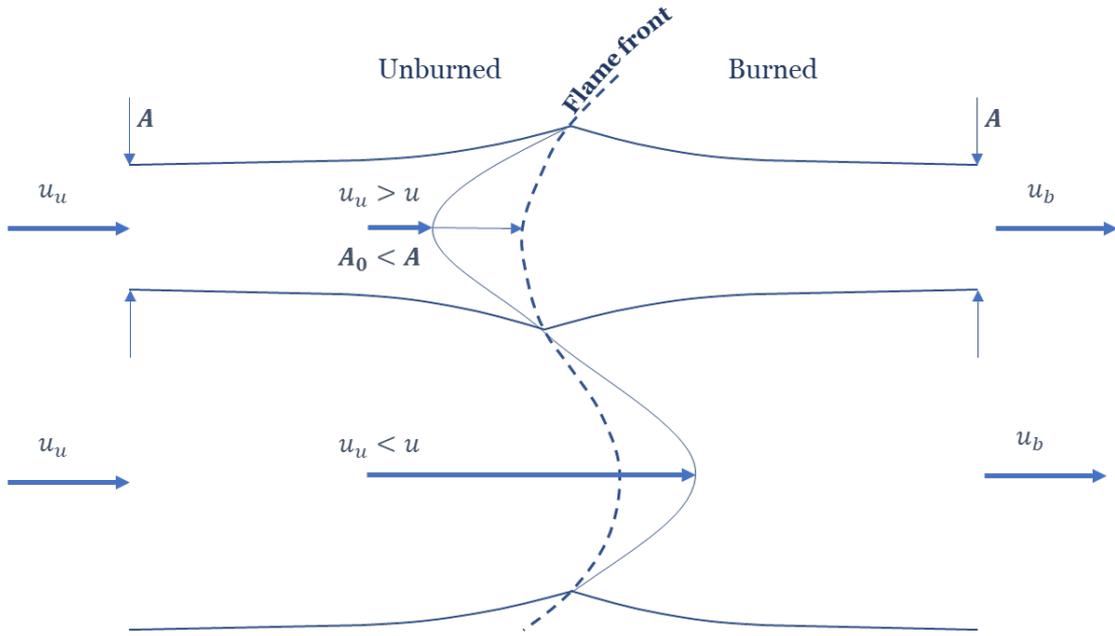


Figure 2.9. Influence of the Hydrodynamic Effect on a Perturbation.

In Figure 2.9, three streamlines are observed, which delimit two flow tubes, one of them with an initial area A_0 (upper part of the flame). The velocity of the unburned gases upstream and at a point sufficiently far from the flame front is $u = u_u$, and downstream, in the burned gas region, the velocity is $u = u_b$. Since the tangential velocity is conserved across the discontinuity (the flame front) [34], the streamline that encounters the concave part of the perturbation will tend to spread out, increasing the area of the flow tube ($A_0 < A$) [15].

By applying the principle of mass conservation to the concave region (upper part of the flame), the velocity of the unburned gases at the flame front is $u < u_u$ (see Equation (2.14)); considering constant density upstream of the discontinuity. Therefore, the flame front penetrates further into the unburned region, increasing the perturbation in that area.

$$A_0 \cdot u_u \cdot \rho_u = A \cdot u \cdot \rho_u \rightarrow u = \frac{A_0}{A} u_u \quad (2.14)$$

In contrast to what occurs in the concave region of the front, in the convex part (lower part of the flame), the streamline will close in, narrowing the flow tube area and increasing the velocity. As a result, the flame front will advance toward the burned region, intensifying the perturbation, just as it does in the upper part of the flame (concave region); see Figure 2.9. The greater the density difference between burned and unburned gases ($\sigma = \frac{\rho_u}{\rho_b} > 1$), the more severe the hydrodynamic instability becomes [32]. This is why, according to Darrius-Landau theory, flat flames subjected solely to this type of instability can never be

fully stabilized (the flame front will never be smoothed). In practice, flames can indeed appear smooth and free of disturbances throughout a laminar combustion process. Darrieus and Landau did not consider, in addition to the hydrodynamic effect, the influence of heat and mass diffusion across the flame front on instabilities, explained in the following section.

2.4.1.3. Instabilities Due to the Thermo-Diffusive Effect

Thermo-diffusive instabilities can have either a stabilizing effect (smoothing the flame) or a destabilizing effect (wrinkling the flame); unlike hydrodynamic instabilities, which are always unstable, as discussed in the previous section. This phenomenon is based on the thermal and mass diffusion processes occurring at a discontinuity in concentration and temperature, as found at the combustion flame front.

The first to analyze the effect of the ratio between thermal and mass diffusivity on flame stability was Zel'dovich in 1944. The parameter that defines this relationship between diffusivities is a dimensionless number known as the Lewis number (Le) [34], as shown in the following Equation (2.15).

$$Le = \frac{\alpha}{D} \tag{2.15}$$

Where α is the thermal diffusivity of the mixture, measured in $[m^2/s]$ and D is the mass diffusivity of a generic component of the mixture, measured in $[m^2/s]$. When referring to the limiting reactant or reactant in defect, it may be denoted without a subscript or as D_{def} ; when referring to the excess reactant, it will be denoted as D_{exc} .

Analyzing the mass and thermal diffusivity perpendicular to the flame front, the thermo-diffusive mechanism operates as follows: mass transport occurs from the unburned region toward the burned region, as reactants at the flame front react and transform into products. On the contrary, heat transport moves from the burned zone (with higher temperature) to the unburned zone (with lower temperature).

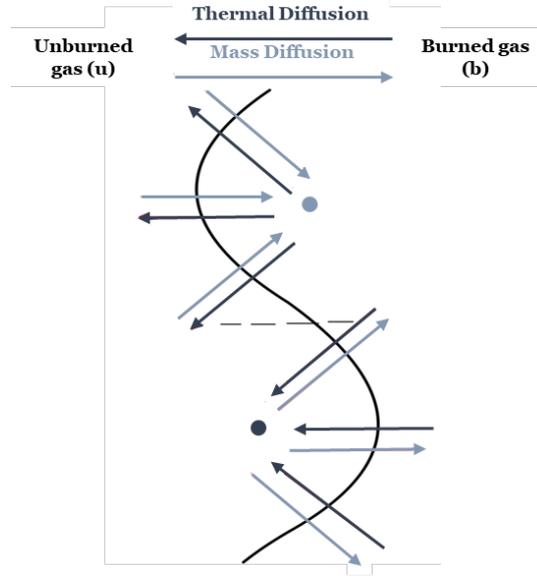


Figure 2.10. Thermal and mass transport across the flame front with a given disturbance.

The previous Figure 2.10 shows a disturbance in the flame front. In the concave zone (upper part), heat tends to disperse outward, while mass diffusion (specifically, of the limiting reactant) concentrates it at the center of the oscillation. In the convex zone (lower part), the opposite behavior occurs: heat concentrates at the center of the oscillation, while the limiting reactant disperses outward. The growth or damping of the oscillation depends on which effect predominates (heat or mass transport), as these effects have opposing influences on the flame front advancement [15]. To analyze the stable or unstable nature of this effect, different cases will be considered based on the relationship between the thermal diffusivity of the mixture (α) and the mass diffusivity of the limiting reactant or reactant in defect (D_{def}), represented by the Lewis number (Le), shown in Equation (2.15).

The previous approach applies to single-fuel cases; for mixtures (two or more fuels), the effective Lewis number (Le_{eff}) should be used. This number represents the combined influence of the individual diffusion coefficients of the mixture components[36]. The calculation of this parameter is given by Equation(2.16), as proposed by Addabbo and Matalon in 2002 [37].

$$le_{eff} = 1 + \frac{(Le_E - 1) + (Le_D - 1)A}{1 + A} \quad (2.16)$$

Where Le_E is the Lewis number of the excess reactant, Le_D is the Lewis number of the limiting reactant, and A is a measure of the composition strength of the mixture, following the next relationship: $A = 1 + \beta(\Psi - 1)$. It depends on the Zeldovich number, β (see Equation (2.3)); but also, on the parameter Ψ which is not the equivalence ratio (represented by ϕ) but the coefficient between the masses of the excess and deficient reactants in the fresh gas mixture, relative to the stoichiometric ratio. It reflects the

difference in the mixture's proportion compared to the stoichiometric equivalence ratio. Therefore, it is always positive and greater than 1 under non-stoichiometric conditions (richer or leaner). Under stoichiometric conditions $A = 1$.

Thermal Diffusion (α) as the Dominant Factor of the Thermo-Diffusive Effect

When thermal diffusion dominates the process (i.e., $\alpha > D_{\text{def}}$), $Le > 1$, and the behavior can be predicted by the diagram in Figure 2.10. The flame advances from the burned (q) region toward the unburned (sq) region. In the concave part (upper part), the flame front speed decreases due to thermal diffusion: the heat transmitted by the burned gases does not concentrate in one place but disperses in multiple directions, flattening that portion of the perturbation. In the convex part (bottom part), an increase in temperature in the unburned region at the center of the perturbation leads to faster transformation into combustion products, causing the flame front speed to increase and equalizing with the upper part of the flame. Therefore, when $Le > 1$, the thermo-diffusive effect stabilizes the flame, flattening perturbations at the front. Ideally, as the flame flattens, the flame speed tends to resemble that of an ideal flat flame. see Figure 2.11 [11], [15], [32]. This effect could counteract hydrodynamic instabilities, potentially resulting in a stable, wrinkle-free flame front, contrary to the predictions of Darrius and Landau, as discussed earlier.

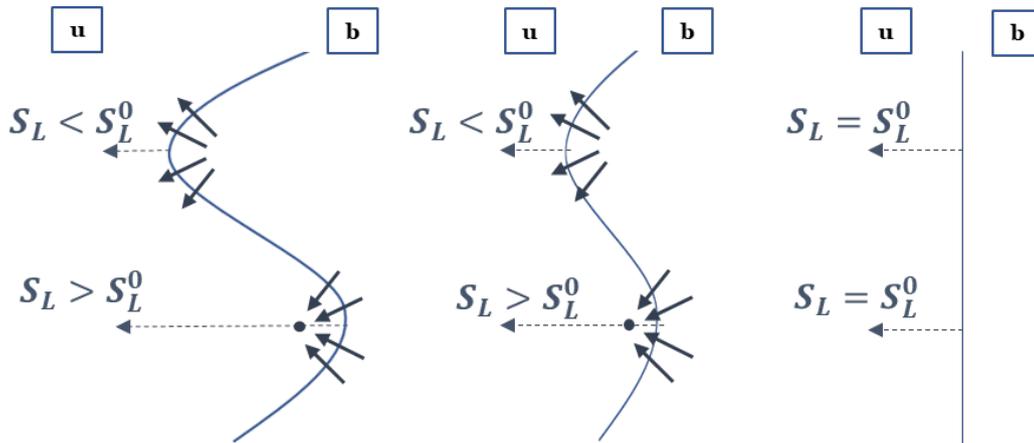


Figure 2.11. Consequences of Thermal Diffusivity Dominance in the Thermo-Diffusive Effect for a Given Disturbance, when $Le > 1$.

For mixtures of multiple fuels, the effective Lewis number (Le_{eff}) is used, and the stability criterion is defined by the critical effective Lewis number (Le_{eff}^*), which is slightly less than 1 [32], [37].

Mass Diffusion (D) as the Dominant Factor of the Thermo-Diffusive Effect

When mass diffusion dominates the process, the opposite effect to that described in the previous section occurs. Similarly, in this case, in the concave part (upper section of Figure 2.10), the deficient reactant will increase its concentration in this area, promoting the reaction and causing an increase in the flame temperature. This accelerates the flame

front speed, thus intensifying the instability in this part. In the convex region (lower section of Figure 2.10), the deficient reactant tends to disperse, delaying the reaction and decreasing the temperature, resulting in a slowdown of the flame front speed. In this zone, the perturbation is also exacerbated, and its final appearance can be seen in Figure 2.12.

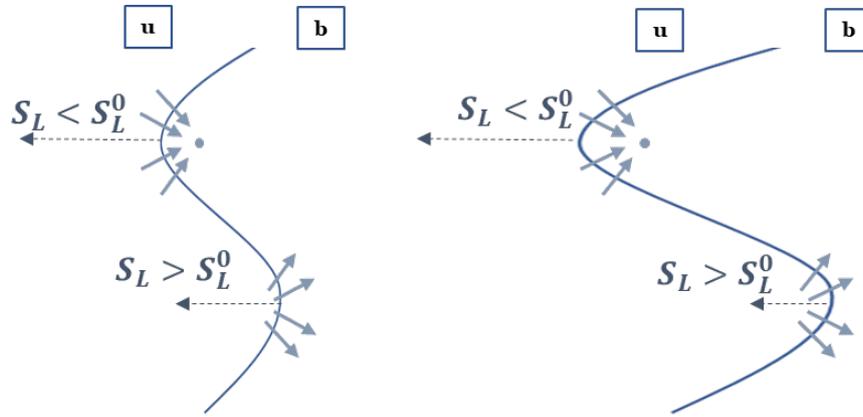


Figure 2.12. Consequences of Mass Diffusivity Dominance in the Thermo-Diffusive Effect for a Given Disturbance, when $Le < 1$.

In this case, the flames are always unstable, as the only stabilizing effect that could smooth the flame front would be the volume forces (in the case where the flame advances in the direction of gravity); however, this is generally insufficient to counteract the hydrodynamic and thermo-diffusive effects [32].

2.4.2. Instabilities in Spherical Flames

The stability analysis of flames presented in the previous sections is valid for flat flames (where the flame front globally advances in one direction), but it is incomplete for flames with a spherical morphology. In theory, an unstable spherical flame is defined as one in which the growth rate of the instabilities is greater than the growth rate of the flame front (the rate at which the radius increases) [33]. The growth of the oscillations is influenced by the effect of the flame general geometry (curvature) and its expansion, the sum of which is quantified as the *stretch*, already defined in section 2.2.2. In that same section, it was also discussed how this parameter affects the combustion process velocities. In this section, however, the aim is to study the joint influence of stretch and the other previously explained effects on the development of instabilities in the front of a spherical flame.

2.4.2.1. Growth Rate of Instabilities in Spherical Flames

The growth rate of instabilities in spherical flames refers to the increase over time in the relative amplitude of the perturbation (ratio between the amplitude and the instantaneous radius of the sphere) formed on the flame surface [33]. Figure 2.13 represents schematically this idea.

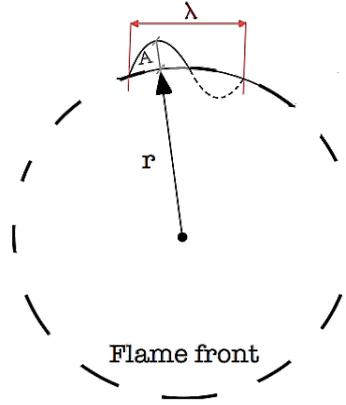


Figure 2.13. Simplified scheme of an instability with a wavelength of λ on the surface of a spherical flame front.

When the radius (r) reaches a minimum value (r_o) significantly larger than the flame thickness, the relative amplitude of the instability (a) takes the following form [26] expressed in Equation (2.17).

$$a = a_0 R^{\omega \left(1 + \frac{\delta_l \Omega}{r \cdot \ln R} \right)} \quad (2.17)$$

Where R is the ratio between the instantaneous radius of the flame and the minimum radius ($R = \frac{r}{r_o}$); a_0 is the relative amplitude of the perturbation when the instantaneous radius of the flame reaches its minimum value ($r = r_o$); δ_l is the flame front thickness (in m); Ω is the parameter that represents the thermo-diffusive effect; and ω is the coefficient that represents the hydrodynamic effect [38].

The hydrodynamic term (ω) in a spherical flame depends solely on thermal expansion (σ) and the dimensionless wave number of instabilities (n)³, as shown in the following Equation (2.18) [37], [26],[39].

$$\omega = \frac{-(b - a) + \sqrt{(b - a)^2 - 4ac}}{2a} \quad (2.18)$$

Given coefficients a , b and c :

- $a = (\sigma + 1)n + 1$

³ The dimensionless wave number for a sphere is defined as $n = 2\pi r / \lambda$, where r is the radius of the spherical flame front, and λ is the wavelength of the perturbation in meters [m]. Conceptually, this definition represents the number of waves of wavelength of λ that could fit around a circumference with radius of r .

- $b = 2n^2 + (4 + 5\sigma)n + 4$
- $c = -\frac{\sigma-1}{\sigma}n^3 + 2n^2 + \left[3(\sigma + 1) - \frac{1}{\sigma}\right]n + 2$

The general function for the instabilities growth rate (denoted by Σ) as developed in the research by Addabbo, Betchtold, and Matalon [37], [39], is further referenced in Lapalme's study [36]. The detailed expression for Σ is provided in the following Equation (2.19) [37]:

$$\Sigma = \frac{1}{a} \frac{da}{dt} = \frac{1}{r} \frac{dr}{dt} \left(\omega - \frac{\delta_l}{r} \Omega \right) \quad (2.19)$$

The parameter representing the thermo-diffusive effect, Ω (mentioned before), depends on several factors, including the thermal expansion coefficient, σ ; the dimensionless wavenumber, n ; and the function $\tilde{k}(x)$, which represents the thermal conductivity expressed in terms of the dimensionless temperature T/T_u (i.e., the flame temperature T over the unburned gas temperature T_u). This function $\tilde{k}(x)$ is influenced by transport properties, and can take on different values: 1, $\sqrt{\sigma} \sim \sqrt{T}$ or T (where T represents the flame temperature).

In the previous Equation (2.19), the contributions to the instability growth rate include the hydrodynamic effect (ω) and the thermal diffusive-effect $\left(-\frac{\delta_l}{r} \Omega = -\frac{\Omega}{Pe}\right)$ [38]. where Pe is the Peclet number (defined in the following Section). The hydrodynamic effect, as previously discussed, is always positive (indicating instability). In contrast, the thermo-diffusive effect can either amplify or attenuate the hydrodynamic effect, depending on its value. The specific definition of the parameter Ω is shown in the following Equation:

$$\Omega = Q_1 + \frac{\beta(Le_{eff} - 1)}{\sigma - 1} Q_2 + Pr Q_3 \quad (2.20)$$

Note that Ω is composed of three contributions, each accompanied by a coefficient Q_i ; the physical meaning of each one is as follows: the term Q_1 refers to the influence of thermal conduction (stabilizing in nature), $\frac{\beta(Le_{eff}-1)}{\sigma-1} Q_2$ represents the effect of molecular diffusion (which can be stabilizing or destabilizing); and the term $Pr Q_3$ accounts for the effect of viscosity (stabilizing in nature) [40]. Q_1, Q_2 y Q_3 are defined as follows:

$$\begin{aligned} Q_1 = & \frac{\gamma_1}{\sigma \Delta} [n^4(\sigma + 1) + \sigma n^3(2\omega + 5) + n^2(\omega\sigma - 2\sigma^2 + \sigma - 1) \\ & + n\sigma(\sigma - 7 - 3\omega - \sigma\omega) - 2\sigma(1 + \omega)] \\ & + \frac{\gamma_3}{\sigma \Delta} [n(n^2 - 1)(n + 2)(\sigma - 1)] \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned}
 Q_2 = \frac{\gamma_2(\sigma - 1)}{2\Delta} \{ & 2n^4 + n^3(2\omega\sigma + 2\omega + 10\sigma - 3) \\
 & + n^2[2\sigma\omega^2 + (5\sigma - 1)\omega + 3\sigma - 2\sigma^2 - 2] \\
 & + n[\sigma\omega^2(1 - 4\sigma) - (14\sigma^2 + 1)\omega + 3 - 9\sigma - 8\sigma^2] \\
 & - 2\sigma(\omega^2 + 4\omega + 3)\}
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

$$Q_3 = \frac{2n(n^2 - 1)(\sigma - 1)}{\sigma\Delta} [(n + 2)(\tilde{k}(x) - \gamma_3) - 3(\tilde{k}(x) - 1)] \tag{2.23}$$

Where $\Delta = 2a\omega + b - 2a$ (the coefficients a and b are those of Equation (2.18)). Coefficients γ_1, γ_2 y γ_3 will take on different values depending on the case, as they rely on the function $\tilde{k}(x)$; these are listed in Table 2.1.

Case	General	$\tilde{k}(x) = 1$	$\tilde{k}(x) = \sqrt{\sigma}$	$\tilde{k}(x) = T$
γ_1	$\frac{\sigma}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \frac{\tilde{\lambda}(x)}{x} dx$	$\frac{\sigma}{\sigma - 1} \ln \sigma$	$\frac{2\sigma}{\sqrt{\sigma} + 1}$	σ
γ_2	$\frac{1}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \frac{\tilde{\lambda}(x)}{x} \ln\left(\frac{\sigma - 1}{x - 1}\right) dx$	$\frac{1}{\sigma - 1} \int_{-\infty}^0 \ln[1 + (\sigma - 1)e^z] dz$	$\frac{4}{\sigma - 1} \{\sqrt{\sigma} - 1 - \ln[0.5(\sqrt{\sigma} + 1)]\}$	1
γ_3	$\frac{1}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \tilde{\lambda}(x) dx$	1	$\frac{2(\sigma^{3/2} - 1)}{3(\sigma - 1)}$	$\frac{\sigma + 1}{2}$

Table 2.1. Values of the coefficients γ_i as a function of the thermal conductivity.

In the first case, $\tilde{k}(x) = 1$, the assumption of constant transport properties is made, so the thermal conductivity is constant, and the influence of viscosity on flame stability is minimized [37]. It is worth highlighting the formulation developed by Bradley and Harper in 1994 [26] for the scenario of constant properties; see Equation (2.24).

$$\Sigma = \frac{1}{a} \frac{da}{dt} = \sigma u_l \omega \left[1 - \frac{2\sigma\delta_l}{r} (Ma - \ln \sigma) \cdot \left(\frac{1}{r} - \frac{\delta_l \Omega^*}{r^2} \right) \right] \tag{2.24}$$

All the thermal terms in the previous equation have been explained earlier, however, here is a brief summary: σ is the density ratio between unburned and burned gases; u_l is the laminar burning velocity (see Section 2.2); ω is the DL instability growth rate (hydrodynamic); δ_l is the flame front thickness; Ma is the Markstein number (see Section 2.2); r is the instantaneous flame radius. Finally, $\tilde{\lambda}(x)$ represents the thermal conductivity, which may equal 1, $\sqrt{\sigma}$ o T depending on the case, with T being the flame temperature [37].

The parameter Ω^* depends on the density ratio, σ , and is similar to that in Equation (2.20) but divided by the hydrodynamic contribution. The formula for Ω^* from the study by Bradley et al. [26] is shown in Equation (2.25):

$$\Omega^* = \frac{Q_1 + \left[\frac{\beta(Le_{eff} - 1)}{\sigma - 1} \right] Q_2}{\omega} \quad (2.25)$$

The coefficients Q_1 y Q_2 are those given in Equations (2.21) and (2.22) but they are particularized for the case of constant properties, resulting in the following form, according to Bradley (1999) [41]. They are shown in Equations (2.26), and (2.27) below.

$$Q_1 = \frac{1}{2\omega a + b - 2a} \left\{ \frac{\ln \sigma}{\sigma - 1} [(\sigma + 1)n^4 + (2\omega + 5)\sigma n^3 + (\omega\sigma - 2\sigma^2 + \sigma - 1)n^2 + (\sigma - 7 - 3\omega - \sigma\omega)n\sigma - 2\sigma(1 + \omega)] + n(n^2 - 1)(n + 2) \frac{\sigma - 1}{\sigma} \right\} \quad (2.26)$$

$$Q_2 = \frac{\gamma}{2\sigma(2\omega a + b - 2a)} \{ 2n^4 + [2\omega\sigma + 2\omega + 10\sigma - 3]n^3 + [2\sigma\omega^2 + (5\sigma - 1)\omega + 3\sigma - 2\sigma^2 - 2]n^2 + [\sigma\omega^2(1 - 4\sigma) - (14\sigma^2 + 1)\omega + 3 - 9\sigma - 8\sigma^2]n - 2\sigma(\omega^2 + 4\omega + 3) \} \quad (2.27)$$

Where γ in Q_2 depends on σ as follows: $\gamma = \sigma \int_1^\sigma \left(\frac{\ln s}{s} - 1 \right) ds$. Note that, for this specific case, the coefficient Q_3 is zero (viscosity has no influence). Nevertheless, according to the reference study performed by Addabbo et al. [37], the most realistic choice of the transport properties is the second one presented in Table 2.1: $\tilde{k}(x) = \sqrt{\sigma} \sim \sqrt{T}$, and is the case chosen for this Thesis.

For the study of the instabilities in spherical flames all the aspects explained in this section must be taken into account; particularly, the thermo-diffusive effect reflected in the Lewis number (Le) or the effective Lewis number (Le_{eff}), should be considered. The analysis carried out below is similar to that of flat flames (as described in section 2.4.1.3), adding the effect of stretch to the hydrodynamic and thermo-diffusive effects already discussed.

On the one hand, if a fuel mixture holds that $Le_{eff} < Le_{eff}^*$, this means that the thermo-diffusive effect is destabilizing, and the instabilities grow from the beginning. The nature of the instabilities developed in the initial moments will be thermo-diffusive, as the stretch

could initially counteract those caused by the hydrodynamic effect [42]. In these cases, stage (1) mentioned earlier does not exist, as the flame is unstable from the outset.

On the other hand, in combustion systems with $Le_{eff} > Le_{eff}^*$ the thermo-diffusive effect is stabilizing, making the hydrodynamic effect the only factor capable of increasing instabilities (see Section 2.4.1.3). The *stretch* of the spherical flame (the curvature and expansion of the burned gases) creates a "stretching" of the front. Along with the thermo-diffusive effect, this stretching slows the growth of hydrodynamic instabilities. However, it is important to note that, even when the Lewis number is greater than the critical value, any spherical flame can still develop cellularity (a visibly unstable flame) once the effect of stretch weakens (less curvature and stretching as the front radius increases). In such cases, the stabilizing thermo-diffusive effect may no longer be sufficient to counteract the hydrodynamic instabilities —because the strength of the thermo-diffusive effect also decreases with the radius, see Equation (2.19)—.

According to the latter, and considering the instability theory discussed in the previous section, the growth rate curves of instabilities Σ (Equation (2.19)) display different forms depending on the type of combustion—specifically, whether the effective Lewis number is greater than or less than its critical value, corresponding to stable or unstable combustion, respectively. In the following figure, adapted from Matalon’s work [43] , growth rate curves for instabilities are shown for a specific radius as a function of the dimensionless wavenumber.

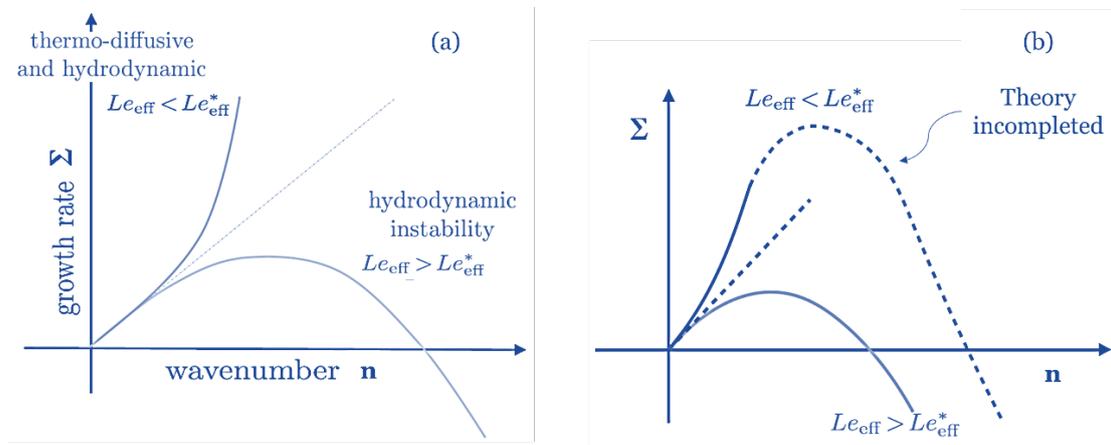


Figure 2.14. The growth rate Σ as a function of the wavenumber k , illustrating the distinction between purely hydrodynamic ($Le_{eff} > Le_{eff}^*$,) and thermo-diffusive ($Le_{eff} < Le_{eff}^*$) instabilities. Adapted from [43].

In part (a), the curves are based on the theory developed thus far; in part (b), the dashed line represents the hypothesis of a potential damping of instabilities generated by the combined effects of hydrodynamic and thermo-diffusive instability (both unstable with $Le_{eff} < Le_{eff}^*$, where the disturbances are smaller than the flame front thickness.

2.4.2.2. Stability Limits of the Combustion Process: Neutral Stability Curves and Peninsula of Instabilities

The stability limits of combustion process are related to the behavior of the instabilities inherent to the process, already explained. As previously mentioned, the development of instabilities is characterized by a parameter known as the growth rate of instabilities (Σ), whose definition can be found in the previous section of this Thesis. It is briefly recalled that the growth rate of instabilities depends on the radius and the dimensionless wave number, n , (or wavelength, λ) of the perturbations; meaning that, at each radius in a spherical combustion process, there exists a curve representing the set of growth rate values for instabilities at each wavelength (λ) or dimensionless wave number (n) [44].

To define the stability limits in a combustion process with a global spherical morphology, it is only necessary to know where the instability growth rate becomes zero ($\Sigma(\lambda \text{ o } n) = 0$) and its sign at points where it is not zero ($\Sigma(\lambda \text{ o } n) < 0, \Sigma(\lambda \text{ o } n) > 0$), It is not necessary to know the exact value at each point. The set of points where the growth rate is zero forms what is known as the neutral stability curve of a combustion process [32], [35].

In Figure 2.15, an example of this neutral stability curve (or stability map) is shown as a function of the dimensionless wave number and the Peclet number, which is a dimensionless representation of the flame front radius in a spherical combustion process, in general terms. The Peclet number (or radius) at which the maximum growth rate is zero ($\Sigma_{\max}(\lambda \text{ o } n) = 0$) is called the critical Peclet number (Pe_{cr} or r_{cr}) (more details are given in section 2.4.2.3).

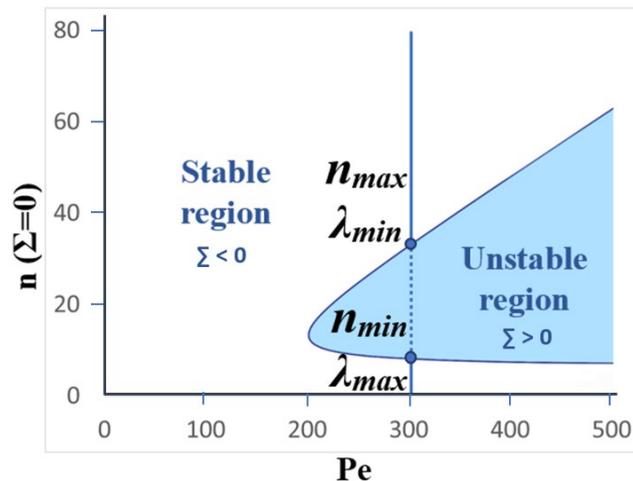


Figure 2.15. Schemes of the neutral stability curve.

Figure 2.15 (i) presents an example of the neutral stability curve, where the wavenumbers corresponding to a zero-instability growth rate ($\Sigma = 0$) are plotted against the Peclet number. Commonly, when the stability curve takes a shape similar to that shown in Figure 2.15 (i), it is referred to as an instability peninsula, and the critical point is known as the "nose" or "vertex" of the peninsula. It is important to highlight that the nose of the

peninsula represents the theoretical critical Peclet number (or theoretical critical flame radius) beyond which the flame transitions into the unstable region. For Peclet numbers exceeding this critical value, a range of perturbations characterized by their wavenumbers (or wavelengths) between n_{max} (or λ_{min}) and n_{min} (or λ_{max}), will exhibit growth, while all perturbations outside this range will decay.

Further explanations about the stability limits of combustions are provided in Chapter 4, in Section 4.2.1.

2.4.2.3. Key Aspects of Instabilities in Spherical flames: Cellularity, Peclet Number, and Critical Radius

In the study conducted by Bradley in 1999 [41], the stages in the propagation of a laminar spherical flame are described: (1) stable laminar propagation, (2) cracking of the flame front and formation of cells, (3) cellular flame propagation, and (4) turbulent propagation.

Cellularity

The concept of the cellularity phenomenon in flames is first explained. Cellularity is the phenomenon by which a flame front in a laminar combustion is altered due to the magnitude of the amplitude of the intrinsic instabilities in the process. In this case, the laminar flame experiences the onset of auto-turbulence (an accelerated combustion rate) as its surface area increases sharply [8].

During this phenomenon, the flame front becomes covered with cells (wrinkling of the front), where the average size of these cells is on the order of the corresponding λ_{min} at that moment [32]. The following image shows, through Schlieren photography, the evolution of a smooth flame front into a cellular one.

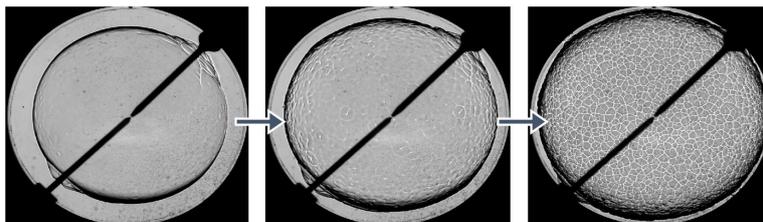


Figure 2.16. Transition from a smooth flame front to a cellular one.

Observing the previous figure, one could say that cellularity is the visible consequence, manifested abruptly, of the instabilities intrinsic to the combustion process at the flame front.

Although a combustion may become unstable from an early stage (with a small critical radius), the phenomenon of cellularity may not manifest immediately in the flame front,

as the growth of instabilities is needed to "break" the structure of the front and make it visible [45].

Several studies have examined the onset of cellularity in spherical flames. Some of the most recent ones are as follows. The research by H. Zhao et al.[40] identifies three stages in the development of cellularity in hydrogen-rich mixtures: crack branching, acceleration of combustion, and extended cellularity across the entire surface. Cai et al. [46] study the self-acceleration of combustion due to cellularity and seek a correlation between this phenomenon and the Peclet number under different initial thermodynamic conditions for various H₂/O₂/N₂ mixtures. Another study by Kim et al. [47] experimentally determines the two Peclet numbers coined by Bradley (explained below) for H₂/air mixtures under different equivalence ratios.

This phenomenon of cellularity is crucial for understanding how instabilities affect the propagation of spherical flames, leading to the introduction of key concepts: the Peclet number and the critical radius.

Peclet Number

The dimensionless Peclet number (Pe) is defined as the ratio between the instantaneous radius of the flame front (r) and its thickness (δ_l):

$$Pe = \frac{r}{\delta_l} \tag{2.28}$$

This number is of great significance in the stability analysis of spherical flames, as for any spherical flame there exists a critical Peclet number at which instabilities begin to grow in the flame front. After a growth period, this results in a flame resembling a turbulent regime. Bradley et al. [48] conducted a study introducing the terms "critical Peclet number" (Pe_c) and "critical cellular Peclet number" (Pe_{cl}) associated with the initial crack formation in the flame front and the appearance of a fully wrinkled flame front (cellularity), respectively.

Critical Radius

It is important to clarify the concept of "critical radius," as it can have different definitions depending on the context. The first definition refers to the radius at which instabilities stop being dampened, as their growth rate (Σ) becomes positive. This radius is termed the "critical radius" (r_c) and is associated with the critical Peclet number (Pe_c) mentioned above. The radius of the sphere (r) reaches this value at the moment when the instabilities growth rate is zero ($\Sigma = 0$), as described in the study by Bechtold and Matalon (1987) [49]. From that point onward, the flame is considered unstable, although this may not be visually appreciable. In 2000, Bradley et al. [50] experimentally defined this critical radius as the point at which the first cracks appear in the flame front, which closely aligns with the $\Sigma = 0$ point defined by Bechtold and Matalon [49].

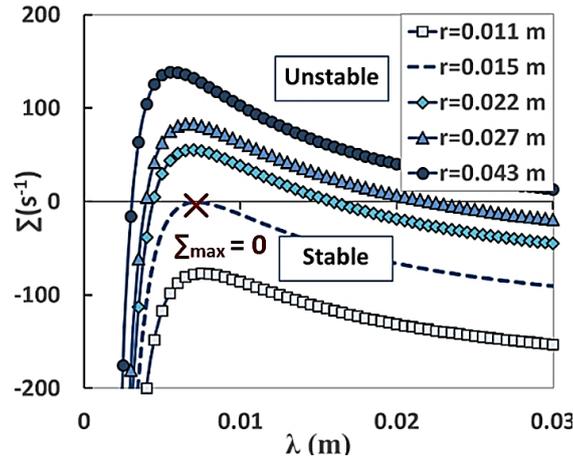


Figure 2.17. Instability growth rate curves for a given flame radius r as a function of the perturbation wavelength. First definition of the critical flame radius.

It is possible to obtain the curves for the growth rate of the instability Σ when the values of Equation (2.19) are represented versus the wavenumber n or, alternatively, versus the wavelength of the perturbations λ for a particular flame front radius or time [8], [26], [49]. This is represented in Figure 2.17 (using Equation (2.19)), where it is possible to see two regions: stable and unstable. Both zones are separated by the value of $\Sigma=0$, which is the stability limit for a spherical flame. The dotted line corresponds with the first definition of the critical radius, r_c [49], from which there are certain wavelengths whose growth rate is positive (unstable flame).

The second definition refers to the radius at which the flame becomes visibly unstable due to the development of cellularity (the concept of "cellularity" is explained later). This radius is called the "cellular critical radius" (r_{cel}), a term also introduced by Bradley et al. in the same study. This radius plays a key role in the stability analysis of spherical flames. At this point, the cellularity increases the surface area of the flame, which in turn accelerates the combustion speed [50]. The "cellular critical radius" is associated with the critical cellular Peclet number (Pe_{cl}), which was discussed in a previous paragraph.

For the cellular critical radius, methods in the literature vary, ranging from identifying the point when the combustion speed increases sharply [3] to using optical methods and image processing to define the radius at the moment the cellular flame front is visually detected [51].

2.4.2.4. Self-Acceleration in Cellular Flames: Influence of Cellularity on the Combustion Process

The study of instabilities in the flame front during combustion events has been a major focus of research over recent decades, as explained in previous sections. This area of investigation originated with Markstein's pioneering work on flame stability [21] and was further advanced by Istratov and Librovich [33]. Over time, many researchers have contributed to expanding the theory of flame front instabilities, including Clavin (1985)

[8], Williams (1985) [11], Bechtold and Matalon (1987) [49], Bradley (1994) [26], Addabbo (2001) [44], and Law et al. (2005)[52], as well as others [32], [37], [52], [53], [54]. Interest in this field continues to grow, with recent studies building on these foundational contributions [35], [38], [55], [56], [57], [58], [59], [60], [61], [62].

The laminar burning velocity is a key parameter in characterizing the combustion properties of a fuel. As explained before, this parameter represents the relative speed at which unburned gas (fuel and air) moves toward the flame front in the absence of turbulence, with the reference frame positioned at the flame front itself. For an ideal planar flame, this velocity is represented by u_l ; unlike the first stages in a spherical flame, it is unaffected by flame curvature and remains unstretched. As discussed in Section 2.2.1, the laminar burning velocity depends on several factors: the burned mass flow rate (\dot{m}_b , [kg/s]), the density of the unburned gas (ρ_u [kg/m³]), and the flame front area (A_f [m²]), expressed as: $u_n = \frac{\dot{m}_b}{\rho_u A_f}$.

Combustion stability also plays a crucial role in shaping the flame's morphology and topology. When flame front instabilities become sufficiently pronounced, they alter the flame front's structure, producing a phenomenon known as cellularity. This cellularity, which is closely tied to the stability of the flame front, influences the burning velocity of the combustion process (u_n).

The initial growth of the flame kernel—and whether or not a misfire occurs—is largely governed by the laminar burning velocity. Even as the flame kernel develops, the laminar burning velocity continues to dictate the burnup rate of turbulent eddies. Numerous studies have demonstrated, both directly and indirectly, the impact of instabilities, particularly in the form of cellularity, on combustion progression. For instance, Reyes et al. [63] conducted a study to calculate the laminar burning velocity of premixed methane-air and hydrogen-air mixtures in a constant-volume combustion bomb (CVCB) under moderate pressure and temperature conditions. In this study, data from the initial and final phases of the combustion event were discarded: early data was removed to eliminate spark-induced noise, and later data was excluded to avoid interference from cellularity effects.

The researchers observed that cellularity led to an apparent burning velocity greater than the laminar one, indicating an acceleration of the combustion process due to an increase in the burned mass flow rate; the wrinkling of the flame front increases its surface area. This effect, illustrated in one of their graphs in Figure 2.18, is also explained by Hu et al.[64]. Known as the "self-acceleration phenomenon," this effect has been confirmed in several recent studies, which show similar impacts of instabilities on both the burning velocity (u_n) and the flame speed (S_n) [47], [65], [66], [67].

As a reminder, flame speed represents the rate at which the flame front advances relative to the chamber walls and is given by the derivative of the flame radius with respect to time: $S_n = dr/dt$.

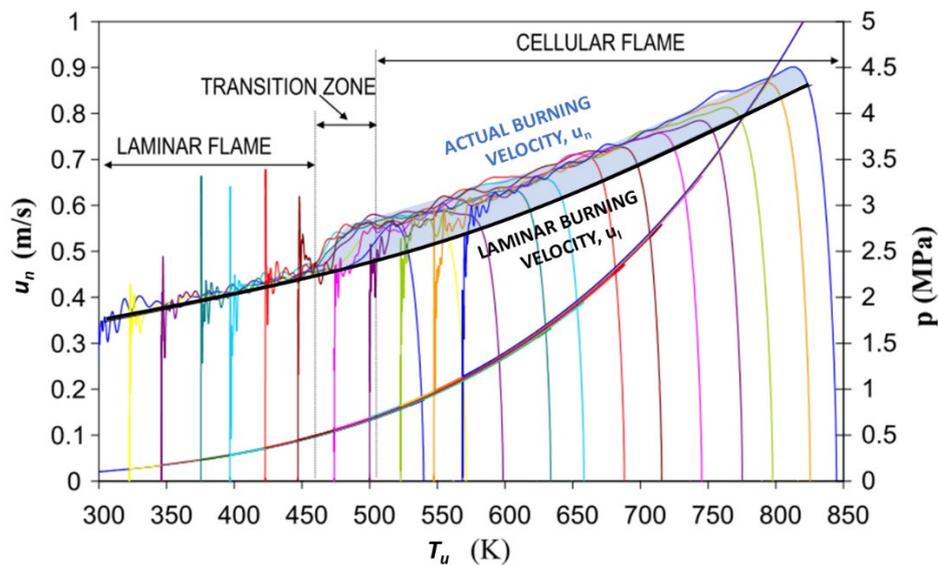


Figure 2.18. -Effect of a cellular flame in the burning velocity of Overlapping plots of 12 combustion processes of a stoichiometric mixture of methane and air with increasingly higher initial conditions, starting at 298 K and 0.1 MPa. Adapted from [63].

Yang et al. [67] describe three stages in the development of a spherical flame front. The first stage, called the *smooth expansion stage*, shows no visible signs of instability or significant increase in flame front area. The second stage, known as the *transition stage*, is marked by the formation of cracks and cellular structures as the flame reaches a critical radius. At this point, the flame accelerates due to the increased surface area from cell formation. During this phase, the cells form enclosed patterns, resulting in a cellular flame front. Finally, the *saturated stage* occurs once the flame front is substantially covered by cells. In this phase, the flame radius and the number of cells continue to grow, further expanding the flame area and increasing the combustion rate, though this acceleration is less dramatic than during the transition stage. Together, the transition and saturated stages represent the full extent of the self-acceleration phenomenon, a pattern observed in various studies mentioned before.

Hinton [68] introduced a method for detecting cellularity by analyzing pressure evolution, proposing a graphical evaluation of image data and pressure dynamics. This involves the second derivative of pressure with respect to time, alongside the number of edges formed by cellular structures. In a two-zone thermodynamic model, such as the one developed by Giménez et al. [69], burning velocity is directly related to the rate of pressure change. As such, burning velocity evolution offers a link between measured pressure and the detection of a cellular flame front.

Omari et al. [70] compared the actual flame front propagation speed, obtained from the pressure in a CVCB, with the laminar burning velocity under those conditions for hydrogen and methane mixtures. They observed an acceleration from a certain point in

the combustion for lean flames when cellularity developed. Part of their results can be seen in the following figure.

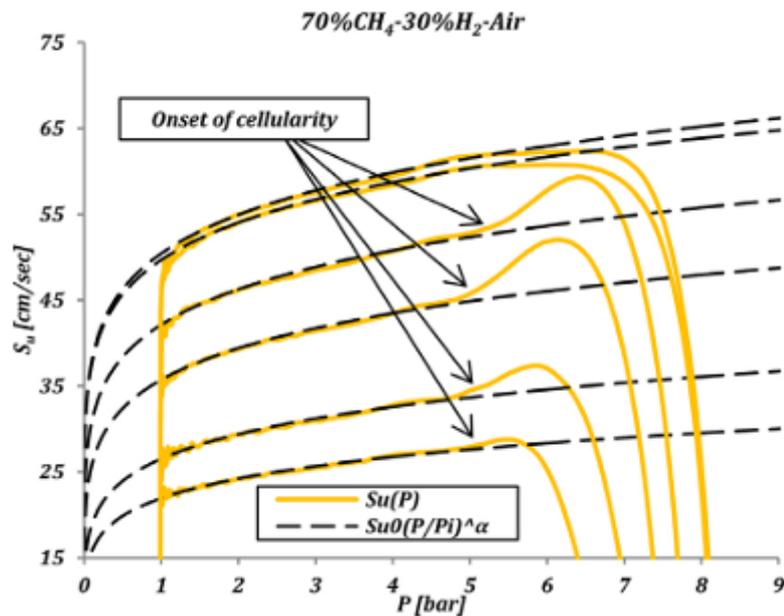


Figure 2.19. -Comparison between the real flame speed for flames of mixtures of CH_4 and H_2 and the laminar flame speed for the same conditions of p and T . The curves correspond to: down-up: $\phi = 0.690, 0.734, 0.820, 0.893, 1.046, 1.114$. Obtained from [70].

Understanding self-acceleration and cellularity formation is closely tied to flame stability analysis, which aims to identify and understand the origins and growth of combustion instabilities. These instabilities primarily stem from thermo-diffusive and hydrodynamic effects, as well as volumetric forces under certain pressure and temperature conditions. In thermal engines, intrinsic instabilities are particularly prominent; they can improve efficiency but may also cause end-gas autoignition [35], [71]. Key combustion parameters—including burning velocity, combustion performance, flame morphology, and flame thickness—are all affected by these instabilities and the appearance of cellularity, influencing the overall combustion process.

2.4.1. Theory of Instabilities and Cellularity Applied in Alternative Fuels

In this section, the fuels studied in this Thesis (methane, hydrogen, ethanol, and syngas) are introduced. Their general importance as fuels is discussed, along with their relevance in various studies related to combustion velocities, instabilities, and cellularity.

2.4.1.1. Methane, Hydrogen and Their Mixtures

Methane (CH_4) is the primary component of natural gas, making it a valuable substitute for combustion research, as natural gas consists of 75–98% methane, 0.5–13% ethane, and 0–2.6% propane [72]) Natural gas is widely used as an alternative fuel to gasoline, powering various vehicle types (Natural Gas Vehicles or NGVs) in two forms:

Liquefied Natural Gas (LNG) and Compressed Natural Gas (CNG). LNG, a liquid at extremely low temperatures, is utilized mainly in industry, heavy vehicles, or for long-distance transport due to the significant volume reduction achieved in its liquid state, though it is unsuitable for passenger vehicles due to its demanding storage temperature (-160°C) [73]. CNG, stored as a gas under high pressure (200 bar), is commonly used in light transport, such as passenger vehicles, taxis, and buses. Combustion of natural gas, mainly methane, offers notable environmental advantages over gasoline, reducing CO_2 emissions by up to 35% [74]. This is because of its chemical structure, that only has one atom of carbon in its molecule [75].

Nevertheless, Natural gas (CNG) has a comparatively low burning velocity when measured against liquid fuels. To enhance its combustion rate, CNG can be mixed with a faster-burning fuel like hydrogen. Due to its favorable combustion characteristics, it improves the overall performance of the fuel mix [63], [75] and contributes to reduce the CO_2 emissions for it has not carbon atoms on its chemical formula.

Additionally, both fuels can have a biological or renewable origin. Methane can be obtained through the "upgrading" or purification process of biogas, which is initially produced by the decomposition of organic compounds under anaerobic (oxygen-free) conditions [76]. On the other hand, green hydrogen is produced through the electrolysis of water, using energy from renewable sources, such as wind energy [77].

Understanding the combustion characteristics and flame instabilities of hydrogen/methane mixtures is essential for optimizing internal combustion engine performance. A significant body of research has focused on the burning velocity of hydrogen/methane mixtures [63], [64], [78], [79], while others have investigated combustion dynamics in engine environments [80], [81]. One area of particular interest is cellularity in flames, which enhances the propagation rate of laminar flames, and this phenomenon has been extensively studied [64], [82], [83].

For example, Kwon et al. [53] explored hydrogen flames at high pressures, identifying the effects of the thermal expansion ratio, flame thickness, Lewis number, and stretch rate on both hydrodynamic and diffusional-thermal instabilities at the flame front. Jiang et al. [84] established a relationship between the cellular structures of the flame front and pressure in hydrogen/methane premixed flames.

Sun et al. [82] demonstrated that in lean hydrogen/air flames, thermo-diffusive instabilities dominate the cellular behavior, whereas hydrodynamic effects become more significant in stoichiometric and rich flames. Okafor et al. [51] conducted both experimental and theoretical studies on cellular instabilities in lean hydrogen/methane mixtures, finding that higher hydrogen content and increased pressure lead to greater cellular instability and self-acceleration.

Additionally, Hu et al. [64] observed that the addition of hydrogen to methane/hydrogen/air mixtures enhances cellularity in lean flames. Law et al. [85] examined outward-propagating spherical premixed flames and discovered that

substituting propane reduces cell formation by mitigating both diffusional-thermal and hydrodynamic instabilities. Further research by Smallbone et al. [86] focused on flame instability, laminar and turbulent velocities in hydrogen/air mixtures within a fan-stirred combustion bomb.

2.4.1.2. Ethanol

Ethanol (C_2H_5OH) is a widely used alcohol fuel in internal combustion engines (ICE), commonly mixed with gasoline in different concentrations (E10, E85, or even E30) [59], [87], [88]. One of the primary environmental advantages of ethanol as a fuel is its potential organic origin, which is referred to as “bioethanol.” Bioethanol, or ethanol derived from crops rich in cellulose (e.g., sugarcane or corn), is an alternative to carbon-based fuels obtained from fossil sources. The advantage of using bioethanol in an ICE is that the CO_2 it generates during combustion was previously captured by the plants that produced the alcohol, making this fuel essentially net-zero carbon. This contributes to a circular economy and supports the primary sector [89], [90].

Regarding combustion instabilities, recent studies have focused not only on ethanol/air blends but also on ethanol mixed with other fuels. Gárzon et al. [91] investigated the ethanol/air combustion process and the effect of water addition on the stability of hydrous ethanol flame fronts at different temperatures and pressures. They found that the equivalence ratio significantly influences flame stability: slightly rich mixtures exhibited the maximum tendency for hydrodynamic instabilities, while richer mixtures ($\Phi \gg 1$) were more prone to thermo-diffusive instabilities. Additionally, they observed that initial pressure enhanced thermo-diffusive instabilities, especially on the rich side of the combustion process, while initial temperature had a smaller effect on the development of flame front instabilities. These findings align with a previous study by Zhang et al. [92], which provided a numerical and theoretical analysis of ethanol/air flame instabilities.

Li et al. [55] examined the impact of hydrogen content in hydrogen/ethanol/air combustion processes on flame instability. Similarly, Liu et al. [93] analyzed the effects of initial temperature and pressure on the stability of E30 (30% ethanol and 70% gasoline by volume) /air flames, as well as the types of instabilities that developed under varying conditions.

2.4.1.3. Biomass producer gas - BPG

Biomass is a basic fuel widely used in rural areas due to its immediate availability. Its primary use is for heating and cooking applications. However, the use of biomass in traditional, inefficient systems, such as (three stones cookfires, poses significant health risks [94]. These systems typically operate at about 10% efficiency [95] and negatively impact indoor air quality due to the emission of pollutants such as carbon monoxide (CO) and particulate matter (PM), exposing users to harmful air quality [96]. Therefore, improving the combustion process in cookstoves is essential, and one way to achieve this is by using gasification-based stoves.

In those stoves, the combustion process is divided into two stages. The first stage is gasification, where primary air (gasification-air) converts the biomass into a gaseous fuel (studied in this Thesis), known as biomass producer gas (BPG). In the second stage, the BPG is oxidized in the combustion chamber with secondary air (combustion-air), releasing thermal energy for cooking [94]. This two-stage structure allows for better use of biomass, reducing the reaction temperature in the solid phase and subsequently decreasing particulate matter emissions. Additionally, the excess air during the oxidation of the BPG improves the combustion process in the gas phase, which results in a reduction of CO emissions [97]. The combustion of BPG has been studied from various perspectives, including burner designs and combustion safety [98].

Once the literature review is done, the following Table 2.2 summarizes the novelty and what this thesis contributes compared to what has been presented in the literature.

Table 2.2. Novelty of the thesis with respect to the literature in general

NOVELTY OF THE THESIS WITH RESPECT TO THE LITERATURE IN GENERAL

Issue 1: The Theory of Instabilities and the Stability Analysis of the Combustion Process

Before the Thesis - State of the Art:

The “Theory of Instabilities” has been developed over many years and is well-documented. Numerous authors have studied instabilities experimentally and have applied the theoretical framework to their findings. Specifically, studies on instabilities in hydrogen combustion processes are widely available in the literature.

Shortcomings detected

Thesis proposals

1.1) There is a lack of established methodology and clear criteria for effectively applying the “Theory of Instabilities” to real-world experiments.

A methodology defined as “Stability Study of the Combustion Processes” has been developed. In which the steps and criteria for applying the theory of instabilities in combustion processes are established. This methodology has been applied and validated in the combustion processes of mixtures of hydrogen and methane.

1.2) While most authors agree that certain conditions—such as lean hydrogen mixtures—lead to the presence of thermo-diffusive instabilities in the process, no comprehensive study currently establishes a clear connection between the theory and what it is observed in the experiments. Therefore, there is a need of studies regarding the real relationship between theory and experimental results in those situations.

The "Stability Study of the Combustion Process" considers cases where thermo-diffusive instabilities occur and provides an explanation in accordance with the theory obtained from the literature.

1.3) A deficiency of explicit explanations regarding the relationships between some basic parameters in the theory of instabilities has been detected; such as the relationship between the "neutral stability curves" and the "instability growth rate".

Graphs have been introduced to highlight the graphical relationship between important parameters, such as the "neutral stability curves" and the "growth rate of instabilities", to support the understanding of the Theory of Instabilities.

Issue 2: The cellularity and the Stability Study of the Flame

Before the Thesis - State of the Art:

Extensive research on the study of the cellularity in spherical combustion flames can be found in the literature. Several studies clearly indicate a relationship between the self-acceleration of such flames and the formation of a cellular flame front.

Shortcomings detected

2.1) There is a lack of established methodology and consensus for the study of cellularity in spherical flames. Disparate criteria have been identified when defining the onset of cellularity.

Thesis proposals

This Thesis proposes a methodology for obtaining a model based on experimental design (DoE) that studies the onset of cellularity in ethanol flames. No other statistical models have been found in the literature that address the same objective. This study is denoted as "Stability study of the flame".

2.2) In several studies, the analysis of cellularity tends to be more qualitative and subjective in certain aspects.

Although there are other studies that help establish parameters to determine the onset of cellularity in spherical flames, the parametric study may be somewhat limited, or the definitions provided are vague and lack objectivity

The model proposed in this thesis for the "Stability Study of the Flame" is based on a series of parameters that define the phenomenon of cellularity. These parameters are objectively measurable.

2.3) Most studies on cellularity focus on its onset. However, there are fewer literary references that study the development of cellularity. Additionally, no references have been found that classify in detail the accelerations experienced by flames due to the different types of cellularity, beyond more qualitative descriptions

The proposed model, combined with the experiments conducted and the Schlieren images obtained, provides detailed and objective information on the development of cellularity in and how it affects the evolution of the flame in ethanol combustion processes.

CAPÍTULO 3:

INSTALACIÓN Y METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

3. INSTALACIÓN, METODOLOGÍA EXPERIMENTAL Y TRATAMIENTO DE DATOS

En este capítulo se describe la instalación experimental empleada en esta Tesis para la realización de los experimentos; la instrumentación disponible para el registro de los datos de presión e imágenes durante el proceso de combustión; la metodología experimental seguida y las herramientas disponibles para el tratamiento de los datos mencionados anteriormente.

3.1. Descripción de la instalación experimental y la instrumentación

En primer lugar, se detalla la instalación experimental, donde se han realizado los experimentos de etanol estudiados en esta Tesis, haciendo mención a cada uno de sus elementos y describiendo la instrumentación disponible. La instalación de la que se dispone para el estudio de combustibles es una bomba de combustión a volumen constante (BCVC) de geometría interna cilíndrica. Se muestra en la Figura 3.1 un esquema general de dicha instalación con la instrumentación asociada.

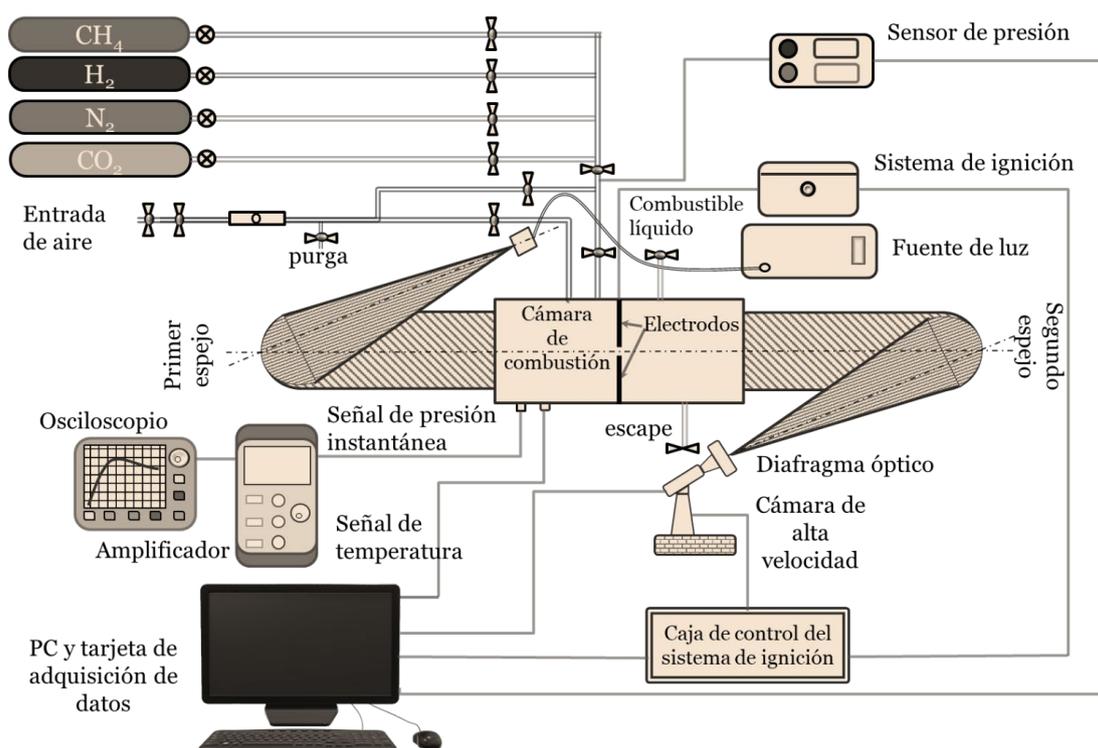


Figura 3.1. Esquema de la instalación de la bomba de combustión a volumen constante con la instrumentación asociada y los combustibles disponibles.

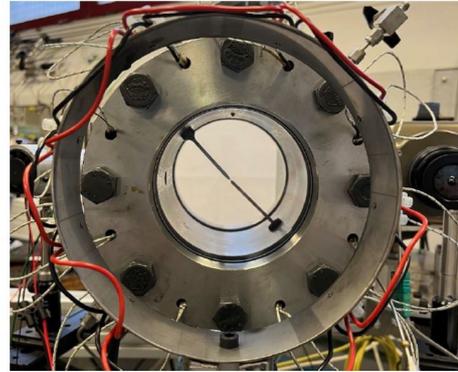
En general, las bombas de combustión a volumen constante (BCVC), como la mostrada en la figura anterior, permiten el análisis de los procesos de combustión en régimen

3. Instalación, metodología experimental y tratamiento de datos

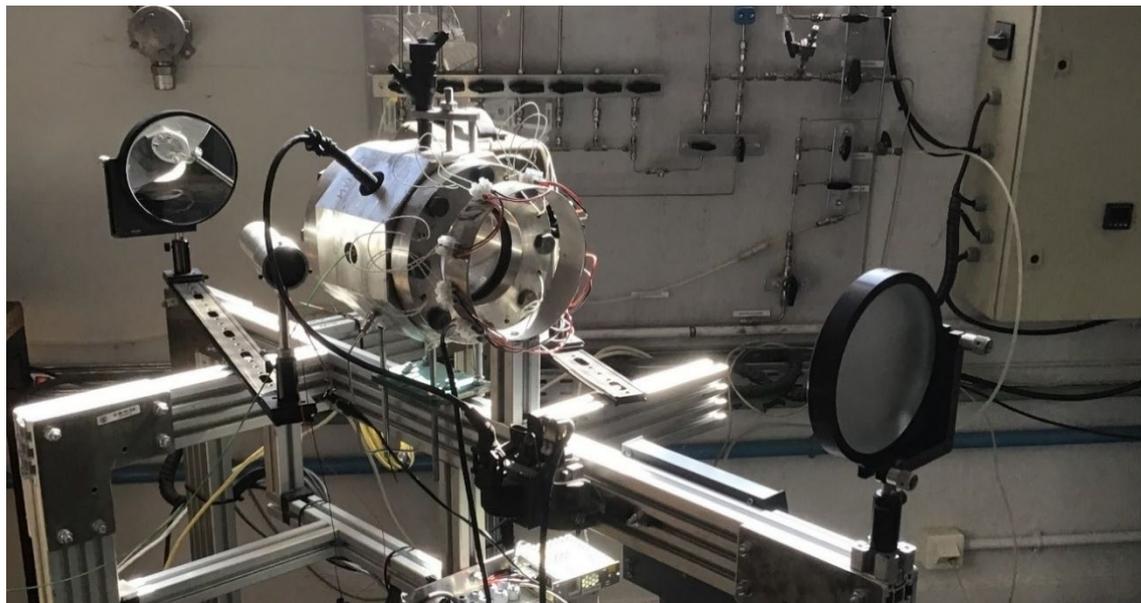
laminar, aislándolo de factores externos como es por ejemplo la turbulencia generada en un motor de combustión. Esto permite el estudio de la naturaleza de la combustión, así como fenómenos concretos, inestabilidades o celularidad, que en régimen turbulento quedarían ocultos. La bomba de combustión a volumen constante de la que se dispone para la realización de esta Tesis se muestra en la siguiente Figura 3.2.



(i)



(ii)



(iii)

Figura 3.2. Perspectiva de la instalación de BCVC y elementos de la fotografía Schlieren.

En la Figura 3.2 (i) anterior se observa la cámara de combustión junto con la cámara de alta velocidad, cuya funcionalidad se explica posteriormente. En la Figura 3.2 (ii) se muestra una vista frontal de la cámara de combustión donde se aprecian los electrodos, encargados del sistema de encendido de la mezcla para iniciar la combustión: el sistema de encendido consiste en una bobina que, conectada a una bujía provoca un salto de chispa entre los dos electrodos, quemando una pequeña cantidad de volumen de reactivos y desencadenando así la combustión. Parte de este sistema se puede ver en la Figura 3.2 (iii)

(cable negro más capuchón de la bujía conectada al electrodo en la parte superior izquierda de la bomba). En esta misma figura se observan también los espejos y la fuente de luz (led) cuyo fin se explica también posteriormente.

Por otro lado, también en la Figura 3.2 (ii) se advierte en la parte superior derecha de la bomba la válvula con la boquilla instalada para la introducción, mediante una jeringuilla, los combustibles líquidos. En esta misma imagen se observan las conexiones y aberturas para el alojamiento de las resistencias eléctricas encargadas del calentamiento de la cámara de combustión para adquirir la temperatura deseada.

El diámetro interior de la cámara de combustión de la BCVC es de 114 mm (57 mm de radio interior), con una longitud de 135 mm y, dada su geometría interior cilíndrica, hace un volumen total de 1,385 l. La cámara de combustión cilíndrica de la BCVC tiene dos ventanas hechas de silicio fundido situadas en ambas caras por las que es posible visualizar el interior de la cámara de combustión. La estanqueidad se asegura mediante dos juntas tóricas de vitón situadas entre los cristales y la base de la cámara y unas juntas planas del mismo material que se encuentran entre los cristales y las tapas de la bomba. El diseño permite trabajar en condiciones de hasta 0.2 MPa y 600 K.

Los principales datos experimentales que se obtienen durante una combustión en la BCVC son la evolución de la presión durante el proceso (gracias a los sensores de presión descritos en el siguiente apartado) y las imágenes obtenidas mediante la fotografía Schlieren, la cual se describe en un apartado posterior.

3.1.1. Instrumentación bomba de combustión a volumen constante (BCVC) para la captación de los datos de presión

Las principales variables que deben controlarse para asegurar la seguridad y la correcta ejecución de un experimento son la temperatura y la presión en el interior de la cámara de combustión de la BCVC. La temperatura en el interior de la cámara sólo se mide directamente con un termopar cuando no se está produciendo un proceso de combustión, ya que no se dispone de instrumentación capaz de captar las rápidas variaciones de temperatura que ocurren durante un experimento. La presión, en cambio, se mide directamente tanto fuera del proceso de combustión como durante el proceso de combustión; la señal de presión durante el mismo es la entrada para un modelo de diagnóstico que analiza la combustión, como se explica en un apartado posterior. A continuación, se explica la metodología de medida y selección de la presión y la temperatura dentro de la cámara de combustión.

- Temperatura interior de la BCVC (sin combustión): la temperatura se controla por un PID (Proporcional Integral Derivativo) el cual recibe primero una señal externa que establece el valor final deseado (seleccionado por el usuario), o punto de consigna, y luego compara esta señal con la temperatura actual del sistema (medida con un termopar situado en la pared de la cámara de combustión). La temperatura se mide mediante un sensor de temperatura (termopar), cuya señal en voltios pasa a través de un amplificador antes de

llegar al PID. Al calcular la diferencia entre ambas señales, el PID envía una instrucción al relé de estado sólido trifásico, que actúa como un interruptor electrónico de alta frecuencia. Esto permite activar el circuito eléctrico en el que se encuentran las resistencias que calientan la BCVC, asegurando que el sistema alcance y mantenga la temperatura deseada.

- Presión en el interior de la BCVC (sin combustión): esta medición se realiza para controlar continuamente la presión dentro de la instalación, previniendo así problemas de sobrepresiones accidentales. Además, permite controlar durante el llenado de la bomba las presiones parciales de los combustibles y del aire, y detectar posibles fugas o problemas de estanqueidad. La medición de presión sin combustión, tanto para control como para el proceso de llenado, se efectúa mediante cuatro sensores piezorresistivos de presión absoluta, tipo Druck PTX-1400. Los rangos de medición de estos sensores van desde 0 bar hasta 1 bar, 4 bar, 10 bar y 20 bar, respectivamente; su incertidumbre máxima sobre fondo de escala es de 0.25% (ver Figura 3.3). El sensor de referencia es aquel cuyo fondo de escala más se aproxime al valor de la presión que se está manejando, lo cual hace más precisa las medidas proporcionando un error absoluto menor.



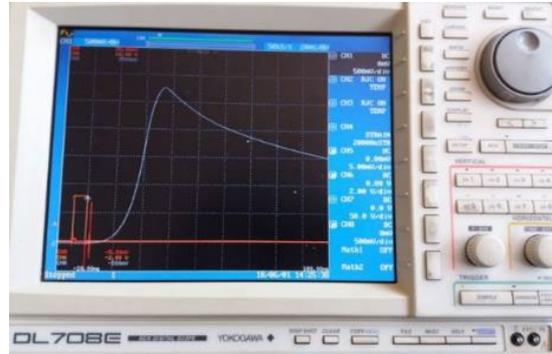
Figura 3.3. Imagen de los captadores de presión para medir la presión interior de la BCVC sin combustión.

- Presión interior de la BCVC (con combustión): la adquisición de los datos de la presión durante el proceso de combustión (su evolución temporal) es clave para posteriormente analizar cómo se ha desarrollado el proceso. Para ello, se

emplea un transductor de presión piezoeléctrico, modelo Kistler 7063, el cual se encuentra roscado a la BCVC. Este dispositivo posee un rango de medición de variación de la presión de 0 bar a 250 bar y presenta una incertidumbre máxima del 0.5% sobre el valor máximo de escala. Para convertir la pequeña señal eléctrica del sensor piezoeléctrico en una señal de voltaje proporcional y manejable, se emplea el amplificador de carga modelo Kistler 5007. En la siguiente Figura 3.4 (i) se proporciona una foto del mismo. El amplificador envía la señal de voltaje proporcional a la del piezoeléctrico al osciloscopio, que en este caso es un modelo YOKOGAWA DL708E, muestra por pantalla la señal recibida del amplificador. Éste tiene módulos de adquisición 701853 HR que permite adquirir la señal 100 kHz con una resolución de 16 bits, ver Figura 3.4 (ii) .



(i)



(ii)

Figura 3.4. Imágenes de (i) el amplificador de señal y (ii) el osciloscopio con un registro de presión (señal blanca y de salto de chispa (señal roja)).

Una vez explicada la instrumentación básica para la obtención de los datos de la evolución de la presión, en el siguiente apartado se explica la instrumentación básica para la captación de imágenes del proceso con la técnica de fotografía Schlieren.

3.1.2. Instrumentación bomba de combustión a volumen constante (BCVC) para la captación de los datos de imágenes con la técnica Schlieren

Se observan, tanto en el esquema de la Figura 3.1 como en las imágenes de la Figura 3.2 cómo, a parte de la cámara de combustión con la instrumentación de captación de presión y temperatura ya explicadas, existe un sistema externo pensado para la captación de imágenes durante el proceso de combustión basándose en la técnica Schlieren, cuyo fundamento ha sido previamente.

En la siguiente figura se muestra un esquema simplificado con los elementos básicos para el desarrollo de esta fotografía y con la disposición en “Z” tomada para la instalación. En primer lugar siguiendo el recorrido del haz de luz se tiene la fuente de luz, la cual es un LED de color blanco de 1.09 W de potencia y el cual se encuentra instalado en una carcasa

metálica, para facilitar su posicionamiento, que tiene incorporado un sistema de refrigeración por aire (con un pequeño ventilador) para evitar sobrecalentamientos, ver Figura 3.2. Seguidamente, el haz de luz generado por el LED se dirige al primer espejo cóncavo colimador que envía los rayos de luz de manera perpendicular al espacio de estudio: el interior de la BCVC. Estos rayos alcanzan el segundo espejo cóncavo, que los refleja y redirige hacia la cámara de alta velocidad, pasando por un filo que elimina la radiación de fondo y reduce la saturación; la cámara CCD recibe los rayos que no han sido desviados por la llama del proceso de combustión.

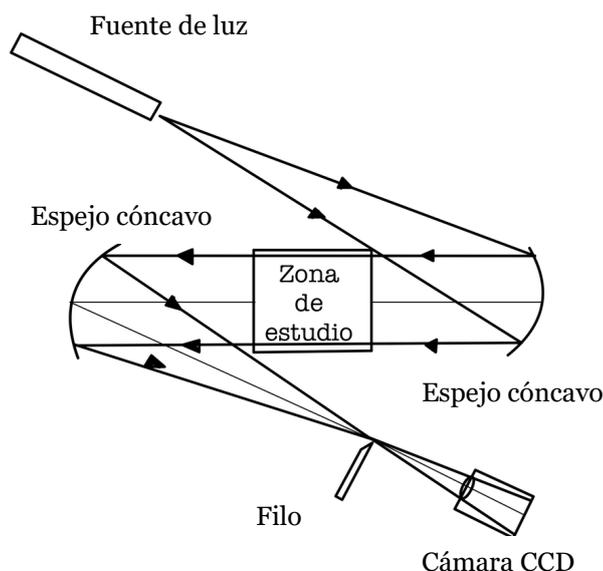


Figura 3.5. Esquema de la instalación de la bomba de combustión a volumen constante con la instrumentación asociada y los combustibles disponibles.

La cámara de alta velocidad empleada para la captura de las imágenes en esta Tesis es una Phantom v210 con una resolución máxima de 1280 x 800 píxeles a 7000 fps (*frames per second*) y con una velocidad de captura máxima de 300000 fps.

Como instrumentación complementaria, se ha empleado una balanza *Kern KB 120-3N*, de 0.001 g de precisión y 120 g de fondo de escala, para la medición de los combustibles líquidos estudiados en esta Tesis. La siguiente Figura 3.6 muestra la balanza junto con la jeringa de precisión *Gas Tight* de capacidad máxima de 1 ml unida a la *BD Spinal Needle* empleada para la introducción de los combustibles en la BCVC.



Figura 3.6. Balanza, jeringa y aguja empleadas para la medición e introducción de combustibles líquidos en la BCVC.

3.2. Metodología experimental

En el punto anterior se ha descrito la instalación experimental de la bomba de combustión a volumen constante (BCVC) y los distintos tipos de datos registrados durante el proceso de combustión: captación de la evolución de la presión y toma de imágenes con la tecnología Schlieren durante el experimento. En este punto se describen los pasos seguidos y las decisiones tomadas para la correcta realización de los experimentos de combustión. Éstos describen el acondicionamiento previo de la bomba de combustión a volumen constante, así como los cálculos realizados para la obtención de la proporción de combustible-aire y la presión inicial deseada. Se enumeran a continuación:

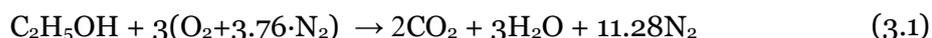
- 1) Adecuación de la cámara de combustión de la bomba de combustión a volumen constante para la realización del experimento: eliminación de residuos y ajuste de la temperatura inicial deseada.
- 2) Cálculo de la proporción de combustible-aire para conseguir el dosado relativo y la presión inicial deseada a la temperatura previamente fijada. Introducción del combustible y el aire en la bomba de combustión a volumen constante.
- 3) Espera del tiempo de evaporación del combustible (si es combustible líquido) y tiempo de mezcla para lograr homogeneidad en toda la cámara de combustión.
- 4) Realización del experimento y registro de los datos de presión e imágenes.
- 5) Expulsión de los productos y residuos de la combustión.

Esta metodología seguida se basa en la elaborada por Reyes [20] en su Tesis Doctoral, ya que la instalación con la que se realizaron los experimentos de dicha investigación tiene un funcionamiento muy similar a la instalación empleada para la presente Tesis.

Antes de realizar cualquier paso, se debe establecer la temperatura inicial a la que se va a trabajar. Esto es especialmente importante cuando la cámara de combustión se encuentra a temperatura ambiente y se desea trabajar a una temperatura más alta, puesto que el tiempo de “atemperado” de la misma asciende hasta más o menos 40 min; de esta manera se asegura que las ventanas de la cámara de combustión se encuentran a la temperatura de trabajo y se evitan gradientes de temperatura que falseen los datos y aumenten el riesgo de condensados en la cámara.

Una vez asegurada la temperatura de trabajo primer paso, denominado como “Adecuación de la cámara de combustión de la bomba de combustión a volumen constante para la realización del experimento: eliminación de residuos y ajuste de la temperatura inicial deseada”, se realiza un doble vaciado y limpieza de la cámara de combustión para asegurar la eliminación de cualquier residuo o impureza de combustiones anteriores. Previamente al vaciado y limpieza se procede al ajuste de los sensores de presión con respecto a la del ambiente; para ello se procede a la apertura del venteo y fijar ese valor como referencia (las presiones medidas son absolutas, pero la presión atmosférica sirve como referencia común a todos los sensores de presión). El vaciado y limpieza mencionados consisten, en primer lugar, en abrir el venteo de la instalación y dejar que pase el aire a cierta presión durante unos minutos (unos 2 minutos); tras esto, se cierra el venteo y se procede al primer vaciado de la cámara mediante la bomba de vacío descrita anteriormente. Una vez que se alcance una presión de aproximadamente 0.006 bar (en este primer vaciado no es tan estricto como en el segundo); alcanzada esta presión, se vuelven a repetir la limpieza y el vaciado explicados. Cuando, después del segundo vaciado, se vuelve a tener una presión absoluta de 0.006 bar, se cierran las válvulas de entrada y salida de aire de la bomba.

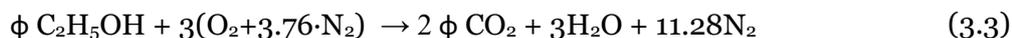
El segundo paso se realiza a la vez que el primero, mientras se “limpia” y vacía la cámara de combustión. Este paso se ha denominado “Cálculo del dosado relativo (o la proporción de combustible-aire) para conseguir la presión inicial deseada a la temperatura previamente fijada. Introducción del combustible y el aire en la bomba de combustión a volumen constante”. Para esta Tesis, se han realizado combustiones de etanol en estado líquido con la máxima pureza que permite el proceso de destilación. A pesar de la naturaleza higroscópica del etanol, existen estudios, como el de Treek et al. en 2019 [99] y el de Wang et al. [100] en 2022, que afirman que por debajo del 10% de volumen de agua (el proceso de destilación genera como máximo un 4%), la velocidad de combustión laminar tiene una variación menor al 3%, lo cual resulta más bajo que la propia dispersión de resultados en la literatura. Para conseguir cambios significativos en la velocidad del etanol se debe tener al menos un 30% en volumen de agua [100]. Dicho esto, la reacción de combustión ajustada para etanol se muestra en la siguiente ecuación (3.1).



Se tiene una masa molecular del etanol, de 46.06 g/mol y una masa molecular del aire de 28.85 g/mol, teniendo en cuenta el peso atómico de los elementos que componen el combustible y comburente. Seguidamente se calcula el dosado estequiométrico del combustible, es decir, la proporción de masa de combustible (m_f) y la masa de aire (m_a) para la que se produzca combustión completa. Se muestra a continuación en la ecuación (3.2) la fórmula para un combustible genérico de la forma $\text{C}_n\text{H}_m\text{O}_p$.

$$F_e = \frac{m_f}{m_a} = \frac{12 + \frac{m}{n} + 16 \frac{p}{n}}{137.28(1 + \frac{m}{4n} - \frac{p}{2n})} \quad (3.2)$$

Para el caso de la reacción de combustión de etanol con aire como comburente, el dosado estequiométrico es $F_e = 0.1118$. El dosado (proporción real del combustible con respecto al aire) se calcula teniendo en cuenta el dosado relativo (F_r) que se quiere tener en el experimento y el dosado estequiométrico del combustible (F_e), teniendo en cuenta la siguiente relación $F_r = \frac{F}{F_e}$, con $F = \frac{m_{f_real}}{m_{a_real}}$. En esta Tesis, para denominar al dosado relativo, se emplea la letra griega “ ϕ ” por tener un uso más internacional; el dosado relativo es escogido por el usuario, lo que lo convierte en una variable conocida en el experimento. La reacción de combustión del etanol con un dosado relativo diferente al estequiométrico se muestra a continuación en la ecuación (3.3).



El siguiente cálculo que se debe hacer es la cantidad de masa de combustible que se debe introducir. Aplicando la ecuación de estado de los gases ideales $pV = nRT$, donde el volumen total de la cámara de combustión ($V = 0.001385 \text{ m}^3$) y la presión inicial del experimento (p), así como la temperatura inicial (T) son variables de entrada conocidas y tanto la presión como la temperatura inicial son escogidas por el usuario. “ R ” se toma como 8.314 J/molK. Despejando n , se tienen el número total de moles que debe haber en la cámara de combustión en las condiciones seleccionadas, $n_t = f(p, T, V)$. Teniendo en cuenta el dosado relativo deseado y la proporción presentada en la ecuación (3.3), se calculan los moles de combustible (tanto del etanol como del agua) y comburente. Con el peso molecular del etanol, se calcula la masa de combustible necesaria para lograr la proporción deseada entre éste y el aire, m_{f_real} .

Una vez calculada la masa del etanol líquido que se debe insertar en la cámara de combustión para que en las condiciones seleccionadas de presión y temperatura se tenga un dosado relativo concreto, se procede a introducir el combustible en la cámara de combustión. Para ello, se mide con una aguja de precisión (descrita en el apartado

anterior) el volumen del combustible, haciendo un cálculo trivial para transformar la masa en volumen; la densidad del etanol líquido usado es de 0.805 g/m^3 a temperatura ambiente, que es en las condiciones en las que se va a tomar la muestra. Se hace una segunda comprobación de la cantidad de combustible que se ha introducido en la aguja midiendo la masa mediante la báscula (también descrita en el apartado anterior).

Una vez verificada la cantidad de combustible mediante el volumen y la masa, se procede a su introducción siguiendo la siguiente mecánica descrita a continuación. El paso primero de esta metodología experimental finalizaba con la bomba de combustión prácticamente en vacío, con una presión mucho menor que la ambiental. Esta depresión asegura la succión del combustible, introducido por una válvula mediante la aguja de precisión. Como dato importante, se tiene que todos los experimentos realizados con etanol se han ejecutado con una temperatura inicial mínima de 374 K ($70 \text{ }^\circ\text{C}$, establecida mediante el control PID (Proporcional Integral Derivativo) que activa o desactiva las resistencias dispuestas alrededor de la cámara), por lo que no se toma como dificultad la evaporación del mismo. Durante la apertura de la válvula para introducir el combustible, se puede insertar algo de aire ambiente en la cámara de combustión, pero esto no se considera un problema ya que la cantidad que se introduzca se tiene en cuenta a la hora de calcular la presión inicial deseada. Una vez introducido el combustible y tras asegurar la evaporación del mismo, se abre la válvula de aire exterior presurizado y se llena la cámara de combustión hasta conseguir la presión inicial deseada. Una vez realizado esto, se prosigue al paso 3 de esta metodología: “Espera del tiempo de evaporación del combustible y tiempo de mezcla para lograr homogeneidad en toda la cámara de combustión”.

Este paso está marcado principalmente por el tiempo de espera en la mezcla, el cual se estableció en 6 minutos para todas las condiciones de etanol. Este tiempo se determinó comparando las curvas de presión obtenidas para diferentes tiempos de mezcla y sobre la base que estableció Reyes [20] en su Tesis doctoral para combustibles líquidos. Durante el tiempo de mezcla, se pone a punto los elementos de la adquisición de datos, especialmente la cámara de alta velocidad, ya que se apaga durante la realización de los pasos 1, 2 y 5 para evitar su calentamiento (se actúa de la misma manera con el led encargado de emitir el haz de luz necesario para la metodología Schlieren).

Una vez pasado el tiempo de mezcla se inicia el experimento haciendo saltar la chispa entre los electrodos, lo que se corresponde con el paso 4: “Realización del experimento y registro de los datos de presión e imágenes”. Durante el experimento, la presión es registrada a través del amplificador en el osciloscopio al que le llegan las señales de salto de chispa y presión; las imágenes Schlieren se almacenan en la memoria de la cámara de alta velocidad y requieren de una selección manual para eliminar los fotogramas previos al salto de chispa, así como los últimos fotogramas donde ya no se obtiene información de interés.

El paso 5 “Expulsión de los productos y residuos de la combustión” se debe realizar en cuanto haya finalizado el experimento para reducir el riesgo de condensados del agua dentro de la cámara de combustión. Esto supondría un problema especialmente para la

realización de la fotografía Schlieren en una combustión posterior, ya que los condensados depositados en las ventanas de la cámara impedirían el paso de la mayoría de los rayos del haz, aportando una visión de “manchas oscuras” en las imágenes. Lo primero que se debe realizar tras la combustión es la apertura del venteo de la cámara de combustión, para expulsar al exterior los productos de la combustión; seguidamente se introduce aire presurizado en la cámara para favorecer la salida de los mismos, lo que lleva al paso 1, comenzando nuevamente la metodología explicada.

En los siguientes apartados 3.3, 3.4 y 3.5 se explican las herramientas usadas para el tratamiento de datos que permiten el diagnóstico del proceso de combustión, principalmente datos del registro de las imágenes y datos del registro de la presión.

3.3. Herramienta para el tratamiento de las imágenes Schlieren

Para el tratamiento de los datos en forma de imágenes Schlieren, se hace uso del modelo de análisis de imágenes desarrollado en Python en el contexto de esta Tesis doctoral, en el cual se hace uso de la librería “OpenCV” para la cuantificación de la celularidad en las imágenes. Los detalles sobre el funcionamiento del programa desarrollado se pueden encontrar en [101].

La medición cuantitativa de la celularidad se realiza en concreto mediante la función de detección de contornos “findContours” que proporciona la mencionada librería de Python “OpenCV”. El parámetro cuantitativo que proporciona el código para medir la celularidad se denomina “densidad celular” y es igual al número de objetos detectados por la función en un área delimitada por el 80% del radio del frente de llama, siguiendo la siguiente ecuación (3.4).

$$\rho_{cell} = \frac{n_{objetos}}{A_{red}} = \frac{n_{objetos}}{\pi \cdot (r \cdot 0.8)^2} \quad (3.4)$$

Siendo r el radio del frente de llama en cada instante y A_{red} [cm²] donde la función “findContours” detecta los contornos, $n_{objetos}$. En la Figura 3.7 se muestra un ejemplo visual de la detección de contornos en Python.

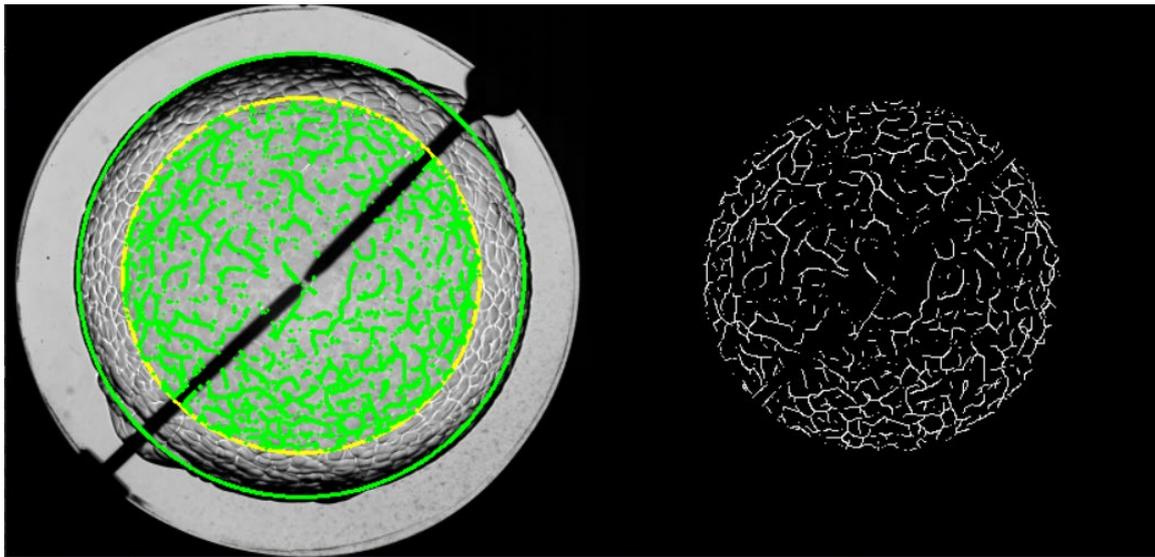


Figura 3.7. Detección de contornos en Python mediante la función “findContours” aplicado a la búsqueda de celularidad en un frente de llama de una combustión de etanol de 1.01 de dosado relativo, 0.3 MPa de presión inicial y 343 K de temperatura inicial.

La circunferencia verde de la anterior figura se corresponde con el radio en ese instante del frente de llama y la circunferencia amarilla delimita el área de búsqueda de contornos. Con esto se evita la detección de contornos correspondientes al frente de llama (que no formarían parte de la celularidad) y se reduce la distorsión de la proyección por ser un frente de llama esférico.

3.4. Herramienta para el tratamiento de los datos de presión: modelo de diagnóstico termodinámico de dos zonas.

Las técnicas matemáticas de modelado aplican ecuaciones termodinámicas para investigar el proceso de combustión. En los modelos de diagnóstico, se analiza la evolución de la presión, mientras que los modelos predictivos se enfocan en prever cómo se desarrollará la combustión sin realizar experimentos previos.

Un enfoque común en el análisis de combustión es el modelo de dos zonas, que sirve de base para el análisis experimental en esta investigación. Este modelo divide la cámara de combustión en dos zonas: una correspondiente a los productos quemados (productos de la combustión) y otra a los productos no quemados (reactivos: combustible y aire). Su resultado principal, la velocidad de combustión laminar, se calcula a partir de los datos de presión registrados. En esta sección, se describirá de forma general el modelo de diagnóstico que se utiliza en este trabajo, el cual fue inicialmente propuesto por Horrillo [102] y luego ampliado por Iglesias [103] y A. Melgar et al. [31]. Este último artículo ofrece una descripción más detallada del modelo. El modelo se puede encontrar en [69].

Las hipótesis utilizadas para formular el modelo de diagnóstico son las siguientes, cuya validez se discute en [31]:

- La cámara de combustión de la BCVC se divide en dos zonas concéntricas: la zona de mezcla fresca o sin quemar (u), que consiste en una mezcla de combustible y oxidante (principalmente aire) a la espera de que ocurra la combustión; y la zona de quemados (b), que contiene los productos de la combustión de la mezcla fresca. Inicialmente, toda la BCVC es una única zona sin quemar. Sin embargo, una vez que se inicia la combustión a través de la chispa en el centro geométrico de la esfera de la BCVC, se forman dos zonas concéntricas: la esfera interior corresponde a la zona de quemados, cuya superficie es el frente de llama que avanza de manera esférica, mientras que el resto del volumen se corresponde con la zona sin quemar.
- La presión se considera uniforme en cada instante para toda la cámara de combustión: p y su evolución temporal durante la combustión es una de las entradas principales del modelo de diagnóstico.
- Las dos zonas de quemados y no quemados se definen por sus promedios de temperatura, T_u para la zona de no quemados y T_b para la zona de quemados. También se caracterizan por la composición y otras variables intrínsecas. En la zona de mezcla fresca (u), la composición química permanece constante, mientras que en la zona de productos quemados (b), ésta experimenta variaciones, dependiendo del equilibrio en la disociación de: $CO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO_2$.
- Se considera que la reacción está en equilibrio, ya que la temperatura de la masa quemada es alta. La presencia de CO en la zona quemada provoca una disminución en el calor liberado por unidad de masa quemada.
- Se asume un comportamiento de gas ideal que depende de la composición de cada zona, aplicándose la ecuación $pV = RnT$ en ambas.
- La composición de la zona de masa no quemada no varía con la temperatura; sin embargo, en la zona de masa quemada, se considera un cambio en la composición debido a la reacción de disociación del CO_2 .
- No se considera transferencia de calor entre las dos zonas, aunque sí hay transferencia de calor entre las paredes y cada zona. Sólo se considera esta transferencia una vez finalizada la combustión, cuando el frente de llama choca con las paredes de la cámara. El resto del proceso se considera que se desarrolla de manera adiabática.
- El flujo másico que se transfiere de la zona de no quemados a la zona de sin quemados es el único flujo másico que se tiene en cuenta, $\dot{m}_{u \rightarrow b}$, que se da a través del frente de llama (no se consideran pérdidas de masa por otras vías).

Las ecuaciones de las que parte el modelo son principalmente las ecuaciones de conservación de la energía y las de estado de cada una de las zonas, así como la de conservación de la masa y del volumen total.

La ecuación de la energía para sistemas abiertos y no estacionarios se aplica para cada zona de no quemados, u, y quemados, b, (ver ecuaciones (2.11) y (2.12)) teniendo en cuenta que en la zona de quemados solo entra masa (\dot{m}_b) y en la zona de sin quemados solo sale masa ($-\dot{m}_u$).

$$\frac{dU_u}{dt} = \dot{Q}_u + \dot{W}_u - \dot{m}_u h_u \quad (3.5)$$

$$\frac{dU_b}{dt} = \dot{Q}_b + \dot{W}_b + \dot{m}_u h_u \quad (3.6)$$

Como se ha mencionado, la ecuación de estado considerada en ambas zonas es la de los gases ideales, como muestran las siguientes ecuaciones.

$$p_b v_b = RT_b \quad (3.7)$$

$$p_u v_u = RT_u \quad (3.8)$$

Se aplica la ecuación de conservación de la masa teniendo en cuenta el gasto másico intercambiado entre ambas zonas.

$$\dot{m}_{u \rightarrow b} = \dot{m}_b = -\dot{m}_u \quad (3.9)$$

Por último, se tiene que el volumen total de la cámara de combustión dividido en la zona de quemados y de no quemados se debe conservar, tal y como se muestra en la siguiente ecuación.

$$V_t = V_b + V_u \quad (3.10)$$

Teniendo en cuenta la siguiente relación entre zonas: $\dot{V}_{u \rightarrow b} = \dot{V}_b = -\dot{V}_u$

Se tiene un sistema de 6 ecuaciones cuyas 6 incógnitas son las temperaturas, los volúmenes y las masas de cada zona: T_u , T_b , V_u , V_b , m_u y m_b . Los datos de entrada conocidos son la presión en cada zona (igual en ambas), el volumen inicial de cada zona, la temperatura inicial en cada zona, la composición química de la zona sin quemar (constante) y quemada (equilibrio) y el volumen total de la cámara. Por otro lado, las entalpías, flujos de calor y trabajo se pueden escribir en función de la temperatura consultando los coeficientes proporcionados por el NIST para cada combustible [104].

El modelo resuelve el sistema y proporciona parámetros que indican cómo se ha producido el proceso de combustión del experimento analizado, como, por ejemplo, la velocidad de combustión del mismo, como se explica en un apartado posterior de esta Tesis.

3.5. Estudio de inestabilidades empleando el modelo de diagnóstico

Para el estudio de las inestabilidades de un proceso de combustión, se realizó durante la elaboración de esta Tesis una modificación del modelo de diagnóstico para la incorporación de las curvas de la tasa de crecimiento de inestabilidades (ver apartado 2.4.2).

En la práctica, para el cálculo de estas curvas, se modificó el programa del modelo de diagnóstico de dos zonas (ver apartado 3.4), ya que se creó una nueva sección para el estudio de estabilidad en procesos de combustión. En concreto, para este primer punto del análisis en el que se calculan los límites de estabilidad, se creó una función general denominada “CalculalimitesPeninsula”.

Antes de la explicación concreta de la función del cálculo de límites de estabilidad “CalculalimitesPeninsula”, es conveniente realizar un recordatorio de la teoría de inestabilidades, la cual se puede encontrar completa en el apartado 2.4. En él se explica que la tasa de crecimiento de inestabilidades está influenciada básicamente por dos efectos: el efecto hidrodinámico y el termo-difusivo. El efecto hidrodinámico es siempre inestable (de valor positivo) y por tanto contribuye en el aumento de la tasa de crecimiento de inestabilidades. El efecto termo-difusivo se recuerda que puede tener un carácter estable (valor negativo) y contribuir negativamente en la tasa de crecimiento de inestabilidades o, por el contrario, puede tener un carácter inestable (valor positivo) y contribuir, junto con el efecto hidrodinámico positivamente en la tasa de crecimiento de inestabilidades.

Teniendo en cuenta esto último y aplicándolo en la Ecuación (2.19) a cada una de las combustiones disponibles de hidrógeno y metano, se observó que cuando el efecto termo-difusivo tenía un carácter estable ($Le_{eff} > Le_{eff}^*$), la tasa de crecimiento de inestabilidades tiene la forma que muestra la gráfica Figure 2.14 (a) (señalada por la etiqueta de *hydrodynamic instability*), donde la curva posee un máximo para una longitud de onda determinada, esto se da porque el efecto termo-difusivo amortigua el efecto hidrodinámico en determinadas longitudes de onda. Sin embargo, en la segunda situación, ambos efectos tienen un aporte positivo en la tasa de crecimiento de inestabilidades y se dibujaría la curva también recogida en la Figure 2.14 (a) (cuando $Le_{eff} < Le_{eff}^*$ señalada por la etiqueta de *termo-diffusive instability*). En esta segunda curva, se observa que no existe un máximo, al menos dentro del régimen de longitudes de onda que físicamente interesan en este estudio, que son aquellas que son mayores que el espesor del frente de llama y menores que el radio del frente de llama en cada instante (con el límite de 5.7 cm que marca la BCVC); esto concuerda con el comportamiento teórico explicado por Matalon [43], donde, a mayores, plantea una estabilización teórica para números de onda adimensionales de

onda muy grandes (longitudes de onda muy pequeñas) que salen fuera del estudio experimental planteado (explicado en el apartado 2.4.2, Figure 2.14).

Dentro de esta función general denominada “CalculalimitesPeninsula” existen funciones secundarias. A continuación, se muestra un diagrama de flujo con las funciones principales destacadas en azul grisáceo.

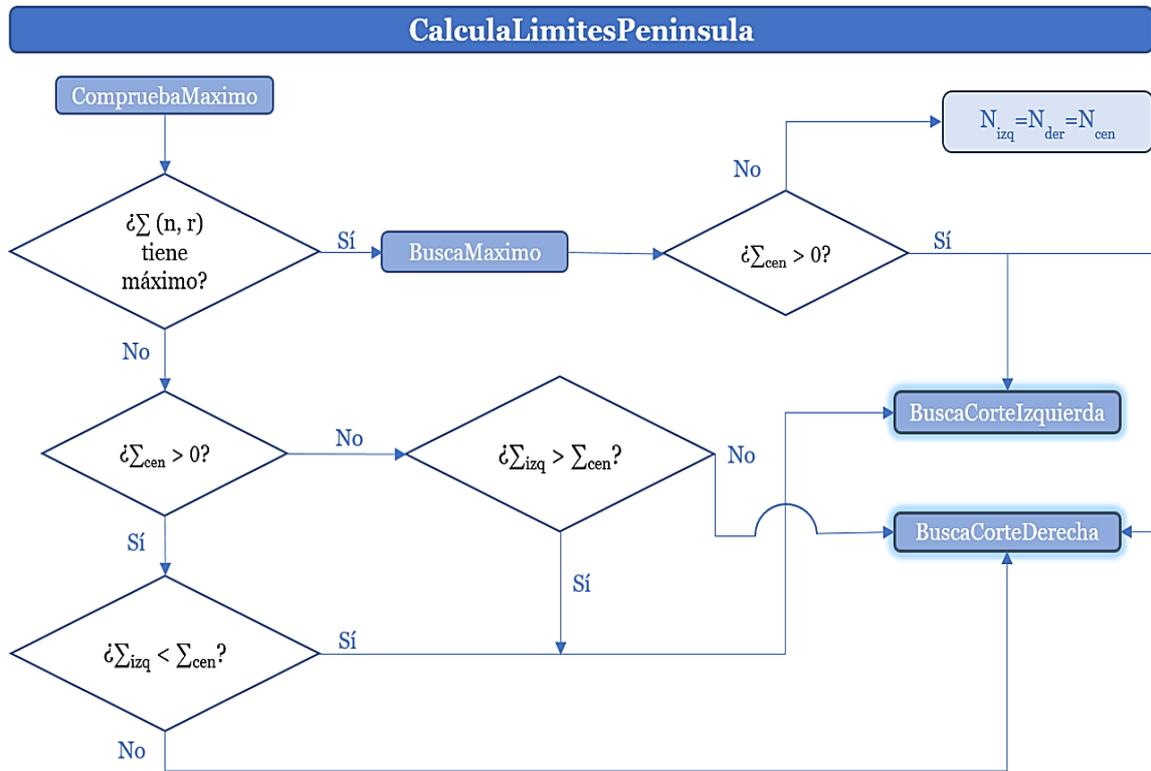
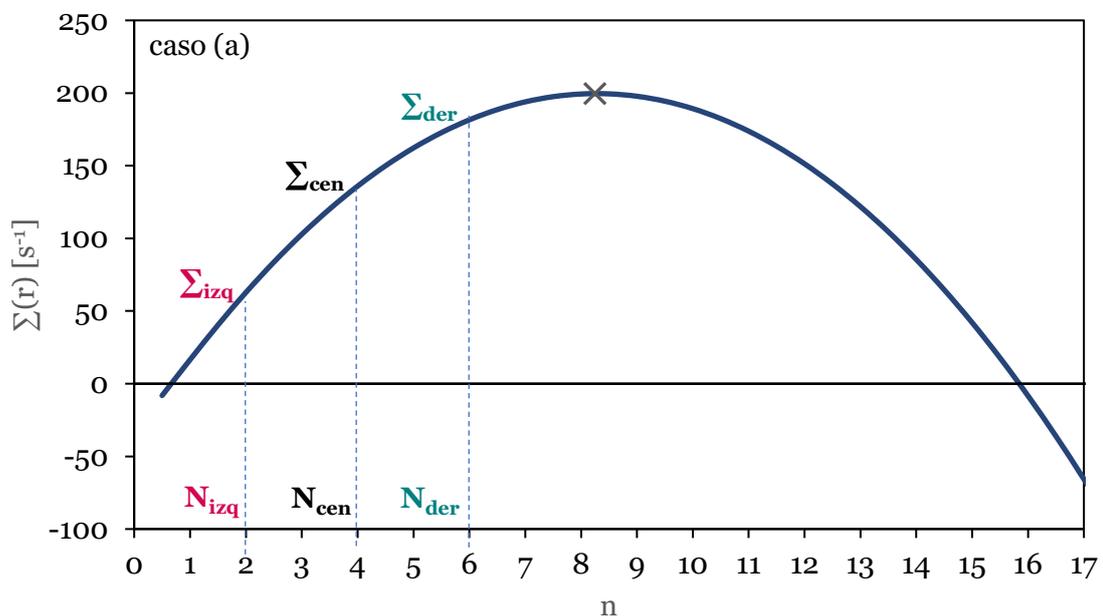


Figura 3.8. Diagrama de flujo de la función añadida al modelo termodinámico de diagnóstico “CalculalimitesPeninsula”.

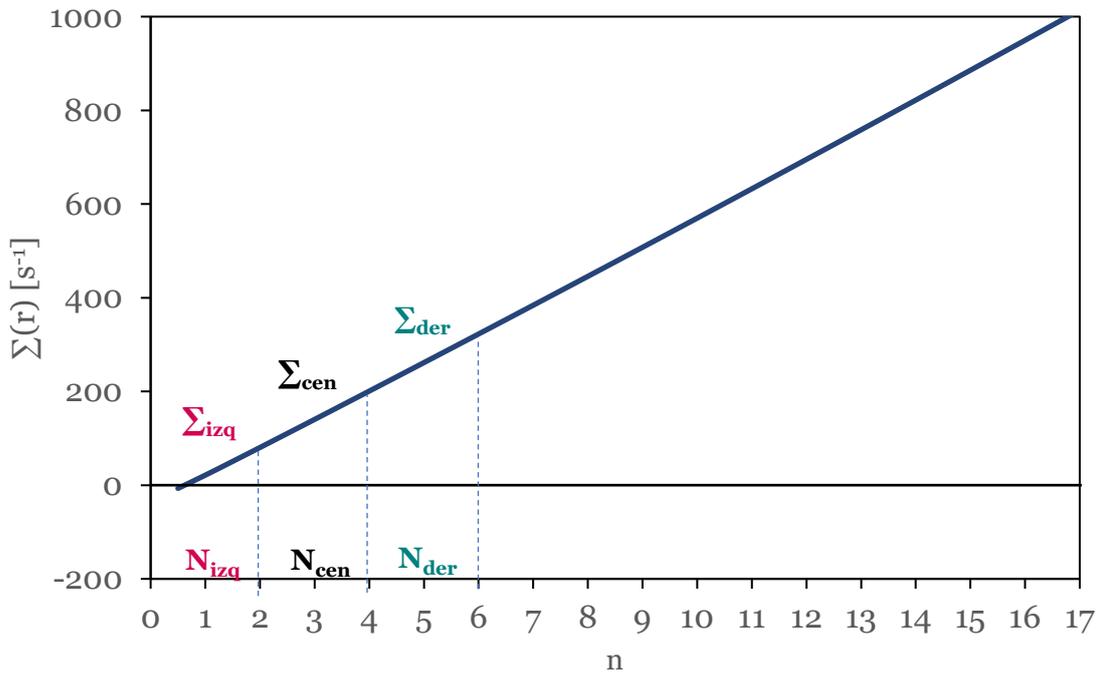
3.5.1. Función “CompruebaMaximo”

La función secundaria “CompruebaMaximo” es la primera función llamada por “CalculalimitesPeninsula”. En la función “CompruebaMaximo” se detecta la forma que tiene la tasa de crecimiento de dentro del rango de estudio, ver Figure 2.14 (a). La manera en que detecta la forma de la tasa, Σ , es buscando si ésta tiene un máximo o no para cada radio del frente de llama. Para ello se crean tres parámetros clave denominados N_{izq} , N_{cen} y N_{der} que son valores del número adimensional de onda que sirven para acotar el valor máximo buscado. Se comienza con unos valores iniciales de estos tres parámetros, con la condición de que $N_{izq} < N_{cen} < N_{der}$. Se calculan entonces tres puntos de la tasa de crecimiento en función de cada uno de los números de onda anteriores teniendo en cuenta el radio del frente de llama correspondiente (así como los parámetros instantáneos necesarios para el cálculo) $\Sigma_{izq}(N_{izq}, r_i, \omega_i, \Omega_i)$; $\Sigma_{cen}(N_{cen}, r_i, \omega_i, \Omega_i)$; $\Sigma_{der}(N_{der}, r_i, \omega_i, \Omega_i)$, ver

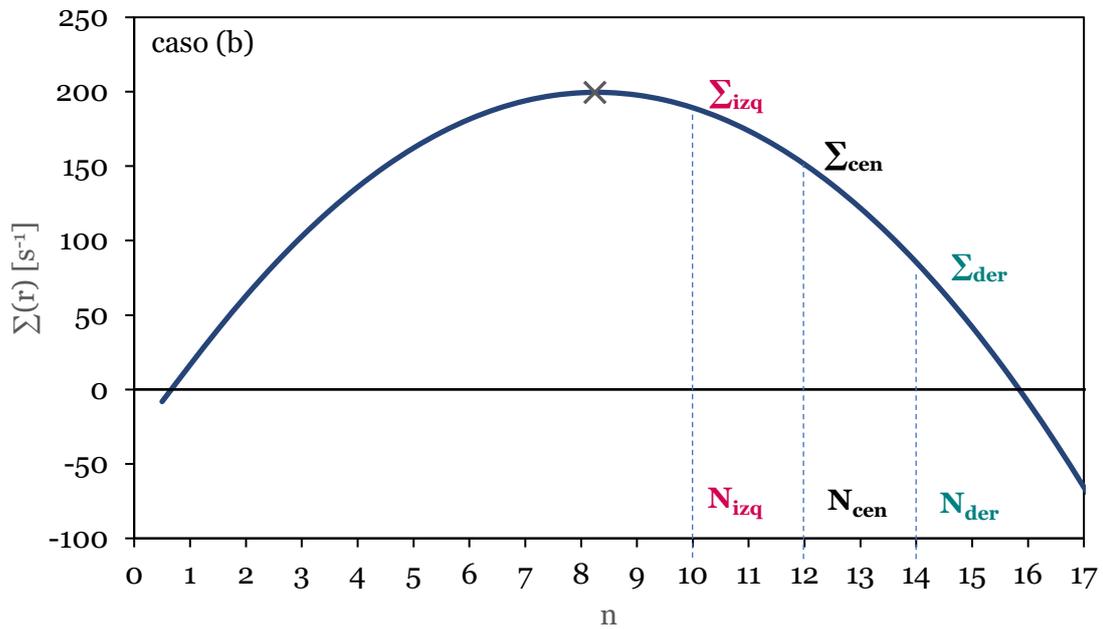
ecuación (2.19). Se emplea un bucle *While*, cuyas condiciones de ejecución son que no se cumpla que “ $\Sigma_{izq} < \Sigma_{cen} > \Sigma_{der}$ ” y sí se cumpla que “ $N_{izq} > 10^{-6} \ \&\& \ N_{der} < 10^6$ ”; cuando se da la primera condición de ejecución del bucle *While* (es decir, no se cumple que “ $\Sigma_{izq} < \Sigma_{cen} > \Sigma_{der}$ ”) significa que aún no se ha encontrado el máximo, mientras que la segunda condición se pone para poner un límite al bucle, especialmente cuando la función de la tasa de crecimiento de inestabilidades no tiene un máximo. En la Figura 3.9 se observan gráficamente los dos casos en los que se entra en el bucle *While*: las Figura 3.9 (i) y la Figura 3.9 (ii) están referidas a cuando el máximo está a la derecha de los valores escogidos, caso (a), el cual se puede dar tanto para tasas de crecimiento con máximo como para tasas de crecimiento sin máximo; y la Figura 3.9 (iii), caso (b), en el cual se tiene el máximo a la izquierda de los valores escogidos, sólo se puede dar para curvas con máximo.



(i)



(ii)

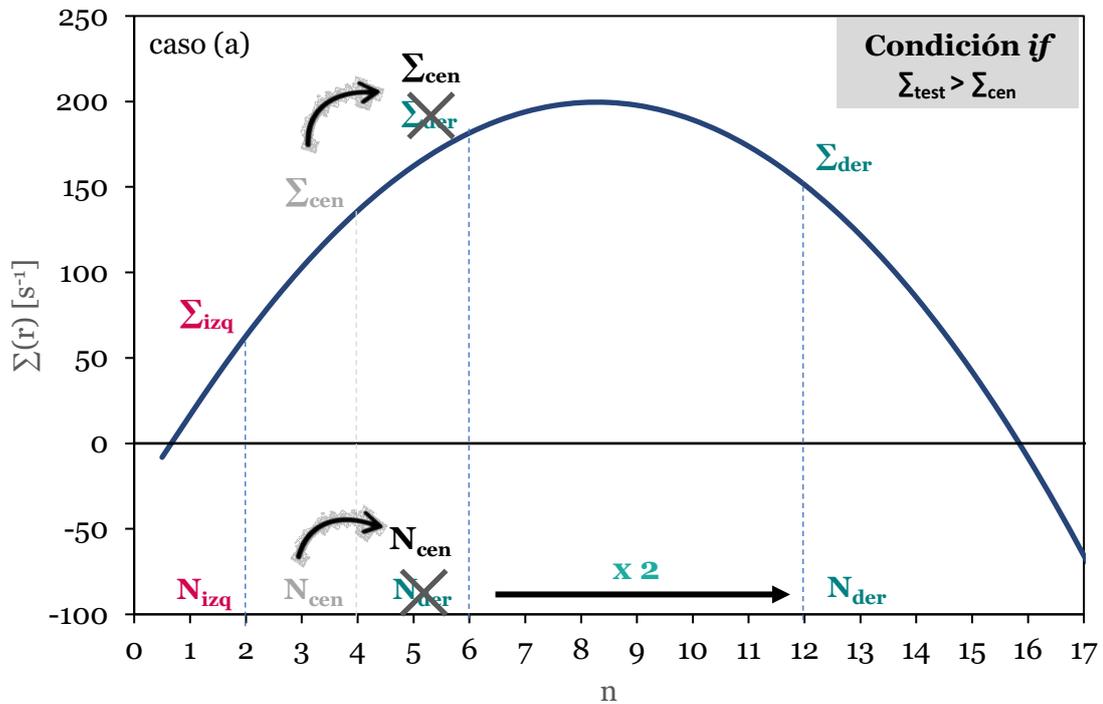


(iii)

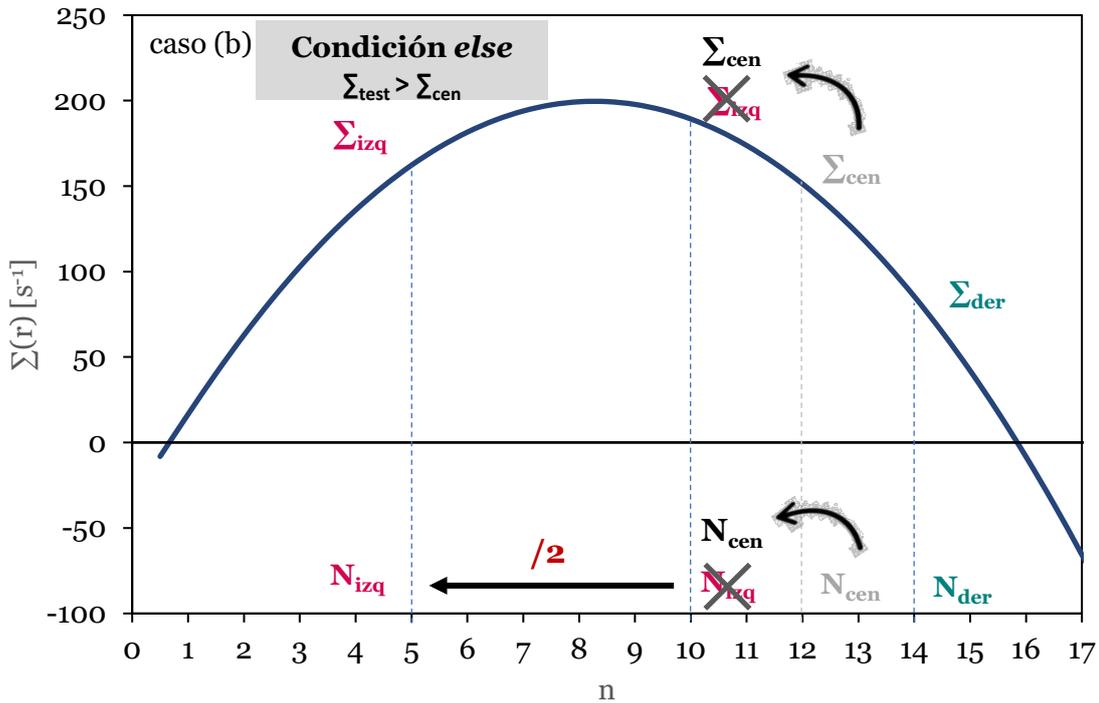
Figura 3.9. Tasa de crecimiento de inestabilidades analizadas por el bucle “While” en la función “BuscaMaximo” donde la condición $\Sigma_{izq} < \Sigma_{cen} > \Sigma_{der}$ no se cumple. Caso (a), máximo a la derecha de los valores (para tasas con (i) y sin máximo (ii)) y caso (b), a la izquierda de los valores (sólo tasas con máximo (iii)).

Cuando se da el caso (a), la ejecución entra dentro del bucle *While* y se cumple la condición *if* " $\Sigma_{cen} < \Sigma_{der}$ ", donde el valor de N_{der} pasa a ser el nuevo valor de N_{cen} ($N_{cen} = N_{der}$) y seguidamente el nuevo N_{der} pasa a ser el doble del antiguo valor ($N_{der} = N_{der} \cdot 2$); lo que se pretende con esta acción es desplazar la búsqueda del centro hacia la derecha. Una vez realizado este cambio de valores en los números de onda adimensionales, se vuelve a comprobar la condición del bucle *While*. La lógica de esta acción se justifica en la Figura 3.10 (i).

Si no se cumpliera la condición *if* indicada anteriormente dentro del bucle *While*, entonces el programa entraría en la condición *else*, que se daría cuando " $\Sigma_{izq} > \Sigma_{cen}$ "; se estaría entonces en el caso (b) expuesto en la Figura 3.9 (iii) anterior. En esta condición entonces se sigue el mismo razonamiento que en la condición *if* pero hacia la izquierda, porque lo que se quiere conseguir es que " $\Sigma_{izq} > \Sigma_{cen}$ ". Para ello N_{izq} pasa a ser el nuevo valor de N_{cen} ($N_{cen} = N_{izq}$) y seguidamente el nuevo N_{izq} pasa a ser la mitad del antiguo valor ($N_{izq} = N_{izq}/2$), este paso se encuentra representado gráficamente en la Figura 3.10 (ii).



(i)



(ii)

Figura 3.10. Procedimiento de actuación de la función “BuscaMaximo cuando (i) se cumple la condición de if “ $\Sigma_{cen} < \Sigma_{der}$ ” o (ii) cuando no se cumple “ $\Sigma_{izq} > \Sigma_{cen}$ ”.

Si la tasa de crecimiento de inestabilidades no tuviera máximo, se seguiría la misma dinámica que en el caso (a) con la particularidad que el bucle *While* se ejecutaría hasta llegar al valor máximo del número de onda adimensional: $N_{der} = 10^6$.

Para salir *While* se pueden haber dado dos situaciones: o bien se cumple que “ $\Sigma_{izq} < \Sigma_{cen} > \Sigma_{der}$ ”, o bien que se haya dejado de ser verdad la segunda condición: cuando $N_{izq} < 10^{-6}$ o $N_{der} > 10^6$; esto última es más probable, como se ha explicado, en casos donde la tasa de crecimiento de inestabilidades no tiene un máximo. Aquí se daría el final de la ejecución de la función “CompruebaMaximo”, donde se ha determinado o bien que la función tiene un máximo, cuando se sale del bucle por la condición uno; o bien, que la función no tiene un máximo, cuando se sale del bucle por la condición dos.

3.5.2. Función “BuscaMaximo”

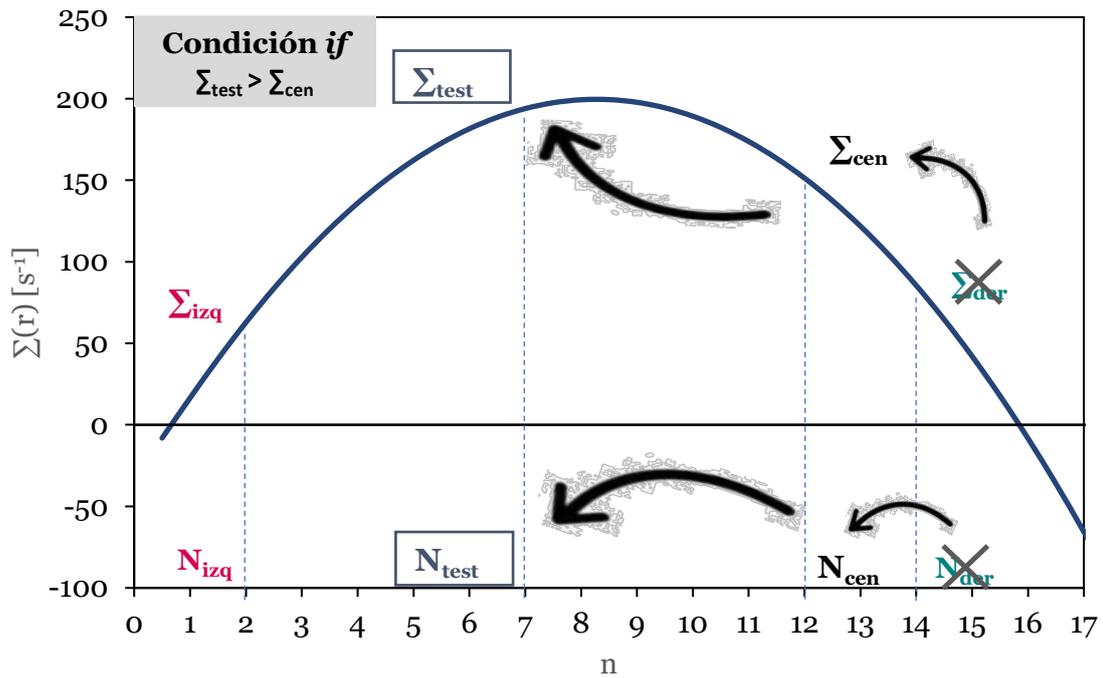
La función “BuscaMaximo” tiene como objetivo encontrar el máximo valor de la tasa de crecimiento de inestabilidades, Σ , para cada instante de tiempo o radio. La evaluación de este valor máximo es importante, porque permite determinar si la tasa de crecimiento corta al “cero” (cuando el valor máximo es positivo) o, por el contrario, todavía no se ha dado esa intersección (cuando el valor máximo es negativo). Los puntos de corte con el “cero” forman lo que se denominan como “curvas de estabilidad neutra” o el perímetro de

la “península de inestabilidad”, cuyo fundamento está desarrollado en los apartados 2.4.2.2 y 4.2.1 de esta Tesis.

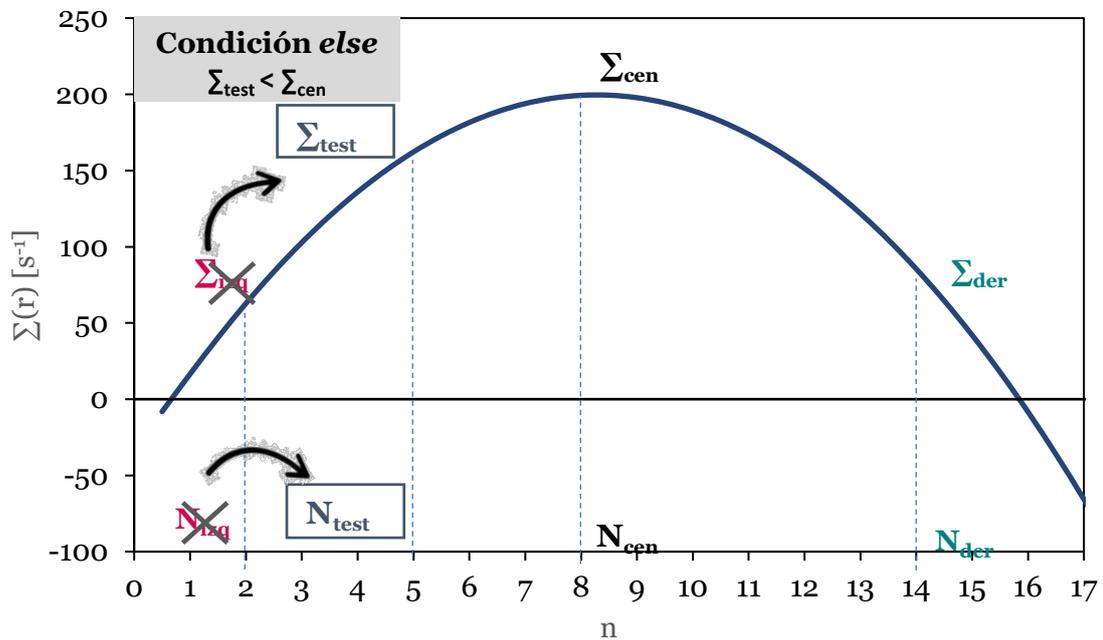
La función “BuscaMaximo” sólo es llamada cuando existe un máximo en la forma de la tasa de inestabilidades, por lo que, para que se ejecute esta función, se tiene que cumplir la condición *if* “ $N_{izq} > 10^{-6}$ && $N_{der} < 10^6$ ” (como se ha indicado en el apartado anterior esta condición se deja de cumplir para tasas de crecimiento sin máximo). En esta función se introduce una nueva variable denominada N_{test} , que se refiere al valor del número de onda que se va a probar para encontrar ese valor máximo de Σ . Esta función se ejecuta seguidamente de la función secundaria “CompruebaMaximo”; con lo cual, si se ejecuta es porque se cumple la condición de fin de la anterior función, que se recuerda que era la siguiente relación: “ $\Sigma_{izq} < \Sigma_{cen} > \Sigma_{der}$ ”. Se parte entonces de los valores de N_{izq} , N_{cen} y N_{der} otorgados por la función “CompruebaMaximo” y se tendría una situación similar a la mostrada en las Figura 3.10.

Para la búsqueda del máximo de Σ la idea general propuesta es ir acercando los puntos N_{izq} , N_{cen} y N_{der} para que finalmente los tres converjan en el máximo dentro de una tolerancia establecida. Se comienza con el lado izquierdo N_{izq} ; para ello, se le da valor a la nueva variable definida, $N_{test} = \frac{N_{izq} + N_{cen}}{2}$ y se calcula el valor de la tasa de crecimiento de inestabilidades para el radio concreto que se esté estudiando y para ese valor de N_{test} : $\Sigma(r_i, N_{test})$. A continuación, se planta en el código la condición *if* “ $\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) > \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$ ”; si esta condición se cumple, entonces los valores de los números adimensionales de onda quedarían de la siguiente forma: $N_{der} = N_{cen}$ y $N_{cen} = N_{test}$. Si no se cumpliera esta condición, es decir, “ $\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) < \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$ ”, se entraría en la condición *else* donde $N_{izq} = N_{test}$.

La idea de este planteamiento se encuentra recogida gráficamente en la siguiente Figura 3.11. La Figura 3.11 (i), muestra la lógica de la condición *if* y la Figura 3.11 (ii), de *else* para el lado derecho.



(i)



(ii)

Figura 3.11. Actuación de la función "BuscaMaximo" para el lado izquierdo dependiendo de si se cumple la condición (i) "if ($\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) > \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$)" o (ii) si no se cumple esa condición y se cumple "else $\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) < \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$ ".

3. Instalación, metodología experimental y tratamiento de datos

A continuación, se prueba con el lado derecho de N_{der} y el planteamiento es similar al explicado para el lado izquierdo, *mutatis mutandis*: $N_{test} = \frac{N_{der} + N_{cen}}{2}$; la condición de *if* es la misma que para el lado izquierdo: " $\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) > \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$ ", pero los valores que se otorgan en ella para los números de onda adimensionales son $N_{izq} = N_{cen}$ y $N_{cen} = N_{test}$; y para el *else* el cambio es $N_{der} = N_{test}$. Esto se puede ver en las siguientes Figura 3.12 (i) y Figura 3.12 (ii), de la misma manera que se mostraba para el lado izquierdo.

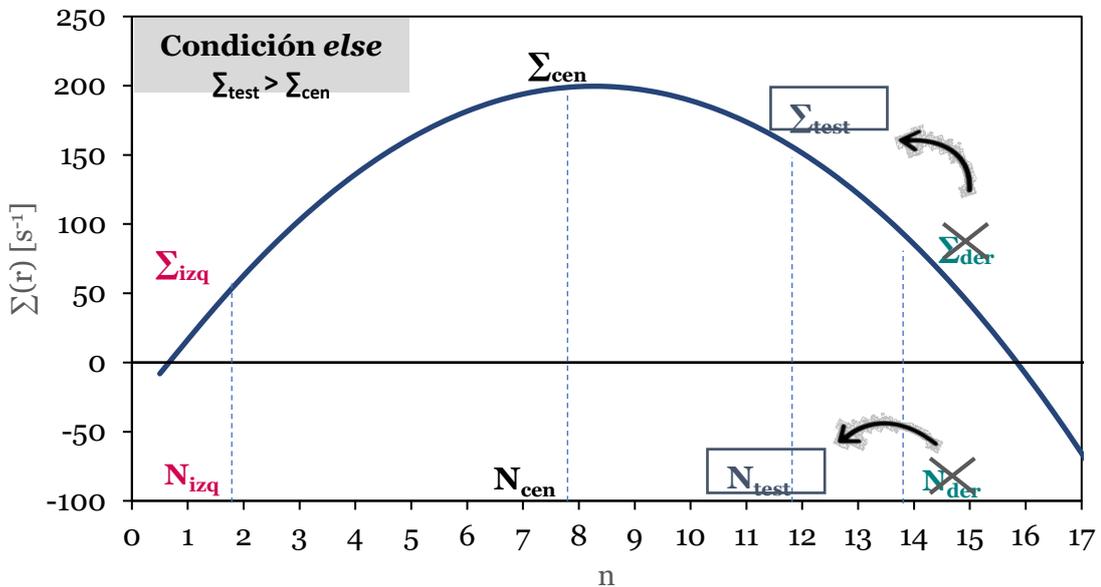
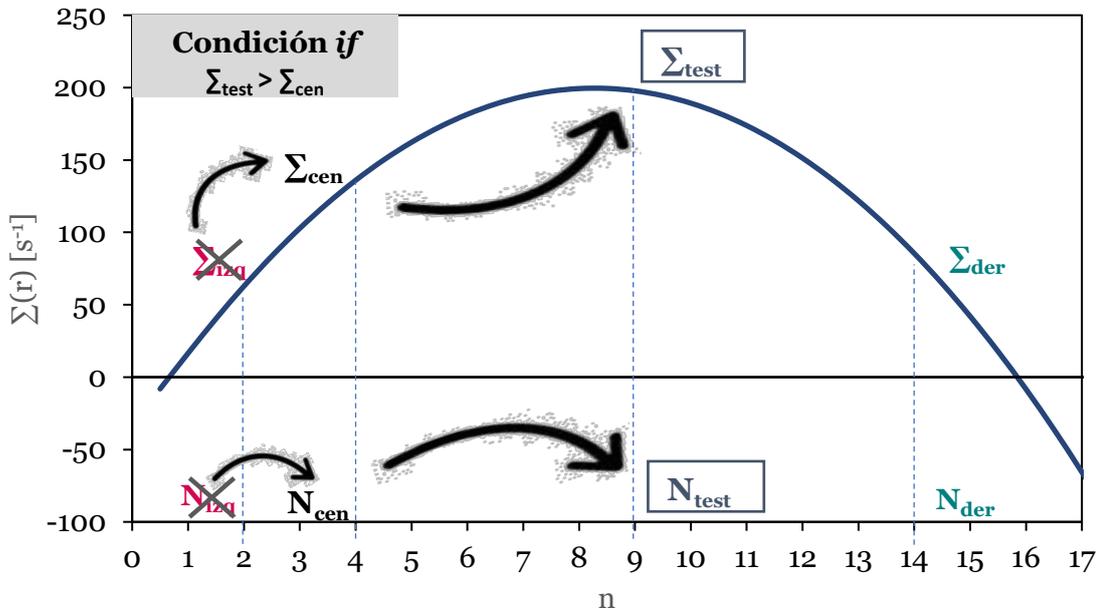


Figura 3.12. Actuación de la función "BuscaMaximo" para el lado derecho dependiendo de si se cumple la condición (i) "*if* ($\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) > \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$)" o (ii) si no se cumple esa condición y se cumple "*else* ($\Sigma_{test} = f(r_i, N_{test}) < \Sigma_{cen} = f(r_i, N_{cen})$)"

La lógica del planteamiento anterior es ir “acercando” los lados izquierdo y derecho hasta que converjan en el valor máximo de la tasa de crecimiento para el radio estudiado, todos ellos dentro de una tolerancia estipulada. Toda la ejecución de esta función “BuscaMaximo” se encuentra dentro de un bucle *While* que finalizará cuando “ $(N_{der} - N_{izq}) < \text{tolerancia}$ ”, obteniendo la situación planteada en la Figura 3.13.

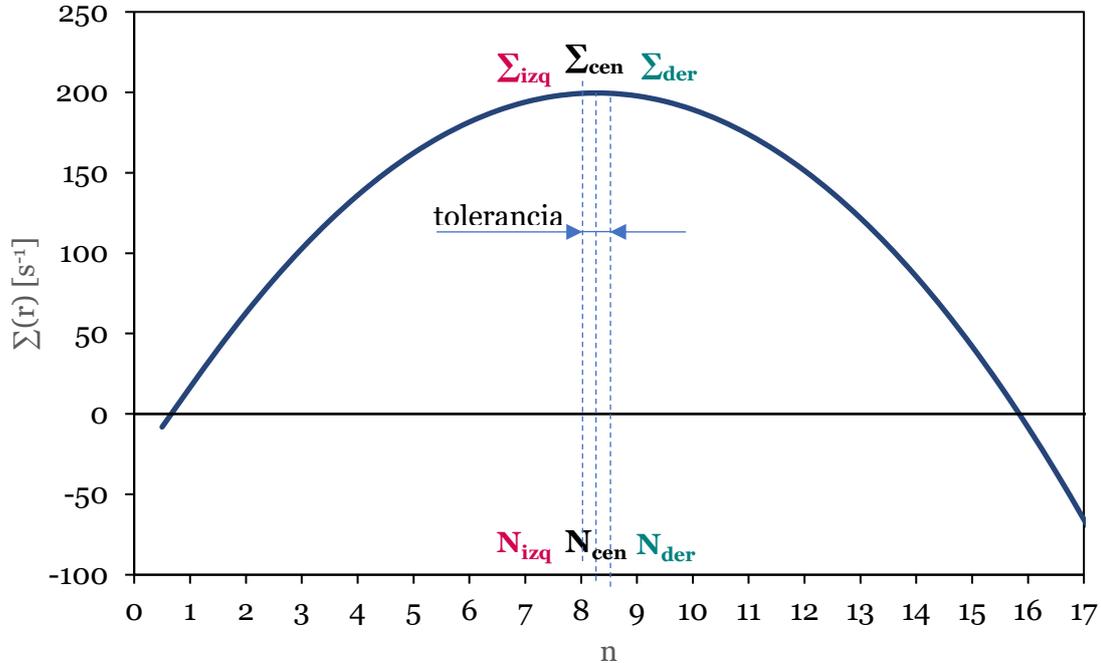


Figura 3.13. Condición de finalización de la función de “BuscaMaximo”, cuando Σ_{izq} , Σ_{cen} y Σ_{der} convergen en el valor máximo dentro de la tolerancia.

Una vez que se tiene el valor máximo de la tasa de crecimiento de inestabilidades para un radio concreto, y el valor del número adimensional de onda que proporcional este valor, se procede a la búsqueda de los cortes de Σ con el eje horizontal, si los hubiera. Las salidas de la función “BuscaMaximo” son N_{izq} , N_{cen} , N_{der} , Σ_{izq} , Σ_{cen} y Σ_{der} .

3.5.3. Funciones “BuscaCorteIzquierda” y “BuscaCorteDerecha”

En el código, se ha definido el tipo de tasa de crecimiento de inestabilidades (con máximo o sin máximo) mediante la función “CompruebaMaximo”. Si esta tasa tuviera máximo, entonces se ejecuta la función “BuscaMaximo” que indica qué valor tiene y para qué número de onda adimensional se produce el máximo para cada radio de un proceso de combustión y se procede a la búsqueda de ambos cortes de Σ con el “cero”, uno a cada lado del valor máximo. Si, por el contrario, Σ no tuviera un valor máximo (siempre creciente para cada radio), la función anterior “BuscaMaximo” no se ejecutaría y se procedería directamente a la búsqueda del corte único de la tasa de crecimiento de inestabilidades.

Como es lógico, la condición para que exista algún corte con el “cero”, ya sean dos cortes o uno, es que la tasa de crecimiento tenga para algún rango de valores del número de onda, valor positivo. Esta es la condición que se tiene que cumplir para que se ejecuten cualquiera de las dos funciones cuyo objetivo es la búsqueda de cortes con el “cero” de Σ : “BuscaCorteIzquierda” y “BuscaCorteDerecha”. Seguidamente se explica la forma de proceder en los dos posibles casos explicados: el caso en que la tasa de crecimiento tenga máximo y el caso en que no tenga máximo

3.5.3.1. Cortes con el “cero” con máximo en Σ

Como se ha dicho anteriormente, para que haya cortes con el eje (o que la fusión tenga puntos donde se anule), debe existir un rango donde la tasa de crecimiento de inestabilidades para el radio concreto de estudio tenga un valor positivo, por consiguiente, usando la salida del valor máximo dada por la función “BuscaMaximo” anteriormente planteada (el cual se recoge en Σ_{cen}) se formula la siguiente condición *if* (Σ_{cen}).

Si no se cumple la anterior condición, no se buscan los cortes y $N_{izq} = N_{cen} = N_{der}$ (metido en una condición *else*). Por el contrario, si se cumple la condición, se llama a las funciones “BuscaCorteIzquierda” y “BuscaCorteDerecha”, cuyo planteamiento se recoge a continuación.

Función “BuscaCorteIzquierda”

Para el correcto funcionamiento de la función “BuscaCorteIzquierda” se define una nueva variable que hace de “variable auxiliar” que sirve para “acotar” la búsqueda del punto de corte o valor nulo de la tasa Σ ; esta variable se refiere a un número de onda y se define como N_{ant} , con el correspondiente valor de la tasa Σ_{ant} (N_{ant}, r_i).

Lo primero que se busca es un valor de Σ negativo a la izquierda del máximo otorgado por “BuscaMaximo”. Para ello se plantea un bucle *While* para el que la condición de entrada es que “ $\Sigma_{izq} > 0 \ \&\& \ N_{izq} > 10^{-6}$ ”. Si se cumple esto, el bucle *While* se ejecuta de la siguiente forma: la variable auxiliar N_{ant} toma el valor de N_{izq} (por lo que $\Sigma_{ant} = \Sigma_{izq}$), y N_{izq} reduce 10 veces su valor para buscar ese valor negativo en Σ_{izq} ($N_{izq} = N_{izq}/10$); se calcula el nuevo valor de Σ_{izq} y se vuelve al inicio del bucle para comprobar la condición de entrada. Este paso se encuentra ilustrado en la Figura 3.14.

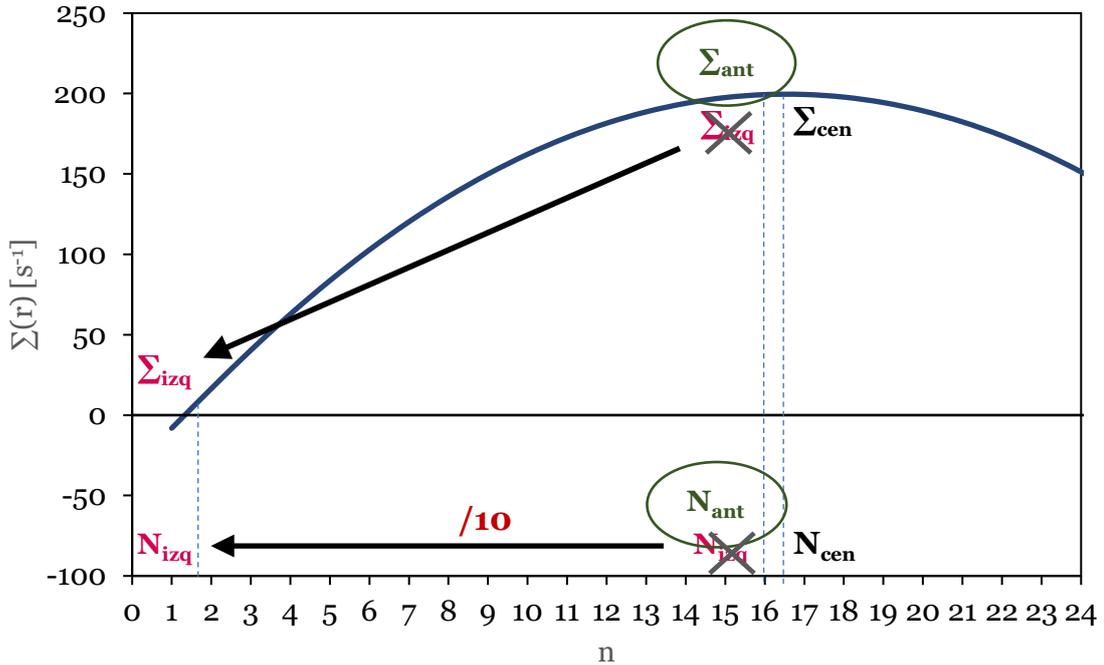
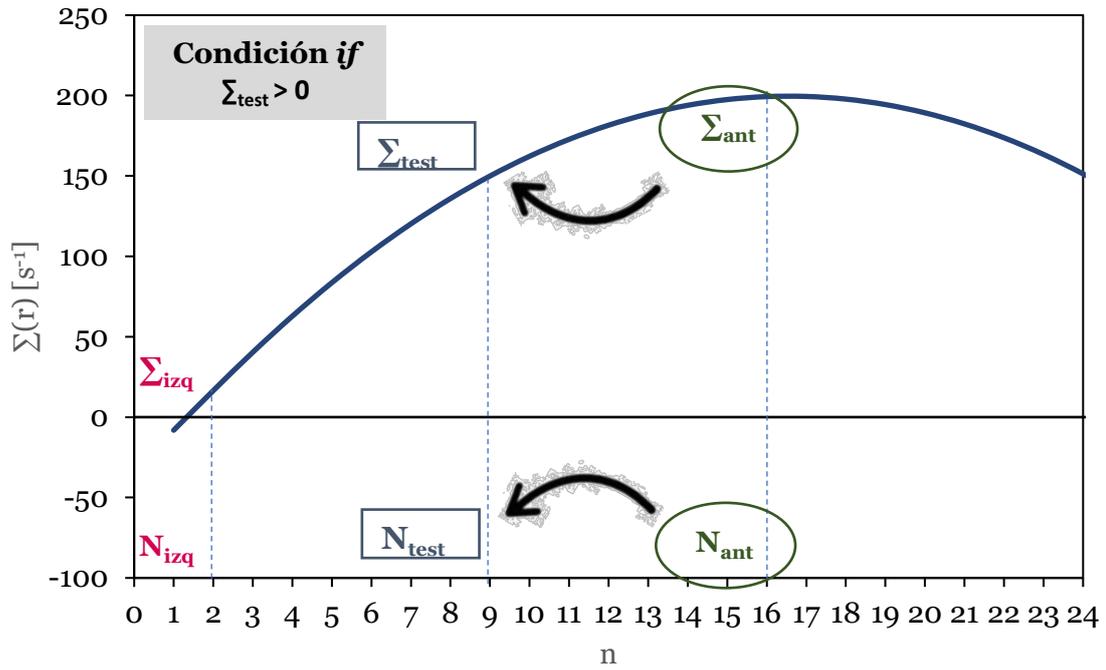
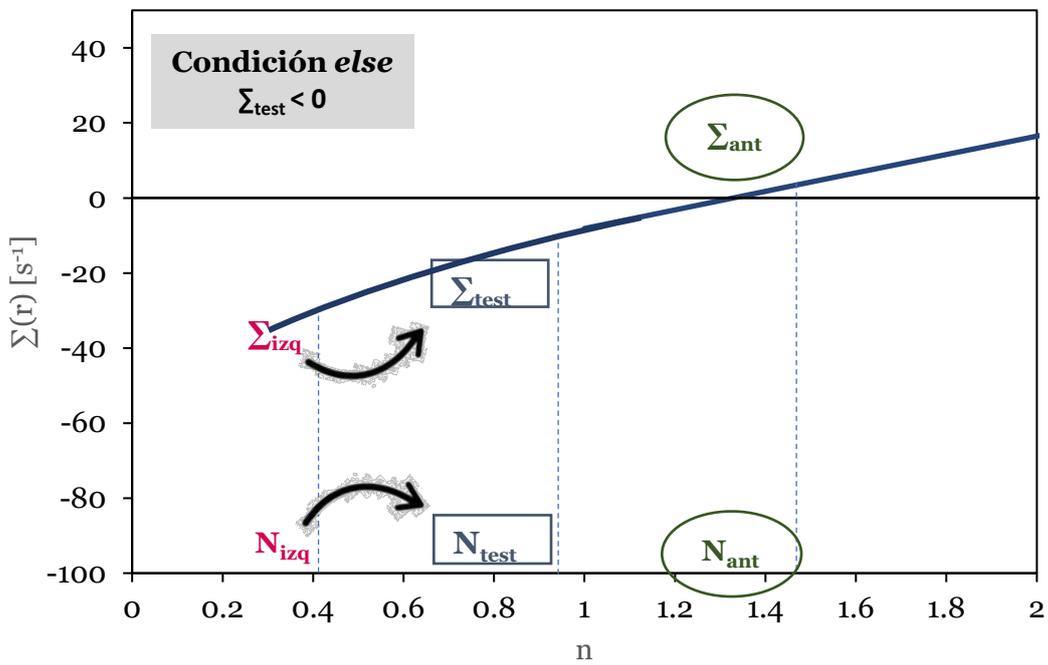


Figura 3.14. Ejecución del primer bucle *While* de la función “BuscaCorteIzquierda” cuya condición de ejecución es que “ $\Sigma_{izq} > 0 \ \&\& \ N_{izq} > 10^{-6}$ ”.

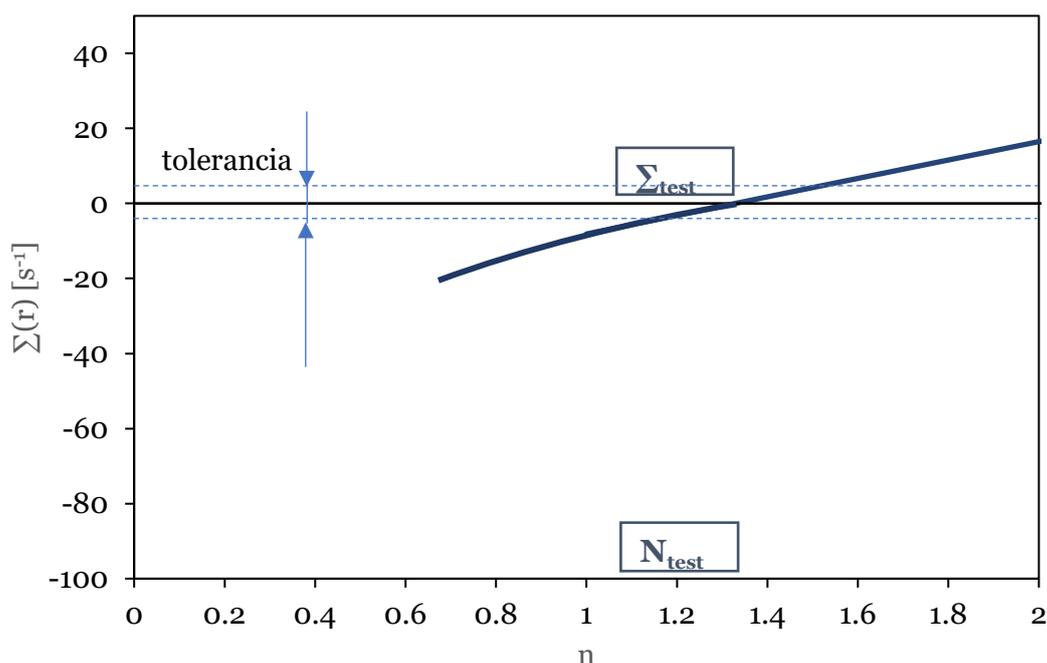
Quando se consigue un valor negativo de Σ_{izq} , se cierra este primer bucle *While* y se ejecuta la segunda parte de la función, donde se retoma el uso de la variable N_{test} empleada en otras funciones. El valor inicial del que parte la variable Σ_{test} (N_{test}, r_i) es el valor de Σ_{izq} (N_{izq}, r_i) obtenido en la salida del bucle anterior *While*, es decir $\Sigma_{test} = \Sigma_{izq}$. Se abre a continuación otro bucle *While* en el que la condición de entrada es que el valor absoluto de Σ_{test} sea mayor que una determinada tolerancia (se usa 0.01 s^{-1}). si se cumple dicha condición, se entra dentro de este bucle y el valor de N_{test} pasa a ser $N_{test} = \frac{N_{ant} + N_{izq}}{2}$, calculándose nuevamente el valor correspondiente de Σ_{test} . Dentro de este bucle *While*, existe una condición *if* “ $\Sigma_{test} > 0$ ” que, si se cumple, da lugar al siguiente cambio de valor: $N_{ant} = N_{test}$ (ver Figura 3.15 (i)); si no se cumple el *if* y Σ_{test} tiene un valor negativo, se entraría en el *else* donde $N_{izq} = N_{test}$ (ver Figura 3.15 (ii)). El bucle *While* finaliza cuando “ $|\Sigma_{test}| < \text{tolerancia}$ ” (ver Figura 3.15 (iii)). En la Figura 3.15 se encuentra de manera gráfica este proceso descrito.



(i)



(ii)



(iii)

Figura 3.15. Ejecución del segundo bucle *While* de la función “BuscaCorteIzquierda” (i) cuando se cumple la condición *if* “ $\Sigma_{test} > 0$ ”, (ii) cuando se cumple la condición *else* “ $\Sigma_{test} < 0$ ” o (iii) cuando se cumple la condición de salida del bucle *While* “ $|\Sigma_{test}| < tolerancia$ ”

La función Busca Corte izquierda también se emplea para cuando la tasa de crecimiento de inestabilidades no tiene un máximo. Esto se explica en el apartado 3.5.3.2.

Función “BuscaCorteDerecha”

De manera muy similar a lo explicado para la función “BuscaCorteIzquierda”, la función “BuscaCorteDerecha” para la situación en que Σ posee un máximo tiene como objeto buscar el corte con el “cero” a la derecha del valor máximo de la tasa de crecimiento para un radio determinado. Paralelamente, la función comienza con un bucle *While* cuya condición en esta ocasión es “ $\Sigma_{der} > 0 \ \&\& \ N_{der} < 10^6$ ”, que si se cumple da paso a la siguiente asignación de valores: la variable auxiliar N_{ant} toma el valor de N_{der} (por lo que $\Sigma_{ant} = \Sigma_{der}$) y N_{der} aumenta 10 veces su valor para buscar ese valor negativo en Σ_{der} ($N_{der} = N_{der} \cdot 10$); se calcula el nuevo valor de Σ_{der} y se vuelve a comprobar la condición de inicio del bucle. Esto se encuentra representado en la Figura 3.16.

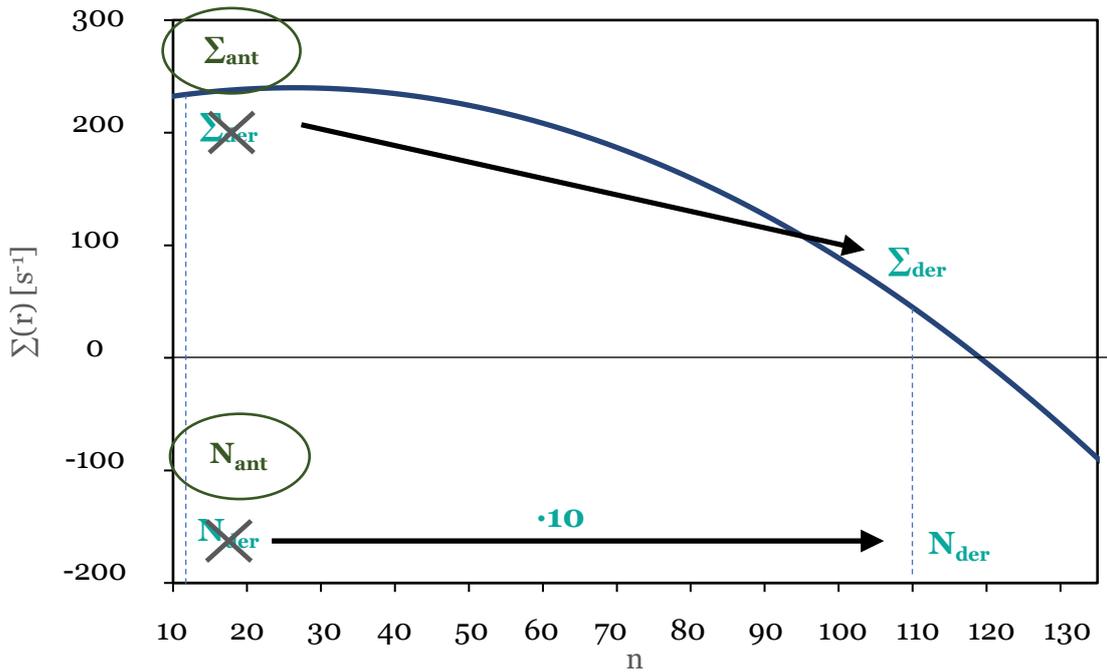
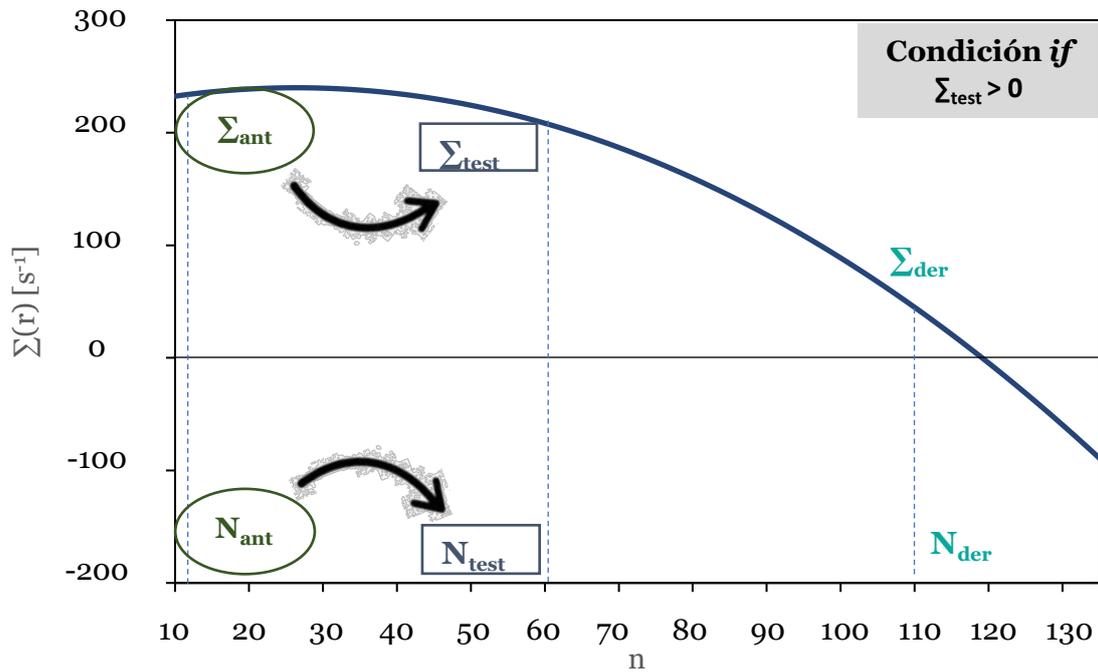
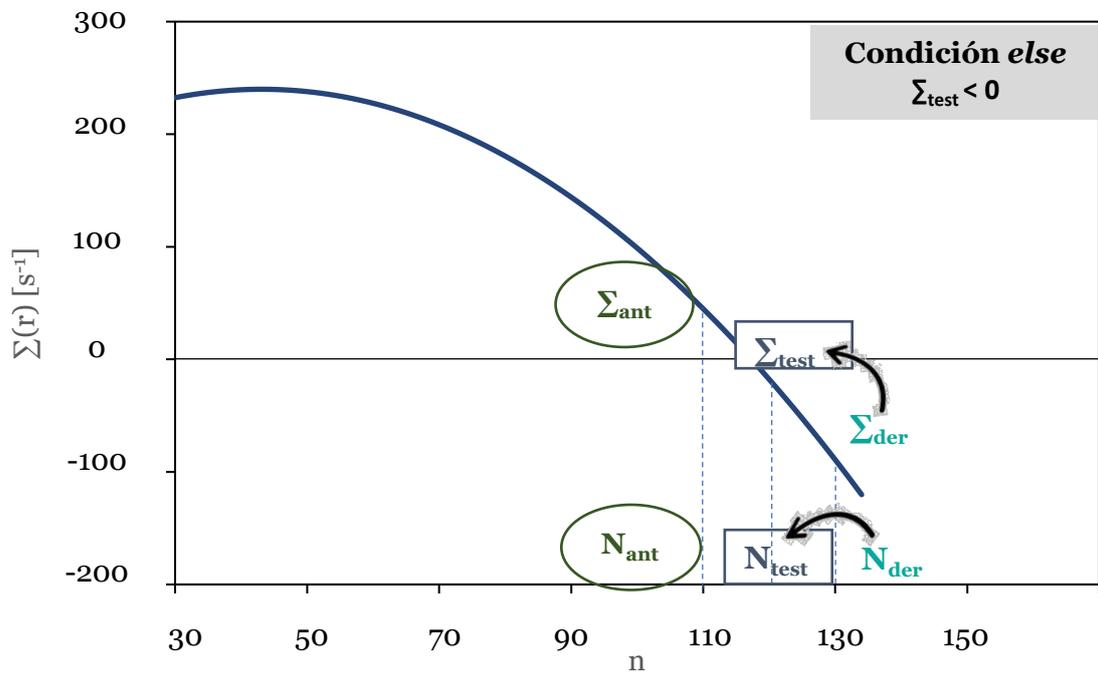


Figura 3.16. Ejecución del primer bucle *While* de la función “BuscaCorteDerecha” cuya condición de ejecución es que “ $\Sigma_{der} > 0 \ \&\& \ N_{der} < 10^6$ ”.

Siguiendo lo explicado para la función “BuscaCorteIzquierda” cuando se consigue un valor negativo de Σ_{der} , se sale del bucle *While*, y en la siguiente parte de la función se retoma el uso de la variable N_{test} empleada en otras funciones. En este caso, el valor inicial del que parte la variable $\Sigma_{test}(N_{test}, r_i)$ es el valor de $\Sigma_{der}(N_{der}, r_i)$ que es la salida del bucle anterior *While*, por lo que $\Sigma_{test} = \Sigma_{der}$. Se abre a continuación el segundo bucle *While* en el que la condición de entrada es que, al igual que en el lado izquierdo, el valor absoluto de Σ_{test} sea mayor que una determinada tolerancia (se usa $0.01 \ s^{-1}$). Dentro de este bucle y el valor de N_{test} pasa a ser $N_{test} = \frac{N_{der} + N_{ant}}{2}$, calculándose nuevamente el valor correspondiente de Σ_{test} . Dentro de este bucle *While*, se tiene como anteriormente la condición *if* “ $\Sigma_{test} > 0$ ” que da lugar al siguiente cambio de valor: $N_{ant} = N_{test}$ (ver Figura 3.17 (i)); si no se cumple el *if* (Σ_{test} tiene un valor negativo), se entra en el *else* donde $N_{der} = N_{test}$ (ver Figura 3.17 (i)). El bucle *While* finaliza cuando “ $|\Sigma_{test}| < \text{tolerancia}$ ”, sería una representación muy similar a la de la Figura 3.15 (iii), pero para el lado derecho de la curva.



(i)



(ii)

Figura 3.17. Ejecución del segundo bucle While de la función "BuscaCorteDerecha" (i) cuando se cumple la condición if " $\Sigma_{test} > 0$ ", (ii) o cuando se cumple la condición else " $\Sigma_{test} < 0$ "

3.5.3.2. Cortes con el “cero” sin máximo en Σ

Dentro de la función “CalculaLimitesPeninsula” se puede dar la situación en la que la tasa de crecimiento de inestabilidades no tenga máximo; en este caso sólo existe un corte con el eje en el rango de interés de estudio. Con las salidas obtenidas de la función “CompruebaMaximo” de N_{izq} , N_{cen} y N_{der} , se cumple la condición *else*, en contraposición a la condición *if* de “ $N_{izq} > 10^{-6} \ \&\& \ N_{der} < 10^6$ ” explicada en el apartado 3.5.2 “FunciónBuscaMaximo”. Esta condición *else* mencionada, $N_{der} > 10^6$, se cumple cuando la función no tiene un máximo. Se calcula entonces $\Sigma_{cen}(N_{cen}, r_i)$ y $\Sigma_{izq}(N_{izq}, r_i)$. Dentro de esta condición *else* existe otra condición *if* “ $\Sigma_{cen} > 0$ ”, donde se llama a la función “BuscaCorteIzquierda” si “ $\Sigma_{izq} < \Sigma_{cen}$ ” ya que el corte con el eje estaría a la izquierda de N_{cen} como se daba en la Figura 3.14; y esto ocurre en todos los casos estudiados de Σ sin máximo. Sólo por si acaso hubiera alguna forma de curva diferente a las mostradas para Σ (con máximo o sin máximo), se incluye la parte “ $\Sigma_{izq} > \Sigma_{cen}$ ” en la que se llama a la función “BuscaCorteDerecha”, ya que el corte con el eje estaría a la derecha de N_{cen} (es decir, para el caso hipotético en que fuera una función Σ sin máximo que sólo tuviera corte a la derecha de la curva)

Este sería el final de la ejecución de la función “CalculaLimitesPeninsula”, de la cual se obtienen como salidas N_{izq} y N_{der} que, en el caso de que hubiera cortes con el eje, se corresponderían con los números de onda adimensionales en los que se producen los cortes con el “cero”, es decir, serían los valores para los que la tasa de crecimiento de inestabilidades se anula. La tercera salida de esta función general “CalculaLimitesPeninsula” es N_{cen} , el cual es el número de onda que marca el máximo (si tuviere) de la tasa de crecimiento de inestabilidades. La operación explicada en este apartado titulado “Modelo de diagnóstico para el cálculo de inestabilidades” se realiza para cada radio (o instante de tiempo) de una combustión, de tal manera que, cuando ésta termina, se dispone de un conjunto de valores de N_{izq} y N_{der} que forman las curvas de estabilidad neutra explicadas anteriormente en el apartado 2.4.2.2, las cuales pueden formar, si existen dos cortes con el “cero” de la tasa de crecimiento de inestabilidades, lo que se conoce como península de inestabilidad. Todas las salidas se almacenan en un documento de Microsoft Excel.

CAPÍTULO 4:

METODOLOGÍA ANALÍTICA

4. METODOLOGÍA DEL CÁLCULO DE INESTABILIDADES

En el presente capítulo, se detalla la metodología seguida para el desarrollo de este trabajo de Tesis Doctoral, la cual está dividida en cuatro puntos que analizan los aspectos principales del proceso de combustión estudiados en esta Tesis: la velocidad de combustión, el estudio de la estabilidad del proceso de combustión basado en las inestabilidades intrínsecas al mismo y el análisis de la estabilidad en llamas con su influencia en la velocidad de combustión. Resulta conveniente destacar que en esta Tesis se ha querido hacer una distinción entre los conceptos de “estabilidad del proceso de combustión” y “estabilidad de la llama” de dicho proceso. La estabilidad de un proceso de combustión se refiere a la naturaleza de la combustión basada principalmente en el comportamiento de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo (ver apartado 2.4). La estabilidad de la llama, en cambio, está relacionada con las consecuencias “visibles” de dichos efectos, cuyo ejemplo más claro es la modificación de la morfología de la llama por el fenómeno de la celularidad (ver apartado 2.4.2.3). Los cuatro puntos principales de esta metodología se resumen en los siguientes párrafos.

En el primer punto de esta metodología se explican los diferentes sistemas concretos empleados para el cálculo de la velocidad de combustión para los combustibles de interés. En el apartado 2.2 se explica el fundamento de este parámetro, que resulta de gran importancia para la caracterización de un proceso de combustión. Además, el cálculo de la velocidad de combustión en primer lugar, previo a la realización de otros análisis, permite la validación de los resultados obtenidos, ya que existe literatura suficiente con la que contrastar.

En el segundo punto de la metodología se desarrolla el análisis de estabilidad del proceso de combustión. Este análisis puede explicar, por un lado, cómo se establecen los límites de estabilidad de una combustión y, por otro, cómo es la naturaleza del proceso (estable o inestable) atendiendo al comportamiento de estas inestabilidades intrínsecas que en él se desarrollan.

Se explicaba en el 2.4.2.3 que las mencionadas inestabilidades intrínsecas a un proceso de combustión pueden acabar desarrollando en el frente de llama el fenómeno denominado “celularidad”. En este tercer punto, se propone una metodología para el análisis de la estabilidad de las llamas, determinado por la aparición de la celularidad en el frente de llama. En él se establecen una serie de parámetros que pueden caracterizar el inicio o aparición del fenómeno de la celularidad en una llama. Como se ha indicado anteriormente, se trata de estudiar las “consecuencias visibles” del crecimiento de las inestabilidades en un proceso de combustión.

Los diferentes puntos de esta metodología plantean un estudio del proceso de combustión comenzando por el cálculo de la velocidad de combustión que caracteriza el proceso; siguiendo por el estudio de estabilidad de la combustión que estudia las

inestabilidades caracterizando su naturaleza y terminando por el estudio de estabilidad de la llama, que examina las inestabilidades de proceso de combustión centrándose en las consecuencias visibles que estas tienen en el proceso de combustión. Tras la presentación general de la metodología seguida, se desarrolla detalladamente cada punto.

4.1. Metodología del cálculo de la velocidad de combustión

En este punto de metodología, se describen los tres métodos empleados en esta Tesis para el cálculo de la velocidad de combustión laminar. En primer lugar, se tiene el “método de la presión”, que calcula la velocidad de combustión laminar a partir de los resultados proporcionados por el modelo de diagnóstico de dos zonas (apartados 2.3.2 y 3.4) cuya entrada es la evolución de la presión medida dentro de la cámara de combustión durante el proceso; a la velocidad calculada con este método se la designa en esta Tesis con u_l^p . En segundo lugar, está el “método de las imágenes” que calcula la velocidad de combustión laminar a partir las imágenes registradas con la técnica de fotografía Schlieren durante la combustión, u_i . Por último, se presenta el “método cinético” que emplea el software Cantera con un mecanismo cinético para obtener la velocidad de combustión laminar; en este caso, *LBV*. En los siguientes puntos se describen cada uno de los métodos mencionados anteriormente para el cálculo de la velocidad de combustión laminar.

Se considera conveniente recordar que el objetivo principal de esta Tesis no es el cálculo de velocidades de combustión laminar ni el desarrollo de nuevas metodologías para este propósito. La obtención de este parámetro se considera más bien un medio para verificación de resultados experimentales, sirviendo como base para otros análisis, como es el estudio de estabilidad del proceso de combustión o de la llama (ambos análisis atienden a objetivos principales de la Tesis).

4.1.1. Metodología del cálculo de la velocidad de combustión laminar con el método de la presión, u_l^p

En el método de la presión introducido anteriormente, la velocidad de combustión laminar se obtiene a partir del gasto másico de gas quemado que atraviesa el frente de llama, del área del frente y de la densidad de los no quemados siguiendo la relación de $u_l^p = \frac{\dot{m}_b}{\rho_u \cdot A_f}$ que se detalló en el apartado 2.2 de esta Tesis. Estos parámetros se pueden obtener partir de la evolución temporal de la presión registrada durante la combustión cuando ésta es introducida al modelo termodinámico de diagnóstico de dos zonas (ver apartado 3.4). Como se explicó en el capítulo del estado del arte, este modelo aplica las ecuaciones de conservación de la masa, de la energía y las ecuaciones de estado en ambas zonas, quemados y no quemados, teniendo en cuenta que el volumen total (suma de los volúmenes de ambas zonas) es constante, asumiendo la hipótesis de frente de llama esférico. Resolviendo las ecuaciones planteadas en el apartado 3.4 se tienen los parámetros necesarios para el cálculo de la velocidad combustión arriba mencionados. Para mayor información sobre el modelo, consultar [31] y [69]. El modelo proporciona como salida la velocidad de combustión en cada instante, u_n . Esta velocidad no tiene por qué coincidir con la velocidad de combustión laminar asociada a las condiciones de temperatura y

presión correspondientes a cada instante, u_t^p , (correspondiente con la de una llama plana ideal), ya que en llamas esféricas pueden influir otros factores que afecten a la misma: principalmente la celularidad (cuando las inestabilidades del proceso se hacen visibles) y el *stretch* por ser llama esférica (este último se explicó en un apartado anterior, ver punto 2.2.2).

Una vez explicado cómo se obtienen los datos de la velocidad de combustión que sirven como base en este método de la presión, se procede a explicar la metodología específica. En primer lugar, se debe seleccionar el rango válido de datos de la velocidad de combustión instantánea obtenida del modelo. Para este fin, se representa ésta en función del tiempo. Por un lado, se eliminan los datos obtenidos para los primeros instantes de la combustión, donde el ruido de la señal y el elevado *stretch* en radios pequeños pueden dar lugar a errores en el cálculo; por otro, se prescinde de la zona de aparición de celularidad (concepto definido en el capítulo 2.4.2.3), ya que ésta aumenta considerablemente la velocidad de combustión. Esto último, no interesa estudiarlo en este apartado, pero se vuelve sobre ello más adelante, ya que en el contexto de esta Tesis es un fenómeno interesante para el cálculo y estudio de inestabilidades de la llama. En la siguiente Figura 4.1 se puede ver un ejemplo de la determinación del rango válido de una combustión de etanol de dosado pobre, 373 K de temperatura inicial y 0.3 MPa de presión inicial con las correspondientes eliminaciones de los datos iniciales y finales del proceso como se ha indicado anteriormente.

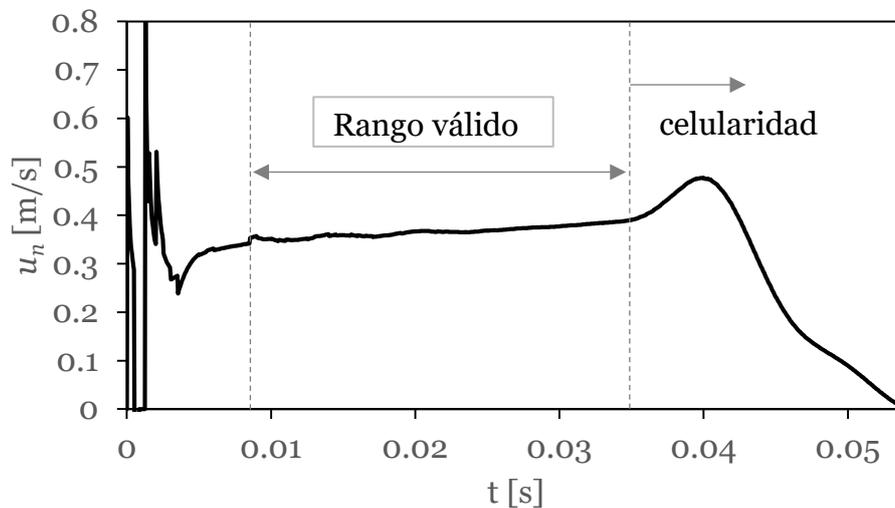


Figura 4.1. Determinación del rango válido para el cálculo de la velocidad de combustión laminar en la evolución temporal de la velocidad de combustión de un experimento de etanol bajo las condiciones de $\phi = 0.8$, $T_i = 373$ K y $p_i = 0.3$ MPa.

En la Figura 4.1 anterior se muestra cómo se consideran los datos a partir de la estabilización de la velocidad; estas variaciones observadas al inicio de la combustión pueden tener diversas fuentes: oscilaciones por la energía liberada al comienzo de la combustión o a la intensa curvatura, *stretch*, que se produce en radios pequeños. Los datos

se dejan de tener en cuenta cuando se produce un cambio de tendencia (aceleración) significativo hacia el final del proceso de combustión que se asocia con la aparición de un frente de llama celular como se explica en apartados posteriores. En el rango válido de valores, la velocidad de combustión aportada por el modelo, u_n , y la velocidad de combustión laminar asociada a una llama plana (*unstretched burning velocity*) en ese mismo rango de condiciones, u_l , se consideran similares. Esto último se basa en que con el método de la presión la influencia del *stretch* en los resultados de la velocidad de combustión de la llama se considera despreciable, ya que la etapa de radios pequeños donde más afecta el *stretch* no entra dentro del rango válido de valores [20], [63], [68].

Una vez que se ha acotado el rango válido de datos para cada combustión, se agrupan los experimentos en función de su dosado relativo. Se tendrían, por tanto, una serie de experimentos con diferentes condiciones de presiones y temperaturas iniciales, pero cuyas curvas de velocidad se podrían solapar si coincidieran los mismos pares de presión y temperatura, independientemente de en qué radio ocurra, tal y como se indica en la investigación realizada por Reyes et al. [63] en 2018, cuyo objetivo era el cálculo de la velocidad de combustión laminar en mezclas de hidrógeno y metano, en el cual también se basa la metodología presentada para el método de la presión. La siguiente Figura 4.2 muestra gráficamente esta idea.

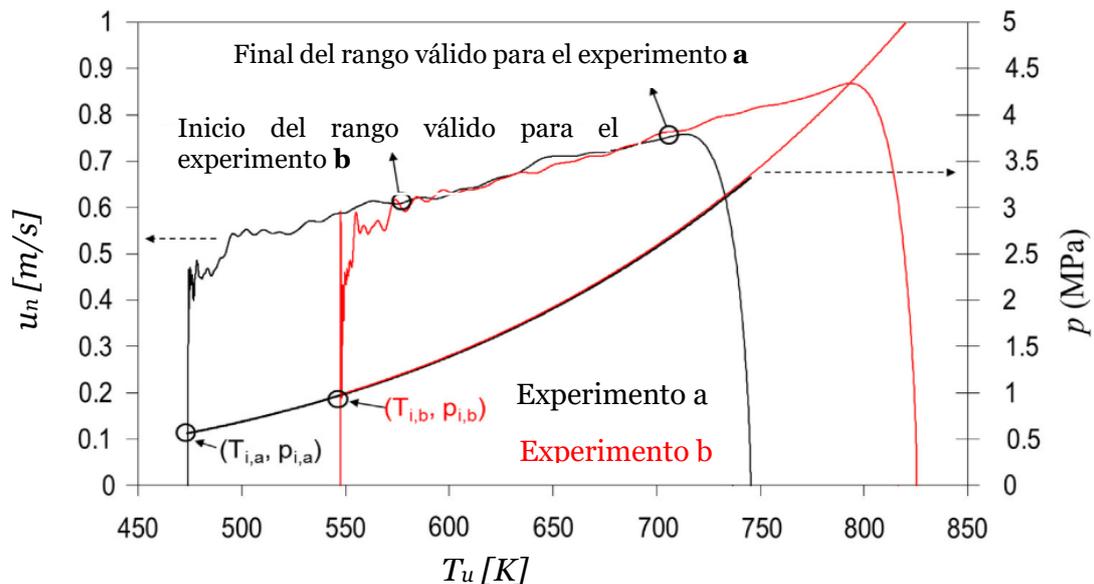


Figura 4.2. Solapamiento de dos curvas de velocidad de combustión instantánea con un mismo dosado relativo global cuando se alcanzan los mismos pares de presión y temperatura. Traducido y adaptado de [63].

Las condiciones iniciales de la combustión del experimento “b” mostrada en la Figura 4.2 anterior han sido escogidas de manera que satisfagan la relación entre temperatura y presión de una compresión adiabática marcada por las condiciones iniciales en “a”, ver ecuación (4.1).

$$p = p_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (4.1)$$

Donde p_0 y T_0 se corresponden con las condiciones iniciales de presión y temperatura respectivamente y γ es el coeficiente de dilatación adiabática.

Una vez que se tienen los valores de la velocidad de combustión para distintos pares de presión y temperatura, se procede a introducir los datos en el programa estadístico Statgraphics 19[®] para la obtención los coeficientes de la correlación de la velocidad de combustión de la forma mostrada en la ecuación (4.2).

$$u_l = u_{l0} \left(\frac{T_u}{T_{u0}} \right)^\alpha \left(\frac{p}{p_0} \right)^\beta \quad (4.2)$$

Esta ecuación de tipo Metghalchi-Keck [20], [68] relaciona la velocidad de combustión aportada por el modelo en cada punto (u_n en el rango válido se considera similar a la velocidad de combustión laminar u_l , por la baja influencia del stretch), con la velocidad de combustión laminar en las condiciones ambientales de referencia en los sin quemados (T_{u0} , p_{u0}), u_{l0} . También se tienen en cuenta los pares de temperatura y presión en cada punto (T , p) acompañados del coeficiente α para la temperatura y del coeficiente β para la presión.

En el programa Statgraphics 19[®] mencionado se introducen los pares de temperatura p y T y la velocidad de combustión aportada por el modelo para cada uno de ellos, u_n ; así mismo, también se introduce la forma de la correlación mostrada en la ecuación anterior. Con esto se busca obtener los coeficientes de presión y temperatura, α y β respectivamente, así como la velocidad de combustión laminar en las condiciones ambiente u_{l0} , los cuales son propios de cada combustible y dosado relativo.

Existen correlaciones más complejas que introducen también el factor del dosado y buscan formular una correlación única válida para cada combustible, ver ejemplos en [105], [106]. Sin embargo, como se ha mencionado, el objeto principal de este trabajo no es simplemente el estudio de la velocidad de combustión, que es meramente un medio para conseguir otros objetivos, por lo tanto, se emplea la correlación mencionada que es ampliamente aceptada en la literatura.

4.1.2. Método de las imágenes

El cálculo de la velocidad de combustión mediante el método de las imágenes, se realiza a través de la obtención de la velocidad de avance o propagación del frente de llama esférico: $u_n = \rho_b / \rho_u S_n$. Se recuerda que S_n es la velocidad de arrastre o relativa del frente de llama con respecto a las paredes de la cámara de combustión en la que se encuentran incluidos los efectos del *stretch* en la velocidad de combustión (*stretched*). En función del

radio esta velocidad de propagación se define como: $S_n = dr_u/dt$, donde r_u es el radio del frente de llama obtenido de las imágenes Schlieren (r_{sch}), al cual se le ha aplicado la corrección mostrada en la siguiente ecuación (4.3), realizada por Bradley et al. [107]. La razón de esta corrección, la cual se explica en dicha referencia, es que, con la técnica Schlieren, el radio medido (r_{sch}) no se corresponde exactamente con el radio del frente de llama en el lado "frío" (r_u), que está asociado a una isoterma aproximadamente 5 K por encima de la temperatura de los reactivos. Esto se debe a que la técnica Schlieren requiere un mayor cambio en la densidad (y, por tanto, en la temperatura) para que las variaciones sean ópticamente detectables. Como resultado, el radio Schlieren tiende a ubicarse ligeramente más hacia el interior del frente de llama. Por esta razón, es necesario aplicar una corrección para estimar el verdadero radio del frente de llama r_u como se muestra a continuación.

$$r_u = r_{sch} + 1.95 \cdot \delta_l \cdot \left(\frac{\rho_u}{\rho_b}\right)^{0.5} \quad (4.3)$$

Donde ρ_b y ρ_u se refieren a las densidades de las zonas de quemados (*burned*) y no quemados (*unburned*) y δ_l es el espesor del frente de llama que satisface la siguiente relación $\delta_l = \nu/u_l$ donde u_l es la velocidad de combustión laminar, explicada en el apartado anterior, y ν es la viscosidad cinemática de los no quemados [10], [107], [108].

Cuando, además, a la velocidad de propagación del frente de llama en una llama esférica, S_n , se le elimina la influencia de la curvatura y estiramiento que recoge el *stretch*, se la designa como S_l (velocidad de avance del frente de llama laminar, *unstretched*) y se cumple la siguiente relación: $u_l = \rho_b/\rho_u S_l$ que conecta la velocidad de combustión laminar explicada en el apartado anterior con la velocidad de propagación del frente de llama. Esta relación únicamente es válida para el periodo de la combustión que se desarrolla a presión constante [109]. Esto obliga a que en este método se tenga que aplicar una corrección por *stretch* debido a que únicamente se tienen en cuenta los primeros radios (radios pequeños con alta curvatura), cuando la presión no supera el 2% de la presión inicial [110].

Las densidades de los quemados y no quemados necesarias para pasar de la velocidad de avance del frente de llama a la velocidad de combustión laminar se obtienen mediante el modelo de diagnóstico explicado anteriormente.

4.1.3. Simulación cinética

Como se encuentra recogido en el Capítulo 2, la simulación cinética de un proceso químico es una herramienta computacional utilizada para modelar y analizar la velocidad con que se desarrolla una reacción basándose en los mecanismos cinéticos que la componen. Un mecanismo cinético es una descripción detallada de las etapas individuales que ocurren durante una reacción química; incluye las especies químicas involucradas, los pasos intermedios y las reacciones elementales que conducen a la transformación de los reactivos en productos. La simulación cinética permite la creación o modificación de

mecanismos asociados a una determinada reacción global, como puede ser la reacción de combustión. Esto permite la optimización de los cálculos y la evaluación de la influencia de diferentes variables como la temperatura y la presión, así como el cálculo de parámetros que definan la combustión. El parámetro que atañe a este apartado de metodología, es la velocidad de combustión laminar que, cuando sea el resultado de una simulación cinética se denomina por LBV (*Laminar Burning Velocity* en inglés).

En esta Tesis se ha empleado la librería de *Python* “Cantera” [10] para el cálculo de la velocidad de combustión de los combustibles estudiados bajo diferentes condiciones de presión, temperatura y dosado relativo. Para ello, se han empleado diversos mecanismos de reacción aceptados por la literatura, como es “GRI-Mech 3.0” [111] y “Aramco” [112], [113]. El programa de Cantera se debe alimentar con un archivo que contenga tres partes diferentes (en otros programas de simulación cinética como “Chemkin”, se encontraría en tres archivos separados). El contenido del archivo que proporciona al programa toda la información necesaria para la simulación de reacciones químicas se describe a continuación.⁴

Existe una primera serie de datos que contiene las reacciones químicas, denominado como “mecanismo cinético o químico”; este apartado presenta la colección de reacciones químicas que se considera que intervienen en el proceso de oxidación de un combustible específico (existen grupos de investigación especializados en optimizar la serie de reacciones para cada combustible). Así mismo, también se incluyen las constantes cinéticas y energías de activación de las reacciones. En el segundo grupo de datos, se presenta toda la información referente a las especies químicas que intervienen en el mecanismo de reacción: sus fórmulas químicas, con las masas moleculares y las propiedades termodinámicas de las especies (como es el calor específico a presión constante) generalmente presentado en forma de polinomio en función de la temperatura y presión. Por último, en el tercer bloque de información que recoge el archivo que alimenta la simulación en “Cantera”, se tienen los datos relacionados con las propiedades de las especies intervinientes necesarios para el cálculo de transporte de masa, energía y momento (como la conductividad térmica y difusividad másica y la viscosidad).

Para obtener la velocidad de combustión laminar empleando la simulación cinética que proporciona la librería “Cantera”, se deben establecer primero las condiciones iniciales de presión y de temperatura, así como el tipo de combustible que se desea estudiar y su proporción con respecto al comburente (generalmente aire). Una vez establecidas las condiciones de cálculo, se crea el objeto de llama laminar mediante la función “ct.LaminarFlame(gas)”, donde “gas” se refiere a los gases no quemados o reactivos (combustible y aire). Este objeto, se refiere a una llama laminar ideal de geometría plana, donde sólo se tienen en cuenta los mecanismos cinéticos, pero no otros efectos físicos más complejos que pueden sufrir las llamas reales, como son el *stretch* o las inestabilidades.

⁴ Documentación de CANTERA: <https://cantera.org/documentation/>
Guía de usuario de CANTERA: <https://cerfacs.fr/cantera/>

Con la función “flame.solve(loglevel=0)” el programa calcula diversas propiedades del proceso de combustión (temperatura adiabática de llama, productos de la combustión, etc.); la interesante para este apartado de metodología es la velocidad de combustión laminar, LBV, cuyo resultado se almacena en el vector “flame.u[o]” donde “[o]” se refiere a la velocidad en la dirección axial, es decir, en la dirección de propagación de la llama.

Los resultados referentes al cálculo de la velocidad de combustión, no se muestran explícitamente en esta Tesis; sin embargo, se pueden encontrar en los artículos publicados en diferentes revistas incorporados en los Anexos del documento. Los combustibles estudiados en dichos artículos fueron: mezclas de H₂ y CH₄ (aplicando métodos de la presión, imágenes y simulación cinética, artículo 5)[10]; etanol (simulación cinética, artículo 2) [*Measurements – Elsevier (Accepted)*] y BPG (simulación cinética, artículo 3) [45].

4.2. Metodología del estudio de estabilidad del proceso de combustión.

En este apartado se presenta la metodología seguida para la realización del estudio de estabilidad en procesos de combustión. Dicho estudio se centra en la definición de la naturaleza de las combustiones en función de sus límites de estabilidad y en la determinación del origen de las inestabilidades intrínsecas a los procesos. La secuencia del estudio se muestra a continuación.

- (1) Definición de los límites de estabilidad en combustiones de morfología global esférica. Curvas de estabilidad neutra.
- (2) Clasificación de la naturaleza de las combustiones.
- (3) Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) y aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo.
- (4) Estudio paramétrico de la celularidad.

En concreto, para el estudio de estabilidad en procesos de combustión, se parte del trabajo experimental previo realizado en la Tesis Doctoral de Camaño en el año 2021 [110]. En esta Tesis, entre otras cosas, se estudian mezclas de hidrógeno y metano variando su dosado relativo y la proporción en la mezcla para ver la influencia del hidrógeno, especialmente en la velocidad de combustión. En el presente trabajo de Tesis, se desarrolla y se añade el estudio del origen, naturaleza y comportamiento de las combustiones desde el punto de vista de las inestabilidades intrínsecas a ellas.

Se escogen estos combustibles, hidrógeno y metano, no sólo por su interés energético creciente (especialmente en el hidrógeno), sino también por el interés científico que suscita la amplia variedad de comportamientos que proporciona el hidrógeno en los procesos de combustión, desde el punto de vista de la estabilidad

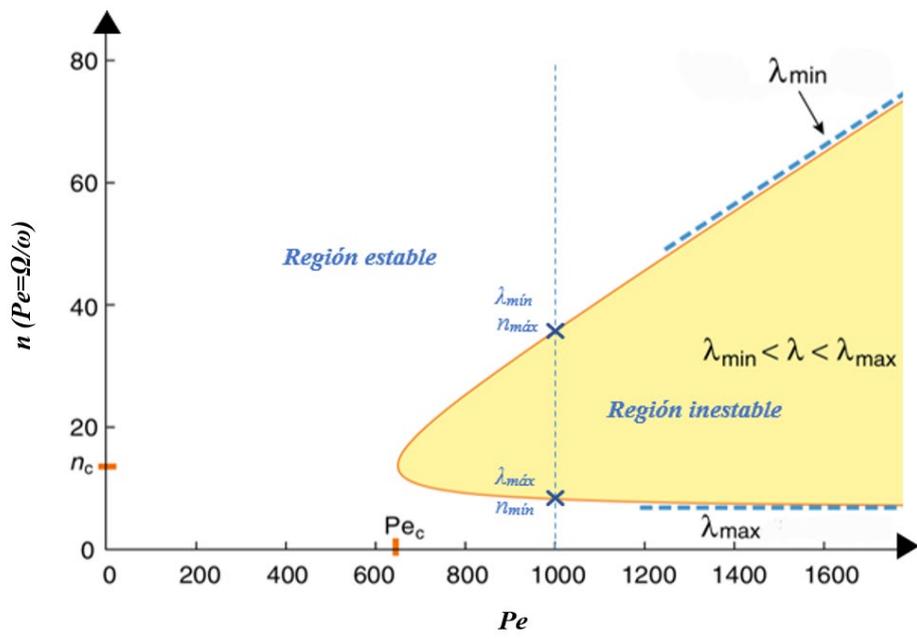
Seguidamente se desarrollan cada uno de los puntos mencionados que componen la metodología del estudio de estabilidad en procesos de combustión.

4.2.1. Definición de los límites de estabilidad en combustiones de morfología global esférica

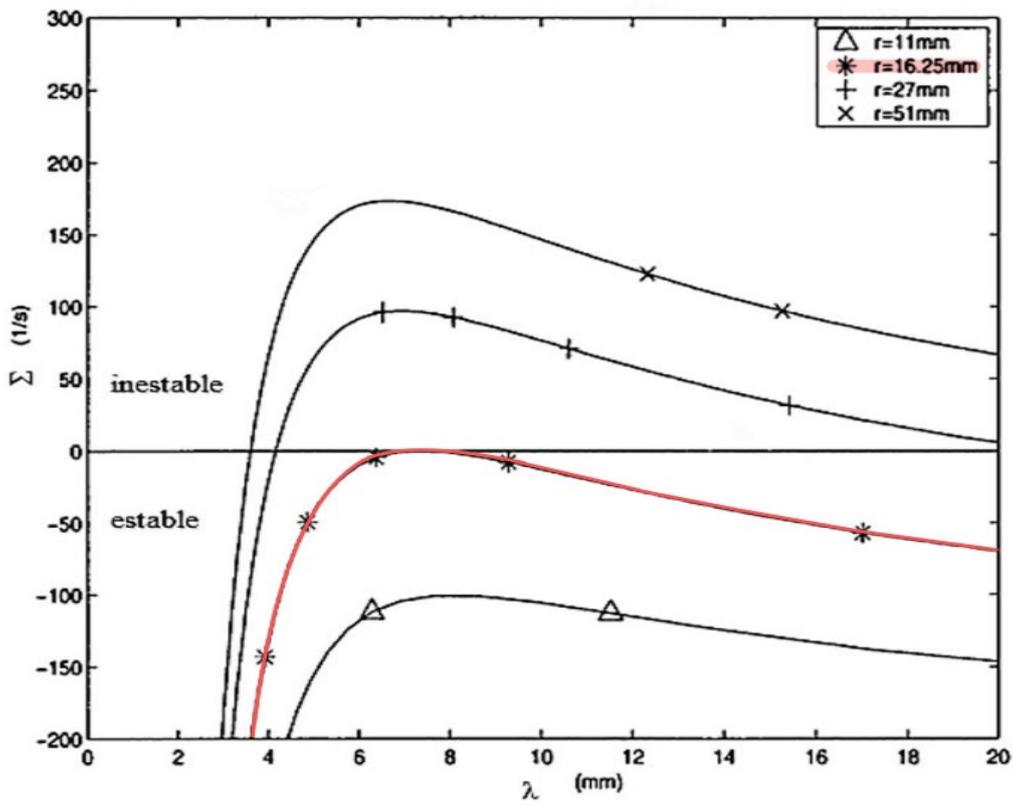
Los límites de estabilidad de una combustión están relacionados con el comportamiento de las inestabilidades inherentes al proceso. El desarrollo de las inestabilidades está marcado por el parámetro denominado tasa de crecimiento de inestabilidades (Σ), cuya definición se puede encontrar en el apartado 2.4 de esta Tesis. Aunque el cálculo y la interpretación de este parámetro, tasa de crecimiento de inestabilidades (Σ), se plantea en el tercer punto de esta metodología, es necesario mencionarlo en este apartado por su relación con los límites de estabilidad del proceso de combustión. Se recuerda brevemente que la tasa de crecimiento de inestabilidades depende del radio y del número adimensional de onda (o de la longitud de onda) de las perturbaciones, significando que, para cada instante de tiempo de un proceso de combustión, existe una curva que representa el conjunto de los valores de las tasas de crecimiento de inestabilidades para cada longitud de onda (λ) o número adimensional de onda (n), esto queda reflejado en la Figure 2.17.

Como se dijo en el capítulo 2, apartado 2.4.2.2, para la definición de los límites de estabilidad en una combustión de morfología global esférica, únicamente resulta necesario conocer dónde se anula la tasa de crecimiento de inestabilidades ($\Sigma(\lambda \text{ o } n) = 0$) y su signo en los puntos donde no es nula ($\Sigma(\lambda \text{ o } n) < 0$, $\Sigma(\lambda \text{ o } n) > 0$), no es necesario conocer el valor exacto en cada punto. El conjunto de puntos con valor nulo en la tasa de crecimiento forma lo que se denomina la curva de estabilidad neutra de una combustión.

En la Figure 2.15 se mostraba un ejemplo de esta curva de estabilidad neutra (o mapa de estabilidad) en función del número adimensional de onda y del número de Peclet, que se recuerda que es una forma de representación adimensional del radio del frente de llama en una combustión esférica. Para mayor claridad y mejorar el seguimiento de las explicaciones, se aporta en la Figura 4.3 (i) otro ejemplo de una curva de estabilidad neutra con forma de piñón obtenida y traducida de [32]. Al número de Peclet (o radio) cuyo valor máximo de tasa de crecimiento es cero ($\Sigma_{\text{máx}}(\lambda \text{ o } n) = 0$) se le denomina crítico (Pe_{cr} o r_{cr}), ver Figura 4.3 (ii) [44].



(i)



(ii)

Figura 4.3. (i) Ejemplo de curva de estabilidad neutra. Adaptado de [32]. (ii) Curvas de tasa de crecimiento de inestabilidades de una combustión para diferentes radios. Adaptado de [44].

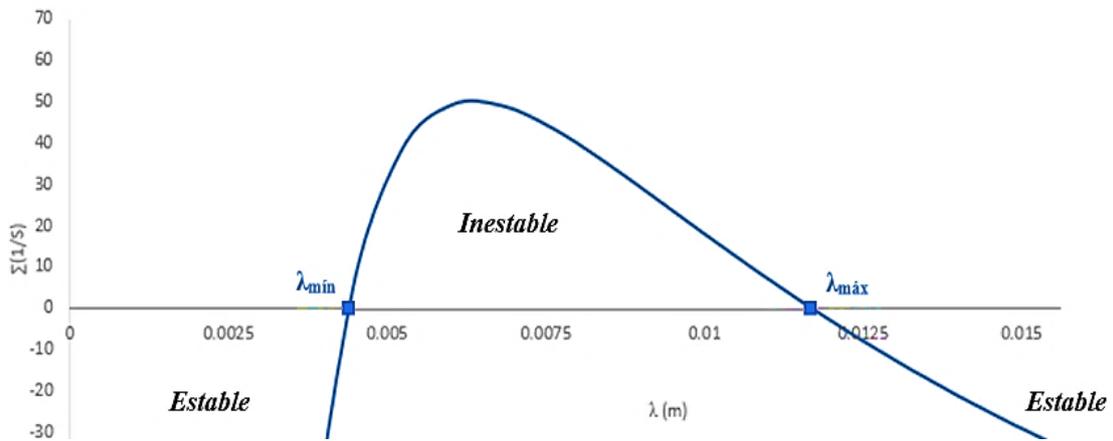
Para los números de Peclet (o radios) entre el valor crítico y el Peclet (o radio) máximo correspondiente con el final de la combustión existen una serie de números de onda adimensionales (o longitudes de onda) para los cuales el valor de la tasa de crecimiento de inestabilidades es positivo; éstos forman la región inestable de la combustión ($\Sigma(n, r) > 0$) señalada en color amarillo en la Figura 4.3 (i). Esta región está acotada por dos rectas aproximadas que contienen todos los números adimensionales de onda, o todas las longitudes de onda, en los que se cumple la condición de tasa de crecimiento de inestabilidades nula para cada número de Peclet de la manera que se muestra en la ecuación (4.4).

$$si \Sigma(n) = \frac{1}{a} \frac{da}{dt} = \frac{1}{r} \frac{dr}{dt} \left(\omega - \frac{\delta_l}{r} \Omega \right) = 0 \Rightarrow \omega - \frac{\delta_l}{r} \Omega = 0 \Rightarrow \left[Pe = \frac{\Omega}{\omega} \right] \quad (4.4)$$

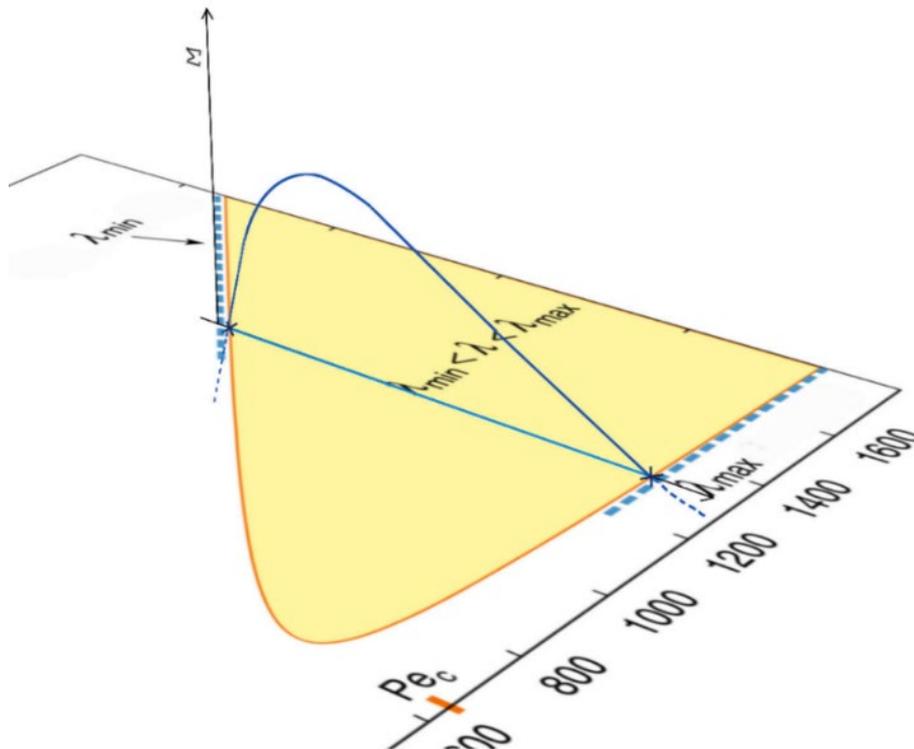
Los puntos pertenecientes a la recta inferior (de pendiente casi nula) son los números de onda adimensionales mínimos (o longitudes de onda máximas) y se denominan n_{\min} (o λ_{\max}). El valor de n_{\min} es aproximadamente constante e igual a 7, puesto que es el valor semejante al que se acerca n cuando la longitud de onda de una estabilidad es del orden del radio del frente (λ_{\max}) de llama de geometría esférica: $n_{\min} = \frac{2\pi r}{\lambda_{\max}} \approx 2\pi$. El límite superior de la región inestable se puede aproximar a una recta de pendiente $\frac{Pe}{n_{\max}} = C$ con C constante y dependiente de la composición y de las difusividades de la mezcla (es decir, del número de Lewis efectivo). La longitud de onda mínima para cada radio se recoge en la siguiente ecuación (4.5), donde se observa que la longitud de onda mínima es directamente proporcional al espesor del frente de llama, δ_l .

$$\frac{Pe}{n_{\max}} = C \Rightarrow \frac{r/\delta_l}{2\pi r/\lambda_{\min}} = C \Rightarrow [\lambda_{\min} = 2\pi C \delta_l] \quad (4.5)$$

Gráficamente n_{\min} (o λ_{\max}) y n_{\max} (o λ_{\min}) se pueden obtener de la curva de la tasa de crecimiento de inestabilidades para cada radio, tal y como se ejemplifica en la Figura 4.4 (i). La relación gráfica entre la tasa de crecimiento de inestabilidades y la curva de estabilidad neutra o mapa de estabilidad que se muestra queda reflejada en el diagrama de la Figura 4.4 (ii) que se muestra a continuación.



(i)



(ii)

Figura 4.4. Tasa de crecimiento de inestabilidades en la que se indican los puntos de corte con el "cero".

Por lo tanto, el primer paso que se propone para el estudio de la estabilidad de los procesos de combustión es la obtención de las curvas o mapas de estabilidad de cada uno de los procesos.

En la práctica, para el cálculo de estas curvas, se amplió el programa del modelo de diagnóstico de dos zonas (ver apartado 3.5), ya que se creó una nueva sección para el

estudio de estabilidad en procesos de combustión. En concreto, para este primer punto del análisis en el que se calculan los límites de estabilidad, se ha creado una función general denominada “CalculalimitesPeninsula”. Dentro de esta función general existe una primera función específica que se denomina “CompruebaMaximo” en la que se introduce la ecuación de la tasa de crecimiento de inestabilidades presentada en el capítulo 2 en la ecuación (2.19). La función “CompruebaMaximo” básicamente detecta la forma que tiene la tasa de crecimiento de inestabilidades (si tiene un máximo o no)

4.2.2. Clasificación de la naturaleza de las combustiones

Como se explica en el capítulo 2 de esta Tesis, la naturaleza de un proceso de combustión está relacionada con la forma y los límites de las curvas de estabilidad y, por tanto, con la tasa de crecimiento de inestabilidades. Si el radio o Peclet crítico es mayor que cero, la curva de estabilidad se asemeja a una “península”, como aquella reflejada en la Figura 4.3 (i), y el proceso de combustión se considera estable; de lo contrario, se clasifica como inestable. En las combustiones existen dos efectos principales intrínsecos a las mismas: el efecto hidrodinámico y el efecto termo-difusivo. Como se muestra en el apartado 2.4 de esta Tesis, el efecto hidrodinámico ha demostrado tener siempre un carácter inestable (contribuye al crecimiento de las inestabilidades), en cambio, el efecto termo-difusivo, puede tener un carácter estable (amortigua las inestabilidades) o inestable dependiendo del número de Lewis, que para mezclas de combustibles se denomina Lewis efectivo, Le_{eff} , ver apartado 2.4. El valor del número de Lewis efectivo, para determinar el comportamiento del efecto termo-difusivo, debe ser comparado con el valor del Lewis crítico, o Lewis efectivo crítico en el caso de mezclas, para cada combustión, Le_{eff}^* .

Acorde con lo anterior, el número de Lewis efectivo crítico se puede definir como el valor mínimo que debe tener el número de Lewis efectivo de una combustión para que el efecto termo-difusivo sea estable (amortigüe el crecimiento de las inestabilidades). Por debajo de este valor, el efecto termo-difusivo sería positivo para todos los radios y contribuiría positivamente al crecimiento de las inestabilidades desde el inicio. Este aspecto se trata en detalle en el apartado 4.2.3.

Para comprender correctamente esta última idea, resulta conveniente remitir al apartado 2.4.2 donde el efecto termo-difusivo se representa con el término $-\frac{\Omega}{Pe}$. Se recuerda que este término está compuesto por las aportaciones estabilizadoras de la difusión térmica y viscosa, de términos Q_1 y PrQ_3 respectivamente, y la aportación de la difusión másica, de término $-\frac{\beta(Le_{eff}-1)}{\sigma-1}Q_2$; éste último es el que le otorga el carácter estable o inestable al efecto termo-difusivo. Law, et al. en su estudio publicado en 2005 [52] proponen el cálculo del número de Lewis crítico como el valor del número de Lewis que se obtendría para un radio o Peclet crítico igual a cero (situación límite de estabilidad). Esto se podría calcular despejando el Peclet crítico (número de Peclet en el que el máximo de $\Sigma=0$) en la ecuación (2.19), tal y como se muestra en la siguiente ecuación (4.6).

$$Pe_{cr} = \omega^{-1} \left[Q_1 + \frac{\beta(Le_{eff} - 1)Q_2}{\sigma - 1} + PrQ_3 \right] \quad (4.6)$$

Imponiendo la condición de $Pe_{cr} = 0$ (situación límite de estabilidad en la combustión) en la ecuación anterior y despejando el número de Lewis, se tiene el número de Lewis crítico (Lewis efectivo) propuesto por Law et al. en el estudio mencionado, dando lugar a la siguiente ecuación (4.7).

$$Le_{eff}^* = 1 - \frac{\sigma - 1}{\beta Q_{2_{cr}}} (Q_{1_{cr}} + Q_{3_{cr}} Pr_{cr}) \quad (4.7)$$

La Figura 4.5. Representación de la situación límite impuesta para la obtención del valor crítico del Lewis efectivo. que se muestra a continuación pretende reflejar gráficamente cómo se calcula el Lewis efectivo crítico.

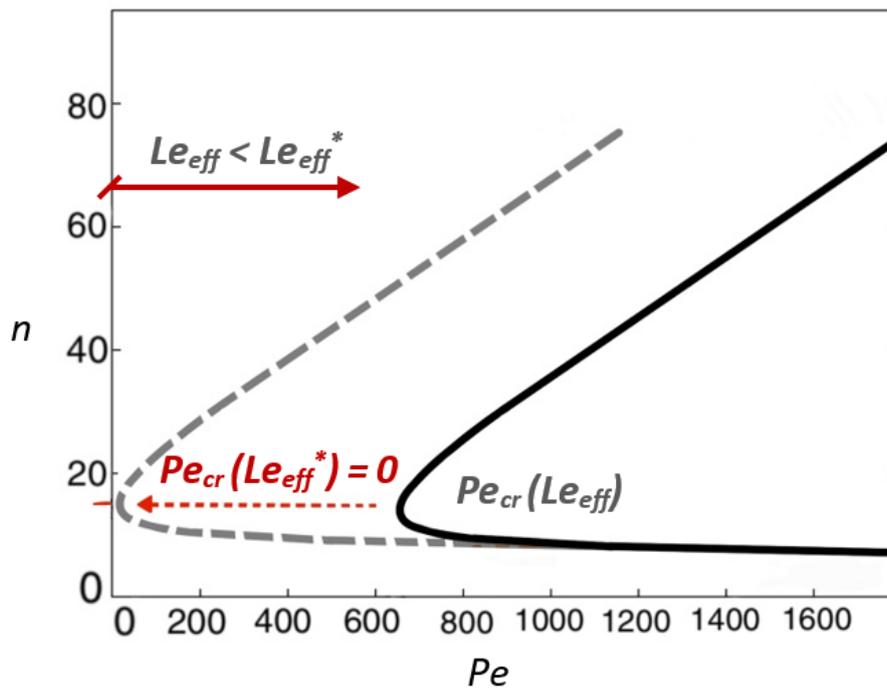


Figura 4.5. Representación de la situación límite impuesta para la obtención del valor crítico del Lewis efectivo.

Se propone en este segundo apartado el cálculo del número de Lewis efectivo y su comparación con el número de Lewis crítico para la determinación de la naturaleza de las combustiones.

4.2.3. Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) y aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo

Una vez calculados los límites de estabilidad de las combustiones y habiendo definido su naturaleza, resulta interesante estudiar más concretamente la tasa de crecimiento de inestabilidades, especialmente en la zona inestable, donde esta se hace positiva para unas perturbaciones cuya λ o n se encuentre dentro de un rango determinado, ver Figura 4.3 (i). Independientemente de la naturaleza de la combustión, en este punto se propone el estudio de las tasas de crecimiento de las inestabilidades para todos los procesos de combustión.

Los dos efectos principales que hacen su aportación a la tasa de crecimiento de inestabilidades tal y como se define en la ecuación (2.19) son el efecto hidrodinámico, o de Daerrius-Landau, y el efecto termo-difusivo (el fundamento teórico de esto se encuentra en el apartado 2.4 de esta Tesis). Por esta razón no sólo se propone en este apartado el estudio de la tasa de crecimiento de inestabilidades de manera global, sino el estudio individual de cada una de las aportaciones de los dos efectos mencionados. En concreto, el efecto termo-difusivo se debe estudiar principalmente en las primeras etapas de la combustión, que es cuando más significativa es su aportación ya que este efecto es inversamente proporcional al radio o al número de Peclet $\left(-\frac{\rho}{Pe}\right)$, como se indica en la ecuación (2.19). A medida que avance la combustión y, por tanto, aumente el valor del radio y del número de Peclet, este efecto pierde influencia.

Para el estudio tanto de la tasa de crecimiento de inestabilidades propuesto en este apartado, se plantea su cálculo para una serie de radios: desde un radio inicial pequeño como puede ser 0.3 cm hasta un radio máximo de 5.7 cm, ya que es el radio interior de la cámara de combustión. Dentro de cada instante o radio, se propone el cálculo de $\Sigma(n)$ para un rango de números de onda correspondientes al intervalo que abarca desde una longitud mínima (del orden del espesor del frente de llama) hasta una longitud de onda máxima igual al radio que se está estudiando.

4.2.4. Estudio paramétrico de la celularidad

El fenómeno de la celularidad es la consecuencia visible del desarrollo de las inestabilidades en un frente de llama de un proceso de combustión. Este fenómeno se da cuando, en un momento dado, el crecimiento de las inestabilidades es tan grande que modifican la estructura del frente de tal manera que la morfología del mismo se ve alterada de manera visible y captable. Este fenómeno se explica en el capítulo X.

Para el estudio paramétrico del fenómeno de la celularidad en las combustiones seleccionadas, se plantea la comparación entre los resultados obtenidos de límites de estabilidad, naturaleza de la combustión y tasas de crecimiento de las inestabilidades con las imágenes obtenidas de las distintas combustiones por medio de la fotografía Schlieren. Lo que se busca es establecer una relación entre la información obtenida de la aplicación de la teoría de las inestabilidades explicada en el apartado X y la información visual que

aporta la fotografía Schlieren, cuyo fundamento se encuentra en el apartado X de esta Tesis.

4.3. Metodología del estudio de estabilidad de la llama

Se ha introducido anteriormente la diferencia entre la estabilidad de una combustión y la estabilidad de una llama. El criterio de estabilidad de un proceso de combustión se establece según la naturaleza del efecto termo-difusivo como queda patente en el 4.2 de esta metodología. Sin embargo, el criterio de estabilidad de una llama se establece sobre la base de parámetros más experimentales, como es la aparición visible de celularidad en el frente de llama y/o en las consecuencias que genera este cambio de morfología en el desarrollo del proceso de combustión. La estabilidad del proceso de combustión y la estabilidad de la llama están evidentemente relacionados porque el segundo depende del primero, pero pueden estudiarse individualmente puesto que son dos aspectos diferentes de la investigación de las inestabilidades de los procesos de combustión. El estudio de estabilidad del proceso de combustión determina la naturaleza y el origen de las inestabilidades y el estudio de la estabilidad de la llama determina las consecuencias visibles (si las hay), tanto en la morfología del frente de llama como en el desarrollo del proceso de combustión.

En muchos campos científicos se emplea una herramienta estadística denominada diseño de experimentos (DDE) que mejora la comprensión de un fenómeno físico de interés y permite aumentar la eficacia experimental y obtener unos resultados más fiables y generalizables en el área de estudio. En este caso el fenómeno que se desea estudiar es la celularidad, ya que es la consecuencia visible del crecimiento de las inestabilidades en un proceso de combustión. En concreto, se considera importante la aparición de la celularidad en una llama, ya que es la frontera entre una llama considerada estable (sin celularidad visible) y una llama inestable (con celularidad visible).

Como complemento a los combustibles propuestos previamente para el estudio de la estabilidad en procesos de combustión (hidrógeno y metano), se considera importante incorporar un combustible líquido como el etanol. Este alcohol, aunque no es un hidrocarburo, presenta un comportamiento más similar a estos que el hidrógeno, especialmente en términos de propiedades termodinámicas y patrones de combustión. Además, como se detalla en el capítulo 2, alcoholes como el metanol y el etanol pueden derivarse de fuentes orgánicas, siendo considerados combustibles "bio". El etanol, en particular, ya se utiliza en mezclas comerciales como el E10, lo que resalta su relevancia como un combustible complementario a los derivados del petróleo. La elección del etanol para este estudio no solo permite analizar un combustible alternativo ya utilizado en la práctica, sino que también facilita la extrapolación de sus resultados hacia otros combustibles líquidos. Por ello, se selecciona como base para el análisis de la estabilidad de llama, aportando un punto intermedio entre los hidrocarburos tradicionales y los combustibles gaseosos como el hidrógeno.

Una vez determinado el combustible de estudio, se procede a planteamiento de la metodología para el empleo de la mencionada herramienta estadística DDE. Para ello se plantea una serie de pasos que se recoge a continuación.

- (1) Elección y definición del parámetro o parámetros que caractericen la celularidad en llamas: parámetros celulares.
- (2) Acotación del área de interés para el estudio de la celularidad en llamas y serie piloto de experimentos.
- (3) Cálculo de los parámetros celulares para la serie piloto de experimentos.
- (4) Selección del mejor diseño de experimentos para el estudio de la celularidad en llamas. Definición de los puntos experimentales de ensayo.
- (5) Desarrollo del modelo predictivo de cada uno de los parámetros celulares seleccionados.

Seguidamente, y tal y como se ha hecho para la metodología del estudio de estabilidad del proceso de combustión, se encuentran desarrollados cada uno de los pasos mencionados anteriormente.

4.3.1. Elección y definición del parámetro o parámetros que caractericen la celularidad en llamas: parámetros celulares.

Para la realización de un diseño de experimentos (DDE) estadístico es necesario la selección de uno o unos parámetros respuesta de carácter cuantitativo que sean característicos del fenómeno que se quiere estudiar; en este caso la celularidad en llamas de etanol.

En la instalación experimental empleada (explicada detalladamente en el capítulo 3) se recogen dos tipos de datos: los datos de la presión instantánea del proceso de combustión y los datos gráficos en forma de imágenes Schlieren grabadas capturadas el mismo. Sólo observando las imágenes Schlieren que se obtienen en una combustión, sin un tratamiento de los datos, se pueden obtener resultados cualitativos, pero es conveniente la búsqueda de un parámetro cuantitativo, no meramente descriptivo, que caracterice el fenómeno de la celularidad que se desea estudiar.

Existen varios estudios en la literatura que relacionan el desarrollo de inestabilidades en el frente de llama con un incremento en la velocidad de combustión a la que se está desarrollando el proceso. Este fenómeno se denomina como “auto-turbulencia” o “auto-aceleración” y el fundamento del mismo se encuentra en el apartado 2.4.2.4.

Este fenómeno de auto-aceleración se produce porque el arrugamiento provocado por la celularidad hace que aumente localmente y en general muy rápidamente el área del frente de llama en combustiones esféricas. En consecuencia, para un mismo radio, el área de reacción en un frente celular es superior al área que se tendría si se considerase para ese mismo radio una llama esférica sin arrugamiento. Esto genera un incremento del flujo de reactivos que participan en la reacción de combustión, lo que hace que aumente la velocidad de combustión (ver ecuación (2.1)). Este punto de aceleración resulta más

sencillo de acotar que el inicio de celularidad en función únicamente de las imágenes, por lo que se parte de este concepto para determinar las respuestas que se buscan en el diseño de experimentos (en esta Tesis se pasan a denominar como “parámetros celulares” por su objetivo de caracterizar el fenómeno de la celularidad).

Basado en lo explicado anteriormente se selecciona como parámetro celular básico el tiempo en el que se da la auto-aceleración en el proceso de combustión, es decir, el instante en el que la velocidad de combustión comienza a verse afectada significativamente por la celularidad. Este parámetro temporal se ha establecido en esta Tesis con el término de “tiempo de activación celular” (*cellular trigger time* en inglés), t_{trigg_cell} , y, además de la definición aportada, se podría definir como el tiempo de “preparación” necesario para que se manifiesten las consecuencias de la celularidad en la combustión.

El segundo parámetro se denomina “radio celular” (*cellular radius* en inglés), r_{cell} , y es el radio del frente de llama cuando se alcanza el tiempo de activación celular: $r=f(t) \rightarrow r_{cell}=f(t_{trigg_cell})$. En otros trabajos este radio se define como “radio crítico”, como en el trabajo de Bradley et al. [50], pero en esta Tesis no se emplea este término porque ya ha sido usado para la definición del vértice de la península de inestabilidad (ver apartado X) y, como se ha explicado, se estudian ambos conceptos de manera individual.

El tercer y el cuarto parámetro son de carácter temporal (como t_{trigg_cell}); se trata del denominado “tiempo de máxima influencia celular”, t_{max} , y el “tiempo de duración de la combustión”, t_{comb} . El primero es el instante en el que la velocidad de combustión alcanza su máximo valor; se relaciona con el instante de máxima influencia de la celularidad en el proceso de combustión porque, como se ha explicado, una de las principales consecuencias de la modificación de la morfología que provoca la celularidad es la aceleración de la velocidad de combustión. Teniendo en cuenta esto, se supone la máxima influencia de la celularidad cuando la velocidad es máxima. El segundo parámetro, t_{comb} , se refiere a la duración total de la combustión desarrollada en la BCVC.

Se definen por último otros dos parámetros de carácter adimensional que surgen de la combinación de algunos de los parámetros ya mencionados. Los parámetros adimensionales pretenden dar un carácter universal al parámetro y permiten su comparación con valores obtenidos en otras casuísticas, en este caso, resulta posible la comparación entre experimentos. El primer parámetro adimensional se denomina “etapa de dominancia celular” (*Stage of Cellular Dominance*, en inglés), SCD. Esta etapa se da desde que comienza la influencia de la celularidad (en el tiempo de activación celular) hasta que la celularidad llega al instante de influencia máxima (tiempo de máxima influencia celular) adimensionalizada con este mismo tiempo de máxima influencia celular de manera absoluta. Está relacionado con el periodo de aceleración de la velocidad de combustión. Esta idea queda reflejada en la siguiente ecuación (4.8).

$$SCD = \frac{t_{max} - t_{trigg_cell}}{t_{max}} \quad (4.8)$$

4. Metodología del cálculo de inestabilidades

El último parámetro, también adimensional, se denomina “etapa de combustión celular” (*Cellular Combustion Stage*, en inglés), CCS, y pretende recoger todo el periodo de actuación de la celularidad, no sólo cuando ésta es dominante, que queda reflejado en el parámetro SCD, sino hasta el final de la combustión (incluyendo la última donde la celularidad deja de ser significativa en la velocidad). La ecuación (4.9) muestra el cálculo de este parámetro.

$$CCS = 1 - \frac{t_{trigg_cell}}{t_{comb}} \quad (4.9)$$

Se recogen en la Tabla 4.1 de manera resumida todos los parámetros celulares explicados, para facilitar la comprensión de los mismos. En ella se aportan los nombres, los símbolos, las unidades (si las hubiere) y las definiciones de cada uno de ellos. Posteriormente se proporcionan explicaciones para el cálculo de cada uno de ellos parámetros celulares explicados en este apartado.

Tabla 4.1. Resumen de los parámetros celulares seleccionados.

Parámetros dimensionales	
Nombre, símbolo [unidades]	Definición
Tiempo de activación celular (<i>cellular trigger time</i>), t_{trigg_cell} [ms]	Periodo de activación requerido para que se materialicen las consecuencias de la celularidad en la velocidad de combustión.
Radio celular (<i>cellular radius</i>), r_{cell} [cm]	El radio del frente de llama cuando la combustión alcanza el tiempo de activación celular.
Tiempo de máxima influencia celular, t_{max} [ms]	Instante en el que se alcanza la máxima velocidad de combustión.
Tiempo de combustión o duración de la combustión, t_{comb} , [ms]	Tiempo total que dura el proceso de combustión desarrollado en la BCVC
Parámetros adimensionales	
Nombre, símbolo [unidades]	Definición
Etapas de dominancia celular (<i>Stage of Cellular Dominance</i>), SCD [-]	Porción del tiempo adimensionalizada en el que la influencia de la celularidad es dominante en el proceso de

combustión. Se corresponde con la etapa de aceleración de la velocidad de combustión.

$$SCD = \frac{t_{max} - t_{trigg_cell}}{t_{max}}$$

Etapa de combustión celular (*Cellular Combustion Stage*), CCS [-] Porción del tiempo adimensionalizada que recoge la actuación celular en el proceso de combustión completo.

$$CCS = 1 - \frac{t_{trigg_cell}}{t_{comb}}$$

Una vez definidos los parámetros respuesta, con el tiempo de activación celular como base, se procede a la acotación del área de interés para el estudio de la celularidad en llamas.

4.3.2. Acotación del área de interés para el estudio de la celularidad en llamas y serie piloto de experimentos

En este punto se explica la obtención del área de interés para el estudio de la celularidad. Basándose en el estudio de Bradley et al.[114] se estableció una temperatura fija de 343 K, ya que, según dicho estudio, en el desarrollo de inestabilidades de etanol son más significativos la presión y el dosado relativo que la propia temperatura. Se decide por este motivo hacer un estudio paramétrico variando el dosado relativo y la presión inicial del proceso con temperatura inicial fija. La presión inicial máxima se fija en 0.3 MPa por motivos de seguridad debido a los límites soportables por la instalación.

Inicialmente se realizaron experimentos en las condiciones fronterizas del área basada en el artículo mencionado para justar las condiciones preestablecidas a la casuística concreta de la instalación experimental descrita en el apartado 3.1. Dichos experimentos se siguieron aplicando la metodología experimental explicada el punto 3.2. La siguiente Tabla 4.2 recoge las condiciones de los experimentos realizados en esta primera etapa de definición y el objetivo que tenía su ejecución.

Tabla 4.2. Resumen de los experimentos iniciales realizados para una primera aproximación del área de estudio.

Presión inicial, p_i [MPa]	Dosado relativo, ϕ	Objetivo
0.10	0.9	Definición de los límites inferiores del dosado relativo y de la presión
	1.0	Definición de los límites inferiores del dosado relativo y de la presión

4. Metodología del cálculo de inestabilidades

	1.4	Definición de los límites superior del dosado relativo e inferior de la presión
	1.5	Definición de los límites superior del dosado relativo e inferior de la presión
0.15	1.0	Definición de límite inferior del dosado relativo a presión intermedia
	1.1	Definición de límite inferior del dosado relativo a presión intermedia
	1.4	Definición de límite superior del dosado relativo a presión intermedia
0.20	0.9	Definición de límite inferior del dosado relativo a presión intermedia
	1.0	Definición de límite inferior del dosado relativo a presión intermedia
	1.4	Definición de límite superior del dosado relativo a presión intermedia
	1.5	Definición de límite superior del dosado relativo a presión intermedia
0.30	0.8	Definición de los límites inferior del dosado relativo y superior de la presión
	1.4	Definición de los límites inferior del dosado relativo y superior de la presión
	1.5	Definición de los límites superiores del dosado relativo y de la presión
	1.6	Definición de los límites superiores del dosado relativo y de la presión

De los experimentos recogidos en la tabla anterior, se seleccionaron 6 para definir los límites generales del área de estudio, los otros 7 experimentos fueron descartados por dos razones principalmente: la primera de ellas es que en algunos de ellos no se llegaba a producir el fenómeno de la celularidad; y la segunda, es que aparecía y tomaba importancia el fenómeno de la flotabilidad (explicado en el apartado 2.4.1.1).

En el grupo de experimentos descartados por la primera razón se encuentran los experimentos de dosado pobre y de baja presión inicial. En el grupo de experimentos descartados por la segunda razón se encuentran principalmente aquellos experimentos con un dosado muy rico, mayor a 1.4. El fenómeno de la flotabilidad se manifiesta en una BCVC con un desplazamiento ascendente notorio del centro de la esfera a la que se aproxima el frente de llama con respecto al centro de la cámara de combustión.

Las condiciones de los experimentos seleccionados para delimitar el área de estudio se reflejan en el mapa de la Figura 4.6, con la etiqueta de “experimentos iniciales seleccionados”. Además de dichas combustiones, se realizaron 4 combustiones más de valores de baja y media presión para el estudio de dosados intermedios y 4 experimentos en máxima presión inicial en las mismas condiciones para la determinación de la repetitividad experimental. Todos estos experimentos están señalados en el mapa de la Figura 4.6 donde también se señala el área de estudio.

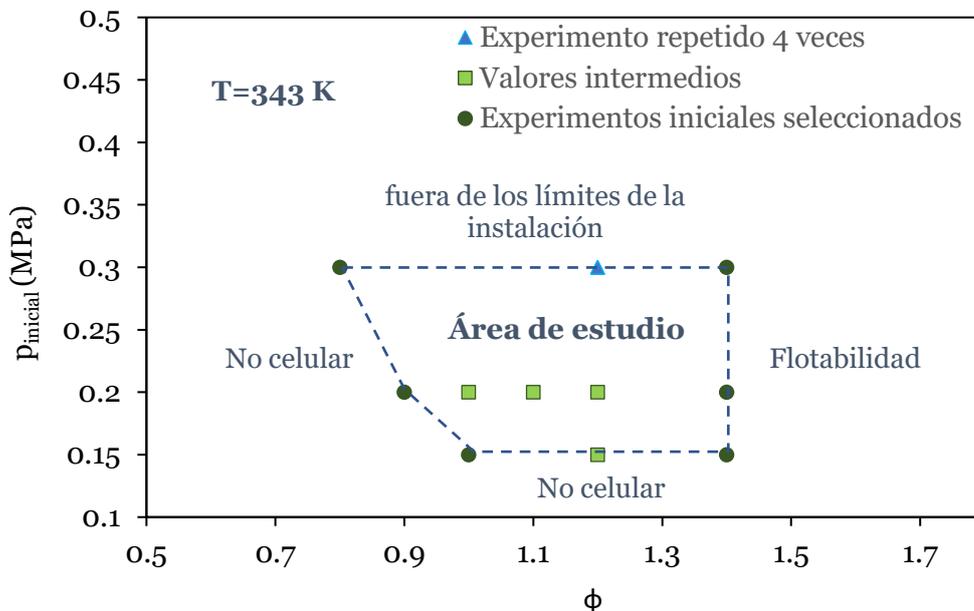


Figura 4.6. Límites del área de estudio de llamas de etanol en función del dosado relativo ϕ y de la presión inicial de las combustiones.

En la figura anterior se aprecia todo el mapa de experimentos iniciales llevados a cabo con los objetivos de, primero, delimitar el área de estudio y, segundo, estudiar algunos puntos intermedios para determinar de manera general y superficial el posible comportamiento del fenómeno de la celularidad. Tal y como se ha mencionado anteriormente, en la periferia del área de estudio se muestran los motivos para la limitación en cada una de las zonas. En las zonas de dosados pobres o presión inicial inferior a 0.15 MPa no se llega a producir el fenómeno de la celularidad, ver Figura 4.7, por lo que carece de sentido su estudio.

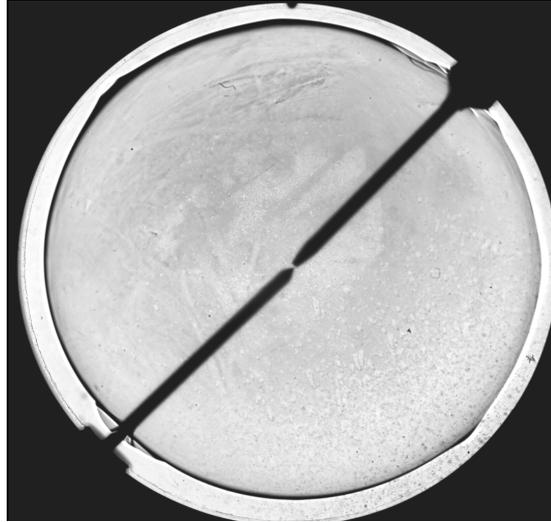


Figura 4.7. Llama de etanol no celular en condiciones iniciales de $T_i=343\text{ K}$, $p_i=0.2\text{ MPa}$ y $\phi=0.8$

En la siguiente Figura 4.8, se recoge gráficamente la consecuencia de la flotabilidad en el desplazamiento vertical de la llama con respecto a la cámara de combustión, y además, como se encuentra explicado en el apartado 2.4.1.1, este fenómeno provoca sus propias inestabilidades, por lo que se descarta su estudio en esta Tesis.

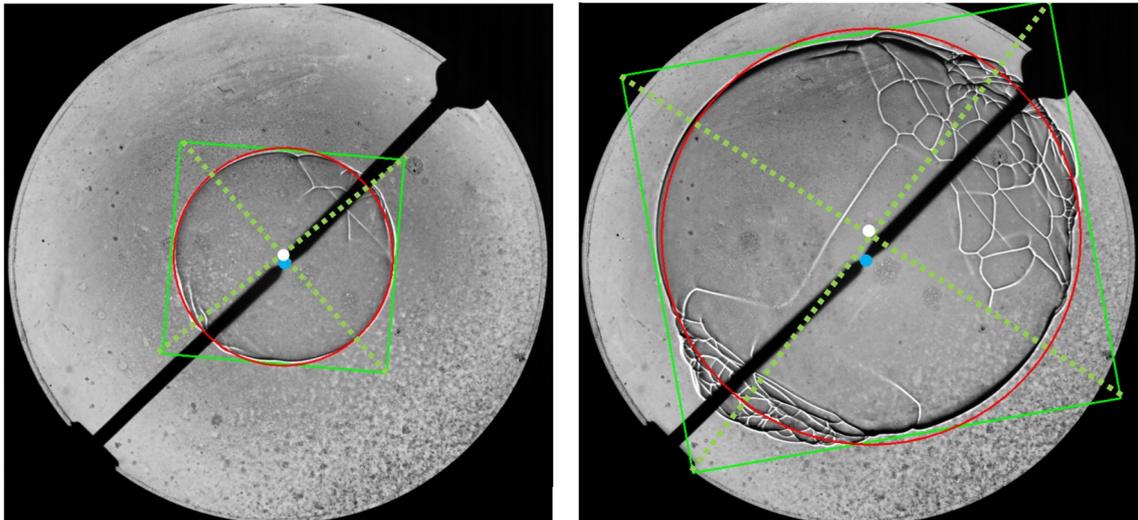


Figura 4.8. Desplazamiento ascendente de la llama con respecto a la cámara de combustión debido al fenómeno de flotabilidad. Llama de etanol en condiciones iniciales de $T_i=343\text{ K}$, $p_i=0.3\text{ MPa}$ y $\phi=1.5$.

En la Figura 4.6 se tiene también la condición de presión y dosado relativo (a la temperatura de 343 K) en la que se repitió cuatro veces el experimento en esta primera aproximación del área de estudio. En la siguiente gráfica recogida en la Figura 4.9 se muestra la evolución temporal de la presión obtenida experimentalmente de cada una de las cuatro repeticiones ensayadas bajo las condiciones de 0.3 MPa de presión inicial y 1.2 de dosados relativo (cada una de ellas se dibuja en un estilo de línea diferente). Se puede

observar que todas las presiones se encuentran dentro de un error relativo máximo menor al 10% y no existe una diferencia significativa en su evolución.

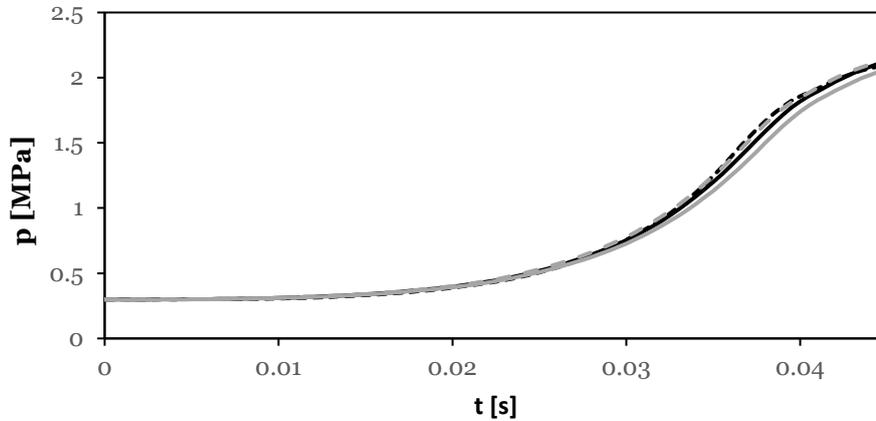


Figura 4.9. Repetitividad de la curva de presión para las condiciones de 0.3 MPa de presión inicial y $\varphi = 1.2$.

Una vez delimitada el área de estudio, se explica el siguiente apartado el desarrollo de una serie de elementos piloto que sirva como base para el planteamiento estadístico de los experimentos significativos de los que se obtienen los modelos para los parámetros celulares. La realización de dicha serie piloto de experimentos resulta necesaria por varias razones: en primer lugar, ayuda a verificar la viabilidad del diseño de experimentos (si el estudio del fenómeno es posible estadísticamente. En segundo lugar, sirve para la detección precoz de posibles problemas en la implementación del estudio. En tercer lugar, permite la identificación de las variables independientes más influyentes y su posible selección para incluirse en el diseño estadístico y, al contrario: detectarse variables no significativas cuyo estudio no sea necesario. Se puede realizar también a través de la serie piloto un estudio de la variabilidad en los resultados, así como la posibilidad de validar las hipótesis planteadas inicialmente.

4.3.3. Cálculo de los parámetros celulares para la serie piloto de experimentos

Una vez que ha sido definida la región de interés para el estudio del fenómeno de la celularidad en la que se encuentra la serie piloto de experimentos, se calculan para cada uno de ellos los parámetros celulares que suponen la base estadística del DDE. Seguidamente, se recoge la metodología seguida para la obtención de cada uno de los parámetros celulares.

4.3.3.1. Cálculo de los parámetros celulares dimensionales de la serie piloto

Los parámetros dimensionales se recogen en la primera sección de la Tabla 4.1; se recuerda su terminología: tiempo de activación celular (cellular trigger time), $t_{\text{trigg_cell}}$; el radio celular (*cellular radius*), r_{cell} ; el tiempo o instante de máxima influencia celular, t_{max} , y la duración o tiempo de combustión, t_{comb} .

Cálculo del tiempo de activación celular, t_{trigg_cell}

Para el cálculo del parámetro denominado tiempo de activación celular (cellular trigger time), t_{trigg_cell} , se sigue la definición aportada en el apartado 4.3.1: “tiempo en el que se da la auto-aceleración en el proceso de combustión”, es decir, “Periodo de activación requerido para que se materialicen las consecuencias de la celularidad en la velocidad de combustión”. La velocidad de combustión se puede calcular tal y como muestra la gráfica recogida en la Figura 4.10.

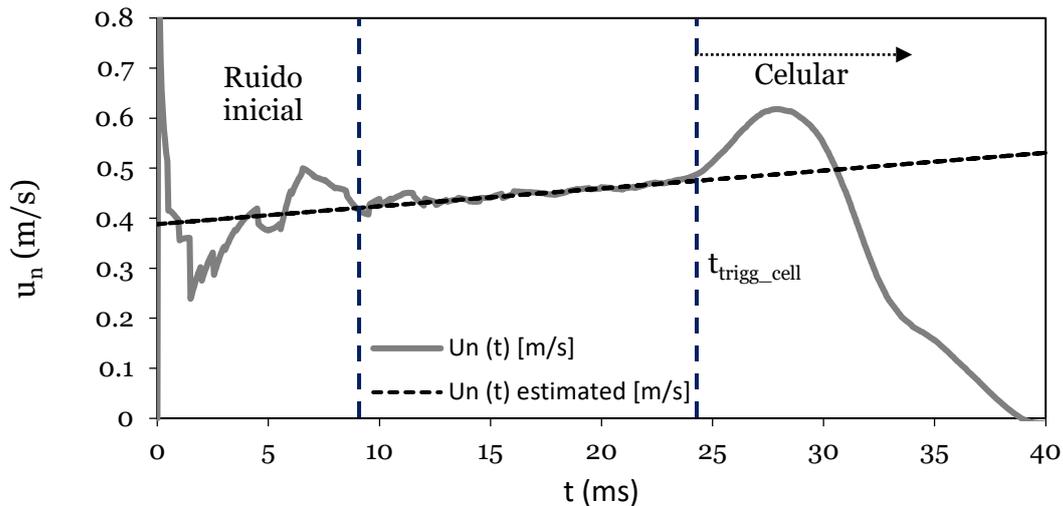


Figura 4.10. Evolución de la velocidad de combustión para etanol: $\phi=0.8$; $p_i=0.3$ MPa; $T=343$ K.

En primer lugar, se realiza una regresión lineal básica de la velocidad de combustión para la cual se excluyen las regiones iniciales de la combustión afectadas por el ruido de la chispa y las perturbaciones del inicio de la combustión y la región celular donde la velocidad de combustión deja de considerarse cercana a la velocidad de combustión laminar no celular. Éste es el parámetro base para calcular otros parámetros celulares, tal y como se explica en los siguientes subapartados.

Cálculo del Radio celular, r_{cell}

El cálculo del radio celular es directo mediante el tiempo de activación celular ya que, como se ha indicado en un apartado anterior, es “el radio del frente de llama cuando la combustión alcanza el tiempo de activación celular”. Para la obtención de la evolución temporal del radio se emplea el programa de seguimiento de imágenes, ver apartado 3.3. En la siguiente Figura 4.11, se muestra un ejemplo de una evolución del radio del frente de llama siguiendo las imágenes Schlieren en función del tiempo.

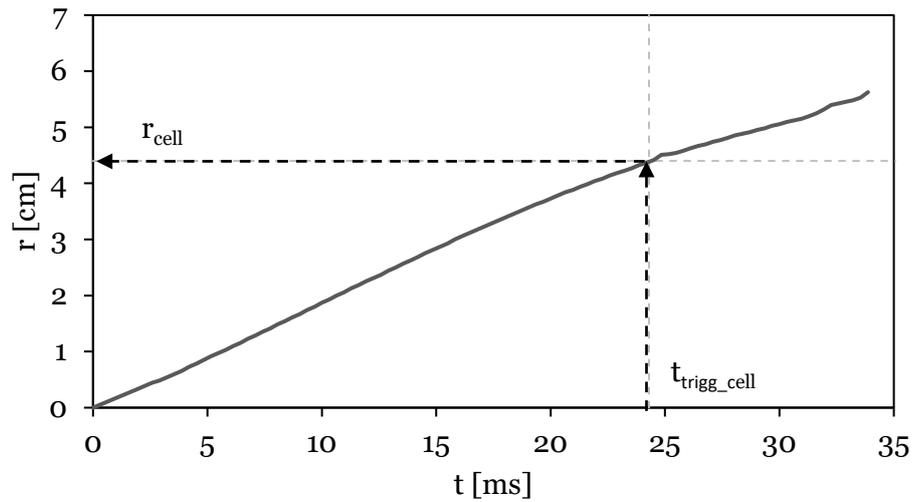


Figura 4.11. Evolución del radio del frente de llama para etanol: $\phi=0.8$; $p_i=0.3$ MPa; $T=343$ K

Para la gráfica en la figura anterior se emplea el mismo experimento que se utiliza para la obtención de la velocidad de combustión reflejada en la Figura 4.10 porque ambos parámetros, tanto el tiempo de activación celular como el radio celular están directamente relacionados.

Cálculo del tiempo de máxima influencia celular, t_{max}

Teniendo en cuenta la definición del parámetro de máxima influencia celular, t_{max} : “Instante en el que se alcanza la máxima velocidad de combustión”, es trivial la obtención de este parámetro, puesto que basta con obtener el máximo de la velocidad de combustión obviando la región influida por el ruido inicial de la chispa. Esto se muestra en la Figura 4.12 la cual se obtiene del mismo experimento que las figuras anteriores.

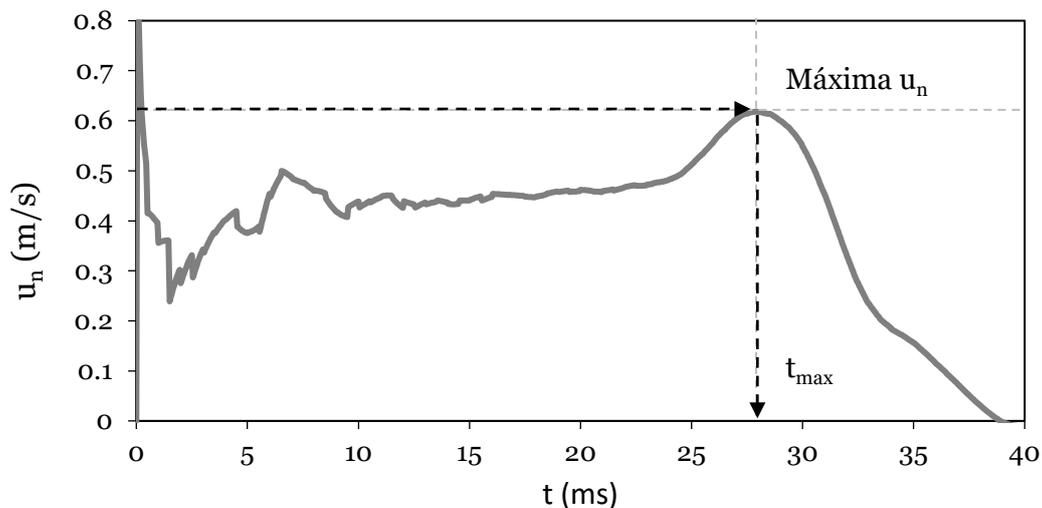


Figura 4.12. Evolución de la velocidad de combustión para etanol: $\phi=0.8$; $p_i=0.3$ MPa; $T=343$ K

Para la obtención de t_{\max} no hace falta el cálculo de la velocidad de combustión laminar sin celularidad, ya que el dato que interesa es el máximo relativo de la velocidad de combustión.

Cálculo del tiempo de combustión o duración de la combustión, t_{comb}

El tiempo de combustión es la duración o “tiempo total que dura el proceso de combustión desarrollado en la BCVC”. La reacción de combustión llega a su fin cuando todos los reactivos se han transformado en productos en una reacción estequiométrica. Si existe un reactivo limitante ya sea el combustible (dosado relativo pobre) o el aire (dosado relativo rico), la combustión llegará a su fin cuando se haya agotado ese reactivo.

En una bomba de combustión a volumen constante el fin de la reacción de combustión está asociada con el instante de máxima presión, ver [115]. En este apartado, se propone la obtención del tiempo de combustión, t_{com} , mediante el valor máximo de la presión que alcanza durante el proceso. Este cálculo se puede ver de manera gráfica en la siguiente Figura 4.13.

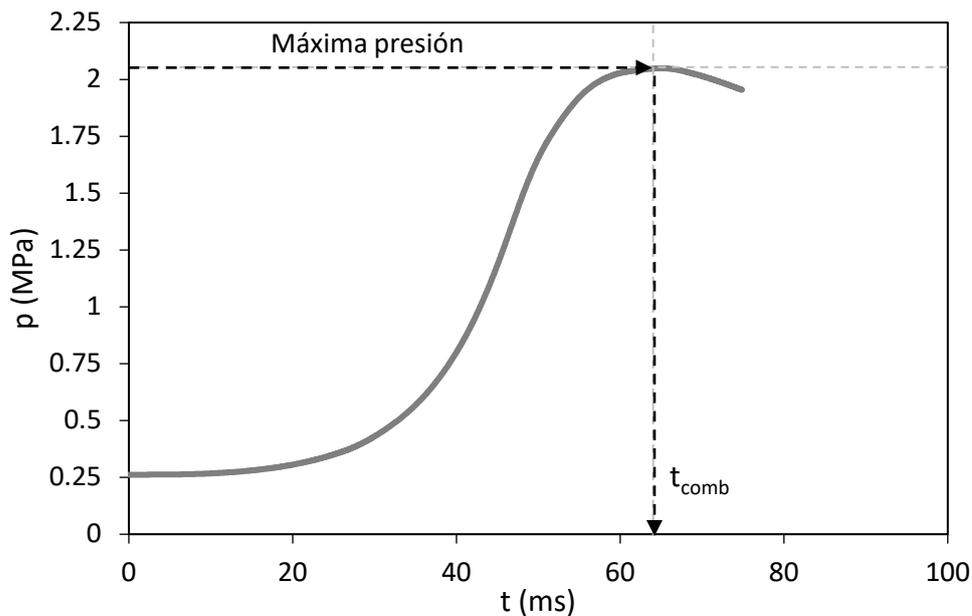


Figura 4.13. Evolución de la velocidad de combustión para etanol: $\phi=0.8$; $p_i=0.3$ MPa; $T=343$ K

Una vez que se ha explicado la metodología del cálculo de los parámetros celulares dimensionales, se explica en el siguiente punto la metodología de aquellos que son adimensionales.

4.3.3.2. Cálculo de los parámetros celulares adimensionales

La obtención de los dos parámetros celulares adimensionales propuestos para el estudio es inmediata teniendo los parámetros dimensionales, ya que, como se puede ver en la Tabla 4.1, resultan de la relación entre ellos. La metodología consiste en, una vez que obtenidos los resultados de los parámetros celulares aplicando los criterios dimensionales

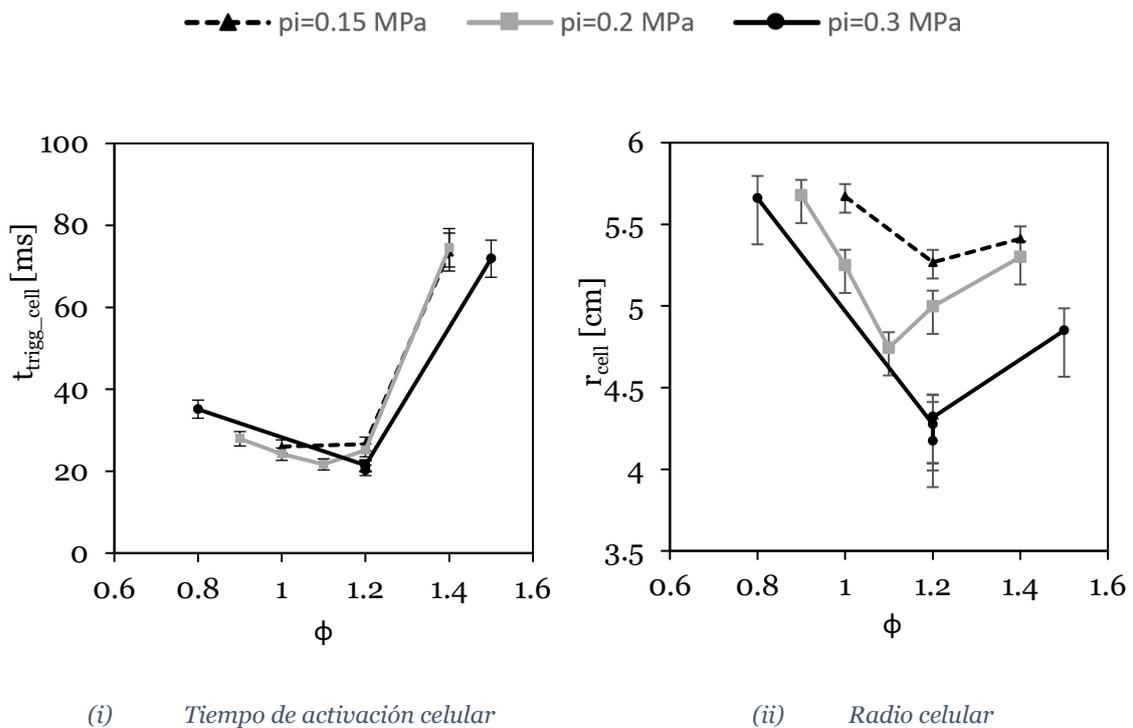
aplicados en los apartados posteriores, se aplica la ecuación (4.8), para la etapa de dominancia celular (*Stage of cellular dominance*), SCD; y de la ecuación (4.9), para la etapa de combustión celular (*Cellular Combustion Stage*), CCS.

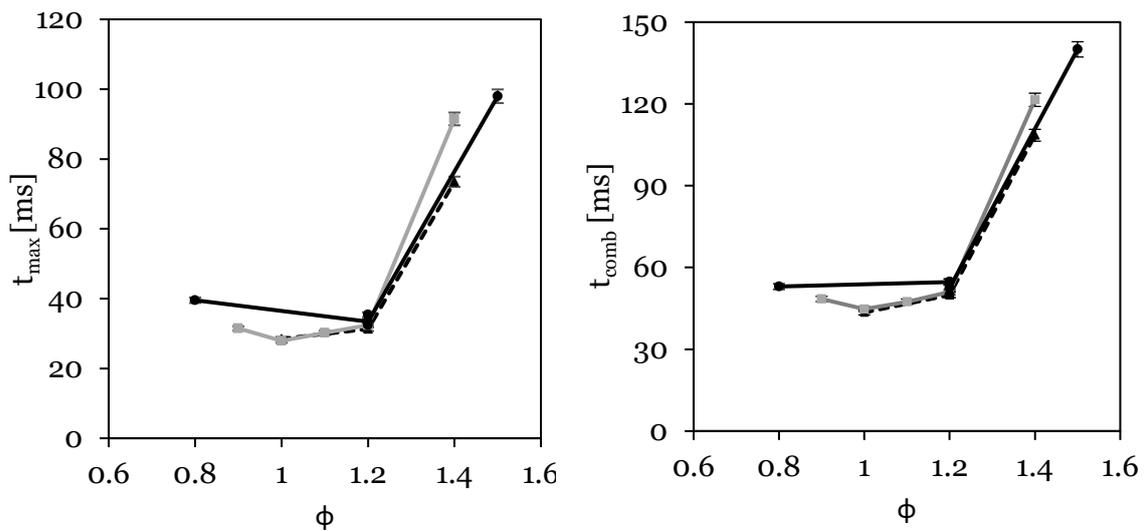
4.3.3.3. Resultados de los parámetros celulares de la serie piloto

La metodología de cálculo de los parámetros celulares, tanto dimensionales como adimensionales, queda recogida en los puntos previos. En los dos siguientes puntos se muestran los resultados para los 14 experimentos que forman parte de la serie piloto.

Parámetros celulares dimensionales

Aplicando la metodología explicada para los parámetros celulares dimensionales explicados en los apartados anteriores, se obtienen los resultados que se muestran en las siguientes gráficas, ver Figura 4.14.





(iii) Tiempo de máxima influencia celular

(iv) Duración o tiempo de combustión

Figura 4.14. Valores de los parámetros celulares dimensionales para la serie piloto de experimentos en condiciones de 343 K de temperatura inicial y diversas presiones iniciales y dosados relativos.

Los resultados de los parámetros celulares y su significado se tratan más detenidamente una vez que se haya el modelo completo para el área de estudio de cada uno de ellos, de esta manera se consigue una visión más global de todos los parámetros y sus posibles dependencias.

El cálculo de los errores reflejados en las gráficas anteriores se explica brevemente a continuación. Para el cálculo de errores en t_{trigg_cell} se ha delimitado, en primer lugar, el punto a partir del cual se considera que la velocidad está aumentando debido a las inestabilidades; para ello, primero se establece que la regresión que “modela” la velocidad de combustión base (sin celularidad) debe tener un $R^2 \geq 0.9$. Una vez que se tiene la regresión de la velocidad, se establece que el valor de velocidad, para que se considere que está acelerado debe ser a partir de ese punto mayor que la velocidad base y debe estar entre un 0.5% y un 2% por encima de ella en el punto considerado como t_{trigg_cell} . Una vez establecida esta tolerancia, a cada uno de los límites (inferior del 0.5% y superior del 2%) se le aplica un error de “dispersión cíclica” explicado anteriormente en el apartado 4.3.2. El siguiente paso es restarle (sumarle) al límite inferior (superior) de esta tolerancia el tiempo de muestreo proporcionado por el captador de presión piezoeléctrico. Una vez calculados todos los errores para la serie piloto, se establece para todos ellos la tolerancia máxima (criterio conservador) que es de un 6.3%, en ella se incluye también el error originados en los aparatos de medidas usados (ver explicación de la instalación experimental en el capítulo 3).

Para el cálculo de errores para el radio celular se parte de la tolerancia del tiempo de activación celular y se le resta (suma) al límite inferior (superior) de esa tolerancia

temporal el periodo entre *frames* (1/fps) que proporciona la cámara, en todos los casos es de 0.00032 s. Esto se hace porque se recuerda que se usa la evolución del radio según las imágenes Schlieren recogidas durante el proceso de combustión. Una vez que se tiene la tolerancia temporal ampliada por la resolución de la cámara, el error del radio estará acotado por los radios correspondientes a los límites temporales calculados. En este caso, la tolerancia no se da en porcentaje, sino que a cada grupo de datos (en función de la presión inicial) se le da una tolerancia en números absolutos, escogiendo la mayor (más conservadora) de cada grupo.

Para el cálculo de los errores en el instante de máxima influencia celular y el tiempo de combustión el planteamiento es el mismo que para el tiempo de activación celular, solo que en este caso no es necesario determinar una tolerancia extra para la aceleración, ya que resulta mucho más inmediato buscar el valor máximo tanto para la velocidad de combustión (para el caso de t_{max}) como para la presión (para el caso de t_{comb}). Para ambos casos el error es de aproximadamente un 5 %.

Resultados de los parámetros celulares adimensionales

De manera similar al punto anterior, en este apartado se recogen los resultados de los parámetros adimensionales, los cuales se exponen en la Figura 4.14.

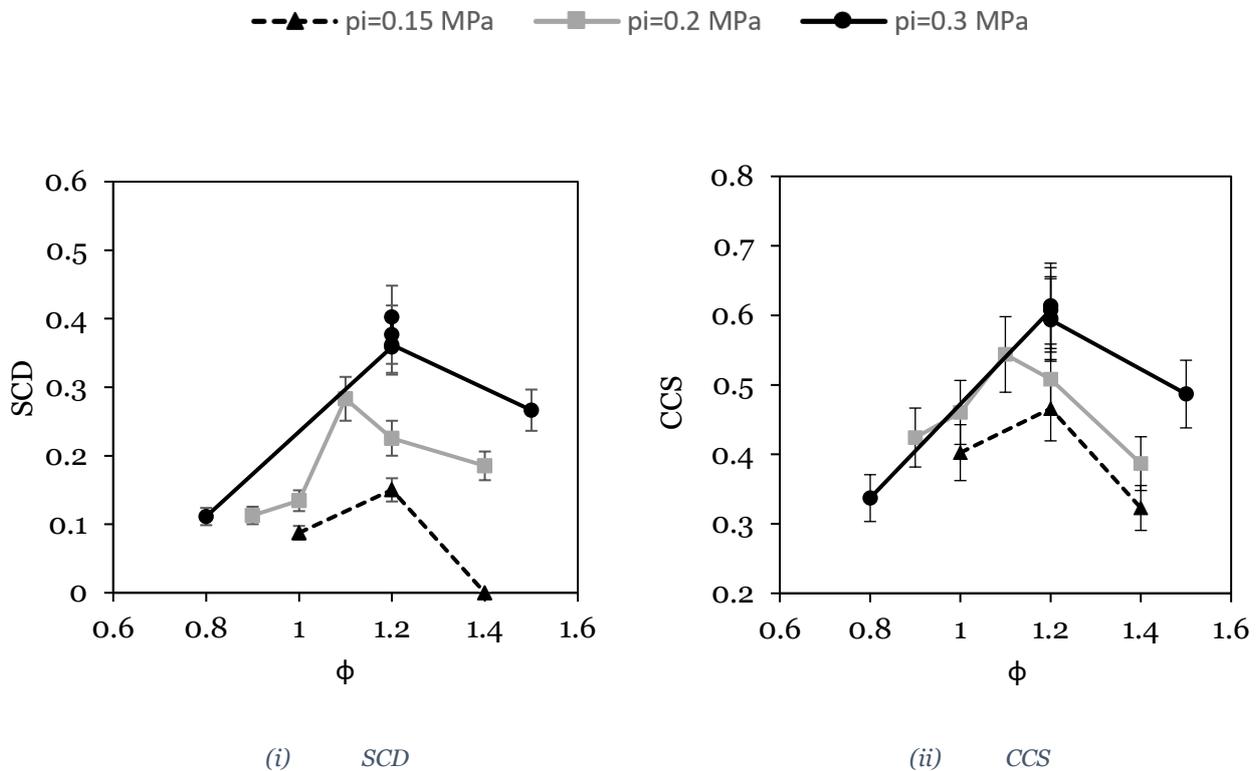


Figura 4.15. Valores de los parámetros celulares dimensionales para la serie piloto de experimentos.

Para el cálculo de errores de estos parámetros celulares adimensionales, como derivan de la relación entre ciertos parámetros dimensionales (a los que se podría denominar en este contexto “medidas primarias”), se aplica la teoría de propagación de errores en “medidas secundarias” derivadas de operaciones aritméticas entre medidas primarias. Los errores asociados, por tanto, a los parámetros celulares adimensionales (o medidas secundarias) equivalen, por tratarse de un cociente entre medidas primarias, a la suma de los errores relativos de esas medidas [116] .

Los resultados presentados en esta sección proporcionan una idea general de los límites del área de estudio y del comportamiento de los parámetros celulares en ella. De esta forma, se puede formular de una manera más adecuada un estudio experimental estadístico donde se visualicen los puntos más significativos donde ensayar para la creación de modelos adecuados para los parámetros celulares presentados.

4.3.4. Selección del diseño de experimentos para el estudio de la celularidad en llamas. Definición de los puntos experimentales de ensayo.

En esta sección, primero se aborda la fundamentación de los diseños óptimos y, posteriormente, se justifica la elección del diseño I-óptimo como el más adecuado, basándose en los resultados de la serie piloto de experimentos. Además, se presenta el conjunto final de experimentos que se lleva a cabo. Finalmente, se detallan los modelos estadísticos predictivos desarrollados para los parámetros celulares seleccionados, que constituyen las variables de respuesta del diseño óptimo propuesto.

En la siguiente Figura 4.16 se muestra un esquema general del planteamiento en este apartado del Diseño Óptimo de experimentos, para facilitar las explicaciones que se proporcionan en los siguientes apartados.

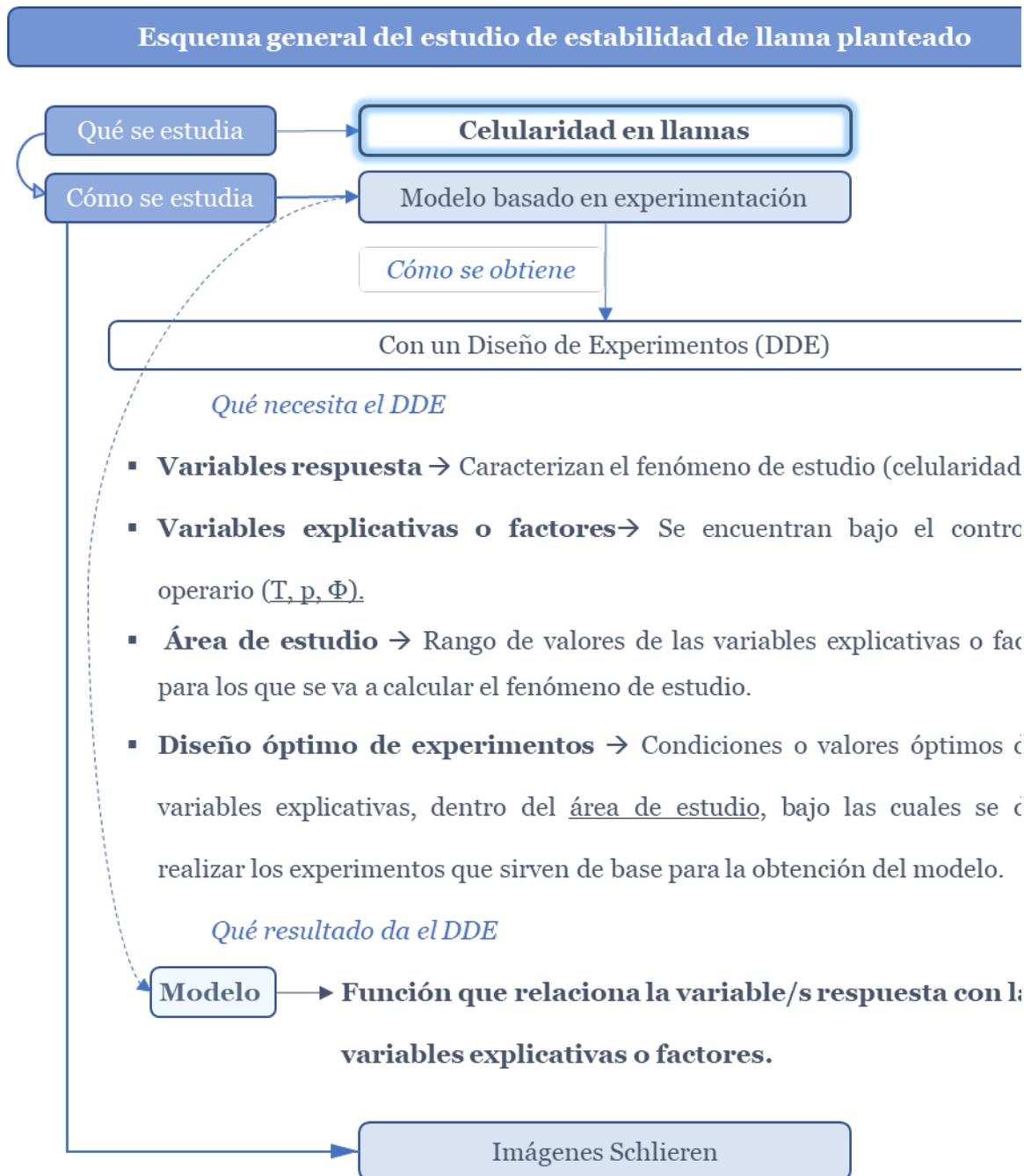


Figura 4.16. Esquema general de la utilización del Diseño Óptimo de experimentos para el estudio de la celularidad en llamas.

4.3.4.1. Fundamento del Diseño Óptimo de Experimentos

Antes de la explicación del Diseño Óptimo de Experimentos escogido para este estudio de la celularidad en llamas, es conveniente explicar el fundamento de esta herramienta estadística.

Sea $y = F(x, \beta) + \varepsilon$ un modelo que describe la relación entre la variable de respuesta y y las variables explicativas x . En este modelo:

- y representa la variable respuesta.
- x es el vector de variables independientes.
- $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_m)^T$ es el vector de parámetros desconocidos.
- $F(x, \beta)$ función que generalmente no es lineal con respecto a β .
- ε representa un error aleatorio.

Este error ε puede ser conocido a partir de resultados o experiencia previa o derivado analíticamente (por ejemplo, a partir de sistemas de ecuaciones diferenciales). Un diseño exacto será una colección de puntos $\{x_1, \dots, x_n\}$ de variables independientes donde n es el tamaño del experimento.

Cuando se trabaja con modelos no lineales, un enfoque común es linealizarlos para aplicar la teoría desarrollada de los modelos lineales. Por lo tanto, se asume en adelante un modelo lineal siguiendo la forma mostrada en la siguiente ecuación (4.10).

$$y = f(x)^T \beta + \varepsilon \quad (4.10)$$

La cual en forma matricial adquiere la siguiente formulación:

$$Y = X \beta + U \quad (4.11)$$

Donde:

- $Y = (y_1, \dots, y_n)^T$ es el vector de observaciones
- U es el vector de residuos (diferencia entre los valores observados de la variable respuesta y los valores predichos por el modelo).
- $X = (f(x_1)^T, \dots, f(x_n)^T)$ es la matriz de diseño con $f(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x))^T$ siendo funciones independientes en el dominio experimental X .

Para errores aleatorios normalmente distribuidos, $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$, los estimadores de Mínimos Cuadrados y Máxima Verosimilitud de los parámetros son equivalentes, lo que justifica el uso del método de Mínimos Cuadrados. Para observaciones independientes, los estimadores se calculan como se muestra en la siguiente ecuación (4.12).

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y \quad (4.12)$$

Con varianza: $\text{Var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$. La matriz $X^T X$ se denomina “matriz de información del diseño exacto ξ ”. Si las observaciones están correlacionadas, se utilizan estimadores de Mínimos Cuadrados Generalizados, tal y como se muestra en la ecuación (4.13).

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Y \quad (4.13)$$

Donde $\Sigma = \text{Var}(Y)$ y la varianza de los estimadores se expresa como: $\text{Var}(\hat{\beta}) = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1}$. La matriz de información del diseño ξ se redefine como: $M(\xi) = X^T \Sigma^{-1} X$. En este caso, la estimación clásica de la matriz de covarianza puede ser sesgada [117], [118], lo que ha llevado a propuestas de correcciones basadas en criterios de optimalidad [119].

Para comparar dos diseños, ξ y η , con diferentes tamaños (n_ξ y n_η respectivamente), se utiliza un criterio de optimalidad específico, Φ . La eficiencia de η respecto de ξ (es decir, la calidad informativa de uno con respecto al otro), se calcula mediante la relación mostrada en la ecuación (4.14).

$$\text{Eficiencia} = \frac{\Phi(M(\xi))}{\Phi(M(\eta))} \quad (4.14)$$

Siendo Φ una función homogénea: $\Phi(kM(\xi)) = \Phi(M(\xi))/k$. Un valor de eficiencia mayor que 1 indicaría que η es superior a ξ en cuanto a calidad informativa (mejor diseño) y en qué medida es mejor. Un diseño con la mitad de eficiencia que otro, requeriría el doble de observaciones para obtener la misma información. Dado que el determinante es una función no homogénea, para la optimalidad-D la fórmula que debe emplearse se presenta en la siguiente ecuación (4.15).

$$\text{Eff}_\xi(\eta) = (n_\xi/n_\eta) (\text{Det}(M(\eta))/\text{Det}(M(\xi)))^{1/m} \quad (4.15)$$

4.3.4.2. Selección del mejor Diseño de Experimentos

El espacio de diseño, que es la región donde deben realizarse los experimentos, se define según los resultados obtenidos de las muestras preliminares descritas previamente (Figura 4.6). El siguiente paso consiste en decidir un modelo que pueda describir mejor la relación entre las variables de respuesta ($t_{\text{trigg_cell}}$, r_{cell} , t_{max} , t_{comb} , SCD y CCS) y las variables explicativas, presión inicial, p , y el dosado relativo ϕ . Se consideran modelos polinomiales por las siguientes razones:

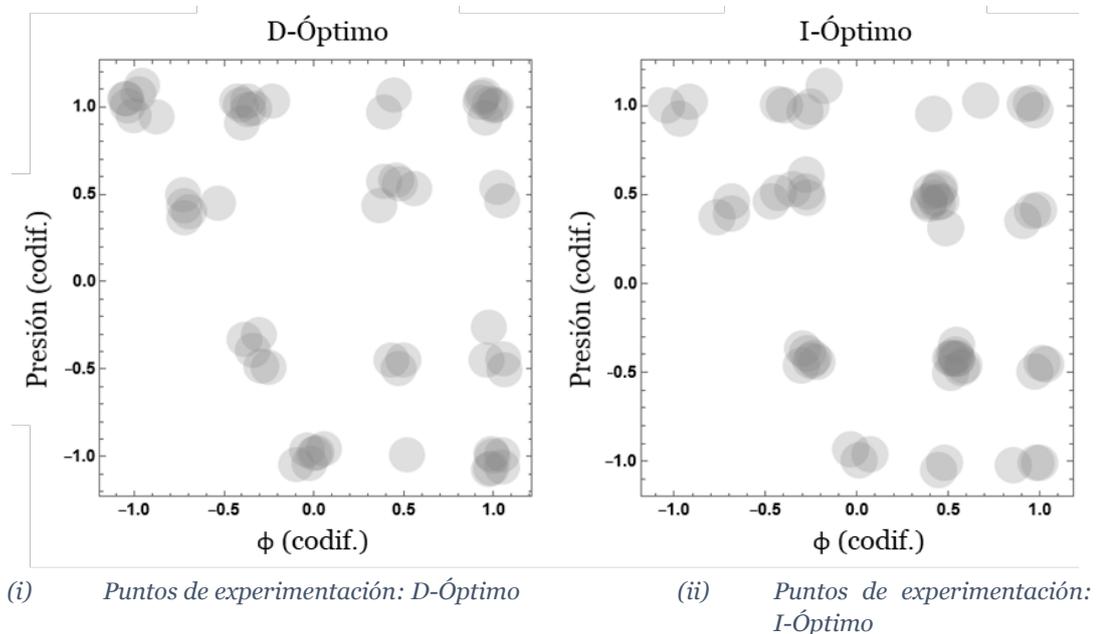
- Son modelos lineales, por lo que se puede utilizar el conjunto de técnicas y algoritmos bien conocidos desarrollados para estos.

- Pueden aproximar localmente cualquier modelo general (no lineal), lo que lleva a la capacidad de adaptar el modelo. Normalmente, es suficiente usar modelos polinomiales de hasta segundo o tercer grado para obtener una aproximación razonable.

Finalmente, se considera un modelo polinómico cuadrático más términos cúbicos puros (las interacciones de tercer orden son muy raras, por lo que se descartaron). Para facilitar los cálculos, las variables explicativas se codifican para ajustarse al cuadrado $[-1,1] \times [-1,1]$ utilizando el cambio de variables $X_1 = (\phi - 1.1) / 0.3$ y $X_2 = (p - 0.225) / 0.075$.

El número de muestras, n , se establece en 60, basado en el criterio del tiempo y los recursos disponibles para la experimentación.

Bajo todas estas condiciones, se puede obtener el diseño experimental óptimo. Existen dos enfoques principales: buscar la mejor estimación de los parámetros del modelo o buscar la mejor predicción de la respuesta, correspondientes con los criterios de D-óptimo e I-óptimo, respectivamente. Por lo tanto, para el caso concreto de estudio, se plantean diseños D-óptimo e I-óptimo utilizando el software estadístico JMP⁵ debido a su versatilidad. En la Figura 4.17, “codif.” significa que tanto la presión como dosado relativo han sido normalizadas y escaladas entre -1 y 1, tal y como se ha explicado previamente. En las Figura 4.17 (i) y Figura 4.17 (ii) se muestran las condiciones o puntos experimentales necesarios para cada tipo de diseño. En las zonas donde el color gris es más oscuro, significa que hay más experimentos solapados en esas condiciones (o en los alrededores).



⁵ Página web del software: https://www.jmp.com/es_es/home.html

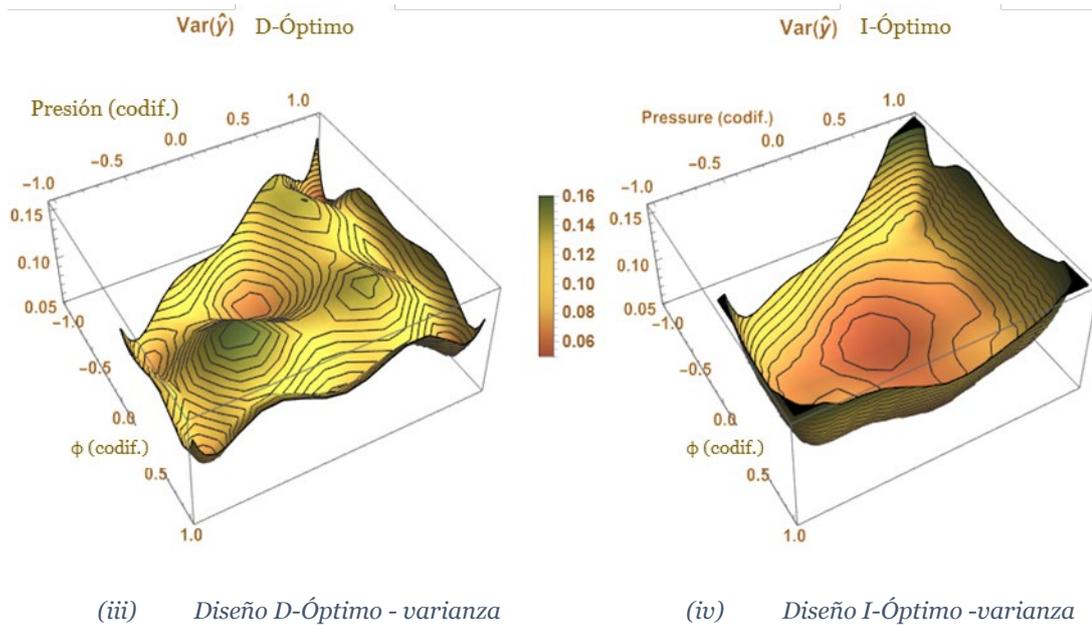


Figura 4.17. Diseños D-óptimo e I-óptimo para el modelo cúbico

Se puede observar que el diseño D-óptimo (Figura 4.17 (i)) concentra más experimentos en los bordes de la región de estudio, mientras que el diseño I-óptimo (Figura 4.17 (ii)) requiere de más experimentos en la parte interior. Para comparar ambos diseños, se realizó un estudio de eficiencia, encontrando que la eficiencia del diseño D-óptimo con respecto al I-óptimo es del 75.5%, mientras que la eficiencia del diseño I-óptimo con respecto a la D-óptimo es del 87.3%. A partir de estas cifras, se considera más beneficioso elegir el diseño I-óptimo, ya que genera una predicción más precisa de la respuesta y, al mismo tiempo, tiene un buen desempeño en la estimación de los parámetros.

Las Figura 4.17 (iii) Figura 4.17 (iv) muestra la varianza de la predicción de la respuesta para ambos diseños. Se puede observar claramente que hay fluctuaciones en la predicción de la varianza para la D-optimalidad (Figura 4.17 (iii) muestra varios picos y valles en la superficie), mientras que se obtiene un comportamiento muy diferente al utilizar el diseño I-óptimo (Figura 4.17 (iv)). Este último produce una varianza muy plana, casi constante, que solo aumenta al acercarse a los bordes de la región, puesto que es en borde donde el diseño I-óptimo coloca un menor número de muestras. Por estas razones presentadas previamente, se considera el diseño I-óptimo el más adecuado para el estudio de la celularidad en llamas de etanol.

En este apartado se han desarrollado las tres metodologías planteadas. La primera es aquella relacionada con el cálculo de la velocidad de combustión, que, como se ha visto, es un parámetro clave para la caracterización del proceso de combustión de los combustibles estudiados. En segundo lugar, se ha presentado la metodología del estudio de estabilidad de los procesos de combustión, la cual pretende dar respuesta al origen y naturaleza de las

inestabilidades de los procesos de combustión. El crecimiento de estas inestabilidades puede llegar a modificar la morfología del frente de llama, dando lugar a lo que se denominada como celularidad. El interés por el estudio del fenómeno de la celularidad da lugar a la metodología desarrollada en el tercer punto de este capítulo de metodología de la Tesis. Éste trata sobre el estudio de estabilidad en llamas, marcada por la aparición de celularidad, así como sus consecuencias en el desarrollo de las combustiones.

CAPÍTULO 5:

RESULTADOS DEL ESTUDIO DE ESTABILIDAD DE PROCESOS DE COMBUSTIÓN DE MEZCLAS DE METANO/HIDRÓGENO/AIRE

5. RESULTADOS DEL ESTUDIO DE ESTABILIDAD DEL PROCESO DE COMBUSTIÓN

En este capítulo, se presentan los resultados del estudio de estabilidad de procesos de combustión (la metodología se explicó en el capítulo anterior). Concretamente, el estudio de estabilidad del proceso de combustión se realiza en mezclas de H_2 y CH_4 y sus mezclas. En cambio, el estudio de estabilidad de la llama, cuyos resultados se muestran en el siguiente capítulo, se realiza para etanol.

5.1. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión en combustiones de H_2/CH_4

En este capítulo se aplican sobre combustiones de hidrógeno y metano y sus mezclas los pasos de la metodología desarrollada para el estudio de estabilidad del proceso de combustión. Se recuerda brevemente en qué consistían estos pasos: (1) Definición de los límites de estabilidad en combustiones de morfología global esférica. Curvas de estabilidad neutra. (2) Clasificación de la naturaleza de las combustiones. (3) Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) y aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo. (4) Estudio paramétrico de la celularidad.

Se muestran y se analizan en los siguientes apartados los resultados obtenidos en cada uno de los puntos de la metodología para combustiones de mezclas de hidrógeno y metano. El objetivo principal de este estudio es determinar la influencia del hidrógeno y del dosado global de la mezcla en el estudio de estabilidad en el proceso de combustión de dichos combustibles. Para ello se analizan dos grupos de experimentos de mezclas de H_2/CH_4 , ambos se componen de cinco experimentos con contenido de hidrógeno variable: 0%, 20%, 50%, 80% y 100% (% en volumen). En el primer grupo se estudian mezclas de dosado global de la mezcla estequiométrico. En el segundo grupo los experimentos que lo componen tienen un dosado global pobre, de 0.7. En la Tabla 5.1 se pueden encontrar de manera esquemática ambos grupos de experimentos con sus correspondientes condiciones de presión inicial, temperatura inicial y dosado.

Tabla 5.1. Condiciones de las combustiones de H_2 y CH_4 y sus mezclas para el estudio de estabilidad en procesos de combustión.

	Dosado relativo, ϕ	% en volumen de H_2	Presión inicial, p_i [MPa]	Temperatura inicial, T_i [K]
Grupo 1	1.0	0	0.10	313
		20		
		50		
		80		
		100		

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

	Dosado relativo, ϕ	% en volumen de H_2	Presión inicial, p_i [MPa]	Temperatura inicial, T_i [K]
Grupo 2	0.7	0	0.10	313
		20		
		50		
		80		
		100		

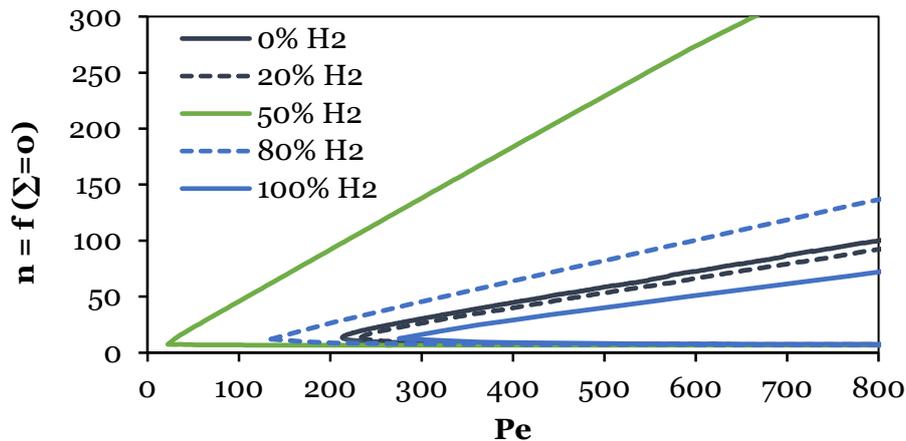
Se plantea el estudio de ambos grupos porque existen estudios de inestabilidades en procesos de combustión de hidrógeno en los que se determina que éste, al contrario que los combustibles con contenido en carbono, modifica su comportamiento con dosado pobre, generando mayores inestabilidades [32].

5.1.1. Definición de los límites de estabilidad en combustiones de H_2/CH_4 de morfología global esférica.

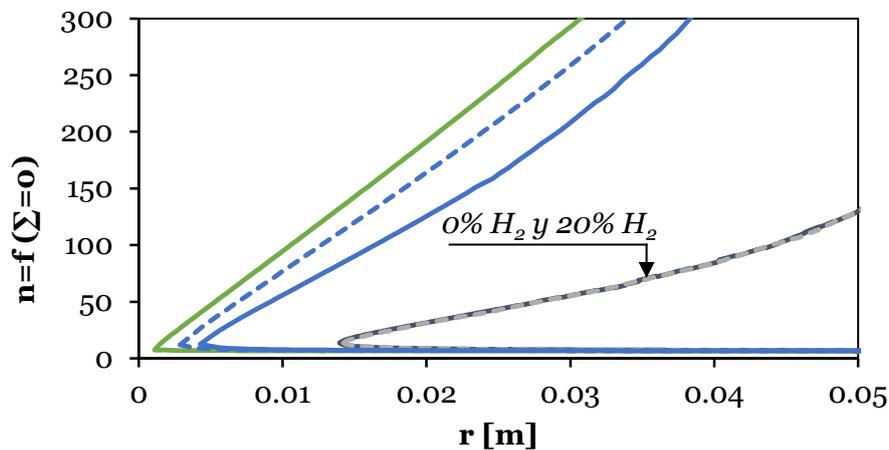
El primer punto del análisis de estabilidad, siguiendo lo explicado en la metodología, es el cálculo de los límites de estabilidad; específicamente se realiza con la construcción de las curvas de estabilidad neutra explicadas en el apartado 4.2.1 de la metodología. Para ello se hace uso de la función desarrollada en el Modelo de Diagnóstico “CalculaLimitesPeninsula”, detallada en el apartado 3.5. Esta función se emplea para la obtención de los números adimensionales de onda donde se hace nula la tasa de crecimiento de inestabilidades.

5.1.1.1. Límites de estabilidad para las combustiones de H_2/CH_4 de dosado estequiométrico

Seguidamente se presentan los resultados obtenidos para los experimentos determinados en el apartado anterior. Se comienza con la obtención de las curvas de estabilidad neutra para los experimentos del primer grupo correspondientes con el dosado estequiométrico (ver Tabla 5.1), se encuentran recogidas en la Figura 5.1. En la Figura 5.1 (i) se ha representado el “mapa” de curvas de estabilidad neutra en función del número de Peclet, que se recuerda que es el radio adimensionalizado por el espesor del frente de llama. En la Figura 5.1. (ii) se ha representado esto mismo, pero en función del radio instantáneo del frente de llama. Cada línea se corresponde con un porcentaje de hidrógeno en la mezcla, siendo metano el resto. El significado de “ $n = f(\Sigma=0)$ ” que aparece en el eje vertical es que se representan todos los números de onda que hacen que se cumpla la condición de que la tasa de crecimiento de inestabilidades se anule.



(i)



(ii)

Figura 5.1. Curvas de estabilidad neutra de combustiones de $\phi = 1$ de H_2 y CH_4 y sus mezclas en función del número de Peclet (i) y del radio del frente de llama (ii).

En las figuras anteriores, tanto en la Figura 5.1. (i), como en la Figura 5.1. (ii), se observa que todas las combustiones dibujan una península de inestabilidad. Dentro de ellas, se puede ver cómo para la combustión de 50% de hidrógeno el vértice o “nariz” de la península queda más cercano al eje vertical que el resto de las combustiones; esta diferencia se hace más notable en la representación en función del número de Peclet. Esto quiere decir que, tanto para para número de Peclet pequeños como para radios pequeños (primeras etapas de la combustión), el proceso de esta combustión entra ya en la zona inestable (interior de la península). Más adelante se determinarán las consecuencias de esta observación.

Otra reflexión que se puede realizar estudiando los “mapas de penínsulas” anteriores es el “cambio de orden” de la combustión de hidrógeno puro (100% H_2), en función de si

se representa frente al número de Peclet o frente al radio. En la Figura 5.1. (i), la península de la combustión de hidrógeno es la que más a la derecha se encuentra situada (más alejada del eje vertical), su vértice se corresponde con el número de Peclet más elevado de todos. En cambio, en la gráfica en función del radio, ésta se encuentra en tercer lugar, más a la derecha de las penínsulas de 50% y 80% de H₂ y más a la izquierda de las penínsulas correspondientes a 20% de H₂ y metano puro (0% de H₂). Conviene recordar que el número de Peclet, como se veía en el apartado 2.4.2.3, es el cociente entre el radio y el espesor del frente de llama ($Pe = \frac{r}{\delta}$), el cual no es igual para todas las mezclas y combustibles. Se veía en el capítulo mencionado que existen varias formas de cálculo del espesor del frente de llama, en el modelo de diagnóstico empleado se calcula como $\delta = \frac{\alpha}{u_n}$.

La explicación para esta diferencia en el “orden” de las penínsulas en el mapa se encuentra en la disparidad de espesores entre las combustiones. En la siguiente Figura 5.2 se muestran graficados los radios en función de los números de Peclet para las combustiones anteriormente analizadas (del grupo de dosado estequiométrico).

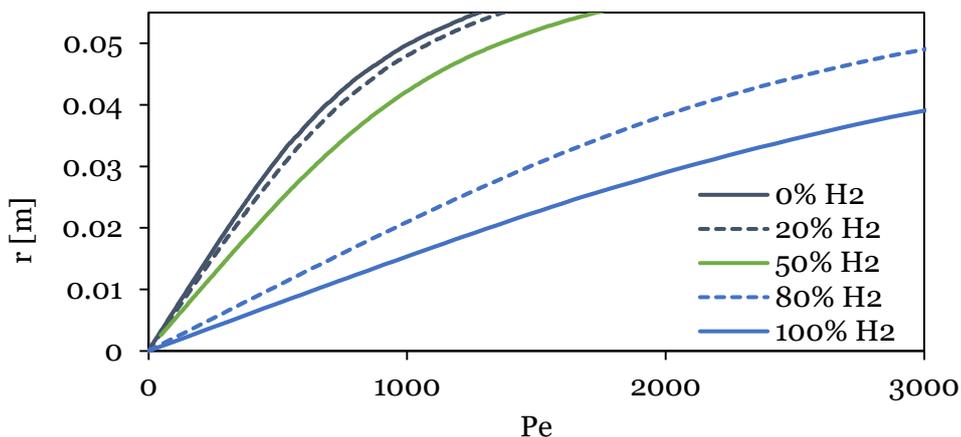


Figura 5.2. Radios del frente de llama en función del número de Peclet para diferentes combustiones de $\phi = 1$ de H₂ y CH₄ y sus mezclas.

Se advierte en la figura anterior que el porcentaje de hidrógeno disminuye la pendiente de las gráficas, que coincidiría con el espesor del frente de llama; por lo que se puede concluir que el hidrógeno disminuye el espesor del frente, especialmente a partir del 50% en contenido de este combustible. Esta diferencia es especialmente notable en hidrógeno puro, porque, como se veía en las Figura 5.1. (i) y Figura 5.1. (ii), a un número de Peclet mayor le correspondía un radio más pequeño que para metano puro o 20% de hidrógeno.

Retomando las Figura 5.1 (i) y Figura 5.1 (ii) se tiene que las curvas de estabilidad neutra de las combustiones de 0% y 20% de hidrógeno prácticamente se solapan en ambas representaciones, por lo que se podría concluir que el hidrógeno no tiene prácticamente influencia en los límites de estabilidad cuando se trata de porcentajes bajos (20% como máximo) y es a partir del 50% cuando su influencia es notable en este aspecto de la combustión.

5.1.1.1. Límites de estabilidad para las combustiones de de H_2/CH_4 de dosado pobre

En este punto se muestran los resultados obtenidos para el grupo 2, compuesto de aquellos experimentos de dosado pobre ($\phi=0.7$) y diferentes porcentajes de hidrógeno en la mezcla (ver Tabla 5.1). Al igual que para el primer grupo, se dibujan las curvas de estabilidad neutra en función del número de Peclet y del radio, ver Figura 5.3.

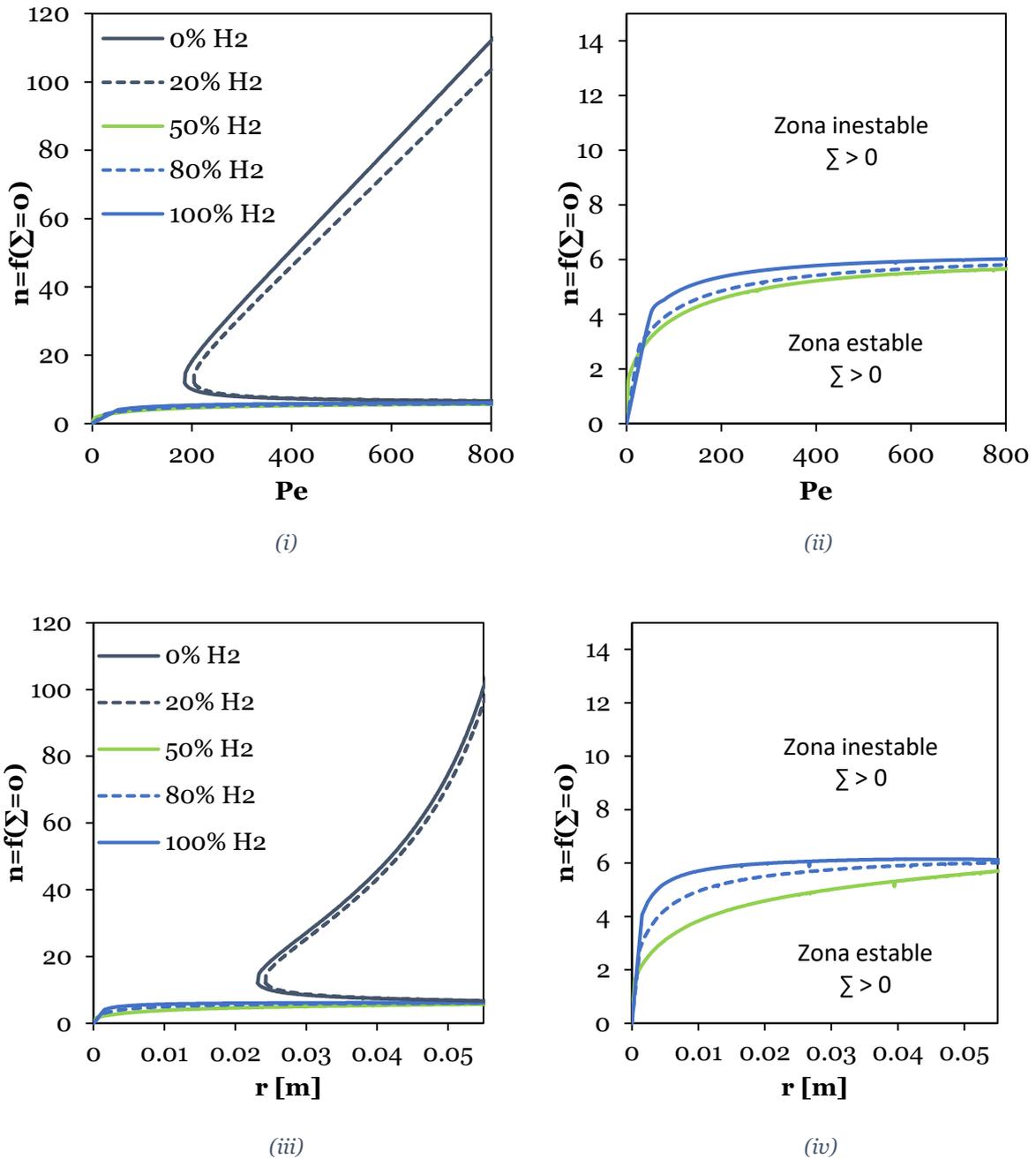


Figura 5.3. Límites de estabilidad de combustiones de dosado pobre.

En las Figura 5.3 (i) y Figura 5.3 (iii) anteriores se pueden ver que las dos curvas de estabilidad neutra correspondientes a las combustiones de 0% y 20% de hidrógeno para dosado pobre (0.7) forman sendas penínsulas de inestabilidad y éstas son similares a las obtenidas para las combustiones con los mismos porcentajes pero de dosado estequiométrico, ver Figura 5.1.

En cambio, en las curvas de estabilidad neutra de las combustiones a partir del 50% de hidrógeno y dosado pobre, se puede apreciar claramente el cambio con respecto a aquellas correspondientes a dosado estequiométrico. Ahora se puede ver cómo éstas no tienen una morfología de península de inestabilidad, sino que forman una única línea que separa la zona inestable ($\Sigma(n) > 0$) de la zona estable ($\Sigma(n) < 0$). Las Figura 5.3 (ii) y (iv) se corresponden con un “zoom” de las Figura 5.3 (i) y (iii) respectivamente. Aunque no existen grandes diferencias entre las tres combustiones (de 50%, 80% y 100% de hidrógeno en dosado pobre), se observa cómo la del 50% tiene menor área estable (la curva está más “baja”), seguida de la combustión del 80% y por último la del 100%. Esta situación es similar a la que se tenía en el grupo de dosado estequiométrico. Las diferencias en todo caso entre estas tres combustiones se pueden apreciar en mayor medida en la Figura 5.3 (iv), por el efecto del espesor del frente de llama visto anteriormente.

Se han representado en este apartado las curvas de estabilidad neutra para combustiones de mezclas de hidrógeno y metano variando su contenido en hidrógeno y el dosado global de las mismas. Éstas se han graficado en función del número de Peclet y en función del radio. Como conclusión general de este primer punto de la metodología se puede decir que el contenido en hidrógeno tiene gran influencia en los límites de estabilidad de un proceso de combustión. Por otro lado, se observa la influencia del dosado para combustiones de un alto contenido en hidrógeno (mínimo 50%), ya que éste influye notablemente en la morfología de las curvas de estabilidad neutra, haciendo que para dosado estequiométrico formen penínsulas de inestabilidad, mientras que para un dosado pobre éstas formen una única línea. Para combustiones de alto contenido en metano (80% o 100%), el dosado no es un parámetro de influencia, ya que apenas se observa variación entre las curvas de estabilidad neutra para dosado estequiométrico y para dosado pobre.

5.1.2. Clasificación de la naturaleza de las combustiones

Siguiendo los resultados del anterior apartado, se podría establecer ya una distinción entre los “tipos” de combustiones en función de sus límites de estabilidad. Se consideran de naturaleza estable todas aquellas combustiones cuyas curvas de estabilidad neutra forman una península. Esto significa que, para ciertos radios iniciales, las tasas de crecimiento de inestabilidades son todavía negativas, lo que quiere decir que no están creciendo inestabilidades relacionadas ni con el efecto termo-difusivo ni con el efecto hidrodinámico, ver capítulo 2. Contrariamente, aquellas combustiones que únicamente tienen una línea como límite entre la zona estable o inestable de la combustión, se consideran inestables, ya que desde el inicio de la combustión existe un rango de números de onda adimensionales para los cuales las tasas de crecimiento de las inestabilidades son

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

positivas. Siguiendo este criterio, se establece en la siguiente Tabla 5.2 las combustiones que se consideran de naturaleza estable y las que se consideran de naturaleza inestable.

Tabla 5.2. Clasificación de la naturaleza de las combustiones de hidrógeno y metano estudiadas

		Dosado relativo, ϕ	% en volumen de H ₂	Naturaleza
Grupo 1	1.0		0	Estable
			20	Estable
			50	Estable
			80	Estable
			100	Estable
		Dosado relativo, ϕ	% en volumen de H ₂	Naturaleza
Grupo 2	0.7		0	Estable
			20	Estable
			50	Inestable
			80	Inestable
			100	Inestable

A pesar de que se ha realizado esta clasificación inmediata de la naturaleza de las combustiones, y siguiendo lo explicado en la metodología en el apartado 4.2, resulta necesario el cálculo y el análisis de los números de Lewis efectivos y de los números de Lewis efectivos críticos de los experimentos que se desean estudiar.

5.1.2.1. Clasificación de la naturaleza de las combustiones de H₂/CH₄ de dosado estequiométrico

Las ecuaciones empleadas para el cálculo de las difusividades, tanto térmica como másica, necesarias para la obtención de los números de Lewis efectivos (Le_{eff}) se encuentran recogidas en el capítulo 2; en la metodología, en la ecuación (2.16), se encuentra la fórmula para los Lewis efectivos críticos. Aplicando dichas ecuaciones en el modelo de diagnóstico, la figura X recoge los resultados para las combustiones del grupo 1 de dosado estequiométrico.

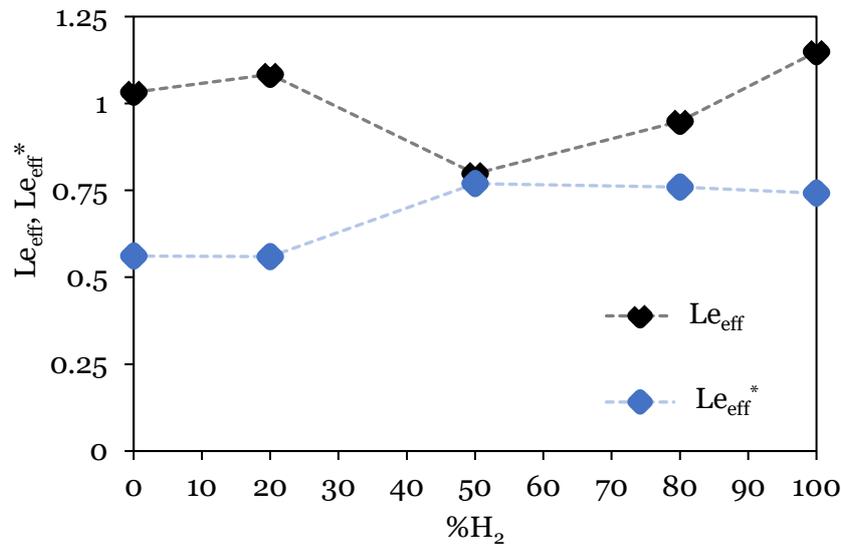


Figura 5.4. Comparación de números de Lewis efectivos (Le_{eff}) y críticos (Le_{eff}^*) para combustiones de hidrógeno y metano de dosado estequiométrico.

Mediante la comparación entre los números Lewis efectivos “reales” obtenidos para las mezclas de hidrógeno y metano de dosado estequiométrico y los Lewis efectivos críticos para dichos experimentos (ambos parámetros representados gráficamente en la Figura 5.4) se puede ver cómo, para todas las combustiones analizadas del grupo 1, los números de Lewis efectivos son mayores que los críticos, lo que explica que las curvas de estabilidad neutra que se dibujaban en el apartado anterior formen todas penínsulas. Destaca el experimento de 50% de hidrógeno, ya que es el que tiene el valor del Lewis efectivo más cercano al crítico, lo que produce que su península se sitúe a la izquierda del mapa y posea el área inestable más amplia, como se ha explicado anteriormente.

De acuerdo con la teoría explicada previamente, se puede decir que, si el número Lewis efectivo tiene un valor tan cercano al crítico como ocurre en el experimento de 50% de H₂ ($Le_{eff} \approx 0.8$; $Le_{eff}^* \approx 0.77$), el efecto termo-difusivo tiene muy poca capacidad estabilizadora. Esta afirmación puede verse más claramente en el siguiente apartado, cuando se representen las tasas de crecimiento de las inestabilidades, así como las aportaciones en las mismas de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo. A pesar de esta última afirmación se puede considerar, tal y como se veía con las penínsulas, que todas las combustiones del primer grupo de dosado estequiométrico son de naturaleza estable, independientemente del porcentaje de hidrógeno que contengan.

La evolución global del número de Lewis en función del contenido en hidrógeno merece un comentario aparte. Dicha evolución muestra un mínimo en el mencionado experimento de 50% de hidrógeno y, a partir de éste, un crecimiento hasta el 100% de H₂. Esta tendencia se compara con aquellos resultados experimentales obtenidos en la investigación realizada por D. Lapalme en 2017 [36], y por J. Z. Ho et al. en 2024 [120]

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

para mezclas de CH_4/H_2 ($\phi=1$ y $p_i=0,1$ MPa). La comparación se muestra en la Figura 5.5 disponible a continuación.

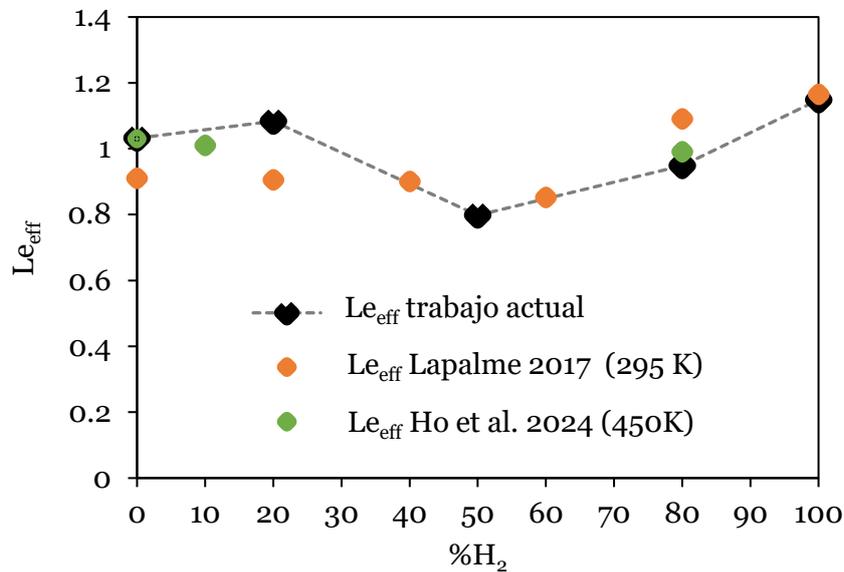


Figura 5.5. Comparación con diferentes autores de los números de Lewis efectivos para combustiones de hidrógeno y metano de dosado estequiométrico.

En los resultados proporcionados por Lapalme [36], el número de Lewis alcanza su mínimo en 0.6 de fracción molar de hidrógeno (60% en volumen). Entre el 40% y el 60% de H_2 los resultados de este autor se ajustan a la tendencia marcada por los resultados de esta Tesis; sin embargo, existe una diferencia máxima del 13% en las combustiones de 10%, 20% y 80% de contenido de hidrógeno entre ambas series de resultados. No obstante, esta diferencia no resulta determinante, ya que no cambia esencialmente los límites de las combustiones ni la naturaleza de la combustión ($Le_{\text{eff}} > Le_{\text{eff}}^*$ para todos los casos); además, la tendencia global de ambas series es muy similar. Por otro lado, los resultados tienen mayor similitud en esos puntos con los presentados por Ho et al. [120], recogidos también en la Figura 5.5 anterior.

Una vez que se han contrastado los resultados del número de Lewis obtenidos para dosado estequiométrico con los de otros autores, se realiza una comparación con los números de Peclet críticos derivados de las combustiones del primer grupo, recogidos en la siguiente Figura 5.6.

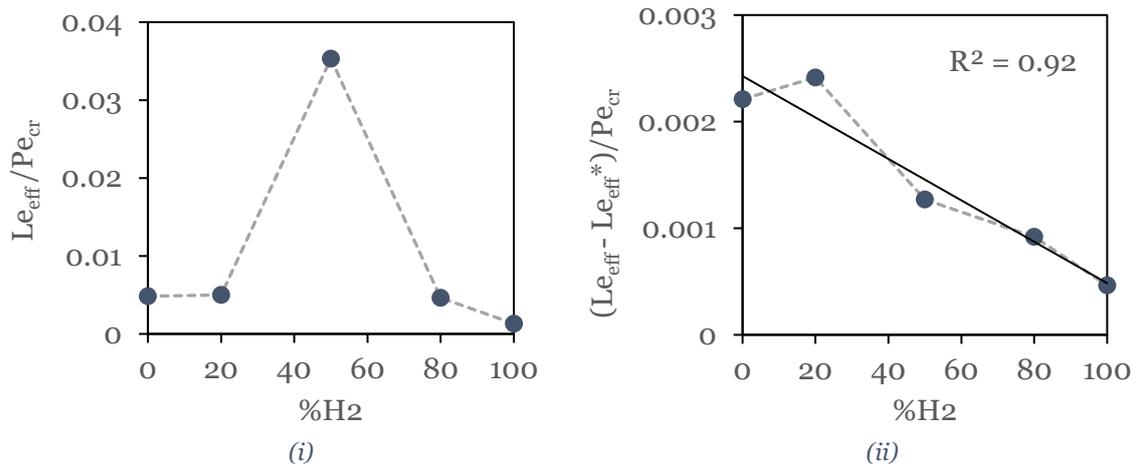


Figura 5.6. Comparación de los números de (i) Lewis efectivos con el número de Peclet crítico para diferentes porcentajes de hidrógeno y de (ii) Lewis efectivos críticos con el número de Peclet crítico para diferentes porcentajes de hidrógeno

En la Figura 5.6 (i), se representa el cociente entre el número de Lewis y el Peclet crítico (Pe_{cr}), que es el correspondiente al vértice de la península. Se puede ver que la tendencia no es lineal y que conviene representar el número de Peclet crítico en función de la diferencia entre los números de Lewis efectivos y críticos. Esta relación se refleja en la gráfica de la derecha, Figura 5.6 (ii), donde se puede ver que, aunque la tendencia no es perfectamente lineal, si se aproxima a una recta, se tiene un $R^2=0.92$; viendo entonces la figura anterior, se demuestra que el número de Peclet crítico resulta aproximadamente proporcional a la diferencia entre los números de Lewis, más que al número absoluto de Lewis efectivo.

5.1.2.2. Clasificación de la naturaleza de las combustiones de H₂/CH₄ de dosado pobre

En esta sección se muestran y analizan los resultados correspondientes a la naturaleza de las combustiones de mezclas de hidrógeno y metano de dosado pobre correspondientes con el grupo número 2 de la Tabla 5.1. Paralelamente a lo realizado para las combustiones de dosado estequiométrico, se grafican los números de Lewis efectivos de las combustiones con sus correspondientes valores críticos, recogidos todos ellos en la Figura 5.7.

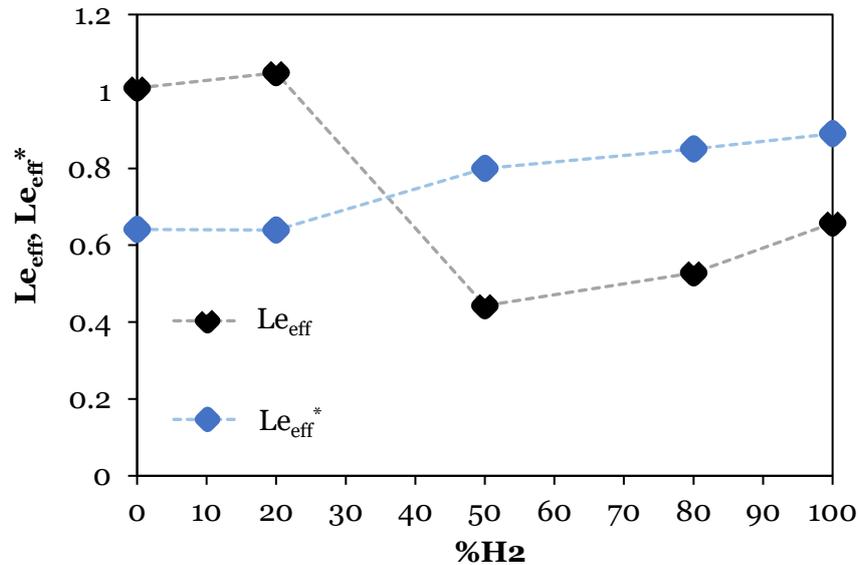


Figura 5.7. Comparación de números de Lewis efectivos (Le_{eff}) y críticos (Le_{eff}^*) para combustiones de hidrógeno y metano de dosado pobre $\phi=0.7$.

En los resultados de las combustiones de dosado pobre igual a 0.7 podemos ver cómo sólo dos combustiones de las cinco analizadas tienen su número de Lewis efectivo por encima de su valor crítico. Estas combustiones se corresponden con aquellas de alto contenido en metano (100% o 80%), que sí dibujan con sus curvas de estabilidad neutra la forma de península. Además, si se compara el valor de números de Lewis efectivo obtenido para estas dos combustiones con los valores obtenidos para sus homónimos estequiométricos, se puede observar cómo apenas existe diferencia en los valores.

Las otras tres combustiones de 50%, 80% y 100% de contenido en hidrógeno tienen el valor efectivo por debajo del crítico, lo que genera que las curvas de estabilidad neutra no dibujen esa morfología de península. De estas tres combustiones, aquella con un 50% de H₂ tiene el menor valor del número de Lewis efectivo (y la mayor diferencia con el crítico), que se corresponde con la curva de estabilidad neutra más “baja”, ver Figura 5.3.

Como conclusión, se podría decir que la naturaleza estable o inestable de una combustión depende simplemente de qué parámetro es mayor: el número de Lewis efectivo (en el caso de mezclas) o el número de Lewis crítico. Si el primero es mayor que el segundo, la naturaleza de la combustión se puede considerar estable; contrariamente, si el primero es menor, la naturaleza de la combustión es considerada inestable. Para determinar la naturaleza basta sólo con saber si el Lewis efectivo es mayor que el crítico. Sin embargo, la diferencia existente entre estos dos parámetros influye en la “posición” de la curva de estabilidad neutra en el mapa -es decir, en el valor del Peclet- de forma casi lineal o, mucho más ligeramente, en la “altura” de la curva.

Sobre la influencia del hidrógeno y del dosado en la naturaleza de una combustión, se extraen las mismas conclusiones que en el apartado anterior de los límites de estabilidad.

Con este análisis también se pretende mostrar que el límite entre la naturaleza estable o inestable de una llama marcado por el número Lewis no necesariamente tiene por qué estar en la unidad, como se ve en algunos estudios de inestabilidades menos exhaustivos, aunque el valor de los Lewis críticos sea cercano a ésta.

5.1.3. Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) y aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo

En el tercer punto del estudio de estabilidad de los procesos de combustión de mezclas de hidrógeno y metano, se calculan las tasas de crecimiento de inestabilidades, las cuales dependen esencialmente del número adimensional de onda y del radio instantáneo (es decir, del instante de la combustión), $\Sigma(n, r)$. También se calculan individualmente las principales aportaciones que conforman esta tasa: la del efecto termo-difusivo y la del efecto hidrodinámico.

Se analizan los dos grupos de combustiones, de dosado estequiométrico y pobre, por separado. Los resultados de ambos se presentan en los siguientes apartados.

5.1.3.1. Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) para combustiones de H_2/CH_4 de dosado estequiométrico

Como se ha adelantado, en este apartado se calculan las tasas de crecimiento de las inestabilidades para combustiones de H_2/CH_4 de dosado estequiométrico, con especial atención en el experimento del 50% de hidrógeno, ya que es el que más cercano se encuentra a la situación límite de estabilidad ($Le_{eff} = Le_{eff}^*$).

Se calcula el primer parámetro mencionado que es la tasa de crecimiento de las inestabilidades para el grupo 1 de experimentos. Se calculan dichas tasas de crecimiento para varios radios de cada combustión hasta 0.057 m, delimitado por el tamaño de la cámara de combustión. El criterio para la selección de radios ha sido que entre las dos iniciales se encuentre el radio crítico (en el que se cumple que $\Sigma_{max} = 0$). El resto se corresponden con diferentes instantes del proceso de combustión hasta llegar a un radio máximo que sea mayor que 0.05 m y menor que 0.057 m. En la siguiente Figura 5.8 se encuentran recogidos los resultados para metano puro (0% de hidrógeno) y para 80% de metano (20% de hidrógeno).

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

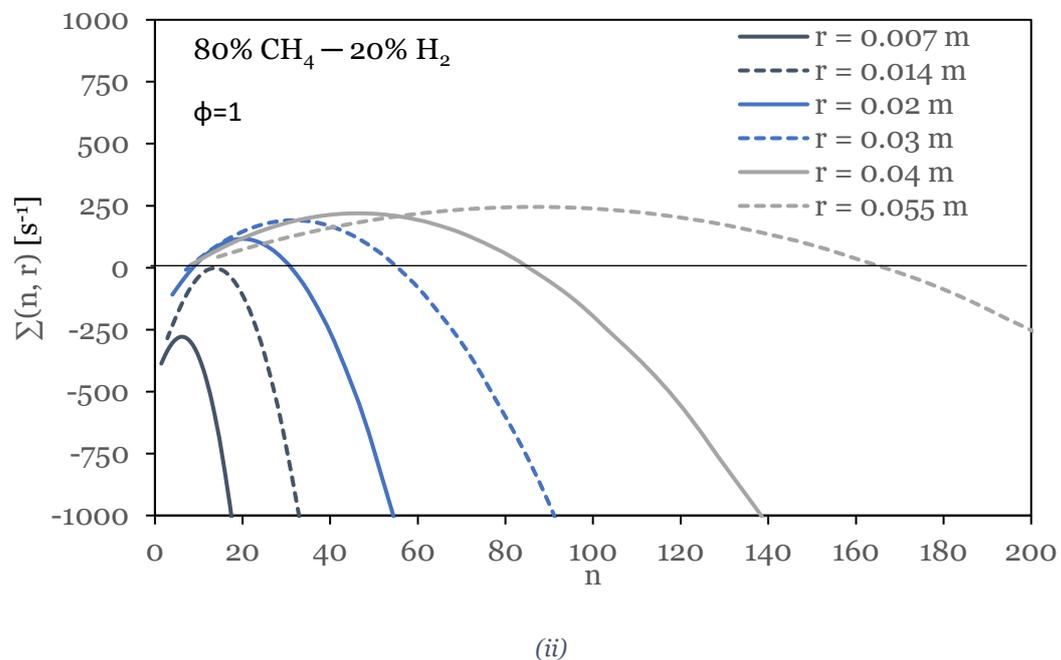
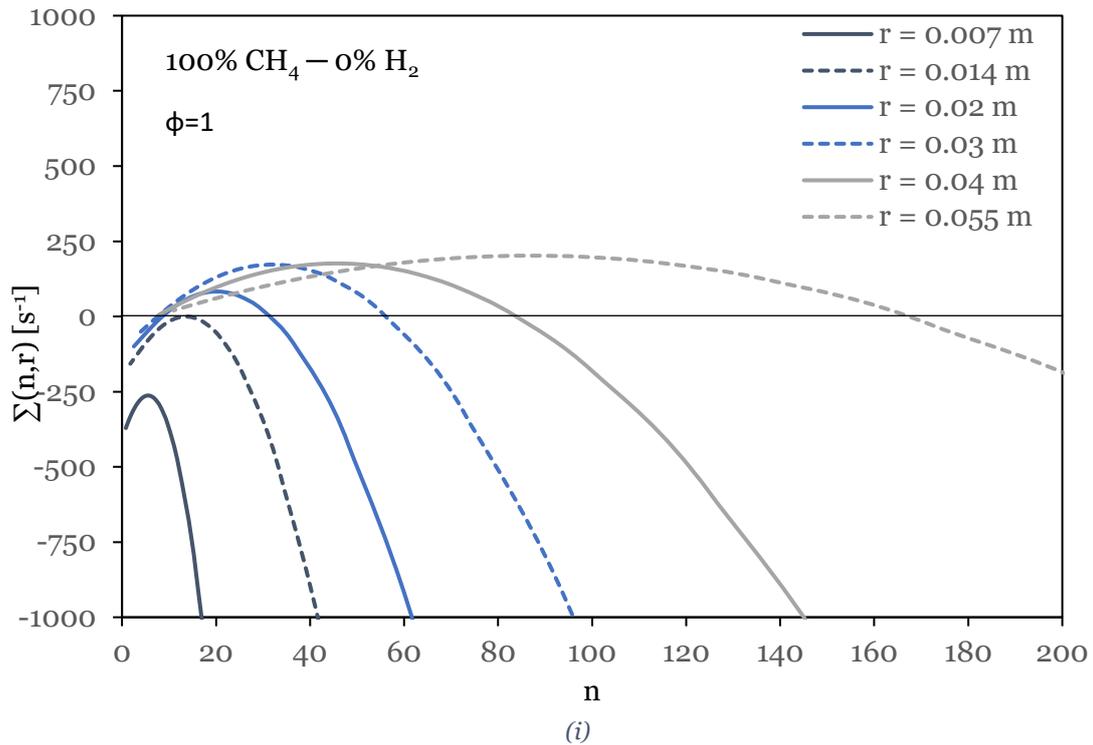


Figura 5.8. Tasas de crecimiento de inestabilidades para varios radios (hasta 5.7 cm) para combustiones estequiométricas de (i) 100% CH₄ y (ii) 80% CH₄ y 20% H₂.

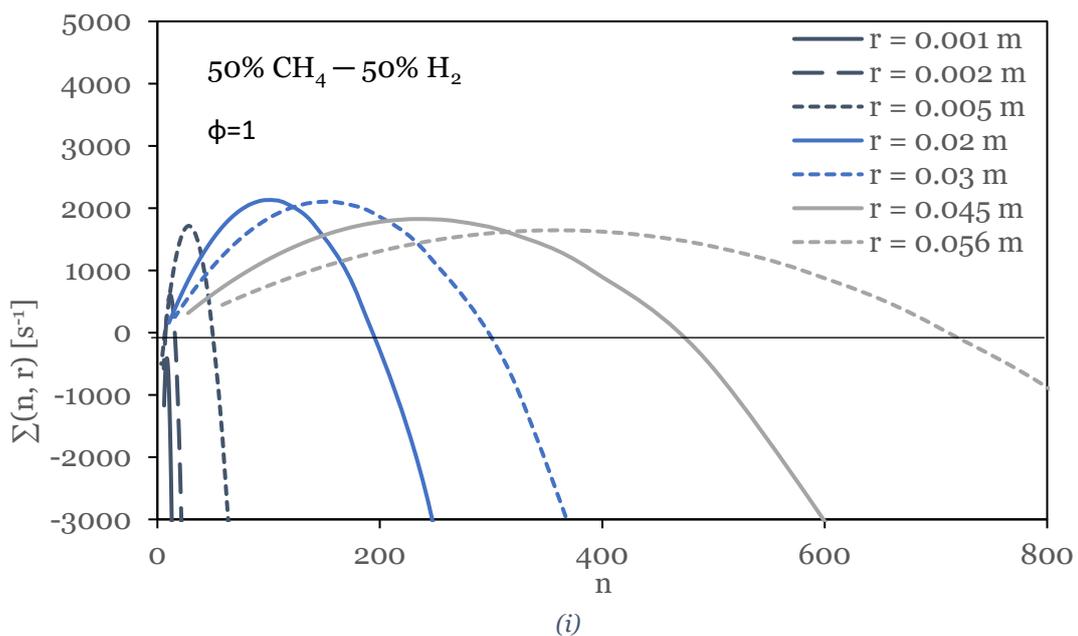
Como se veía en el apartado anterior con las penínsulas de inestabilidad, estas dos combustiones resultan bastante similares también en las curvas de las tasas de crecimiento. Se pueden ver en ambas cómo los valores máximos de las tasas de crecimiento

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

se acercan a los 250 s^{-1} . Como se vio en las penínsulas, los cortes de las curvas con el “cero” también se producen en valores de números de onda adimensionales similares. Se puede ver cómo el radio crítico correspondiente con el vértice de la península de inestabilidad es aquel cuya tasa de crecimiento máxima es nula ($\Sigma_{\text{máx}}(r_{\text{cr}}) = 0$) y tiene un valor de 0.014 m para ambas combustiones.

Por otro lado, haciendo un comentario más detallado, cabe destacar que en la combustión de 20% de hidrógeno, las tasas tienen un decrecimiento ligeramente más pronunciado una vez pasado la zona inestable de cada radio (es decir, cuando $\Sigma > 0$). Esto se podría ver, por ejemplo, teniendo en cuenta para qué valores de número adimensional de onda la tasa de crecimiento alcanza el valor de -1000 s^{-1} : para la combustión de metano puro y un radio de 0.02 m , ésta se alcanza para $n > 60$; mientras que para la de metano 80% e hidrógeno 20%, ésta se da para n ligeramente inferior a 60. Aunque la diferencia no es muy notable, esto significa que para números de onda mayores (o longitudes de onda más pequeñas) esas inestabilidades tienen una tasa de amortiguamiento (de crecimiento negativo) mayor en la combustión de 20% de hidrógeno que en la de metano puro. En diversos estudios sobre el papel del hidrógeno en las inestabilidades, como por ejemplo en el estudio de Okafor et al. [121], la conclusión general es que el hidrógeno ensalza o desestabiliza el proceso de combustión en este sentido, sin embargo, la observación obtenida en la comparación de estas gráficas parece indicar que, en el caso de bajo contenido en hidrógeno, la conclusión es diferente. La explicación de esto podría estar relacionada con el papel del combustible dominante en el proceso.

Se pasa a continuación a analizar las tasas de crecimiento de las inestabilidades en la mezcla de 50% de metano y 50% de hidrógeno. En la siguiente Figura 5.9 se encuentran graficadas las tasas para diferentes radios. Figura 5.9 (ii) se ha representado un “zoom” para que la representación de radios más pequeños sea más clara.



5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

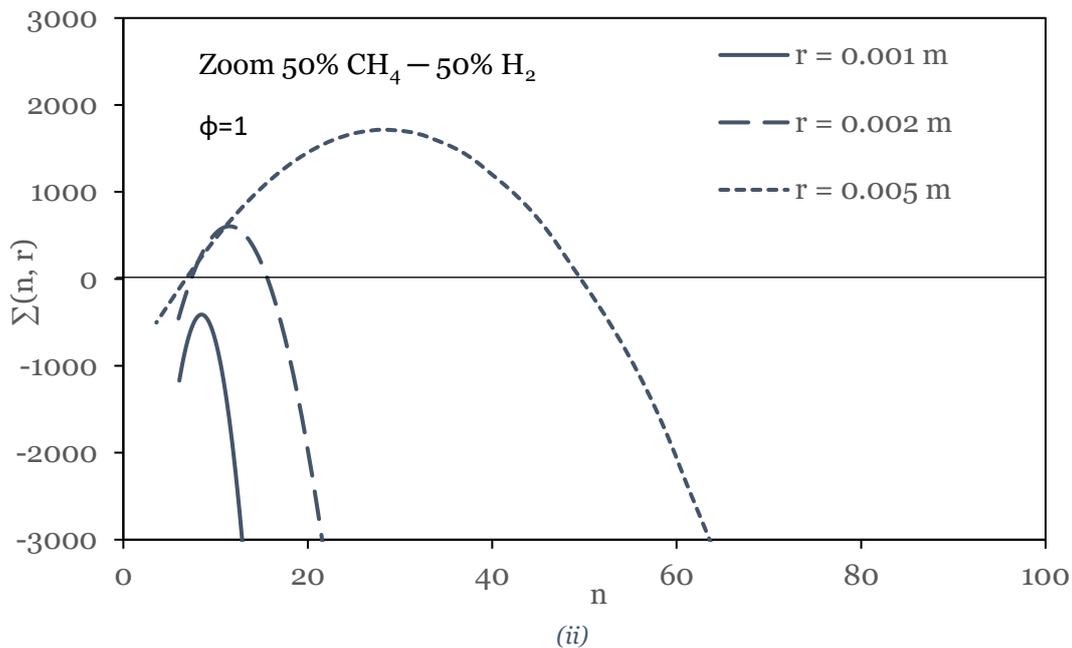
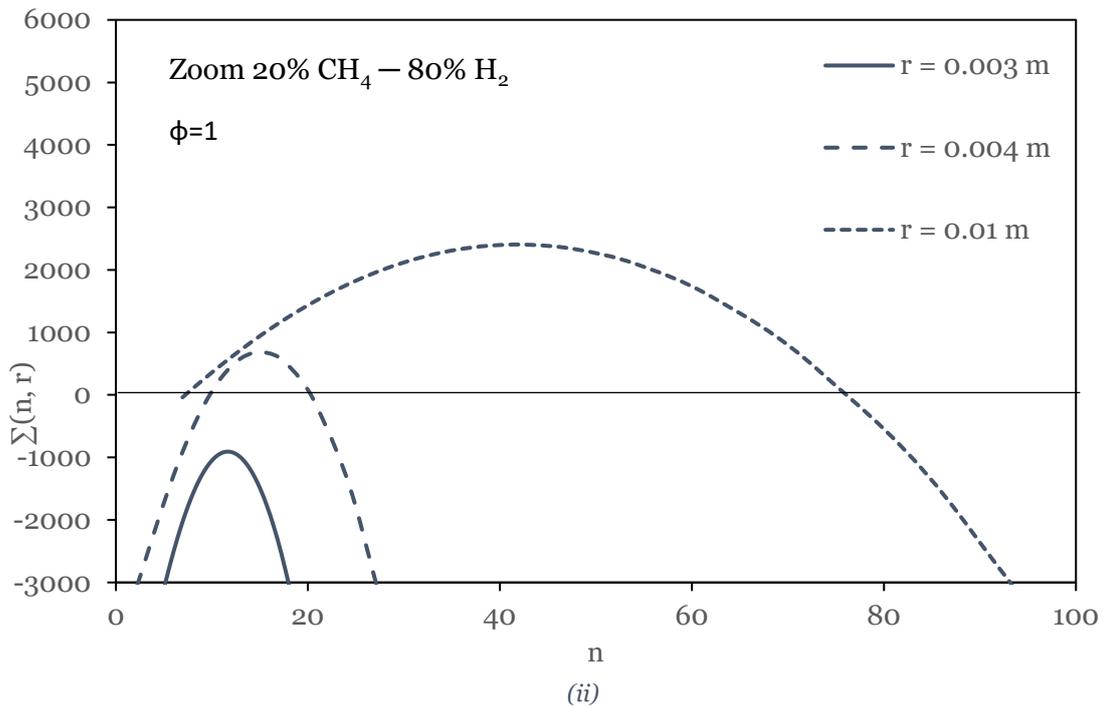
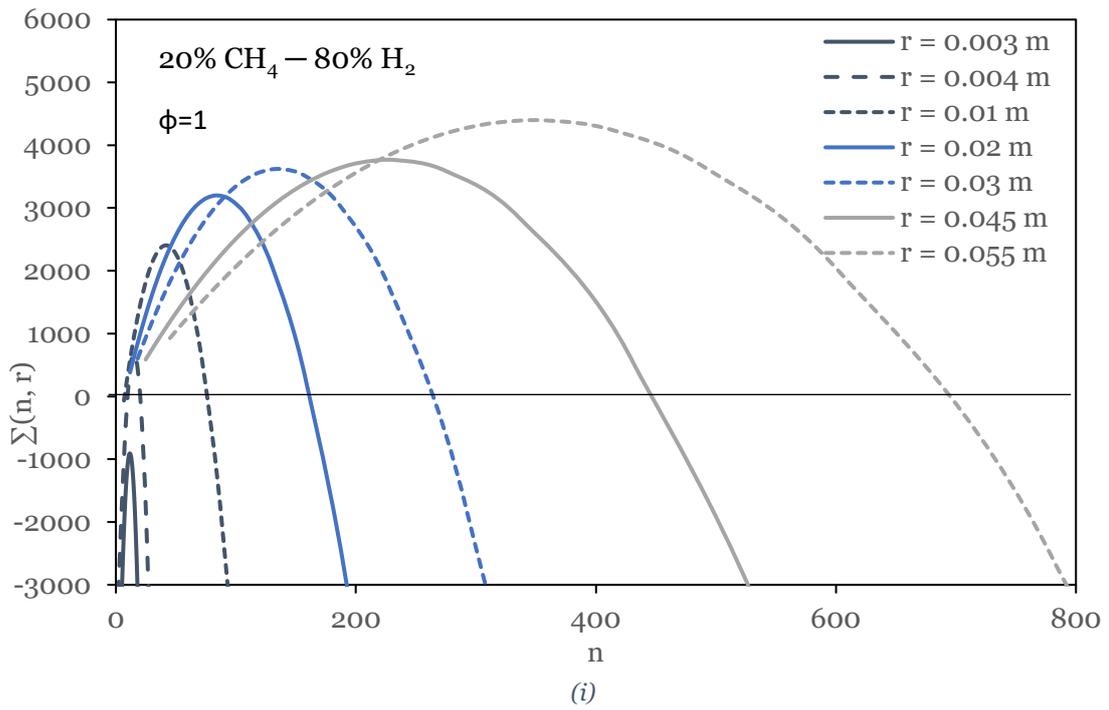


Figura 5.9. (i) Tasas de crecimiento de inestabilidades para varios radios para una combustión estequiométrica de 50% CH₄ y 50% H₂. (ii) Zoom para radios pequeños.

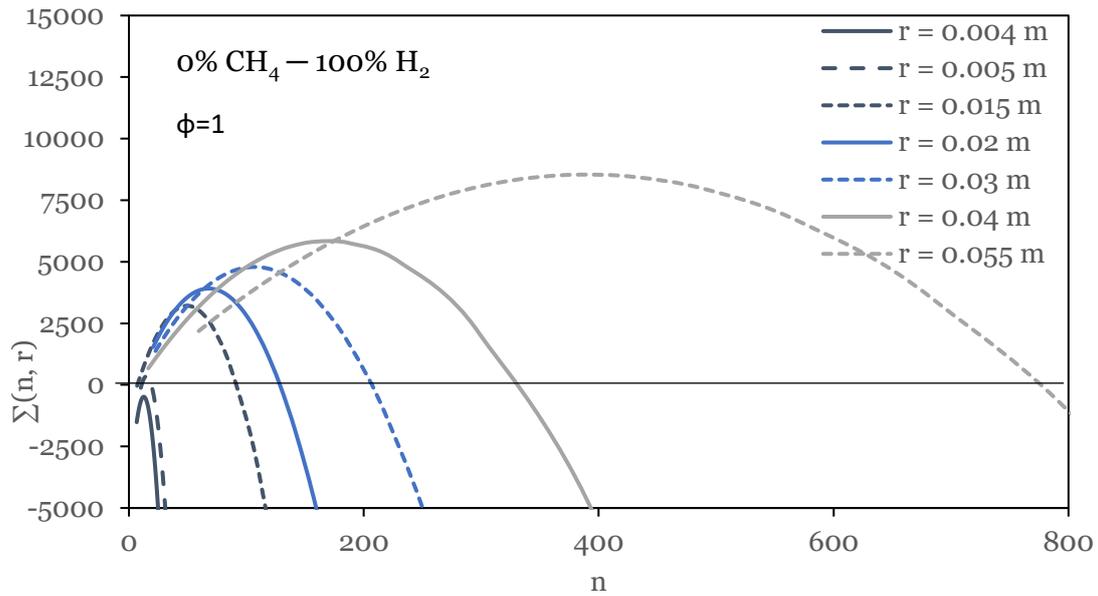
En la gráfica anterior de la Figura 5.9 (i) se observa que las tasas de crecimiento de inestabilidad comienzan a tener valores positivos para radios muy pequeños: a partir de 0.002 m. El radio crítico se encuentra, como se puede observar para la Figura 5.9 (ii), entre 0.001 m y 0.002 m. Este radio resulta menor que para las combustiones de bajo contenido en hidrógeno analizadas anteriormente. El valor máximo de las tasas de crecimiento se encuentra entre 1000 s⁻¹ y 2000 s⁻¹, las cuales son superiores a las de las combustiones de metano 100% y 80%. Esto quiere decir que no sólo es que esta combustión tenga una zona inestable más amplia que las dos combustiones mencionadas, sino que, además, las inestabilidades están creciendo en la zona inestable de la combustión del 50% de hidrógeno a un ritmo mayor que para las combustiones de menor contenido en este combustible.

Por último, se agrupan en la Figura 5.10 los resultados para las combustiones de alto contenido en hidrógeno, del 80% y 100% con las correspondientes representaciones de los “zoom” para los radios más pequeños.

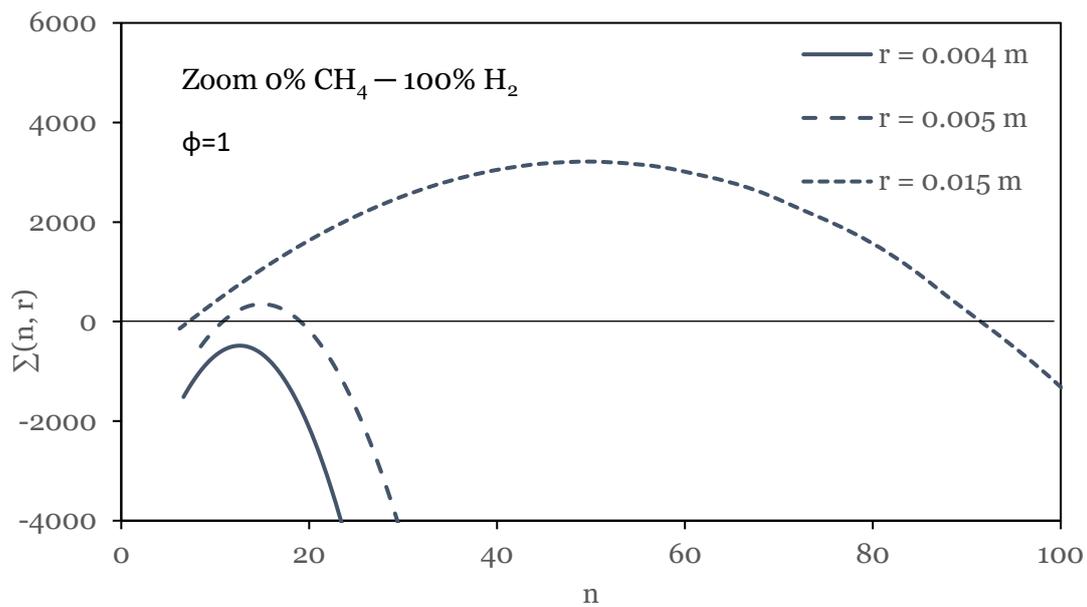
5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión



5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión



(iii)



(iv)

Figura 5.10. (i) Tasas de crecimiento de inestabilidades para varios radios para una combustión estequiométrica de 20% CH_4 y 80% H_2 . (ii) Zoom para radios pequeños de 20% CH_4 y 80% H_2 . (iii) Tasas de crecimiento de inestabilidades para varios radios para una combustión estequiométrica de 0% CH_4 y 100% H_2 . (iv) Zoom para radios pequeños de 0% CH_4 y 100% H_2 .

Comparando las combustiones de alto contenido en hidrógeno, se observa que, aunque ambas tienen radios críticos similares (entre 0.004 m y 0.005 m) y en el apartado anterior se había observado que las penínsulas de inestabilidades en función del radio se

encontraban próximas, el valor de las tasas de crecimiento de inestabilidades para radios similares es muy diferente. Para la combustión de 80% de hidrógeno a partir de 0.02 m las tasas máximas se encuentran entre 3000 y 5000 s^{-1} ; en cambio, para la de hidrógeno puro, las de hidrógeno puro están entre los 5000 y 10000 s^{-1} . En las combustiones de alto contenido en hidrógeno no pasa, por tanto, como en las combustiones de alto contenido en metano, las cuales son muy similares en todos los aspectos analizados, sino que existe un cambio significativo en los valores de las tasas de crecimiento de inestabilidades, especialmente en los valores máximos.

Se ha observado que el parámetro referido al valor máximo de la tasa de crecimiento de cada radio tiene importancia a la hora de comparar diferentes combustiones. Por esta razón, en la siguiente gráfica se muestran los valores máximos de cada tasa en función del radio para todas las combustiones analizadas del grupo 1.

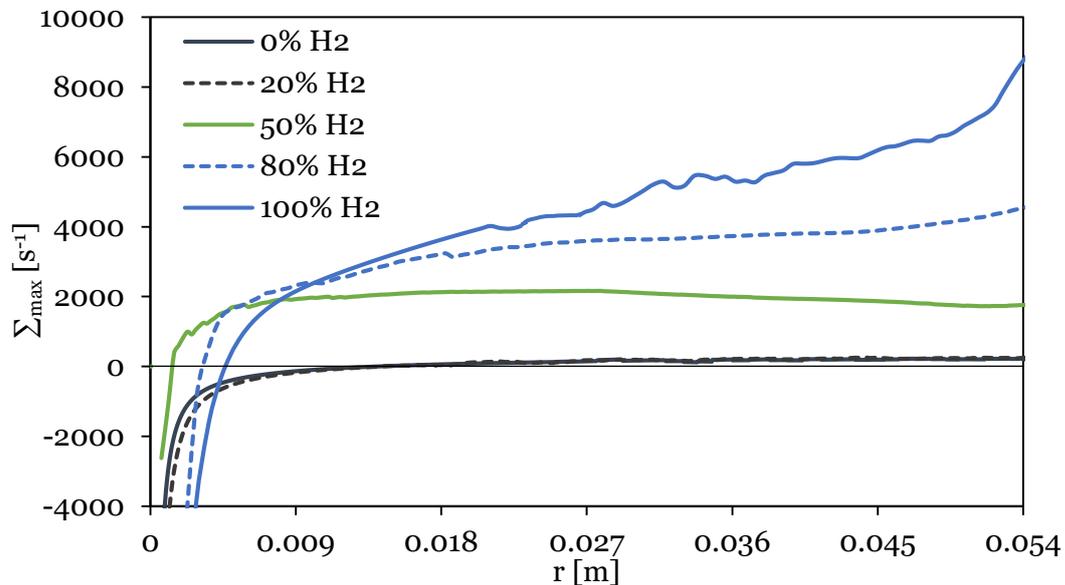


Figura 5.11. (i) Tasas de crecimiento de inestabilidades máximas para combustiones estequiométricas de mezclas de hidrógeno y metano desde 0% hasta 100% de hidrógeno.

En la gráfica anterior de la Figura 5.11 se muestran las tasas máximas para cada radio de los experimentos de dosado estequiométrico, el parámetro se le va a denominar “tasa máxima de crecimiento de inestabilidades” y se le denota como Σ_{max} , medido en segundos a la menos uno. Se observa cómo, para los experimentos de metano puro y 20% hidrógeno, la evolución de la tasa máxima es muy similar y sus valores se mantienen muy por debajo de los del resto de las combustiones; además, permanecen prácticamente constante a partir de radio crítico. La tasa máxima para la combustión de 50% de hidrógeno, inicialmente tiene un crecimiento muy rápido; sin embargo, pasado el radio crítico, al igual que las combustiones de bajo contenido en hidrogeno, ésta se mantiene constante, pero el valor es de prácticamente 10 veces más que el de las otras combustiones mencionadas.

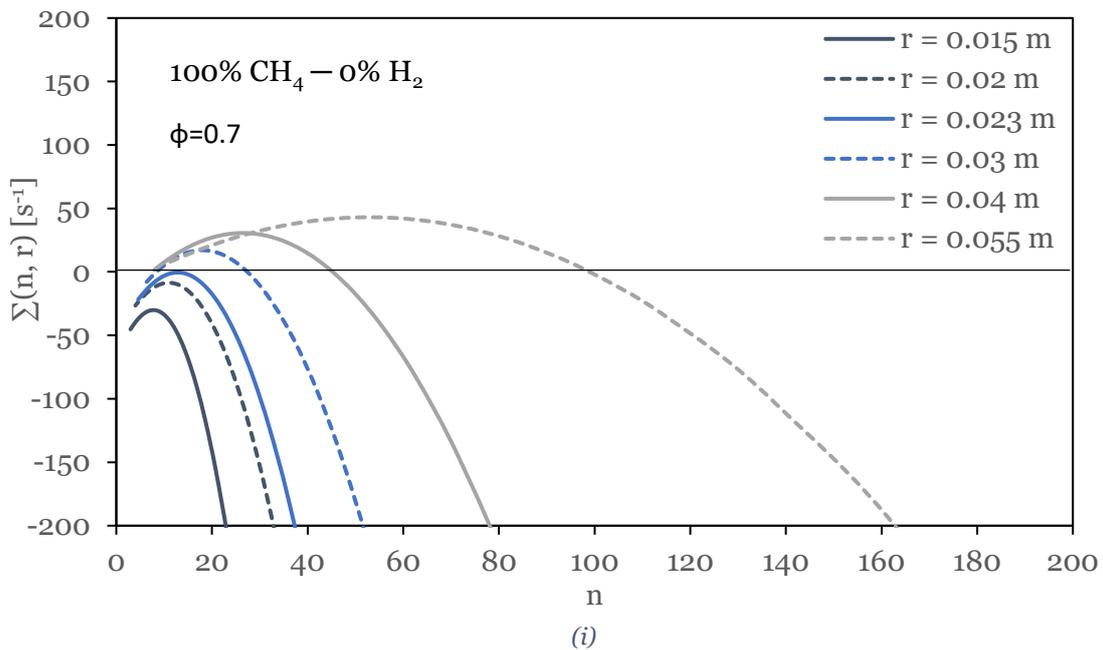
5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

A partir del 80% de hidrógeno, se observa un comportamiento diferente en este parámetro de la tasa máxima de crecimiento de inestabilidades, ya que crece con el radio. Esto se puede ver especialmente en la curva de hidrógeno puro, donde hay un crecimiento prácticamente lineal de la tasa máxima en función del radio a partir del radio crítico e, incluso, se puede apreciar al final, alrededor del radio de 0.05 m una aceleración de la tasa para los radios más elevados. Esta aceleración se aprecia también, aunque más ligeramente, en la combustión de 80% de hidrógeno.

El hidrógeno puro tiene una tasa máxima de inestabilidades en $r = 0.054$ m dos veces mayor que la del 80% de este combustible y cinco veces mayor que la del 50%, a pesar de que el radio crítico sea mayor que el de las otras dos combustiones.

5.1.3.2. Cálculo de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (Σ) para combustiones de H_2/CH_4 de dosado pobre

Una vez que se han estudiado las tasas para las combustiones de dosado estequiométrico, en este punto se hace el mismo análisis para las de los experimentos de dosado pobre de $\phi=0.7$ (grupo 2, ver Tabla 5.1). Primeramente, se calculan las tasas de crecimiento para cada combustión y diferentes radios en función del número adimensional de onda.



5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

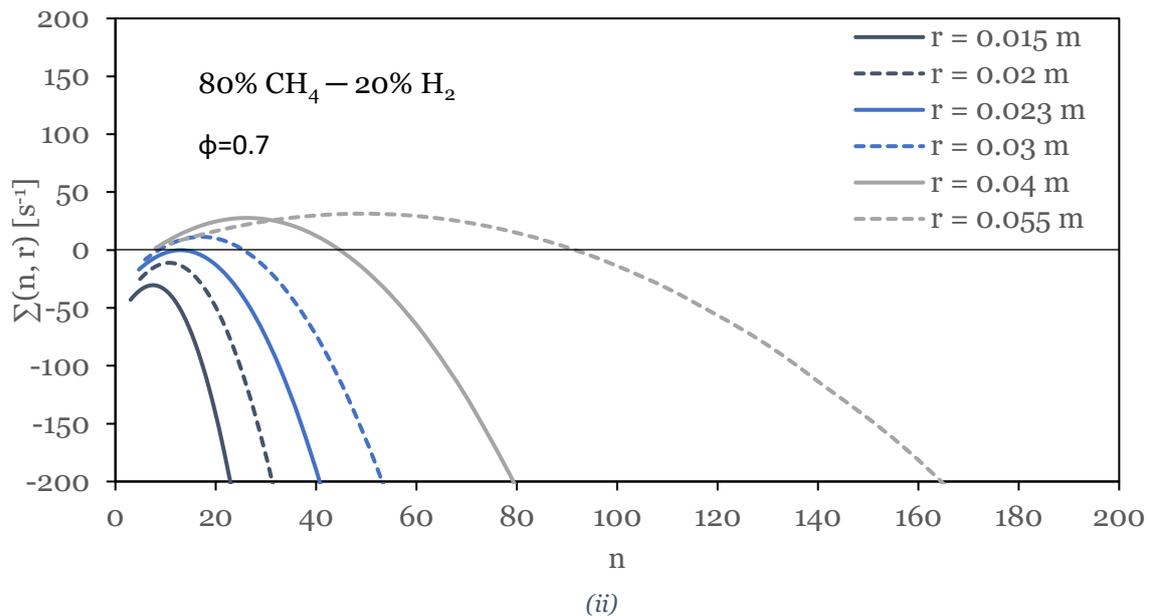


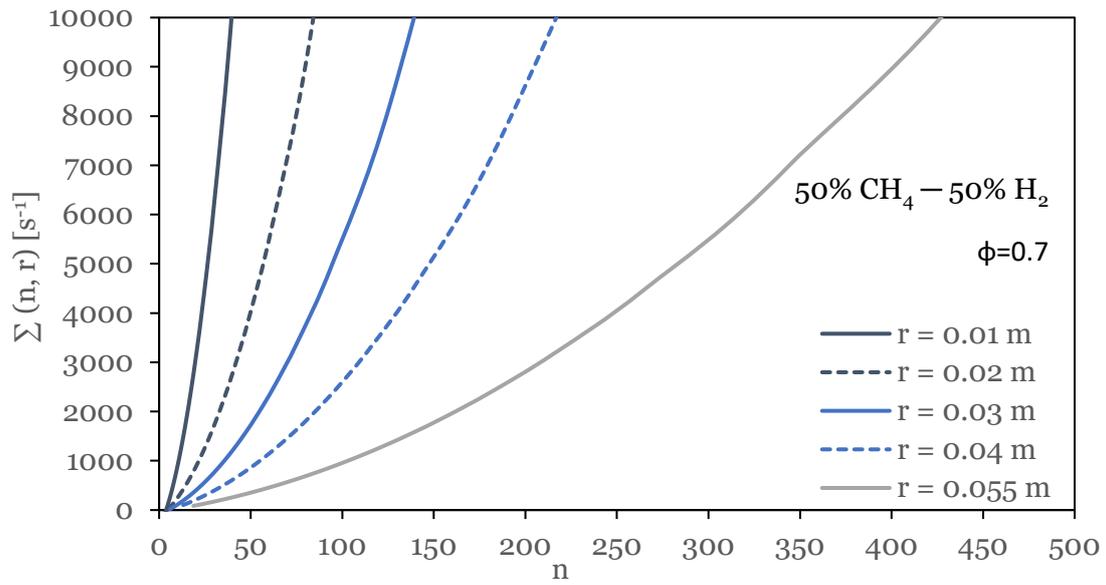
Figura 5.12. Tasas de crecimiento de inestabilidades para varios radios (hasta 5.7 cm) para combustiones de dosado 0.7 de (i) 100% CH₄ y (ii) 80% CH₄ y 20% H₂.

Para este segundo grupo de dosado pobre, las tasas de crecimiento de inestabilidades son similares entre los dos experimentos de bajo contenido en hidrógeno, tal y como se puede ver en la Figura 5.12. También como se comentó en el anterior punto, las tasas para la combustión de 80% de metano y 20% de hidrógeno parecen indicar un proceso de carácter más “estable” que la de 100% metano. Esto se puede comprobar comparando los valores máximos de las tasas: los de 20% de H₂ son menores y, además, si se compara radio por radio, se puede ver que para cualquier “n” la tasa va a ser menor que la de metano puro.

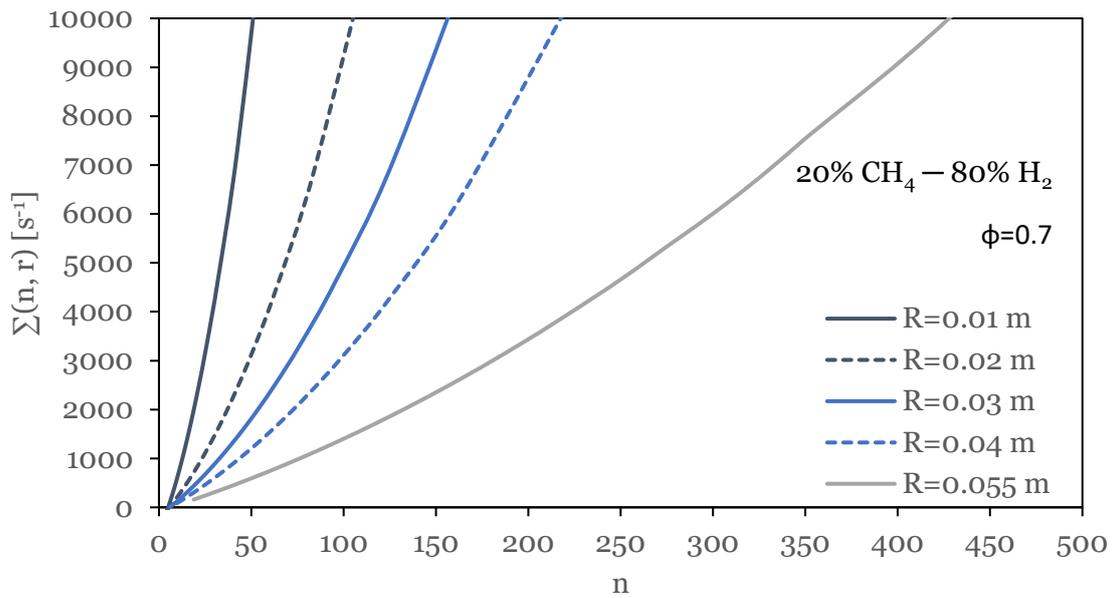
Comparando los resultados de las combustiones de bajo contenido en hidrógeno de dosado estequiométrico y de dosado pobre, se puede ver que, aunque la morfología de las curvas es similar, las de dosado pobre tienen tasas de crecimiento de inestabilidades más bajas. Debido a esto último, se puede decir que, aunque el dosado no es un parámetro excesivamente significativo en el comportamiento de las mezclas de metano dominante, éste ayuda a la “estabilización” de la naturaleza de las mezclas, ya que reduce las tasas de crecimiento de las inestabilidades, hasta 5 veces su valor máximo.

En el siguiente grupo de gráficas recogidos en la Figura 5.13, se encuentran representados los resultados para medio y alto contenido en hidrógeno (50%, 80%, 100%).

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión



(i)



(ii)

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

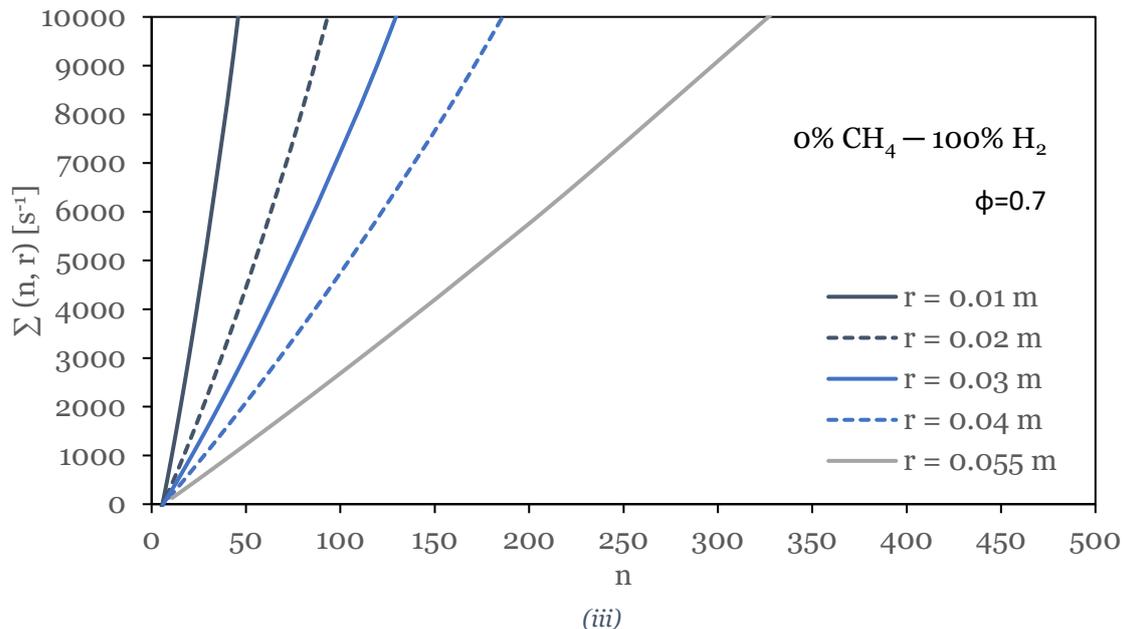


Figura 5.13. Tasas de crecimiento de inestabilidades para varios radios (hasta 5.7 cm) para combustiones de dosado 0.7 de (i) 50% CH_4 y 50% H_2 , y (ii) 20% CH_4 y 80% H_2 .

Las tasas de crecimiento de inestabilidades de las combustiones de alto contenido en hidrógeno (50%, 80% y 100%) representadas en la figura anterior son completamente diferentes a las observadas para contenidos de hidrógeno bajos o nulos (la figura X). Esto es debido a la diferencia entre naturalezas de las diferentes combustiones. En las combustiones de metano dominante, de naturaleza estable, la región inestable ($\Sigma > 0$) se encuentra delimitada por sendos cortes con el “cero”; sin embargo, en las combustiones de hidrógeno dominante o de mayor contenido en hidrógeno, la tasa de inestabilidades siempre es creciente con el número adimensional de onda.

Por otro lado, si se comparan entre sí los resultados para los procesos de alto contenido en hidrógeno, la Figura 5.13 muestra que no presentan diferencias significativas entre ellos, al contrario que lo que se veía en las combustiones de dosado estequiométrico. En este caso prima más el efecto del dosado pobre en todas ellas que el contenido en hidrógeno; se podría decir que éste tiene menor influencia de manera general, siempre y cuando se trate de combustiones de hidrógeno dominante, es decir de alto contenido en hidrógeno (50%, 80% o 100%). El efecto del dosado en combustiones de hidrógeno dominante resulta más significativo que para las de metano, ya que modifica por completo la naturaleza de la combustión.

Cabe destacar que, aunque la combustión de 50% y de 80% de H_2 son muy similares, existe alguna diferencia con respecto a la combustión de hidrógeno puro, ya que, si se analizan individualmente los radios, resulta que, para todos ellos, los números de onda tienen mayores tasas de crecimiento, lo que podría decir que se desarrollan a un ritmo

mayor las inestabilidades en el frente de llama. Esto se contrasta con los resultados obtenidos de las imágenes y presentado en el último punto de este capítulo.

En el caso de este apartado carece de sentido estudiar las tasas de crecimiento máximas, ya que no existe este parámetro para las combustiones de medio y alto contenido en hidrógeno.

Como conclusiones de este apartado se puede decir que las curvas de inestabilidad para mezclas pobres con mayor contenido de hidrógeno presentan una morfología distinta, caracterizada por una única línea que separa la zona estable de la inestable. Esto se debe a que solo existe un valor del número de onda donde la tasa de crecimiento es cero.

El dosado relativo posee una influencia significativa en la estabilidad de los procesos de combustión con proporciones altas de hidrógeno. En condiciones estequiométricas, todas las mezclas analizadas exhiben una naturaleza estable. En cambio, bajo condiciones pobres, las combustiones con alto contenido de hidrógeno se tornan inestables. Los experimentos muestran que la forma de las curvas de estabilidad y la morfología de las llamas están fuertemente condicionadas por el dosado relativo combustible/aire, transformando completamente las curvas de estabilidad de formas tipo península en condiciones estequiométricas a líneas bajo condiciones pobres. Sin embargo, el dosado relativo tiene una influencia menor en las curvas de estabilidad y la morfología de las llamas en mezclas dominadas por metano, ya que las formas tipo península no varían significativamente con su modificación. En las combustiones de bajo contenido en hidrógeno (0% y 20%), se observa que la adición de este combustible no contribuye al crecimiento de las inestabilidades, teniendo mayores tasas de inestabilidad de la combustión de 100% CH₄/0%H₂. De una manera similar ocurre en las combustiones de alto contenido en hidrógeno (80% y 100%), donde la primera de ellas presenta tasas de inestabilidad más elevadas. Se profundiza en esta última conclusión en el apartado último de este capítulo, donde se muestran las imágenes de las combustiones.

5.1.3.3. Cálculo de las aportaciones a la tasa de crecimiento de inestabilidades de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo en combustiones de mezclas de H₂/CH₄

En el apartado anterior se ha calculado la tasa de crecimiento de inestabilidades en función del radio instantáneo del frente de llama y del número adimensional de onda. En este apartado se van a “desglosar” esos resultados para calcular las aportaciones correspondientes al efecto hidrodinámico y al efecto termo-difusivo.

Antes de la presentación de los resultados es conveniente aclarar que las aportaciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo a la tasa de crecimiento de inestabilidades (Σ) se pueden estudiar a través de dos conceptos diferentes, aunque relacionados entre sí. El primero de ellos se refiere a los parámetros adimensionales que caracterizan ambos efectos, representados por “ ω ” y “ $-\frac{\Omega}{Pe}$ ” respectivamente (ver capítulo 2); a estos parámetros adimensionales se les va a denominar “contribuciones” en este contexto. Por

otro lado, en la fórmula de la tasa de crecimiento de inestabilidades global recogida en la ecuación (2.19), se observa cómo las contribuciones definidas anteriormente se encuentran multiplicadas por la velocidad de avance del frente de llama $\left(\frac{dr}{dt}\right)$ y divididas por el radio del frente de llama; a estos productos se los pasa a denominar tasa de crecimiento de las inestabilidades debidas al efecto hidrodinámico o tasa de crecimiento hidrodinámica (Σ_h) y tasa de crecimiento de las inestabilidades debidas al efecto termo-difusivo o tasa de crecimiento termo-difusiva (Σ_{t-d}). Ambas se encuentran recogidas en las ecuaciones X y X que se muestran a continuación

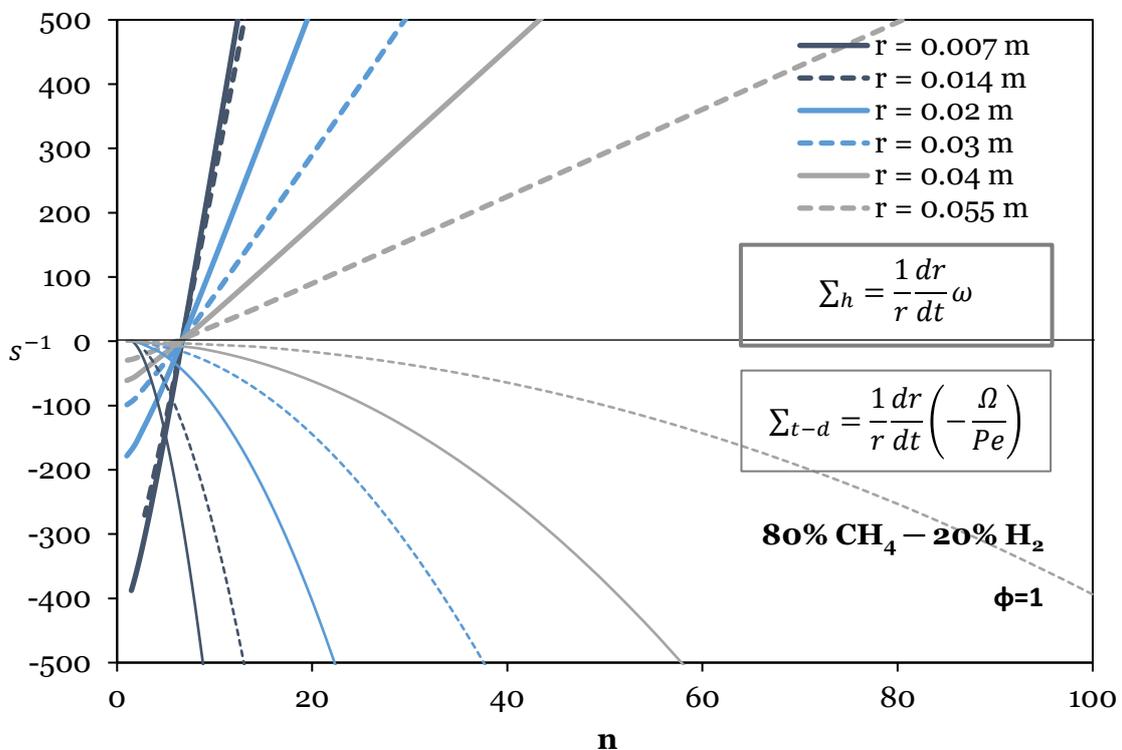
$$\Sigma_h = \frac{1}{r} \frac{dr}{dt} \omega \quad (5.1)$$

Siendo ω el parámetro adimensional denominado “contribución hidrodinámica”.

$$\Sigma_{t-d} = \frac{1}{r} \frac{dr}{dt} \left(-\frac{\Omega}{Pe}\right) \quad (5.2)$$

Siendo $\left(-\frac{\Omega}{Pe}\right)$ el parámetro adimensional denominado “contribución termo-difusiva”.

Seguidamente se muestran los resultados para cada una de las combustiones de estudio, comenzando con el grupo 1, de dosado estequiométrico.



(i)

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

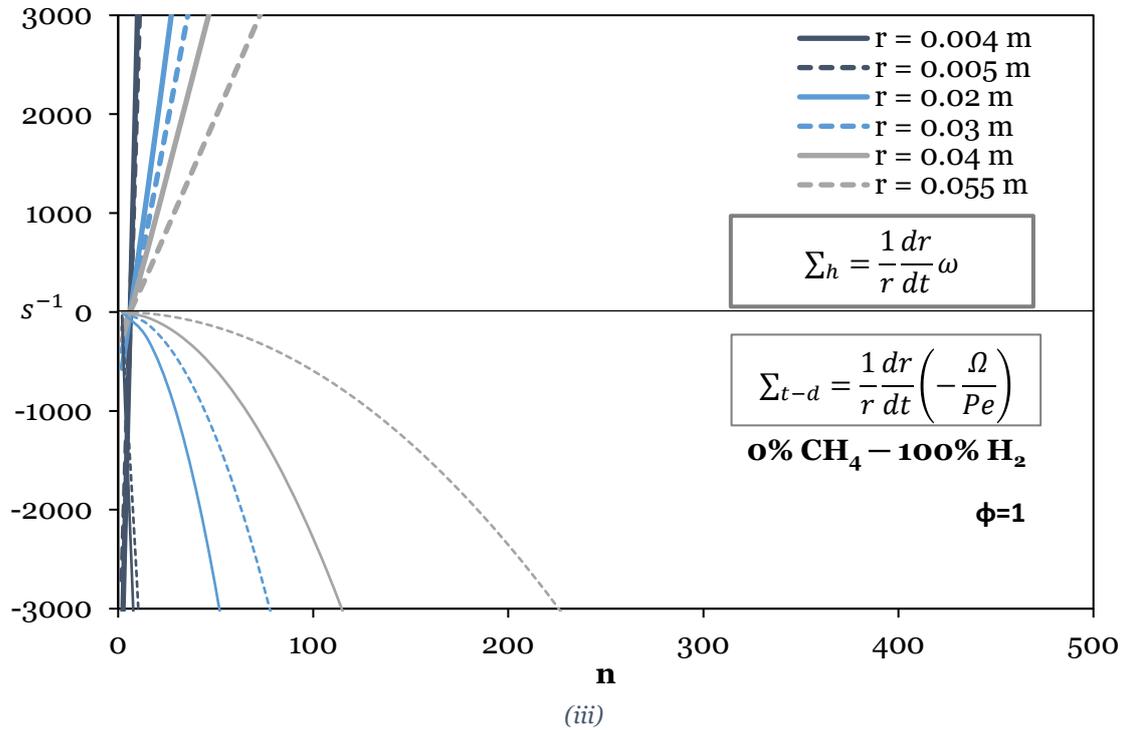
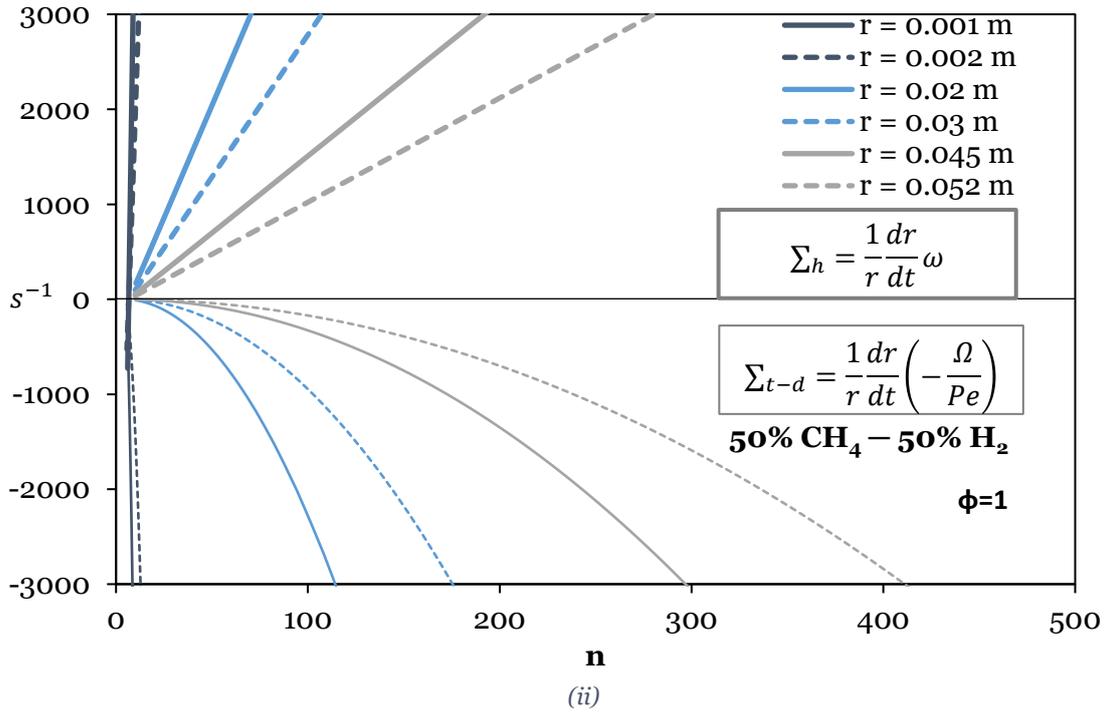


Figura 5.14. (i) Contribuciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo de una combustión de dosado estequiométrico y 20% de hidrógeno. (ii) Contribuciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo de una combustión de dosado estequiométrico y 50% de hidrógeno. (iii) Contribuciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo de una combustión de dosado estequiométrico y 50% de hidrógeno. Todas ellas para dosado estequiométrico.

En la Figura 5.14 anterior se recogen las contribuciones desglosadas de las combustiones representativas del grupo de dosado estequiométrico para bajo, medio y alto contenido en hidrógeno. De manera global se puede observar el mismo comportamiento en todas ellas: el efecto hidrodinámico es positivo y creciente para cada radio y para todos los números de onda a partir de aproximadamente $n=7$ y el efecto termo-difusivo es negativo y decreciente para todos los radios y números de onda.

Para números de onda menores a 7, el efecto hidrodinámico tiene un valor negativo (efecto estabilizador), ya que para esos valores las longitudes de onda de las inestabilidades serían mayores que el radio del frente de llama y físicamente no se considera que modifiquen de manera perceptible la estructura del frente de llama[32]. Por otro lado, debido a que el efecto termo-difusivo —a pesar de ser en todos los casos negativo (estabilizador)— para números de onda pequeños tiene un valor menos significativo que el del efecto hidrodinámico, por lo tanto, para el rango de números de onda contenido en (0, 7], se podría considerar entonces que la amortiguación de las inestabilidades es puramente hidrodinámica. Esto se puede apreciar especialmente en la Figura 5.14 (i). Para números de onda más realistas, esto es $n>7$, la amortiguación de las inestabilidades es debida, como ya se ha indicado, al efecto termo-difusivo.

Las contribuciones, tanto positivas como negativas, de los efectos se ven mermadas por el crecimiento del radio. Esta influencia es especialmente notable en la contribución del efecto termo-difusivo, ya que se encuentra dividido dos veces por el radio $\left(\frac{1}{r} \text{ y } \frac{1}{Pe}\right)$. Se observa en las figuras anteriores que a medida que el radio crece, este efecto pierde poder de amortiguación frente al efecto hidrodinámico.

Para facilitar la comparación entre las contribuciones en función del contenido en hidrógeno para dosado estequiométrico, se propone la siguiente figura que recoge los valores para los radios cercanos a 0.05 m para cada experimento.

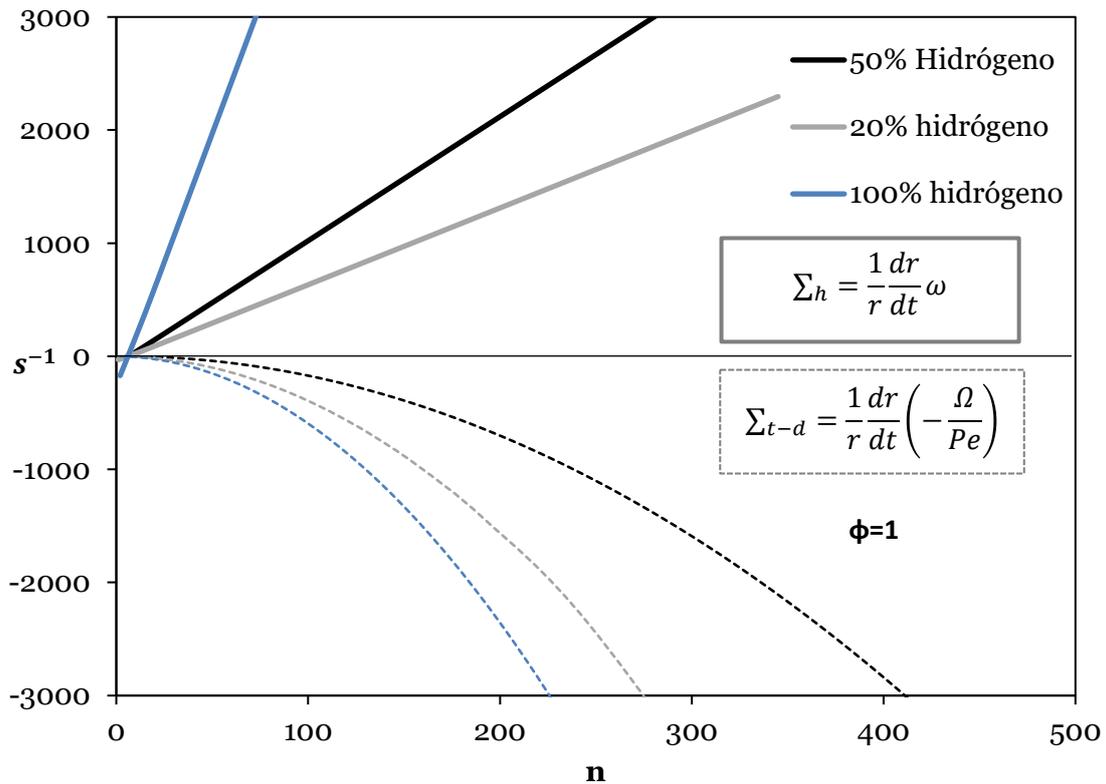


Figura 5.15. Contribuciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo de combustiones de 50%, 80% y 100% de hidrógeno (dosado pobre) para un radio mayor de 5 cm. Para dosado estequiométrico.

Para el radio máximo (más de 5 cm), se puede observar en la Figura 5.15 anterior que la combustión con mayor capacidad de estabilización del efecto termo-difusivo es la de hidrógeno puro (línea discontinua azul). Sin embargo, también es la combustión con mayor capacidad desestabilizadora del efecto hidrodinámico, por los elevados valores del mismo. Esto puede ser especialmente debido a la influencia de la elevada velocidad del frente de llama, representada en el término $\frac{dr}{dt}$.

Continuando el análisis del efecto termo-difusivo, se observa que es la combustión de 50% de hidrógeno la que más elevados valores presenta de dicho efecto, como son valores negativos quiere decir que es la que menor capacidad estabilizadora posee. A pesar de esta última observación, en la Figura 5.11 (tasas máximas) se vio que las mayores tasas de inestabilidad se correspondían con el hidrógeno puro. Por último, se destaca que el experimento correspondiente con el 20% de hidrógeno posee la menor contribución del efecto hidrodinámico comparando con los otros dos experimentos, indicando que la influencia del hidrógeno en las inestabilidades es mínima, ya que su comportamiento contrasta con el del hidrógeno puro ya analizado.

Seguidamente se muestran los resultados obtenidos para el grupo número 2, de dosado pobre ($\phi=0.7$). Al igual que para las de dosado estequiométrico, únicamente se va a analizar una combustión de bajo, medio y alto contenido en hidrógeno

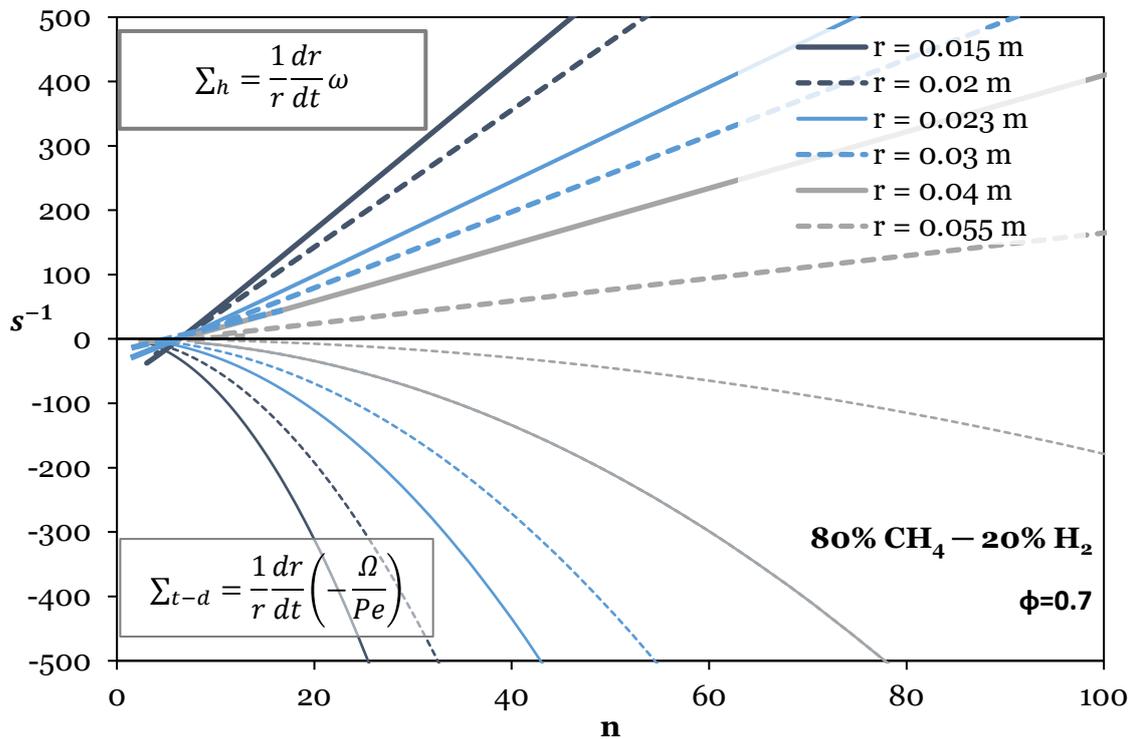
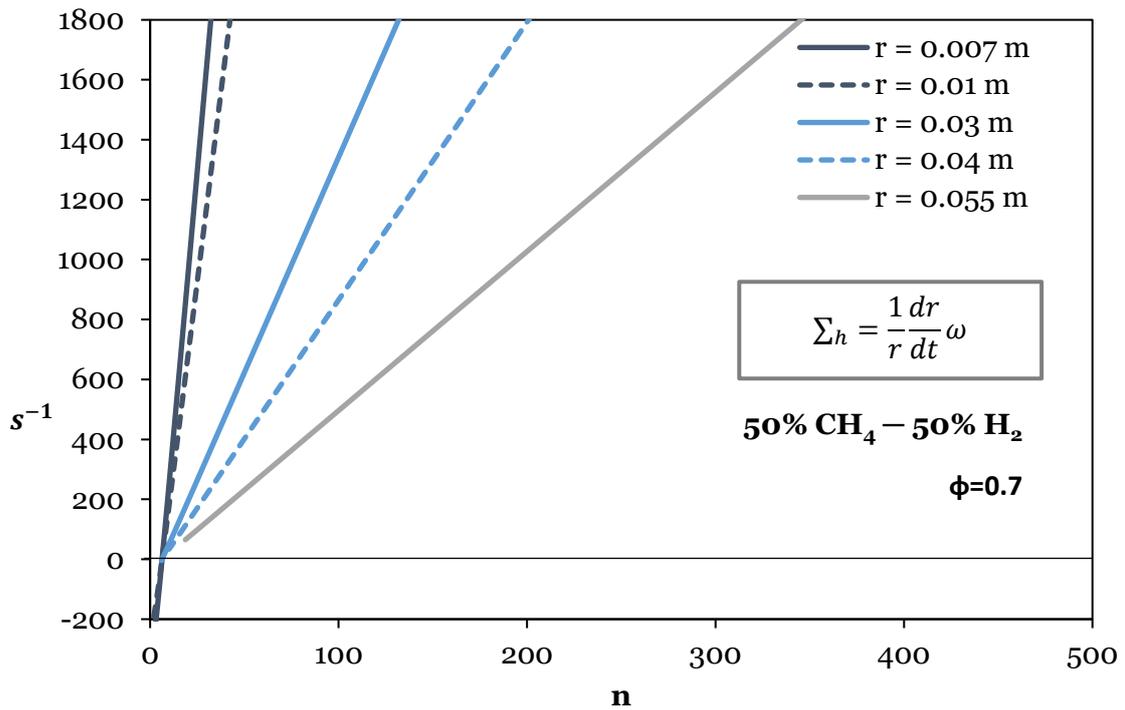


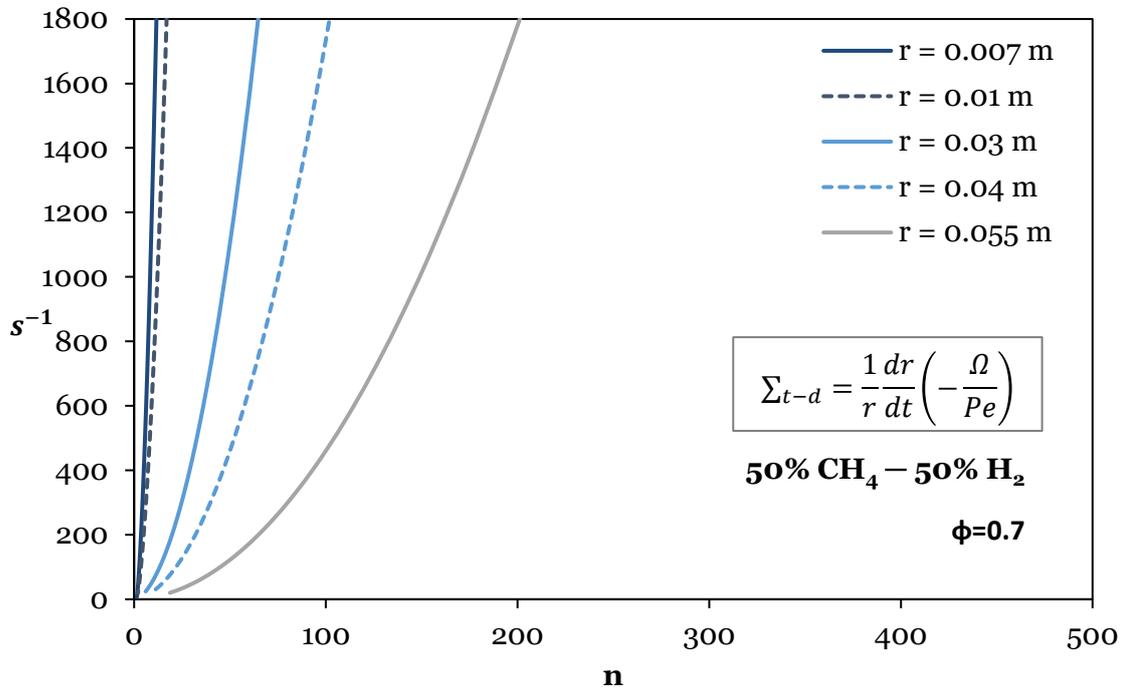
Figura 5.16. Contribuciones de los efectos hidrodinámico y termo-difusivo de una combustión de 80% $CH_4/20\% H_2$ de dosado pobre (0.7).

En la Figura 5.16 anterior se encuentran representadas las contribuciones de ambos efectos. Como se estudiaba en el punto anterior, donde se calcularon las tasas globales para cada radio, la naturaleza de la mezcla es similar para ambos dosados: el efecto termo-difusivo es estabilizador por sus valores negativos. Se puede ver cómo el efecto hidrodinámico posee valores menores que los que se observaban para su esta mezcla en dosado estequiométrico. Esto explica que las tasas de crecimiento que se alcanzan sean menores en esta combustión y se adivina el carácter estable de la combustión.

En la siguiente figura se representan por separado las contribuciones para aportar mayor claridad a los resultados.



(i)



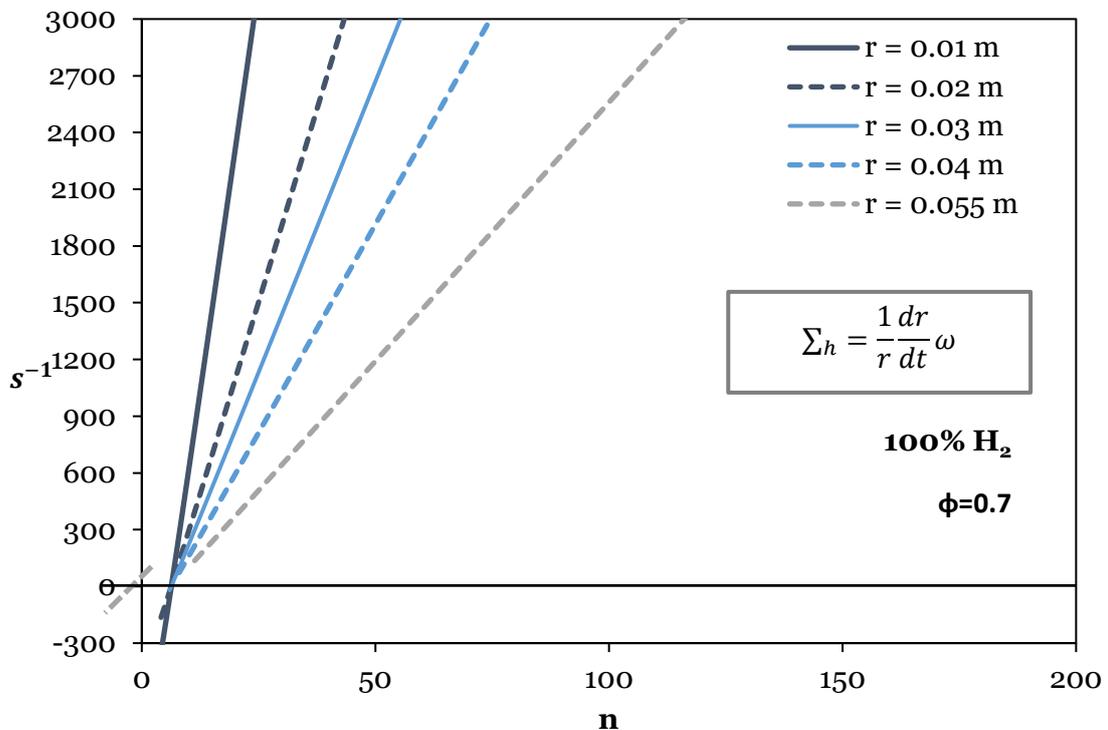
(ii)

Figura 5.17. Contribuciones de los efectos (i) hidrodinámico y (ii) termo-difusivo de una combustión de 50% CH₄/50% H₂ de dosado pobre (0.7).

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

En la Figura 5.17 anterior se muestran los resultados para la combustión de 50% de hidrógeno en dosado pobre. Se observa cómo cambia radicalmente el comportamiento del efecto termo-difusivo (Figura 5.17 (ii)) con respecto a su homónimo en estequiométrico. No se observan grandes cambios en el comportamiento del efecto hidrodinámico, más que éste no alcanza valores tan elevados como en condiciones estequiométricas. Teniendo en cuenta los valores de las contribuciones de ambos efectos, se concluye, la contribución principal al crecimiento de las inestabilidades es aquella debida al efecto termo-difusivo de carácter inestable en este caso, el cual crece con el cuadrado del número de onda adimensional (n^2). La excepción a esto se da para radios más elevados y números de onda por debajo de un cierto límite —para el radio de 0.055 cm sería $n < 100$ —, para los cuales la contribución principal es la hidrodinámica.

Por último, se presentan en la siguiente Figura 5.18 los resultados para la combustión de hidrógeno puro en condiciones de dosado pobre.



(i)

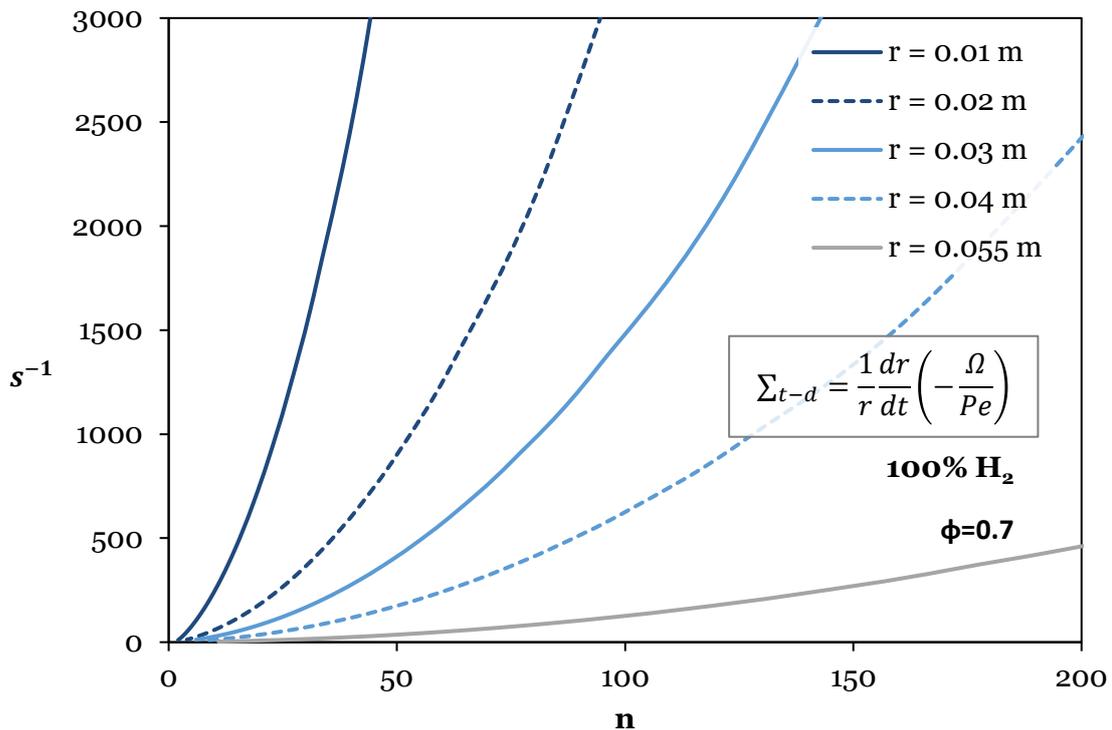


Figura 5.18. Contribuciones de los efectos (i) hidrodinámico y (ii) termo-difusivo de una combustión de 100% H₂ de dosado pobre (0.7).

Como ya se ha indicado en anteriores apartados, el dosado es un parámetro clave para determinar el comportamiento de las contribuciones de los efectos (y por tanto la naturaleza) de las combustiones de hidrógeno puro o de alto contenido en hidrógeno. En este caso también el efecto termo-difusivo tiene un comportamiento opuesto al que se obtenía para dosado estequiométrico y, por tanto, similar al de la combustión anterior de 50% de hidrógeno y dosado pobre.

Sin embargo, en este caso, por los valores alcanzados en cada radio y longitud de onda, la contribución principal a la tasa de crecimiento de inestabilidades es la del efecto hidrodinámico, ya que ésta es mayor que la del efecto termo-difusivo en la mayor parte del espectro de números de onda estudiados, aunque ambos efectos contribuyen positivamente al crecimiento de las inestabilidades.

5.2. Estudio morfológico de combustiones de H₂/CH₄ y desarrollo de la celularidad en sus llamas

En esta sección se analiza la morfología de las llamas de CH₄/H₂ y la aparición de celularidad con el objetivo de unir los fenómenos visibles y observables en las imágenes con todo el estudio de estabilidad en procesos de combustión realizado en este capítulo. Inicialmente, se presentan las mezclas estequiométricas que desarrollan un frente de llama

5. Resultados del estudio de estabilidad del proceso de combustión

celular, correspondientes a los experimentos con 100%, 80% y 50% de hidrógeno, como se muestra en la Figura 5.19 (i), (ii) y (iii). Por otro lado, las llamas con bajo contenido de hidrógeno (20% y 0% de H_2), Figura 5.19 (iv) y (v), no desarrollan celularidad dentro de los límites establecidos por el tamaño de la cámara de combustión.

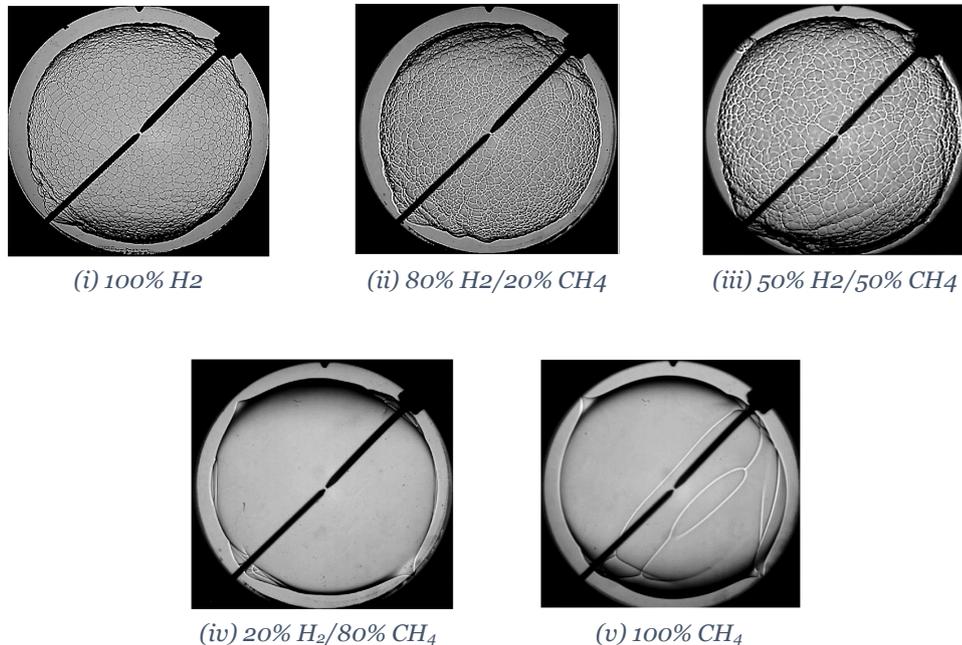


Figura 5.19. Morfología de la llama y aparición de celularidad en algunas llamas estequiométricas dependiendo del contenido de H_2/CH_4 (radio de la llama de 5 cm).

Es importante determinar en cuál de las llamas celulares (experimentos con 50%, 80% y 100% de H_2) se desarrolla un crecimiento más temprano de este fenómeno. Para ello, se comparan imágenes del frente de llama de estas tres mezclas con diferentes radios en la Figura 5.20. Para las mezclas con 80% y 100% de hidrógeno, la celularidad ya está formada en $r=5$ cm, lo que sugiere que el origen de la celularidad debe darse a un radio menor de 5 cm. Sin embargo, para la mezcla con 50% de H_2/CH_4 , aunque se aprecian algunas fisuras en la superficie, aún se observa un frente de llama laminar para un radio de 5 cm.

Cabe recordar que los mapas de estabilidad muestran que esta mezcla (50% de H_2/CH_4) es aquella en la que las inestabilidades comienzan a crecer primero (su península está más desplazada hacia la izquierda). No obstante, en la Figura 5.11 se mostraba que, una vez que el radio de la llama ha crecido, los experimentos con mayor contenido de hidrógeno tienen una tasa de crecimiento máxima (Σ_{max}) mayor que la mezcla con 50% de H_2 . Por lo tanto, se concluye que el parámetro más influyente para la aparición de la celularidad es la tasa máxima de crecimiento, más que el número de Peclet crítico o el radio crítico (vértice de la península). En otras palabras, la tasa de crecimiento de las inestabilidades es más importante para el desarrollo de un frente de llama celular que el momento en el que comienzan a crecer.

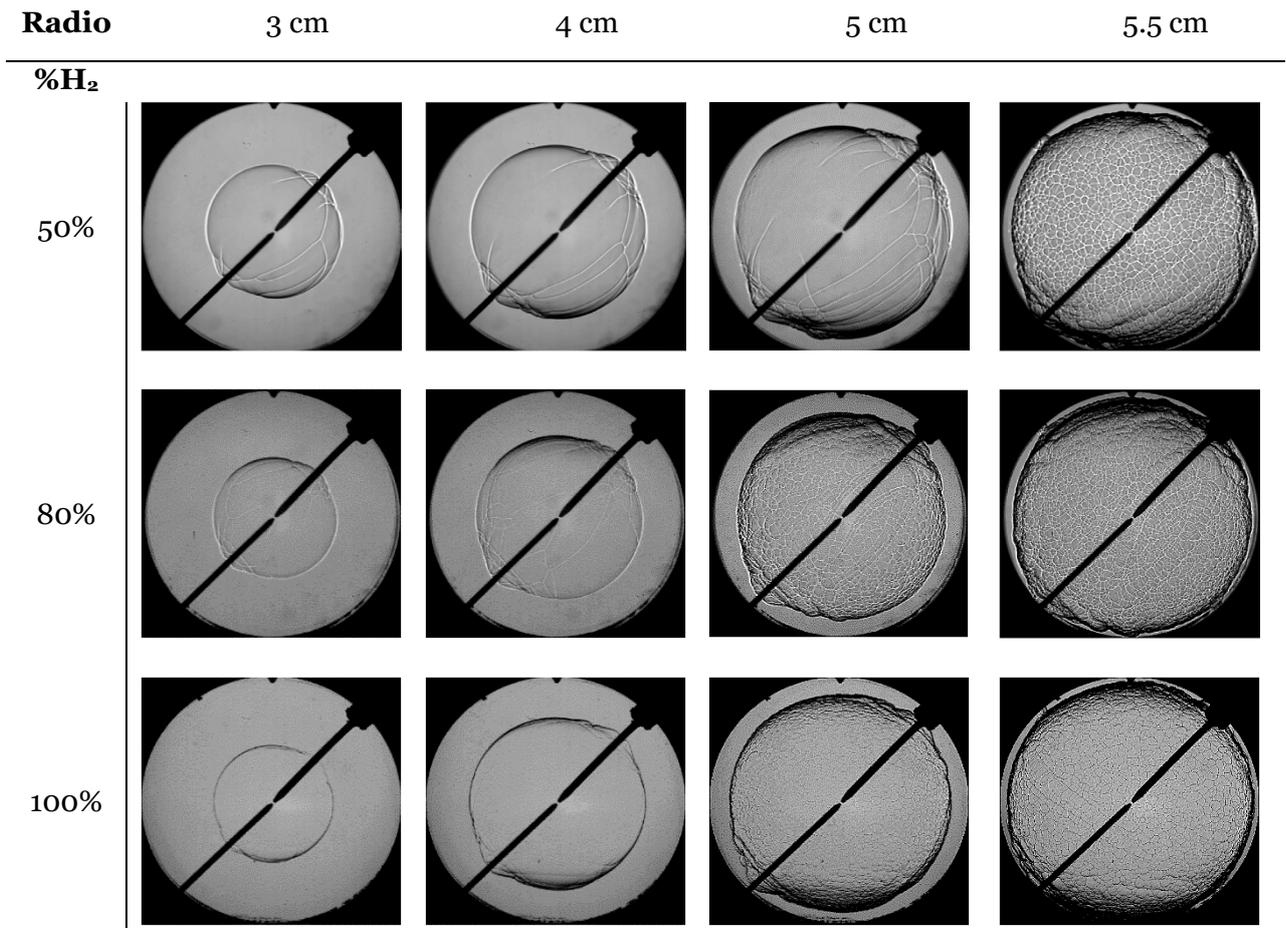
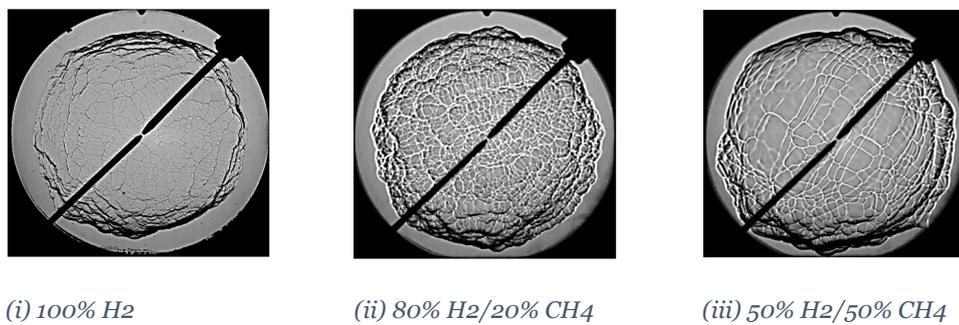
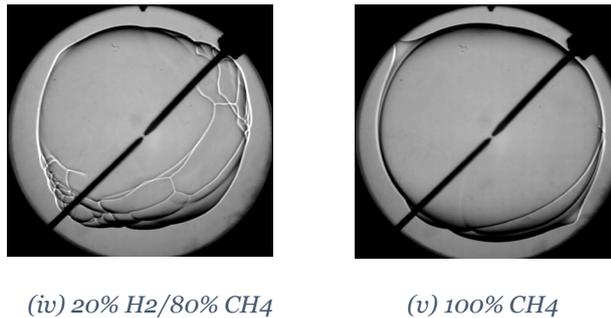


Figura 5.20. Morfología del frente de llama y aparición de la celularidad para llamas estequiométricas de mezclas de metano e hidrógeno.

En la Figura 5.21 se presentan las imágenes de la morfología de las llamas para las combustiones de mezclas pobres. Se puede observar que hay tres llamas celulares (las inestables, que corresponden a los experimentos con contenido de hidrógeno que varía del 50% al 100%) y dos llamas laminares (las estables, experimentos con 0% y 20% de hidrógeno). Cabe destacar que el frente de llama con 20% de hidrógeno presenta varias fisuras en su superficie, pero estas no conducen a una rápida aparición de la celularidad.





(iv) 20% H₂/80% CH₄

(v) 100% CH₄

Figura 5.21. Morfología de la llama y aparición de celularidad en algunas llamas pobres ($\phi=0.7$), dependiendo del contenido de H₂/CH₄ (radio de la llama de 5 cm).

La estructura de la celularidad formada en condiciones pobres es diferente de la observada en condiciones estequiométricas, debido al origen de las inestabilidades. Para un adosado relativo estequiométrico, las llamas celulares tienen una forma esférica definida, ya que no hay grandes arrugas en la superficie, y las células (originadas por inestabilidades hidrodinámicas) están homogéneamente distribuidas. Sin embargo, para una mezcla pobre (dosado relativo de 0.7), hay perturbaciones de gran escala (debido a inestabilidades termo-difusivas) combinadas con perturbaciones de menor escala, lo que da un aspecto de estructura agrupada a la llama (*clustered*), como se observa en las Figuras 13i, ii, iii, y 14 [65], [122].

Huang S. et al. [65] explican que, en mezclas pobres de hidrógeno, la aparición de grietas podría causar la generación de perturbaciones con longitudes de onda largas. La formación de estas primeras grietas se debe a causas externas, como la interferencia con los electrodos, pero son impulsadas debido a que la tasa de crecimiento de inestabilidades en el caso de llamas pobres de hidrógeno (combustiones inestables) es positiva para un gran número de longitudes de onda (pequeñas y grandes). Estas celdas de gran tamaño que se forman debido a las grietas iniciales, continúan dividiéndose hasta una etapa de saturación, cuando las celdas se extienden por toda la superficie. En esta fase, las grietas formadas en instantes tempranos coexisten con aquellas celdas formadas instantáneamente al desarrollarse la celularidad; consecuentemente, las celdas más recientes se adaptan a las grietas, derivando en la morfología agrupada o *clustered* mencionada anteriormente.

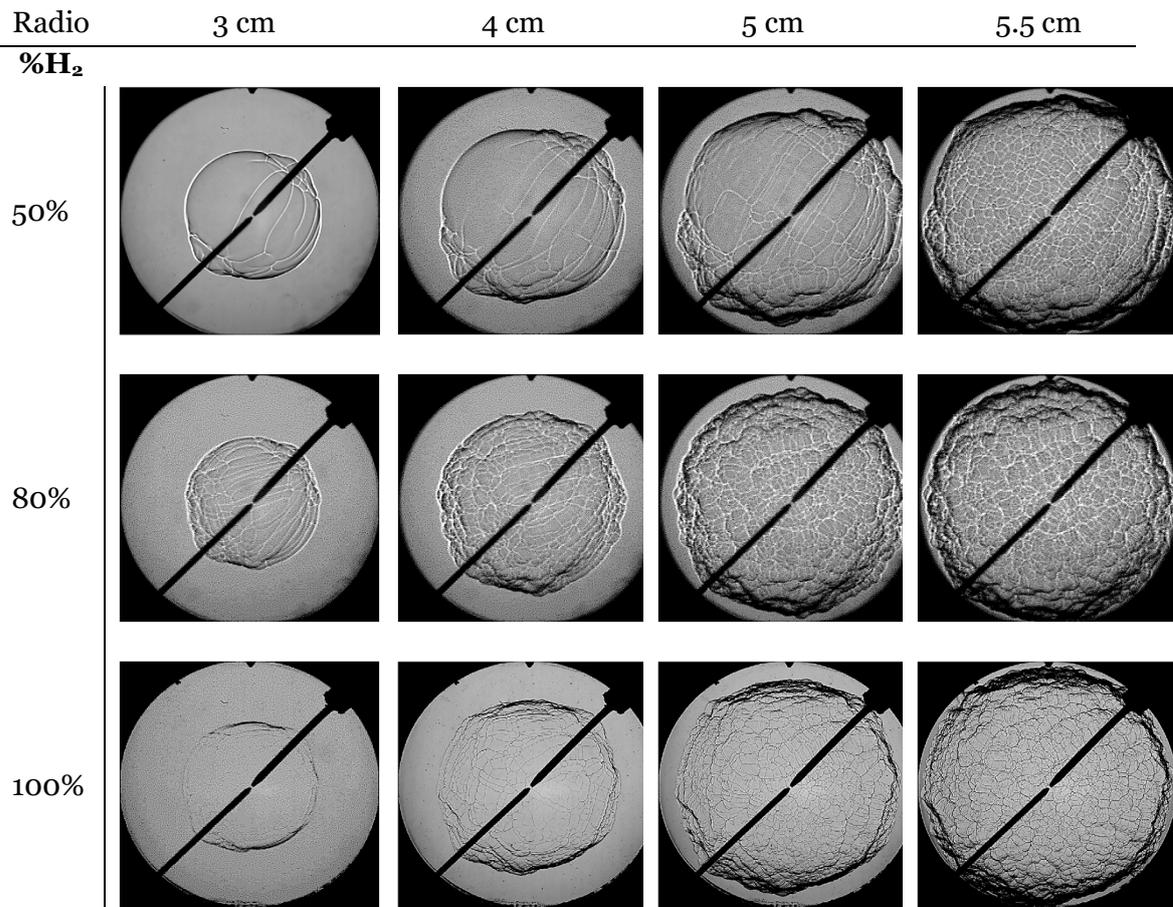


Figura 5.22. Morfología del frente de llama para varios radios de llamas de dosado pobre ($\phi=0.7$) de combustions de CH₄/H₂.

Comparando la Figura 5.22 anterior con la Figura 5.20, es posible observar que los experimentos con mayor contenido de hidrógeno en el grupo de combustiones pobres (Figura 5.22) desarrollan una estructura celular en la llama en un radio menor que aquellas homónimas del grupo de combustiones estequiométricas (Figura 5.20), debido al carácter termo-difusivo de las inestabilidades encontrado en las combustiones pobres de hidrógeno (Figura 5.22).

En este capítulo la naturaleza de la llama, ya sea estable o inestable, ha sido estudiada caracterizando las inestabilidades desarrolladas en la llama al diferenciar aquellas asociadas con fenómenos hidrodinámicos y termo-difusivos.

Se han utilizado curvas de estabilidad o penínsulas de inestabilidad para representar el número de onda frente al número de Peclet (y el radio de la llama) con el fin de establecer los límites de estabilidad para cada mezcla. El contenido de hidrógeno determina la forma de la península de inestabilidad y tiene una influencia directa en Le_{eff} , que es un parámetro crucial para determinar la naturaleza de la llama. La diferencia entre Le_{eff} y Le_{eff}^* afecta la ubicación de la península en los mapas de estabilidad: para mezclas con $Le_{eff} > Le_{eff}^*$,

cuanto más similares sean estos parámetros, más hacia la izquierda se encuentra la península.

Cuando $Le_{eff} > Le_{eff}^*$, existen dos límites de estabilidad, superior e inferior, y la combustión es intrínsecamente estable; las inestabilidades desarrolladas tienen un origen hidrodinámico. Por el contrario, cuando $Le_{eff} < Le_{eff}^*$, la combustión es intrínsecamente inestable, y el origen de las inestabilidades es termo-difusivo, además de la contribución hidrodinámica.

Las curvas de inestabilidad para mezclas pobres con mayor contenido de hidrógeno muestran una morfología diferente, con solo una línea que separa la zona estable de la inestable, ya que solo hay un valor del número de onda para el cual la tasa de crecimiento es cero.

El dosado relativo tiene un gran efecto en la estabilidad de los procesos de combustión con una proporción significativa de hidrógeno: en el caso estequiométrico, todas las mezclas estudiadas tienen una naturaleza estable, mientras que, en el caso pobre, las combustiones con alto contenido de hidrógeno son inestables. En estos experimentos, la forma de las curvas de estabilidad y la morfología de las llamas están muy influenciadas por el dosado relativo, cambiando completamente la forma de la curva de estabilidad de condiciones estequiométricas (penínsulas) a condiciones pobres (líneas).

No obstante, el dosado relativo tiene una menor influencia en las curvas de estabilidad y la morfología de la llama en mezclas dominadas por metano, ya que las formas de las penínsulas no varían significativamente con la modificación del dosado relativo.

Con respecto al desarrollo de la celularidad, los resultados del estudio morfológico de las mezclas de H_2/CH_4 muestran que la estructura celular y la morfología del frente de llama son diferentes dependiendo del origen de las inestabilidades (solo hidrodinámicas o también termo-difusivas), las cuales pueden presentar una apariencia agrupada. El contenido de hidrógeno influye en el desarrollo de un frente de llama celular, ya que todas las llamas celulares corresponden a experimentos con porcentajes medios y altos de hidrógeno. Para las llamas estequiométricas, la aparición de la celularidad está marcada por los valores máximos de la tasa de crecimiento de las inestabilidades (velocidad de crecimiento de las ondas de amplitud). Para mezclas dominadas por hidrógeno, la reducción del dosado relativo tiende a volver inestable la llama. Las mezclas pobres desarrollan una aparición temprana de la celularidad del frente de llama debido al origen termo-difusivo de la inestabilidad, lo que da un aspecto agrupado a la estructura celular.

Finalmente, se puede afirmar que la tasa máxima de crecimiento de las inestabilidades es más importante para el desarrollo de la celularidad que el radio de la llama (y el número de Peclet asociado) en el que se desencadenan las inestabilidades.

CAPÍTULO 6:

RESULTADOS DEL ESTUDIO DE ESTABILIDAD DE LLAMAS DE ETANOL/AIRE

6.RESULTADOS DEL ESTUDIO DE ESTABILIDAD DE LA LLAMA

En el apartado de metodología para el estudio de estabilidad de la llama (capítulo 4) se explican los pasos para la obtención de un modelo predictivo de la celularidad en llamas de etanol basado en experimentación empleando la herramienta estadística del Diseño de Experimentos.

En dicha metodología se definen los denominados “parámetros celulares” los cuales caracterizan el fenómeno de estudio. Estos parámetros se clasificaron en dos grupos: los dimensionales y los adimensionales. El primer grupo engloba tres parámetros temporales: tiempo de activación celular, tiempo de máxima influencia celular y tiempo de combustión o duración de la combustión; así como el radio celular, obtenido a través del tiempo de activación celular. El segundo grupo contiene dos parámetros adimensionales: Etapa de dominancia celular y Etapa de combustión celular, derivados de la combinación de los parámetros temporales como se explicó en el capítulo 4.

Una vez que se definieron los parámetros celulares como variables respuesta, se determinó el área de estudio mediante la serie de experimentos piloto; se recuerda que el área de estudio contiene los valores de las variables explicativas o factores (presión inicial, temperatura inicial y dosado relativo) para los cuales se genera celularidad en llamas de etanol.

El resultado de la metodología es un modelo que busca caracterizar la celularidad en llamas de etanol. Este modelo consta de varias funciones que relacionan las variables explicativas o de entrada, que en el caso concreto de este estudio son la presión inicial y el dosado relativo (la temperatura inicial permanece constante y es común para todos los experimentos realizados), y la/s variable/s respuesta, denominadas como “parámetros celulares”.

En este capítulo se proporcionan los resultados del modelo obtenido y se analizan los factores de influencia y las consecuencias de la celularidad en llamas esféricas de etanol. En la siguiente Figura 6.1 se muestra un esquema que contiene el planteamiento del capítulo para facilitar el seguimiento del mismo.

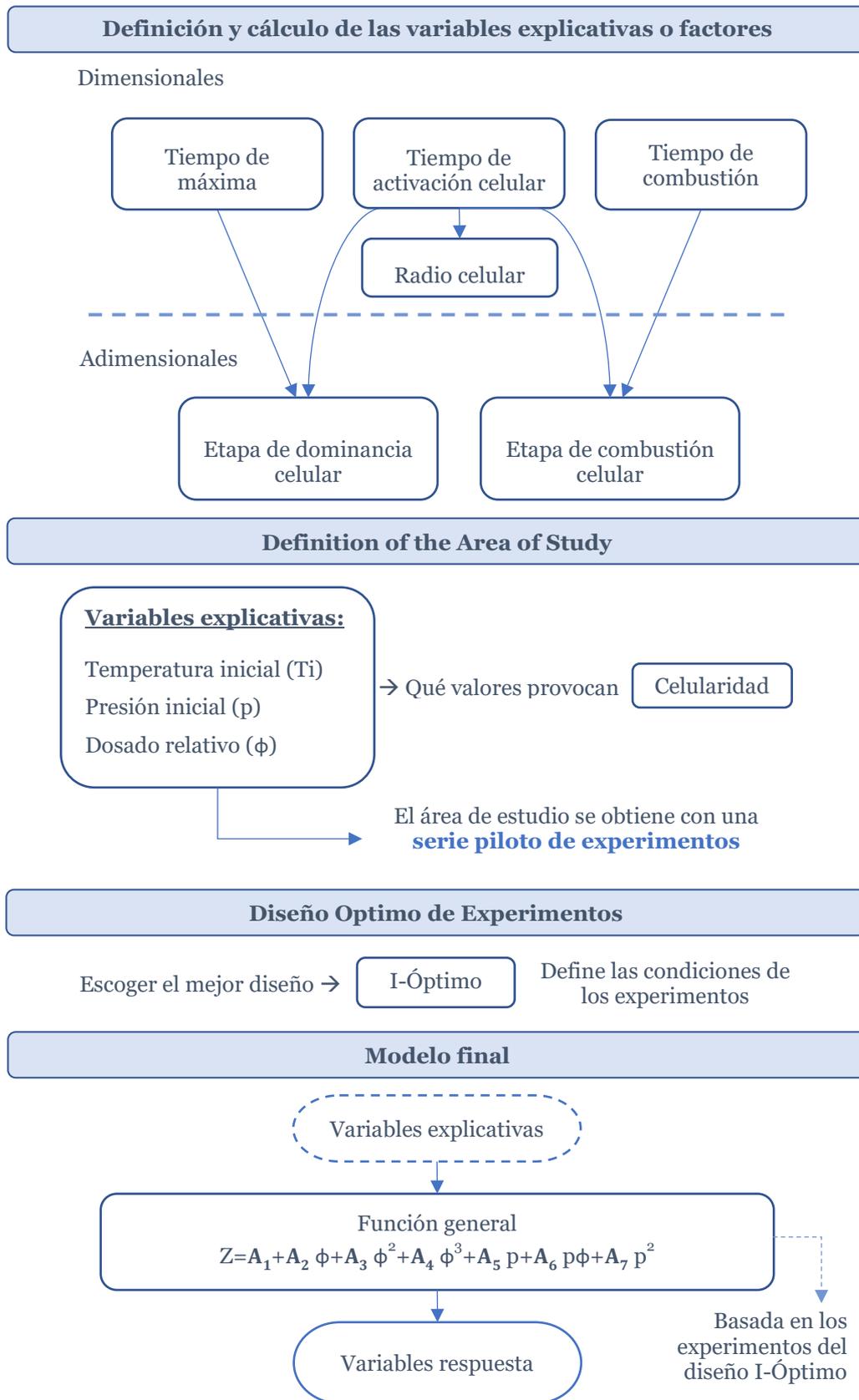


Figura 6.1. Esquema resumido de la obtención del modelo de celularidad en llamas de etanol

6.1. Desarrollo del modelo predictivo de cada uno de los parámetros celulares seleccionados

En este punto se obtienen los coeficientes de las funciones asociadas a los parámetros celulares que conforman el modelo de celularidad; esto se realiza sobre la base de los resultados experimentales de los puntos ensayados de acuerdo con lo señalado en el apartado de la metodología 4.3 (los resultados experimentales de todas las combustiones realizadas se encuentran en el Anexo). Las funciones que en este apartado se presentan describen la relación encontrada entre cada uno de los parámetros celulares definidos en este capítulo y las condiciones de presión inicial y dosado relativo dentro del área de estudio.

Para la extracción de las relaciones entre las variables respuesta (parámetros celulares) y las entradas (presión inicial y dosado relativo) se emplea el programa de diseño estadístico software estadístico JMP, como se indica en el apartado 4.3. El modelo escrito en forma general en función de los parámetros respuesta (parámetros celulares) se encuentra descrito en la ecuación (6.1).

$$Z = A_1 + A_2 \phi + A_3 \phi^2 + A_4 \phi^3 + A_5 p + A_6 p \phi + A_7 p^2 \quad (6.1)$$

Donde Z representa el parámetro celular (variable respuesta); ϕ y p son las variables explicativas de dosado relativo y presión inicial respectivamente; y A_i representa los coeficientes específicos para cada parámetro celular cuyos valores se recogen en la Tabla 6.1 que se muestra seguidamente.

Tabla 6.1. Coeficientes de los modelos de acuerdo con las variables explicativas: presión inicial y dosado relativo.

	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7
t_{trigg_cell} [ms]	-707.91	2197.03	-2237.55	774.59	394.56	-410.88	-
r_{cell} [cm]	-23.41	99.57	-103.79	34.50	-3.09	-4.69	-
t_{max} [ms]	-223.32	919.60	-1115.93	442.27	147.02	-120.80	-
t_{comb} [ms]	-515.46	1731.89	-1912.46	703.58	444.01	-133.59	-602.52
SCD	5.84	-20.52	21.28	-7.04	3.02	0.94	-4.90
CCS	1.43	-6.29	7.81	-2.97	2.23	1.52	-5.95

En los siguientes apartados se representan dichas funciones gráficamente y se interpreta su significado con respecto a las llamas celulares, también se comparan ciertos resultados obtenidos con aquellos recogidos en la literatura y, por último, se relaciona el modelo obtenido con las imágenes captadas por la técnica fotográfica Schlieren, empleada como segunda herramienta para el estudio de celularidad en llamas de etanol.

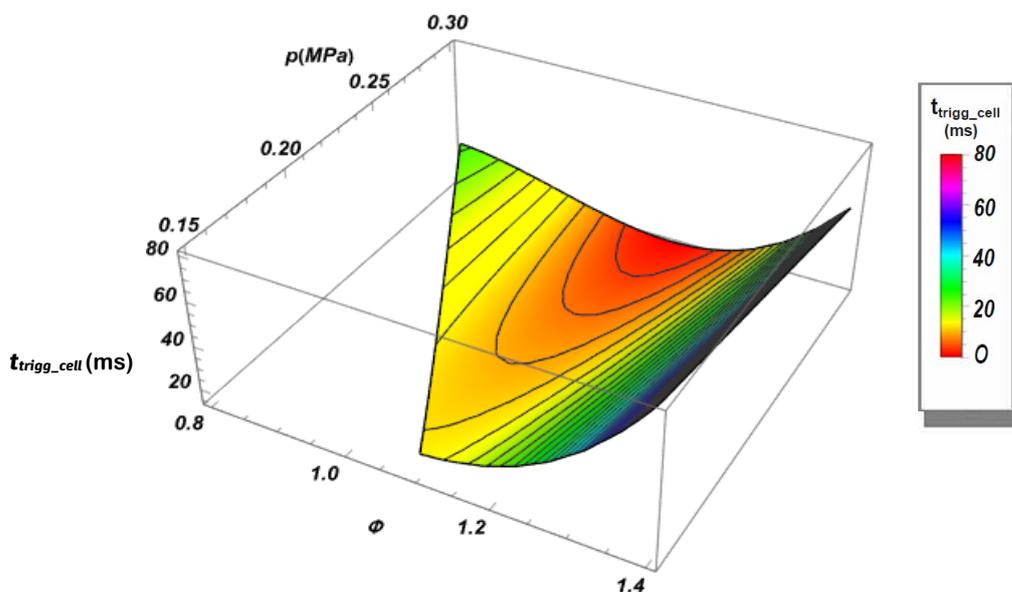
Antes del comienzo de la exposición y análisis de los resultados, se considera importante recordar que, en lo referente a este punto 6.1 “Desarrollo del modelo predictivo de cada uno de los parámetros celulares seleccionados”, cuando se hable de que las llamas presentan celularidad, se hace sobre la base de la velocidad de combustión, no de las imágenes Schlieren. Es decir, se parte del supuesto de que si las llamas presentan una aceleración en la velocidad de combustión fuera de los valores esperados en las condiciones laminares es debido al desarrollo de un frente de llama celular (ver apartado 2.4.2.4), pero el análisis de las imágenes y la verificación de que el supuesto es correcto se realiza en un apartado posterior.

6.1.1. Resultados del modelo para los parámetros celulares dimensionales

En este primer punto se presentan y analizan las representaciones gráficas de cada una de las funciones obtenidas para los parámetros celulares dimensionales en función de la presión inicial y el dosado relativo. Se comienza por la presentación conjunta de los resultados del tiempo de activación celular y del radio celular, recogidos en punto 6.1.1.1, sabiendo que ambos parámetros están muy relacionados entre sí; seguidamente se muestran en el punto 6.1.1.2 los resultados obtenidos del tiempo máximo y la duración de la combustión.

6.1.1.1. Resultados del modelo para el tiempo de activación celular y para el radio celular

Se inicia el análisis del modelo con los parámetros de tiempo de activación celular y de radio celular, los cuales se representan a continuación. La Figura 6.2 muestra los valores del tiempo de activación celular (t_{trigg_cell}) frente a la presión inicial y el dosado relativo; dichos resultados se obtienen de la función, plasmada en la propia figura, válida para el área de estudio.



$$t_{\text{trigg_cell}} [\text{ms}] = -707.913 + 2197.032\Phi - 2237.552\Phi^2 + 774.597\Phi^3 + 394.56p - 410.877p\Phi$$

Figura 6.2. Resultados predichos por el DDE I-óptimo para el tiempo de activación celular (ms) en función del dosado relativo y la presión inicial.

En primer lugar, se destaca de la función obtenida para la variable respuesta “tiempo de activación celular” que en ella no se encuentra el término cuadrático de la presión inicial (como sí está en otras funciones, ver Tabla 6.1), por lo que depende linealmente de ella y se presupone una mayor influencia del dosado relativo ya que éste tiene hasta el término cúbico. Esta afirmación se puede observar gráficamente en la Figura 6.2.

En segundo lugar, analizando la gráfica recogida junto con la función en la Figura 6.2, se observa que, desde la perspectiva del dosado relativo, los valores mínimos del tiempo de activación celular se encuentran en el rango de $1.1 < \phi < 1.2$, para todas las presiones analizadas; mientras que, desde la perspectiva de la presión inicial, el mínimo para cualquier dosado relativo rico se encuentra en la presión inicial más elevada: 0.3 MPa. Para dosados relativos pobres, el valor del tiempo será menor cuanto más baja sea la presión inicial. También se destaca que, para dosados muy ricos $\phi > 1.2$, el tiempo de activación celular aumenta considerablemente; este aumento se produce independientemente de la presión inicial escogida. Este aumento del tiempo de activación celular, también se produce para dosados pobres, pero los valores alcanzados no son tan elevados como en la región de dosados muy ricos mencionada.

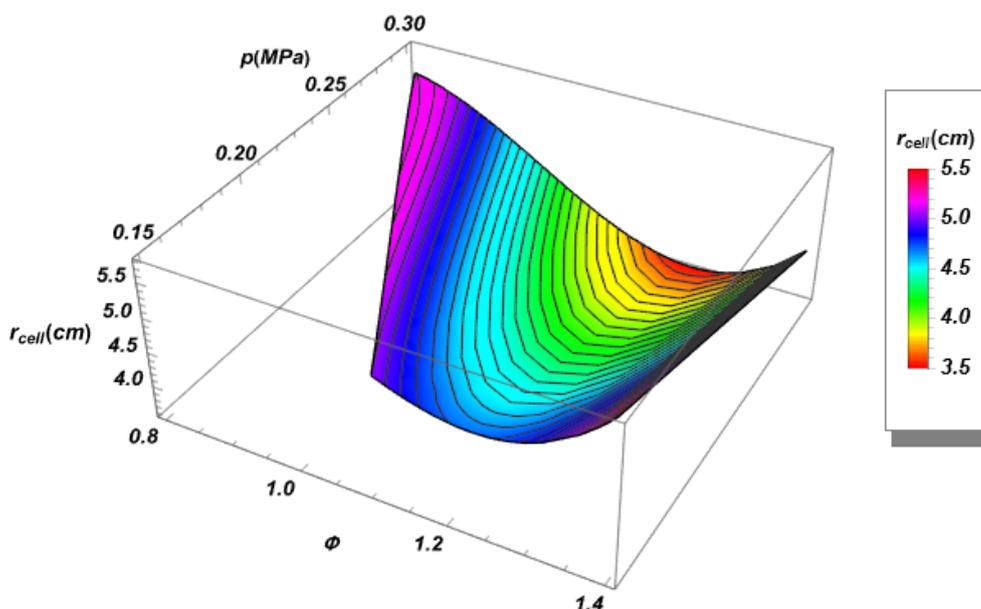
Por otro lado, el mínimo absoluto de la función de tiempo de activación celular se produce para las condiciones de $\phi = 1.15$ y $p = 0.3$ MPa, siendo de 14.3 ms. Este dato se traduce en que esas condiciones de dosado ligeramente rico y presión inicial máxima hacen

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

que el tiempo que lleva formar el frente de llama celular (celularidad) sea el mínimo posible en términos absolutos dentro del área de estudio. El máximo de la función del tiempo de activación celular tiene valor de 80.72 ms y se da para las condiciones de máximo dosado relativo y máxima temperatura inicial: $\phi=1.4$ y $p=0.15$ MPa. Inicialmente se podría concluir que las condiciones cercanas a 0.3 MPa y dosado relativo 0.15 son las que favorecen la aparición más temprana de la celularidad (tiempo de activación mínimo), pero se debe tener en cuenta que este tiempo se mide en términos absolutos y se ve afectado por la posible influencia de la celeridad con que se desarrollan los distintos procesos de combustión, es decir, su duración.

En resumen, con el tiempo de activación celular se podría decir en general que los frentes de llama que desarrollan celularidad en menos tiempo se encuentran en la región de presiones iniciales altas y dosados relativos moderadamente ricos (hasta 1.2); mientras que para presiones bajas y dosados pobres o muy ricos (hacia 1.4), se tienen las combustiones que más tiempo tardan en desarrollar este fenómeno, pero subrayando de manera clara que este tiempo es referido en términos absolutos. En particular, se concluye que el frente de llama al que menos tiempo le llevaría desarrollar celularidad, en términos absolutos, es el que se ha generado en las condiciones del punto ($\phi=1.15$; $p=0.3$ MPa); y, al contrario, el tiempo de activación celular indica que el frente de llama al que más tiempo le lleva desarrollar celularidad, en términos absolutos, es el de las condiciones del punto ($\phi=1.4$; $p=0.15$ MPa).

Seguidamente se muestran y analizan los resultados obtenidos función de radio celular en función de las variables explicativas (presión inicial y dosado relativo).



$$r_{\text{cell}}[\text{cm}] = -23.41 + 99.57\phi - 103.79\phi^2 + 34.50\phi^3 - 3.09p - 4.69p\phi$$

Figura 6.3. Resultados predichos por el DDE I-óptimo para el radio celular (cm) en función del dosado relativo y la presión inicial.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Al igual que sucede con el tiempo de activación celular, en la función obtenida para el radio celular, recogida junto con su representación gráfica en la Figura 6.3, no aparece el término cuadrático de la presión (no es significativo), por lo que también en este parámetro se espera una relación lineal con la presión y una mayor influencia del dosado relativo que de la presión inicial (dependencia cúbica, ϕ^3).

Como se explica en la metodología del estudio de estabilidad de la llama (apartado 4.3), el radio celular está muy relacionado con el tiempo de activación celular, ya que es el radio correspondiente a ese instante; sin embargo, el radio celular, al contrario que su homólogo temporal, se “desprende” de la influencia de la velocidad de combustión, porque todas las combustiones alcanzan un determinado valor del radio (tarden más o menos) hasta llegar al radio máximo coincidente con el radio de la cámara de combustión: 5,7 cm. Esto quiere decir que este parámetro permite la comparación entre combustiones en diferentes condiciones, ya que todas ellas tienen la misma referencia. Sin embargo, aunque este parámetro permite hablar en términos relativos, no permite una comparación perfecta desde el punto de vista del desarrollo de la combustión puesto que no tiene en cuenta la etapa final de la misma, que puede ocurrir (en menor o mayor medida, dependiendo de las condiciones) después de alcanzar el radio máximo. Dicho esto, se analizan los resultados recogidos en la Figura 6.3.

En primer lugar, se obtiene que los menores radios celulares se encuentran en la zona de dosados ligeramente ricos y presiones elevadas, como similarmente se apreciaba en la función del tiempo de activación celular; los valores máximos se encuentran en la zona de presiones mínimas y dosados muy ricos o también en dosado pobre y presión alta.

El mínimo absoluto de la función se encuentra en el punto y se alcanza a $\phi = 1.25$, $p = 0.3$ MPa y su valor es de 3,72 cm, lo que quiere decir que es el radio más pequeño en el que se va a encontrar celularidad en la llama. Nótese que, aunque el mínimo se produce a la misma presión que en la función del tiempo de activación celular, en el radio celular el dosado es ligeramente mayor. En la siguiente Tabla 6.2 se muestran las condiciones de los mínimos de ambas funciones y sus correspondientes valores para el tiempo de activación celular y el radio celular para facilitar su comparación. Por otro lado, el valor máximo del radio celular se da para las mismas condiciones que para el tiempo de activación celular: dosado máximo y presión inicial mínima ($\phi = 1.4$; $p = 0.15$ MPa).

Tabla 6.2. condiciones de los valores mínimos de las funciones del modelo para tiempo de activación celular y radio celular.

	ϕ	p [MPa]	Valor t_{trigg_cell} [ms]	Valor r_{cell} [cm]
1. Mínimo t_{trigg_cell}	1.15	0.3	14.3	3.76
2. Mínimo r_{cell}	1.25	0.3	19.37	3.72

Como era de esperar, la combustión correspondiente con el dosado relativo de 1.15 es más rápida, ya que alcanza un radio de 3.76 cm en menor tiempo que la de dosado relativo de 1.25 (14.3 ms frente a 19.37 ms). En términos absolutos la celularidad aparece en menor tiempo en el primer caso, pero si se tuviera únicamente el tamaño de la esfera a la que se asemeja el frente de llama en el instante de aparición de la celularidad, en el segundo caso ésta sería menor.

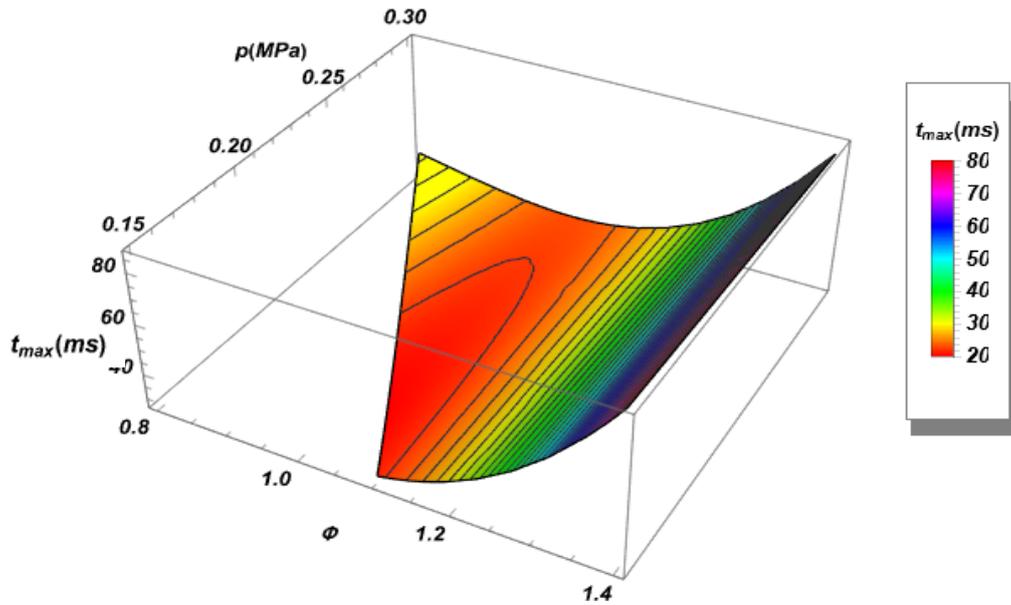
En términos absolutos la celularidad aparece en menor tiempo en el primer caso, pero, si la referencia no fuera el tiempo sino el tamaño de la esfera a la que se asemeja el frente de llama en el instante de aparición de la celularidad, en el segundo caso ésta sería menor. Éste segundo criterio permite comparar diferentes combustiones bajo una misma referencia máxima: el radio de la cámara de combustión. Como depende de estas dos perspectivas (tiempo y tamaño), se ve necesario el análisis de otros parámetros celulares que puedan aportar más información sobre el momento de la aparición de la celularidad.

6.1.1.2. Resultados del modelo para el tiempo de máxima influencia celular y para el tiempo de combustión

En este punto se muestran los resultados obtenidos para las funciones del tiempo de máxima influencia celular (t_{\max}) y del tiempo de combustión (t_{com}) para las condiciones dentro del área de estudio. El primer parámetro, “tiempo de máxima influencia celular”, se recuerda que se ha denominado de esta manera porque es el instante en el que se alcanza la máxima velocidad de combustión debida a la aparición de la celularidad. El segundo parámetro es el “tiempo de combustión” o de “duración de la combustión” (ver apartado 4.3.1) el cual es un parámetro que resulta muy útil para comparar tiempos de desarrollo de combustiones bajo distintas condiciones.

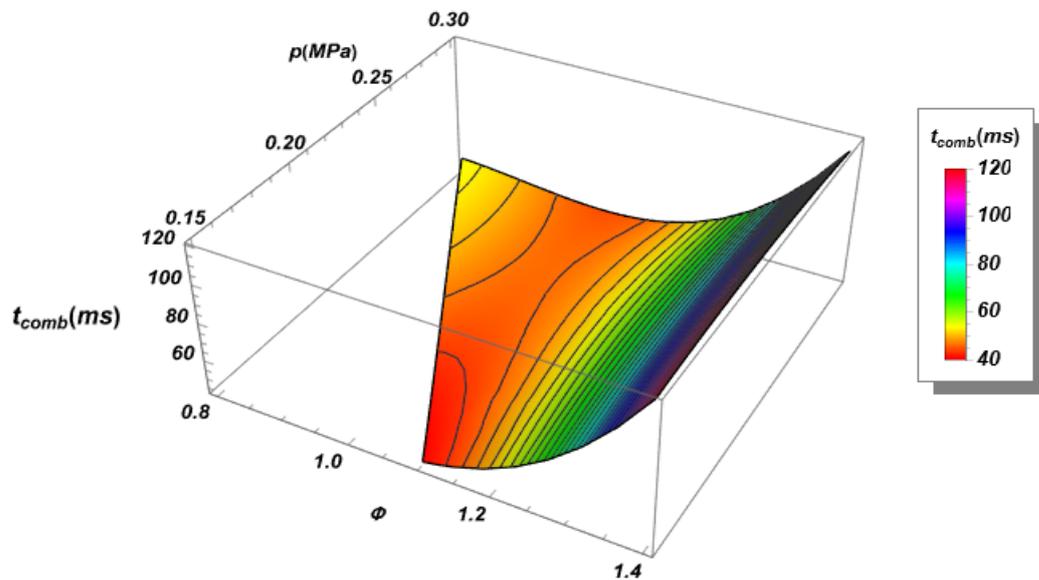
En la siguiente Figura 6.4 se encuentran tanto las funciones como las representaciones gráficas de éstas de los parámetros temporales de máxima influencia celular y duración de la combustión. El análisis de ambos parámetros se realiza paralelamente.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama



$$t_{max} [\text{ms}] = -223.322 + 919.603\Phi - 1115.934\Phi^2 + 442.278\Phi^3 + 147.02p - 120.80p\Phi$$

(i) Tiempo de máxima influencia celular (t_{max})



$$t_{comb} [\text{ms}] = -515.460 + 1731.890\Phi - 1912.460\Phi^2 + 703.588\Phi^3 + 444.011p - 133.592p\Phi - 602.52p^2$$

(i) Duración de la combustión (t_{comb})

Figura 6.4. Resultados predichos por el DDE I-óptimo para el tiempo de máxima influencia celular (ms) y el tiempo o duración de la combustión (cm) en función del dosado relativo y la presión inicial.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Comparando ambas funciones recogidas en la figura anterior, se puede observar que el tiempo de máxima influencia celular y el tiempo de combustión no son exactamente proporcionales, ya que el segundo posee un término cuadrático de la presión del que el primero carece; el tiempo de activación celular visto en un punto anterior tampoco tiene este término. En la duración de la combustión, por tanto, tendrá mayor influencia la presión. Teniendo en cuenta esto, se compara la gráfica y los coeficientes de la función del tiempo de influencia máxima celular primero con el tiempo de activación celular y posteriormente con el tiempo de duración de la combustión. Se comparan los tres parámetros celulares temporales mediante los coeficientes que acompañan a los términos de la presión en ambas funciones, cuyos valores se recogen en la siguiente Tabla 6.3.

Tabla 6.3. Coeficientes de los términos de presión de los parámetros celulares temporales.

Parámetro	símbolo	P	$p\phi$	p^2
Tiempo de activación celular	t_{trigg_cell}	394.56	-410.877	-
Tiempo de máxima influencia celular	t_{max}	147.02	-120.80	-
Tiempo de máxima influencia celular	t_{comb}	444.011	-133.592	-602.52

Comparando los coeficientes recogidos en la tabla anterior, se puede ver cómo los coeficientes de la influencia directa de la presión en el tiempo de máxima influencia celular son menores en valor absoluto que los de los otros dos parámetros. Esto se traduce en que la presión tiene menor influencia en el resultado.

En el tiempo de máxima influencia celular, se observa cómo los valores mínimos marcados por el color rojo, se encuentran en dosados ligeramente ricos y hasta 1.15, con respecto a la presión, la zona de mínimos se extienden de 1.5 MPa a 2.2 MPa sin que la presión influya excesivamente (explicado anteriormente); en concreto, el valor mínimo absoluto es el que se da en las condiciones de $\phi=1.04$ y $p=0.18$ MPa, y es de 27.42 ms. Esto quiere decir que es en ese punto donde se alcanza el tiempo mínimo, con carácter absoluto, en el que se alcanza una velocidad de combustión máxima debida a la influencia de la celularidad.

En el caso de tiempo de combustión, los valores mínimos se encuentran también en dosados ligeramente ricos, pero en las presiones se ve que se tiende más a obtener un valor más pequeño cuanto menor sea la presión inicial. Esto se comprueba calculando el mínimo absoluto de la presión, que se encuentra en el punto de $\phi=1.1$ y $p=0.15$ MPa (presión mínima) y adquiere un valor de 43.47 ms. Que se dé el mínimo en esas condiciones tiene su explicación, ya que la duración de la combustión está íntimamente ligada con la

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

velocidad de combustión y con la velocidad del frente de llama, ya que cuanto más rápido se desarrolle la combustión, menor será la duración de la misma; en la literatura se encuentra que en el etanol la presión tiene una influencia negativa en la velocidad (alarga el tiempo de combustión) y el dosado que maximiza la velocidad se encuentra en los alrededores de 1.1.

Con respecto a los valores máximos, se centran en la región de mayor dosado relativo; en el tiempo de mayor influencia celular, se da el máximo a menor presión y en el tiempo de combustión, a presión media-alta. En concreto, para el tiempo de influencia máxima celular, el valor más elevado se da para $\phi=1.4$ y $p=0.15$ MPa; mientras que, para el tiempo de combustión, según la función del modelo, el máximo (proceso más lento) se encuentra en $\phi=1.4$ y $p=0.22$ MPa.

Al igual que se hizo anteriormente, se compara en la siguiente Tabla 6.4 el valor de los puntos mínimos de las funciones de los parámetros temporales (tiempo de activación celular, tiempo de máxima influencia celular y tiempo de combustión), así como sus condiciones.

Tabla 6.4. condiciones de los valores mínimos de las funciones del modelo para tiempo de activación celular y radio celular.

	ϕ	p [MPa]	Valor t_{trigg_cell} [ms]	Valor t_{max} [ms]	Valor t_{comb} [ms]
1. Mínimo t_{trigg_cell}	1.15	0.3	14.3	33.47	50.84
1. Mínimo t_{max}	1.04	0.18	22.28	27.42	44.56
2. Mínimo t_{comb}	1.1	0.15	23.76	28.75	43.47

De la tabla anterior se extrae que la presión favorece la aparición temprana de la estructura celular (tiempo de activación celular mínimo). Sin embargo, no favorece el desarrollo rápido del proceso de combustión ya que los valores máximos del tiempo de combustión (correspondientes con combustiones más lentas) se encuentran en presiones iniciales media-altas (y dosado rico de 1.4). Es decir, la presión favorece el desarrollo de la celularidad, pero hace también que las combustiones sean más lentas. Para el parámetro del tiempo de influencia máxima celular, la presión que favorece el mínimo tiempo en que se alcanza la velocidad máxima está en un punto intermedio entre las presiones de los dos parámetros anteriores, ya que tiene influencia de ambos aspectos: celularidad y velocidad del proceso.

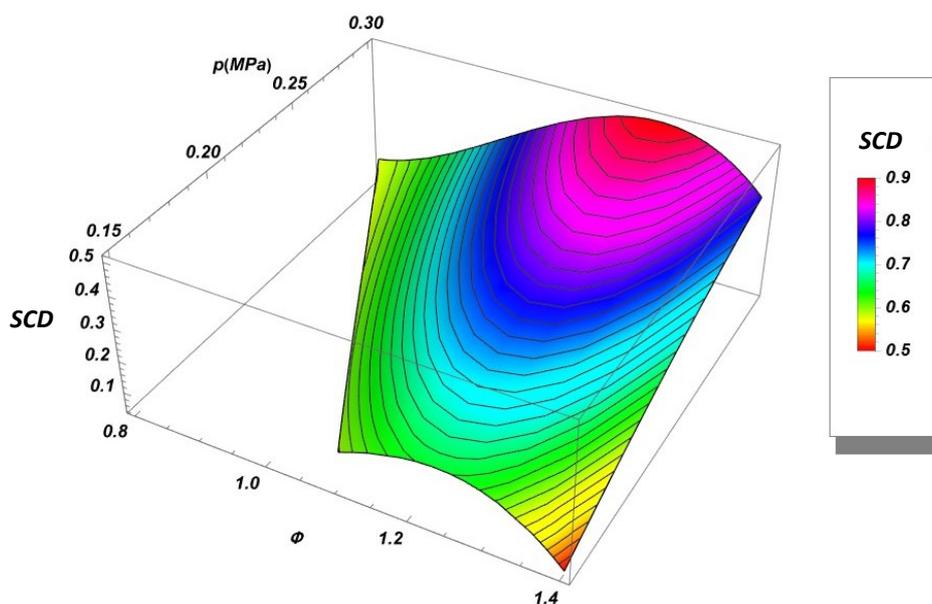
El comportamiento de los tres parámetros frente al dosado es similar: el mínimo se produce para dosados ligeramente ricos y menores o iguales a 1.15 y el máximo se da para el dosado relativo más rico: 1.4.

Aunque, en general, el tiempo de activación celular visto en el anterior apartado, el tiempo de máxima influencia celular y el tiempo de combustión puedan tener a grandes rasgos la misma tendencia, se refieren a tres momentos de la combustión diferentes que no tienen por qué ser completamente proporcionales entre sí. Esto se ve más claramente en el siguiente punto, donde se analizan los parámetros adimensionales, que resultan de la relación de dichos parámetros temporales.

6.1.2. Resultados del modelo para los parámetros celulares adimensionales

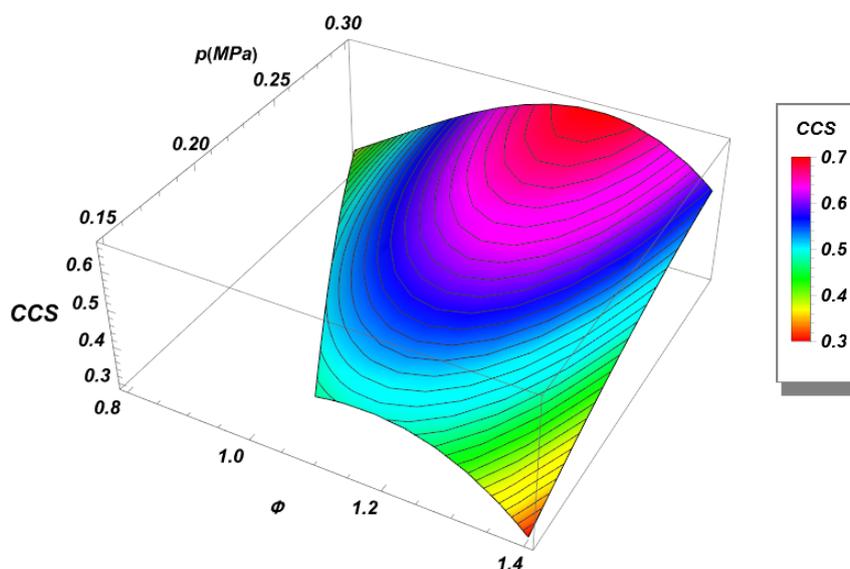
En este apartado se presentan los resultados de los parámetros adimensionales: SCD (etapa de dominancia celular — *Stage of Cellular Dominance* —) y CCS (etapa de combustión celular — *Cellular Combustion Stage* —). Es conveniente recordar que la diferencia entre dos parámetros radica en que el primero, SCD, representa el período adimensionalizado de la combustión en el que se observa una aceleración debido a la presencia de celularidad. Por otro lado, el CCS abarca todo el período de la combustión en el que existe una llama celular, incluso después de que esta haya dejado de contribuir a la aceleración de la combustión, es decir, una vez alcanzada la velocidad máxima.

En la siguiente Figura 6.5 se encuentran las representaciones gráficas de ambos parámetros en función de la presión inicial p [MPa] y del dosado relativo ϕ .



$$SCD = 5.84 - 0.520p + 21.280\phi^2 - 7.041\phi^3 + 3.02p + 0.94p\phi - 4.90p^2$$

(i) *Etapa de dominancia celular (SCD)*



$$\text{CCS} = 1.429 - 6.298\phi - 7.818\phi^2 + 2.976\phi^3 - 2.233p - 1.516p\phi - 5.957p^2$$

(ii) Etapa de combustión celular (CCS)

Figura 6.5. Resultados predichos por el modelo para el SCD y el CCS en función del dosado relativo y de la presión

En la Figura 6.5 (i) se muestra la evolución del SCD en función del dosado relativo y la presión inicial. Se observa que el SCD aumenta para los dosados relativos entre 0.8 y 1.2 debido a la aparición temprana de la celularidad (mayor periodo de dominancia celular en el proceso de combustión). Para dosados más ricos, la aparición de la estructura celular se retrasa nuevamente, lo que resulta en una disminución de la etapa en la que domina la celularidad.

También se observa que, aunque la influencia de ϕ (dosado relativo) es más fuerte que la de p (presión inicial), la presión inicial tiene un efecto más significativo en SCD en comparación con los parámetros estudiados anteriormente. Este efecto puede verse en la Figura 6.5 (i) e inferirse de la Tabla 6.1 de los coeficientes, ya que SCD depende del término cuadrático de la presión inicial. El valor máximo de este parámetro es 0.51 para $\phi=1.24$ y $p=0.3$ MPa. Estas condiciones producen la diferencia máxima entre el inicio de la celularidad (t_{trigg_cell}) y el momento en el que la llama es más afectada por la celularidad (t_{max}). Es decir, en este punto, la celularidad tiene más tiempo para desarrollarse debido a que la diferencia entre t_{trigg_cell} y t_{max} . Por el contrario, para aquellos procesos de combustión en condiciones pobres (o muy rico y presión inicial baja), el SCD es mínimo, lo que implica que la velocidad de combustión se mantiene durante un mayor periodo de tiempo sin que sea afectada por la celularidad, y, por ende, la celularidad tiene poco tiempo para desarrollarse.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

En la Figura 6.5 (ii) se presenta el gráfico de la etapa de combustión celular (CCS, por sus siglas en inglés) en función de la presión inicial (en MPa) y el dosado relativo, obtenido a partir del modelo presentado para la región de estudio. Al igual que con SCD, se observa que la influencia de la presión inicial es mayor que la de los parámetros presentados anteriormente.

El valor máximo del parámetro CCS es de 0.668 para $\phi=1.21$ y $p=0.3$ MPa. Esto significa que la celularidad comienza a desarrollarse una vez que el proceso de combustión está completado en un 33.2%, siendo el 100% la condición en la que todos los reactivos han sido consumidos. Este parámetro representa el porcentaje de la combustión (en términos de tiempo) que está afectado por la presencia de celularidad en el frente de llama.

Tabla 6.5. condiciones de los valores máximos de las funciones del modelo para la etapa de dominancia celular SCD y para la etapa de combustión celular CCS.

	ϕ	p [MPa]	Valor SCD	Valor CCS
1. Máximo SCD	1.24	0.3	0.51	0.50
2. Máximo CCS	1.21	0.3	0.665	0.668

En la Tabla 6.5 se representan las condiciones para los valores máximos de SCD y CCS. Se puede ver que el CCS y el SCD alcanzan en máximo en condiciones muy similares (aunque representan conceptos diferentes), presentando más disparidad en dosados más pobres, ver Figura 6.5.

En este apartado 6.1 se han presentado los resultados del modelo para todos los parámetros celulares definidos (dimensionales y adimensionales), interpretando el significado físico que dichos resultados pueden tener con respecto a la celularidad y el comportamiento de la llama de etanol.

6.2. Comparación del modelo de celularidad con los resultados experimentales

En esta sección se comparan los resultados de los parámetros celulares otorgados por el modelo (analizados previamente en el punto anterior) con los resultados experimentales obtenidos en los puntos de ensayo propuestos por el diseño I-Óptimo. Esta comparación se plantea porque se quieren tener en cuenta más aspectos de la combustión además del punto de inicio de la celularidad y su consecuencia en la velocidad de combustión, que ha sido el aspecto principal en el planteamiento del modelo (el ajuste estadístico del modelo a los resultados experimentales se puede obtener en la tabla ANOVA recogida en el Anexo)

La comparación entre el modelo y los resultados experimentales se va a centrar en los siguientes aspectos:

- 1) Comparación de los resultados del modelo con la evolución de la velocidad obtenida para los pares de presión inicial y dosado relativo: la razón del planteamiento de esta comparación es que el modelo predice el inicio de la aceleración de la velocidad (tomado como inicio de la celularidad), pero no tiene en cuenta el tipo de aceleración sufrida por la misma (aceleración constante, aceleración a tramos, mayor o menor aceleración, etc.). Por lo tanto, se busca determinar si el modelo también puede predecir resultados en estos aspectos.
- 2) Comparación de los resultados del modelo con los resultados proporcionados por las imágenes de las combustiones obtenidas con fotografía Schlieren: el modelo está basado en la idea de que la aceleración de la velocidad de combustión se debe a la celularidad en el frente de llama. En este punto se busca la confirmación de que dicho planteamiento resulta adecuado y, por tanto, pretende dar respuesta a la cuestión de si el modelo, en consecuencia, también es capaz de predecir el cambio en la morfología del frente de llama debido a la aparición de la celularidad.

6.2.1. Comparación de los resultados del modelo con la evolución de la velocidad obtenida para diferentes condiciones de presión inicial y dosado relativo

En este primer punto de comparación de los resultados del modelo y los experimentales, se busca determinar la relación del modelo no sólo con el inicio del crecimiento de la velocidad de combustión (el cual es evidente, ya que el modelo tenía como base ese planteamiento) sino con otros aspectos del perfil de velocidad de combustión ya que se ha observado durante el desarrollo de este estudio ésta sufre diferentes tipos de evolución en función de las condiciones de ensayo.

Como se ha visto en general que la mayor influencia en el modelo la tiene el dosado relativo más que la presión inicial — aunque esta posee importancia —, se van a dividir los experimentos de manera general en función de su dosado; dentro de éste se dividirán en función de la presión inicial.

6.2.1.1. Comparación de puntos de dosado relativo pobre o ligeramente rico

En este apartado se estudiarán los puntos cuyo dosado relativo sea $0.8 \leq \phi \leq 1.1$. Se han seleccionado una serie de experimentos que son representativos de los puntos ensayados. Se busca tener al menos un punto en presión inicial baja (0.15 MPa), otro en presión inicial media (~ 0.195 MPa) y otro en presión inicial alta (≥ 0.25 MPa). En la siguiente Figura 6.6 se muestran las condiciones dentro de esta categoría entre las que se van a comparar los resultados del modelo y los resultados experimentales de la velocidad de combustión.

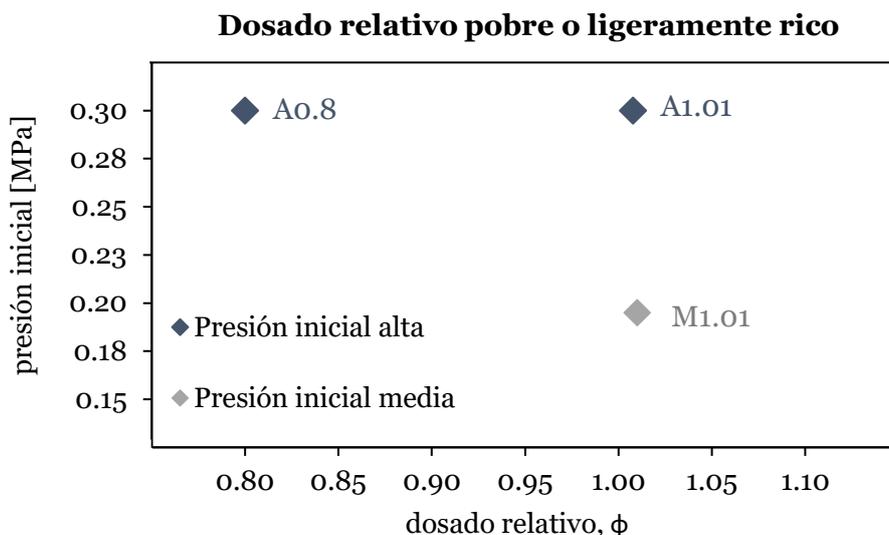


Figura 6.6. Mapa de las condiciones de dosado pobre o ligeramente rico en las que se comparan los resultados del modelo y los resultados de velocidad de combustión experimentales.

Los puntos se nombran con la letra A, M o B, según sean del grupo de alta, media o baja presión; los números que los acompañan están dispuestos según el dosado dentro de esa presión.

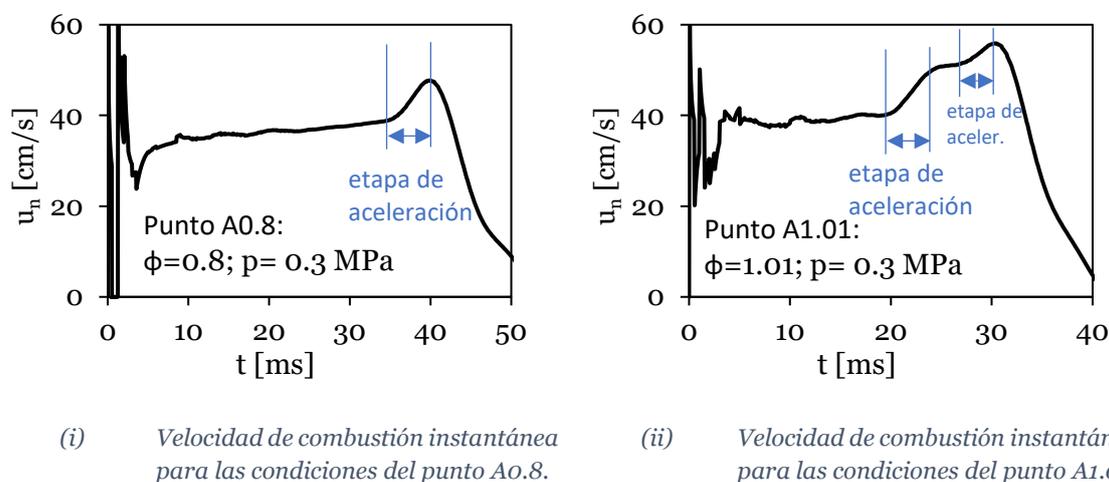


Figura 6.7. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones de los puntos A0.8 y A1.01.

Los resultados experimentales de la velocidad de combustión en función del tiempo de los procesos de combustión en las condiciones de presión inicial alta se recogen en la anterior Figura 6.7. Seguidamente, los resultados de ambos puntos para el modelo se recogen en la siguiente Tabla 6.6, en la cual se tienen los valores de los parámetros celulares.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Tabla 6.6. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones de los puntos A0.8 y A1.01.

	Punto A0.8 $\phi = 0.8$; $p=0.3$ MPa	Punto A1.01 $\phi = 1.01$; $p=0.3$ MPa
t_{trigg_cell} [ms]	34.03	20.5
t_{max} [ms]	39.72	30.29
t_{comb} [ms]	54.12	47.15
r_{cell} [cm]	5.43	4.47
SCD	0.13	0.32
CCS	0.37	0.57

El primer aspecto que merece un comentario se refiere a la evolución de la velocidad de combustión en ambos puntos (Figura 6.7); se observa que para el punto A0.8, de dosado relativo pobre (0.8), la aceleración a partir del tiempo de activación celular de 34.03 ms (según el modelo) resulta aproximadamente constante puesto que no se aprecian cambios de pendiente significativos hasta llegar a tiempo de máxima dominancia celular, es decir, de máxima velocidad: 39.72 ms de acuerdo con el modelo. En cambio, en el punto A1.01 se pueden apreciar en la gráfica de velocidad instantánea dos periodos de aceleración entre el tiempo de activación celular de 20.5 ms hasta el tiempo de máxima dominancia celular (máxima velocidad) de 30.29 ms, según resultados del modelo. Los periodos de aceleración “por tramos” siguen la dinámica aproximada de una etapa de aceleración constante, una etapa de meseta y una segunda etapa de aceleración constante. Una primera clasificación de las aceleraciones sería: “aceleración en una etapa” y “aceleración en dos etapas”, ver Figura 6.7.

Se puede resaltar también que la velocidad media de la combustión en las condiciones de A0.8 es menor que la velocidad media en las condiciones de A1.01; el parámetro celular que muestra esta diferencia es el tiempo de combustión (t_{comb}), donde se ve que el punto A1 tiene un tiempo de combustión mayor que el A1.01 (54.12 ms frente a 47.15 ms) porque su combustión es más lenta.

En este punto no sólo se pueden comparar los resultados del modelo y los experimentales, sino también entre ellos mismos. Para realizar esto se recurre primeramente al análisis de los parámetros de carácter relativo, como es el radio celular y,

especialmente, los parámetros adimensionales SDC y CCS. Para el punto A1 el radio celular es mayor que en el punto A1.01, significando que para el primero la celularidad aparece más tarde desde el punto de vista del tamaño desarrollado por el frente de llama. Con respecto al parámetro del periodo de dominancia celular (SCD), se puede apreciar que el del punto A0.8 es un 19% menor el del A1.01, de lo que se podría concluir que, como la celularidad domina el proceso de combustión durante un periodo mayor en el punto A1.01, ésta podría tener la oportunidad desarrollarse más, lo que se traduciría en los diferentes periodos de aceleración observados. Se profundizará en este punto cuando se comparen los resultados experimentales de la velocidad de combustión con los de las imágenes, donde se podrá apreciar el desarrollo morfológico.

Al igual que ocurre con la dominancia celular, para el parámetro que modela el periodo o etapa de combustión celular (CCS), también existe una diferencia entre los puntos A0.8 y A1.01. Aquí también el CCS para el primero resulta un 20% menor que para el segundo, por lo que se podría extraer una conclusión similar a la ya presentada. En el punto A0.8 existe una diferencia de 0.18 entre el SCD y el CCS, mientras que en el punto A1.01 la diferencia es de 0.25. De esto se deduce que la segunda combustión existe un periodo más largo en el que la llama, a pesar de ser celular, no domina ya el proceso de combustión, porque existen otros factores con mayor influencia, como es el efecto de la geometría de la cámara de combustión.

A continuación, se comparan los resultados del modelo y los experimentales para el punto M1, de presión media (0.195 MPa) y dosado muy cercano al estequiométrico (1.01).

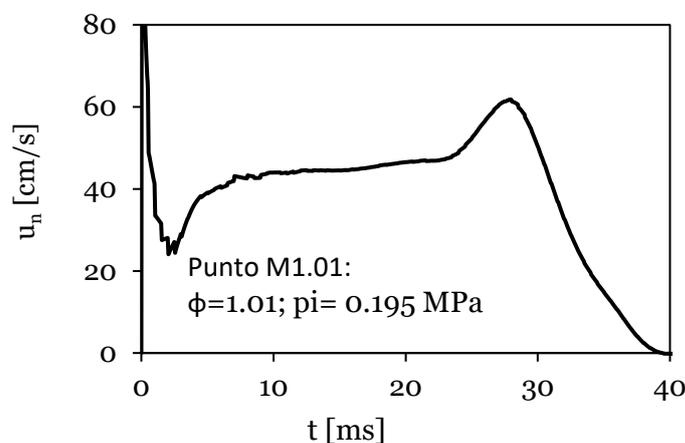


Figura 6.8. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto M1.01.

En la Figura 6.8 anterior se representa gráficamente la velocidad instantánea de combustión obtenida experimentalmente para las condiciones del punto M1.01 de 1.01 de dosado relativo y 0.195 MPa de presión inicial. A continuación, en la Tabla 6.7 se muestran los resultados del modelo.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Tabla 6.7. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones del punto M1.01.

Punto M1.01	
$\phi = 1.01$; $p=0.195$ MPa	
t_{trigg_cell} [ms]	22.64
t_{max} [ms]	27.66
t_{comb} [ms]	45.70
r_{cell} [cm]	5.30
SCD	0.16
CCS	0.48

Al igual que la evolución que se apreciaba en la velocidad de combustión del punto A1, en el punto M1.01 se observa un aumento de la velocidad constante, sin variaciones de pendiente entre el tiempo de activación celular, que de acuerdo con el modelo es de 22.64 ms, hasta el tiempo de máxima dominancia celular que marca el pico de velocidad que el modelo dicta que es 27.66 ms. Para el análisis de estos resultados del punto M1.01, se va a comparar, además, éstos con aquellos obtenidos para los puntos A1 y A2; es especialmente interesante comparar el punto M1 con el punto A0.8, ya que éstos poseen, como se ha indicado, el mismo patrón de aceleración. Teniendo como referencia entonces los resultados del punto A0.8 (condiciones de ensayo: $\phi = 0.8$; $p=0.3$ MPa), se pueden determinar qué parámetros celulares son importantes para la predicción del tipo de aceleración debido a la celularidad.

La duración de la combustión del punto de estudio M1 es menor que la del punto A0.8, a pesar de que el dosado relativo es el mismo. Al tener una presión inicial menor en M1.01 que en A0.8, la primera combustión se desarrolla más rápido, teniendo un tiempo de combustión de 45.7 ms frente a 54.12 ms. Esto se confirma teniendo en cuenta que la velocidad instantánea de M1 es mayor que la de A0.8 (ver Figura 6.7 (i) y Figura 6.8).

El radio celular, al igual que en el punto A1, en las condiciones de M1.01 éste se acerca al límite máximo de 5.7 cm, pues tiene un valor de 5.3 cm según el modelo. Con respecto a los parámetros adimensionales, se tiene para el punto M1.01 un periodo de dominancia celular SCD = 0.16, valor similar al del punto A0.8, que era de 0.13, frente al valor de A1.01 que era mayor (de 0.32).

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Si se comparan los valores del parámetro de periodo de combustión celular (CCS) de los 3 puntos, se puede ver que la diferencia entre los dos tipos de aceleración, la uniforme de A0.8 y M1.01 por un lado y la de varios periodos de A1.01 por otro, no es tan clara como en el parámetro anterior de SCD, ya que los valores de M1.01, A0.8 y A1.01 son de 0.48; 0.37 y 0.57 respectivamente. Con esto podría parecer que el parámetro que más ayuda a determinar el tipo de aceleración y, por tanto, con el nivel de desarrollo de la celularidad, sea el de la dominancia celular SCD: podría ser que un valor bajo, menor de 0.2 indique una aceleración uniforme, mientras que un valor más elevado indique varios periodos de aceleración.

Por lo tanto, con este primer análisis se puede formular la hipótesis de que, tanto el SCD como el CCS pueden estar relacionados con la capacidad de desarrollo que tiene la celularidad en una combustión.

Por último, en este punto se analizan los resultados para las condiciones de presión inicial baja del punto B1.1 ($\phi=1.1$; $p=0.15$).

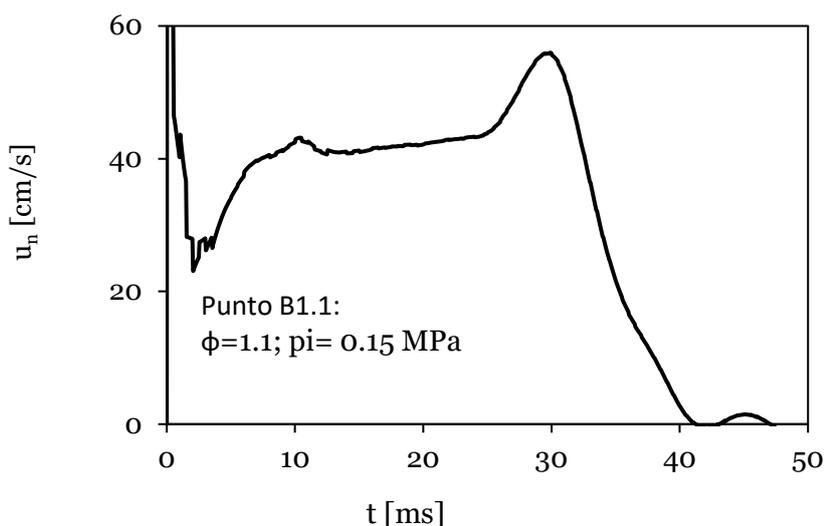


Figura 6.9. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto B1.

En la Figura 6.9 se representa la evolución temporal de la velocidad de combustión bajo las condiciones de dosado relativo igual a 1.1 y presión inicial de 0.15 MPa del punto B1. A continuación, en la Tabla 6.8, se recogen los resultados del modelo para esas mismas condiciones.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Tabla 6.8. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones del punto B1.1.

Punto B1.1	
$\phi = 1.1; p=0.15$ MPa	
$t_{\text{trigg_cell}}$ [ms]	23.76
t_{max} [ms]	28.75
t_{comb} [ms]	43.47
r_{cell} [cm]	5.21
SCD	0.14
CCS	0.45

Tanto los valores de la dominancia celular (SCD) como de la llama celular (CCS) del punto de ensayo de B1.1 son similares a los de la gráfica del punto M1.01 (Figura 6.8), como también lo es la curva de velocidad y el tipo de aceleración “en una etapa” que sufre.

6.2.1.2. Comparación de puntos de dosado relativo rico menor a 1.3

En este punto se van a comparar los resultados obtenidos del modelo y de los experimentos en condiciones de dosado relativo rico, mayor a 1.2 pero menor a 1.3; al igual que para dosado pobre, se han seleccionado experimentos que estén en diferentes rangos de presión. En la Figura 6.10 se muestran las condiciones seleccionadas. Al igual en el apartado anterior, el código de designación de los puntos se forma teniendo en cuenta en qué nivel de presión inicial se encuentra (alta “A”, media “M” y baja “B”), seguido de su dosado relativo.

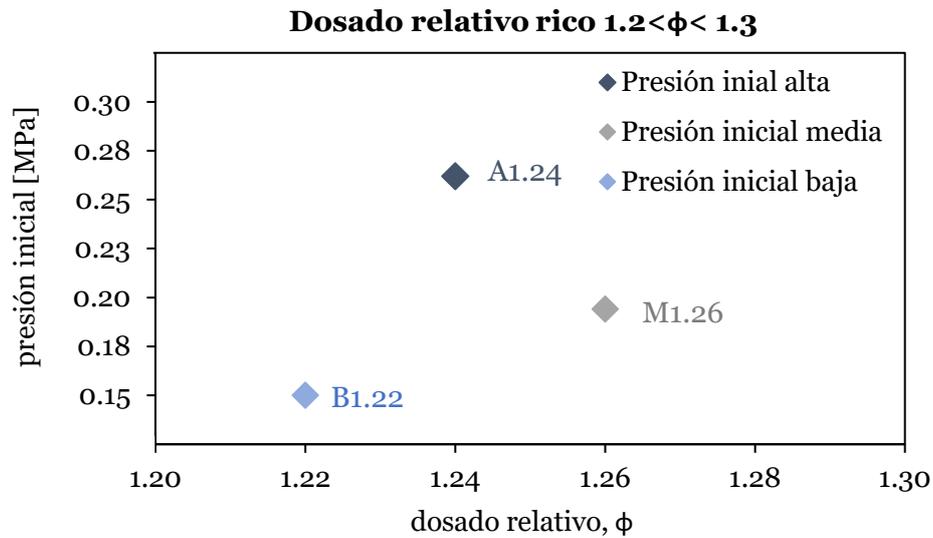
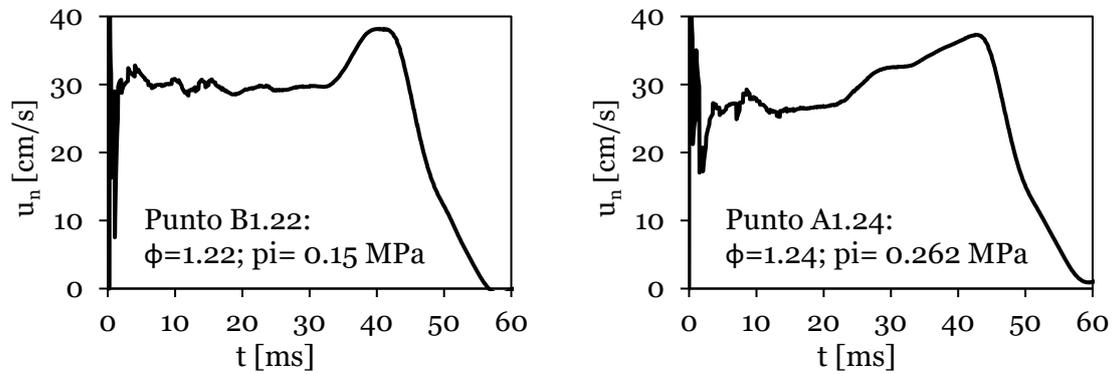


Figura 6.10. Mapa de las condiciones de dosado rico menor de 1.3 en las que se comparan los resultados del modelo y los resultados de velocidad de combustión experimentales.

En primer lugar, se comparan los resultados obtenidos para los puntos A1.22 y B1.22 tanto experimentales como del modelo. En la siguiente Figura 6.11 se muestran sendas velocidades de combustión instantánea.



(i) Velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto B1.22.

(ii) Velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto A1.24.

Figura 6.11. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones de los puntos A1.22 y B1.22.

En la Tabla 6.9 se encuentran en paralelo los resultados del modelo para los puntos A1.24 y B1.22, así como sus condiciones.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

Tabla 6.9. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones de los puntos A1.22 y B1.22.

	Punto B1.22 $\phi = 1.22; p=0.15$ MPa	Punto A1.24 $\phi = 1.24; p=0.262$ MPa
t_{trigg_cell} [ms]	32.63	22.70
t_{max} [ms]	40.69	43.65
t_{comb} [ms]	57.59	65.31
r_{cell} [cm]	4.91	3.91
SCD	0.21	0.45
CCS	0.45	0.63

Lo primero que llama la atención de la evolución de las velocidades es que no siguen exactamente el patrón tan claro de aceleración que se ve en las combustiones analizadas de dosado pobre o estequiométrico.

En las condiciones de B1.22 (Figura 6.11 (i)), la aceleración podría considerarse uniforme, como la obtenida en los puntos A0.8, M1.01 o B1.1, pero se observa cómo el valor máximo no se alcanza en un único punto, sino que se mantiene constante un periodo (meseta), recordando a la dinámica existente entre diferentes etapas de aceleración vistas en la combustión de condiciones de A1.01, visto en el apartado anterior (Figura 6.7 (ii)). Así mismo, la gráfica mostrada en la Figura 6.11 (ii) en las condiciones de A1.24, se asemeja a la dinámica de velocidad con aceleración “por tramos”, aunque destaca que el segundo periodo de aceleración es más largo y aunque, de manera sutil, ésta no posee una evolución tan uniforme o constante como en la primera etapa (esto se analiza con más detalle en un apartado posterior).

En cuanto a la comparación de los datos experimentales con el modelo, se observa que los parámetros celulares temporales resultados del modelo se ajustan a lo observado en las gráficas en ambos casos. Comparando ambos tiempos de combustión se podría deducir que la velocidad media del punto B1.22 es mayor que la de A1.24. Los parámetros adimensionales se analizan posteriormente ya que se considera especialmente interesante el comparar los parámetros adimensionales de dominancia celular (SDC) y de periodo de combustión celular (CCS) no sólo entre las combustiones estudiadas en el presente punto, sino compararlo con aquellas de dosado pobre o estequiométrico que representan el

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

modelo de cada tiempo de aceleración definido (aceleración uniforme o aceleración por tramos). Por esta razón, se analizarán después de haber presentado los resultados de la presión media del punto M1.26.

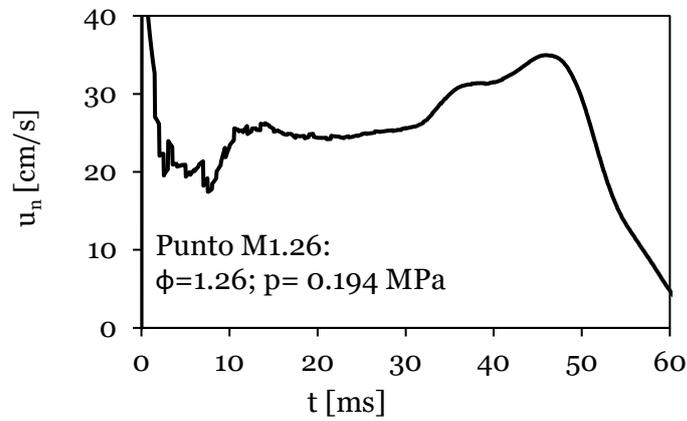


Figura 6.12. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto M126.

En la Figura 6.12 se muestran los resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea obtenidos para las condiciones del punto M1.26 ($\phi=1.26$; $p= 0.194$ MPa). Los resultados del modelo se muestran a continuación en la

Tabla 6.10. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones del punto M1.26.

Punto M1.26

$\phi = 1.26$; $p=0.194$ MPa

t_{trigg_cell} [ms]	33.60
t_{max} [ms]	47.43
t_{comb} [ms]	69.32
r_{cell} [cm]	4.54
SCD	0.32
CCS	0.53

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

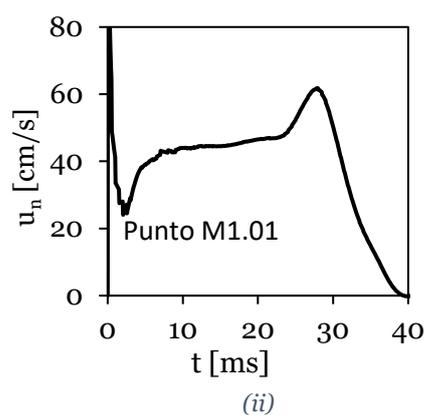
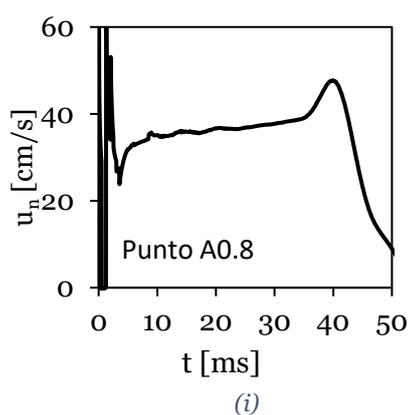
En la gráfica de la evolución de la velocidad se puede ver cómo ésta tiene una aceleración dividida en varias etapas que encaja bien con lo que se ha denominado como aceleración “por tramos” (visto también en el punto A1.01 de la Figura 6.7 (ii)). Se puede ver cómo el modelo predice correctamente los parámetros celulares temporales.

Como se ha adelantado, lo más interesante para este análisis que pretende comprobar la eficacia del modelo para la predicción del tipo de evolución que sufre la velocidad de combustión debida a la celularidad, en la siguiente Tabla 6.11 se recopilan los valores de los parámetros adimensionales para facilitar la comparación entre los tipos de aceleración observados, ya que éstos están resultando ser los parámetros más significativos para la clasificación de tipos de aceleración, especialmente el SCD.

Tabla 6.11. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones de los puntos A1.22 y B1.22.

	Aceleración en una etapa			Aceleración en dos etapas		
	A0.8 $\phi = 0.8;$ $p=0.3$ MPa	M1.01 $\phi = 1.01;$ $p=0.195$ MPa	B1.22* $\phi = 1.22;$ $p=0.15$ MPa	A1.01 $\phi = 1.01;$ $p=0.3$ MPa	A1.24* $\phi = 1.22;$ $p=0.26$ MPa	M1.26 $\phi = 1.26;$ $p=0.194$ MPa
SCD	0.13	0.16	0.21	0.32	0.45	0.32
CCS	0.37	0.48	0.45	0.57	0.63	0.53

En la siguiente Figura se recogen las curvas de velocidad de los puntos de la Tabla 6.11.



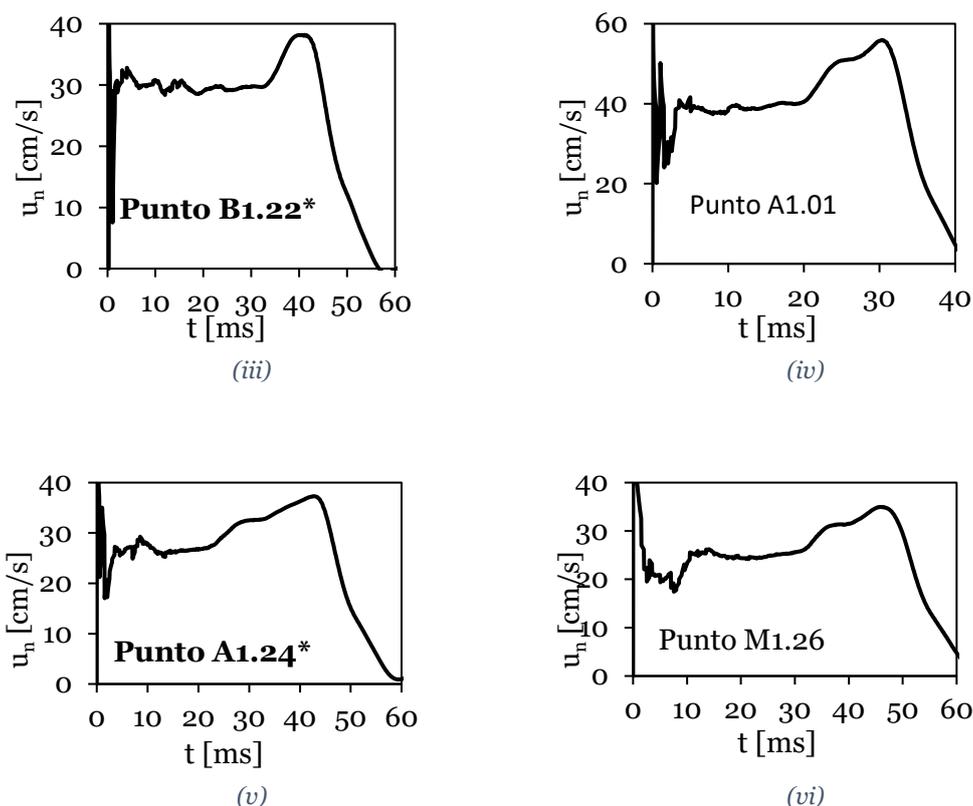


Figura 6.13. Gráficas de la velocidad de combustión de “una etapa” de aceleración (i) y (ii); de “transición” entre una y dos etapas (iii); de “dos etapas de aceleración” (iv) y (vi); y de “transición” entre dos etapas y “multietapa” (v).

En la tabla y en la figura anteriores se han resaltado dos de las combustiones analizadas en este punto, ya que son las dos que no encajan exactamente con el estándar de aceleración constante de una etapa ni con el de aceleración con dos etapas.

De los valores de los parámetros se destaca que, en el SCD, las combustiones que claramente se corresponden con el patrón de aceleración en una etapa (correspondientes a los puntos de A0.8 y M1.01) tienen un periodo de dominancia celular SCD menor a 0.2. Esto significa que, de todo el periodo temporal entre el inicio de la combustión y el punto de máxima influencia celular determinado en el instante de velocidad máxima, para obtener una aceleración en una etapa, la celularidad sólo puede dominar durante un 20% del tiempo. Se define este límite superior de 0.2 para el SCD puesto que para 0.21 obtenido en el punto B1.22, la dinámica de la velocidad cambia ligeramente, obteniendo una evolución de aceleración constante para luego pasar a una de “meseta” o velocidad constante; este punto B1.22 se podría considerar como un comienzo de transición entre una aceleración de una etapa y una aceleración en dos etapas.

Con respecto a la aceleración en dos etapas, se observa que la dominancia celular es, al menos, de un valor de 0.32; el límite superior se podría situar por debajo de 0.45, ya que es el valor que corresponde a las condiciones de A1.24, cuya evolución de velocidad no se

puede considerar únicamente en dos etapas de aceleración constante (en la segunda etapa se observa una dinámica ligeramente diferente). Esto se trata con más detalle en un apartado posterior).

En cuanto al parámetro del periodo de combustión celular, CCS, se puede decir a grandes rasgos que las combustiones que poseen una velocidad de combustión cuya dinámica se asemejan a la aceleración en una etapa presentan un $CCS < 0.5$ y aquellas que se asemejan a la de dos etapas tienen un $CCS > 0.5$. Sin embargo, este patrón no es tan determinante como el SCD a la hora de clasificación detallada de los patrones de aceleración, ya que, si se estudia la Tabla 6.11, se observa, por ejemplo que el CCS de la combustión en transición del punto B1.22 se encuentra entre el CCS de A0.8 y el CCS de M1.01; por lo tanto, no se puede establecer un límite de este parámetro para definir los tipos de aceleración, al menos en lo referente a la de una etapa.

6.2.1.3. Comparación de puntos de dosado relativo muy rico

Similarmente a lo que se ha planteado en los puntos anteriores donde se estudiaban dosados relativos pobres y ricos hasta 1.3, en este apartado se seleccionan experimentos de dosado relativos muy ricos, correspondientes a 1.4. Las condiciones y el nombre de los puntos seleccionados se muestran en la Figura 6.14.

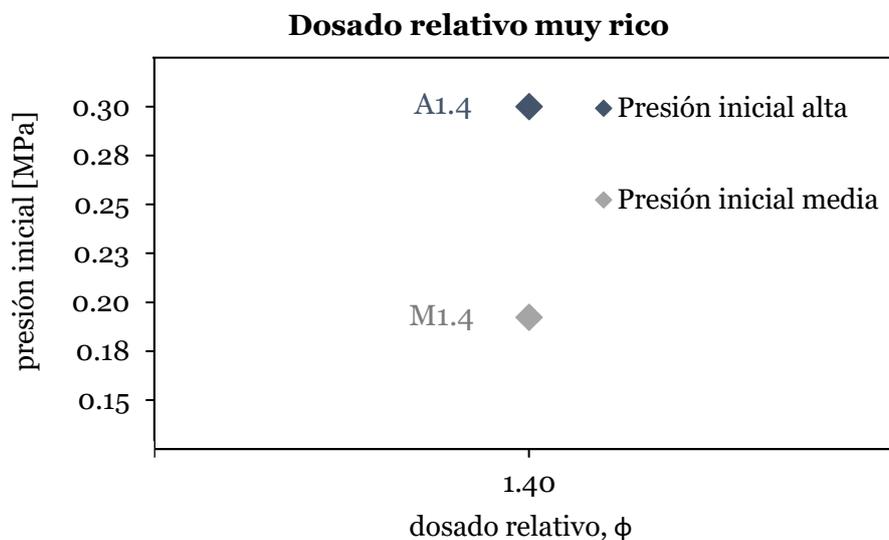


Figura 6.14. Mapa de las condiciones de dosado muy rico en las que se comparan los resultados del modelo y los resultados de velocidad de combustión experimentales.

Los resultados experimentales de la evolución de la velocidad de combustión en función del tiempo se recogen para las condiciones de los puntos A1.4 y M1.4 en la siguiente Figura 6.15.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

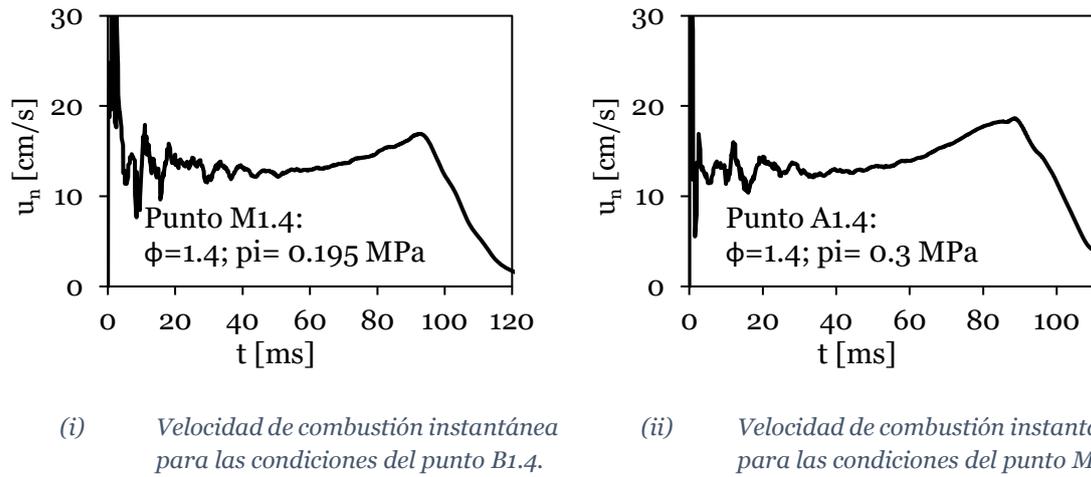


Figura 6.15. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones de los puntos M1.4 y A1.4.

La Tabla 6.12 recoge los resultados del modelo para las condiciones de presión media y alta para dosados relativos muy ricos.

Tabla 6.12. Resultados de los parámetros celulares del modelo para las condiciones de los puntos B1.4, M1.4 y A1.4.

	Punto M1.4 $\phi = 1.4; p=0.195 \text{ MPa}$	Punto A1.4 $\phi = 1.4; p=0.3 \text{ MPa}$
$t_{\text{trigg_cell}}$ [ms]	72.59	53.62
t_{max} [ms]	86.19	83.87
t_{comb} [ms]	119.19	115.17
r_{cell} [cm]	5.35	4.33
SCD	0.16	0.36
CCS	0.39	0.54

En primer lugar, llama la atención la evolución de la velocidad mostrada para ambas condiciones en la Figura 6.15, ya que se ve cómo esta es muy diferente a las vistas anteriormente. En ella la evolución es mucho más suave y progresiva y no se da un punto tan claro de cambio en el crecimiento de la velocidad como se ha dado en todos los casos vistos anteriormente. Se tiene entonces un nuevo tipo de aceleración “progresiva” para dosados muy ricos de combustiones de etanol independientemente de la presión inicial.

El modelo proporciona un punto de inicio razonable si se tiene en cuenta las gráficas obtenidas experimentalmente de la velocidad de combustión, aunque hay que recordar que al haber empleado un modelo I-Óptimo, la predicción en los extremos del área de estudio es menor debido a que se tiene un menor número de muestras en esta zona. Si sólo se tiene en cuenta los valores de la dominancia celular SCD y de la etapa de combustión celular CCS según lo dicho anteriormente, las combustiones se tendrían que clasificar como de una etapa la del punto A1.4 y de dos etapas la del punto M1.4; sin embargo, como ya se ha explicado, en estas condiciones se da otro tipo de evolución de la velocidad diferente a las anteriores. Se requiere por tanto de otro parámetro celular que indique que se trata de una aceleración progresiva. Un posible criterio podría ser tener en cuenta el tiempo de activación celular, el cual se observa mucho más elevado (entre 30 y 40 ms más que en combustiones anteriores). Este mismo planteamiento sería válido también con el tiempo de combustión, ya que en esencia se está queriendo decir lo mismo: las combustiones que desarrollan este tipo de aceleraciones, son combustiones lentas.

En los últimos experimentos analizados de dosado muy rico, se ve que el modelo no es tan representativo como en las otras condiciones y resulta necesario la búsqueda de otro criterio complementario para determinar el inicio de la celularidad, como por ejemplo el análisis de las imágenes Schlieren. Esto se trata en el siguiente capítulo de resultados.

En este apartado se han comparado los resultados del modelo con los resultados de la velocidad de combustión obtenidos experimentalmente. Como conclusión general de este de o se puede decir que el modelo en general concuerda bien con los resultados experimentales de velocidad de combustión; además, aunque está construido sobre la idea del inicio de la celularidad y cómo ésta afecta a la velocidad de combustión, se ha demostrado que también proporciona información sobre cómo se está produciendo esa aceleración de la velocidad, siendo un criterio clave la determinación de la dominancia celular (SCD), complementado con el tiempo de activación celular o la duración de la combustión.

6.2.2. Comparación de los resultados del modelo con los resultados proporcionados por las imágenes de las combustiones obtenidas

Como se explicó anteriormente, el modelo está basado en la idea de que la aceleración de la velocidad de combustión se debe a la celularidad en el frente de llama. En este punto se busca la confirmación de la adecuación de dicho planteamiento y, por tanto, pretende dar respuesta a la cuestión de si el modelo, en consecuencia, también es capaz de predecir el cambio en la morfología del frente de llama debido a la aparición de la celularidad. Como parámetro clave para el estudio se tiene el radio celular, ya que es el que hace las veces de

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

“puente” entre los resultados del modelo con las imágenes. Se considera, por tanto, ahora la coherencia entre los parámetros celulares obtenidos por los modelos y las imágenes de Schlieren obtenidas experimentalmente en determinadas condiciones. El objetivo de este análisis es confirmar con la aparición de la celularidad en las imágenes si el modelo predice correctamente ese instante.

Para este análisis se selecciona en primer lugar un grupo de tres experimentos de dosado relativo variable y una misma presión inicial. Las condiciones, así como los parámetros celulares obtenidos por el modelo, se presentan en la Tabla 6.13.

Tabla 6.13. Resultados del modelo para condiciones de presión media (0.195 MPa) y diferentes dosados relativos: estequiométrico, rico y muy rico.

	a	b	c
	$\phi=1.01;$ $p=0.195$ MPa	$\phi=1.26;$ $p=0.195$ MPa	$\phi=1.40;$ $p=0.195$ MPa
t_{trigg_cell} [ms]	23.09	33.42	72.67
t_{ul_max} [ms]	27.73	47.43	86.19
t_{comb} [ms]	45.17	68.78	118.61
r_{cell} [cm]	5.35	4.53	5.35
SCD	0.15	0.32	0.17
CCS	0.47	0.53	0.39

La Figura 6.16 muestra las imágenes correspondientes al radio celular para cada una de las condiciones expuestas en la Tabla 6.13. Las imágenes de la columna de la izquierda corresponden a un radio 0.5 cm menor que el celular y, paralelamente, las imágenes de la columna de la derecha se corresponden con un radio 0.5 cm mayor que el celular. La comparación entre esas imágenes permite estudiar cualitativamente la evolución y la morfología de la celularidad.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

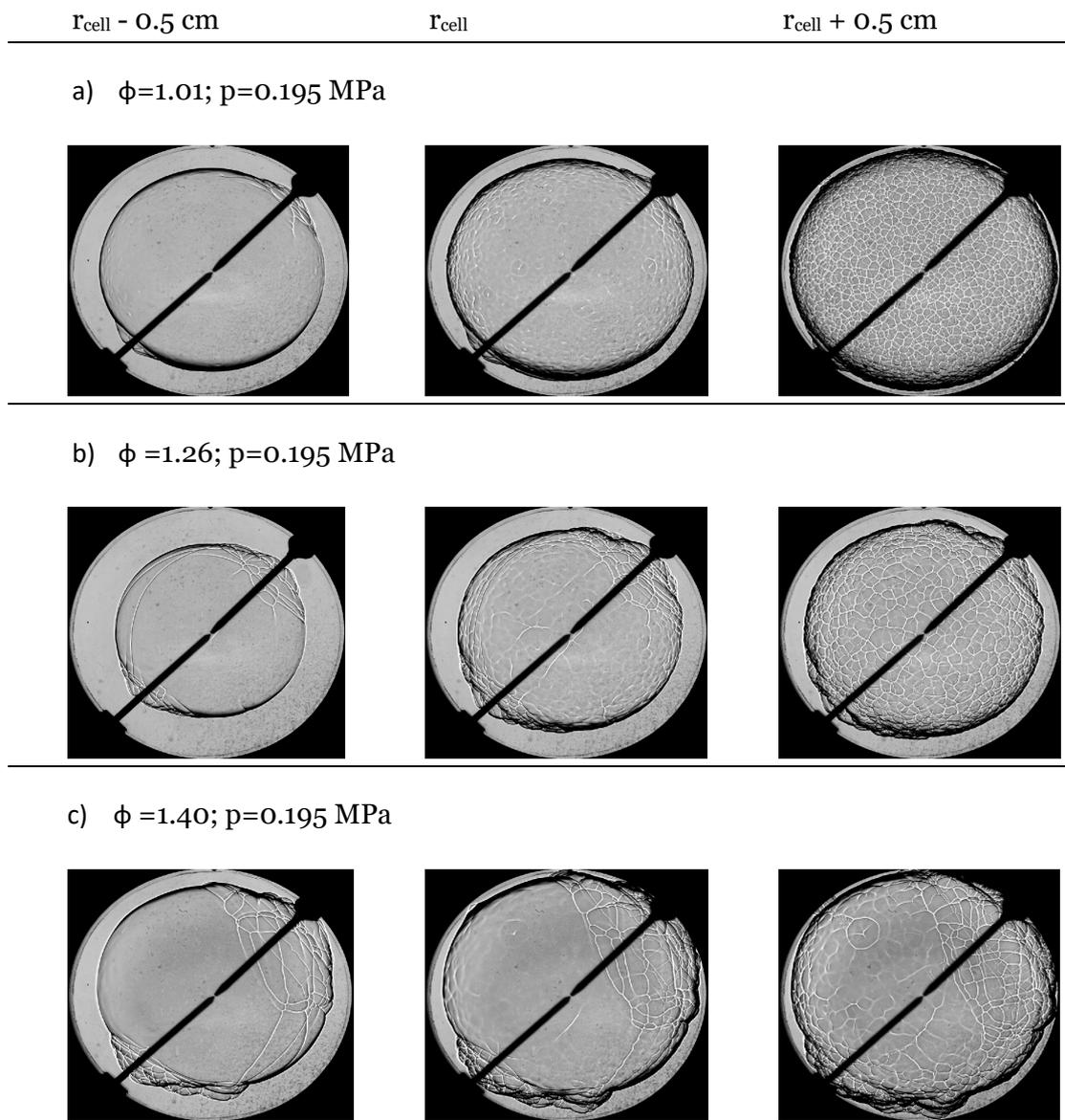


Figura 6.16. Imágenes Schlieren de la aparición de la celularidad bajo 3 condiciones diferentes.

Observando las imágenes de la Figura 6.16, puede apreciarse que la celularidad de la Figura 6.16 (a) es una celularidad homogénea, mientras que en (c) se observa una forma heterogénea debida al crecimiento previo de las grietas cerca de los electrodos. La celularidad en (b) podría considerarse una transición entre (a) y (c). En el radio que el modelo considera celular, en todos los casos, se observan los cambios iniciales en la forma de la morfología de la llama debidos al inicio de la celularidad, que comienza a desarrollarse. En la imagen anterior no se aprecia celularidad en ninguna de las condiciones mientras que en la imagen posterior se aprecia el desarrollo de un frente de llama completamente celular. Los resultados del modelo para el de radio celular como de tiempo de activación celular pueden predecir correctamente la aparición de la celularidad en esas imágenes.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

En el capítulo 5 de esta Tesis, se investigaron estas morfologías de celularidad (homogénea o heterogénea) concluyendo que estaban relacionadas con el tipo de inestabilidades que causaban esa celularidad. La Figura 6.16 (a) muestra una llama celular homogénea con una forma esférica definida, ya que no se aprecian arrugas en la superficie, y las celdas están homogéneamente repartidas; este tipo de morfología se asocia al efecto hidrodinámico (explicado en la sección 5.2). En cambio, la Figura 6.16 (c) contiene una estructura celular del frente de llama con grietas a gran escala, así como celdas de menor escala, lo que conduce a un agrupamiento de celdas en el frente de llama. Este tipo de morfología heterogénea está asociada al efecto térmico-difusivo, tal y como se detalla en la sección 5.2, cuyos resultados se encuentran publicados correspondientes a la referencia [45].

Para verificar que el modelo propuesto puede identificar correctamente el inicio de la celularidad en diferentes condiciones, se estudia una combustión extra con una celularidad de transición entre una homogénea y una heterogénea. Sus condiciones y los parámetros celulares se encuentran en la Figura 6.14.

Tabla 6.14. Parámetros celulares del modelo para un dosado relativo de 1.24 y 0.262 MPa de presión inicial.

	$\phi = 1.24;$
	$p = 0.262 \text{ MPa}$
t_{trigg_cell} [ms]	22.721
r_{cell} [cm]	3.92
t_{max} [ms]	43.66
t_{comb} [ms]	64.53
SCD	0.45
CCS	0.635

Analizando el radio celular, se observa que es pequeño (menos de 4 cm). Así lo confirman las imágenes que se muestran a continuación en la Figura 6.17. Existen algunas grietas antes del radio celular y las celdas no son completamente homogéneas después del radio celular. Se requeriría de un análisis más extenso para cuantificar la contribución de ambos efectos a la morfología celular y estudiar el origen y la naturaleza de las inestabilidades desarrolladas en las llamas esféricas de etanol.

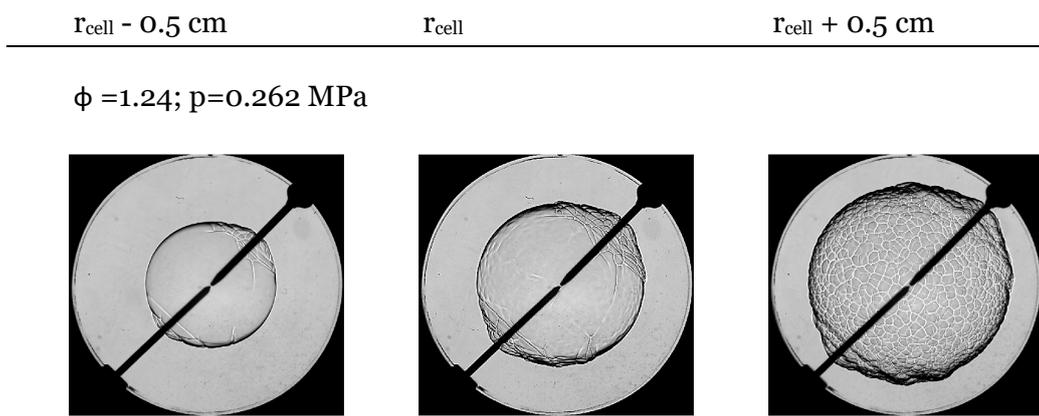


Figura 6.17. Schlieren images during the cellularity appearance for $\phi = 1.24; p = 0.262 \text{ MPa}$

Las imágenes verifican que el modelo predice correctamente el radio celular, cuando la celularidad empieza a modificar el frente de llama. Además, esto confirma que la celularidad afecta a la velocidad de combustión de la forma que se expuso en la primera sección de este trabajo.

En un análisis de un apartado posterior de esta Tesis doctoral se realiza una comparación más exhaustiva para determinar la posible relación entre las diferentes aceleraciones observadas en las velocidades de combustión y los tipos de celularidad advertidos en las imágenes; todo ello teniendo en cuenta los resultados proporcionados por el modelo para diferentes condiciones.

6.3. Comparación del modelo de celularidad con otros autores

Para concluir este capítulo de resultados del estudio de estabilidad de la llama en llamas de etanol, y una vez comprobado que las predicciones de los modelos I-óptimos son consistentes con los resultados experimentales mostrados a través de las imágenes, se comparan los resultados proporcionados por el modelo con los obtenidos por otros autores. Como el radio celular es el parámetro celular más calculado en la bibliografía para estudiar la aparición de la celularidad en llamas esféricas, se toma como referencia para la comparación; además, como éste ha sido obtenido con el tiempo de activación celular derivado de la evolución de la velocidad, se verifican indirectamente otros parámetros estudiados. En el trabajo de Zhang et al. [58] se muestra una investigación de las inestabilidades en llamas de etanol. Este trabajo es la referencia empleada para comparar y validar los resultados del modelo propuesto en esta Tesis. En ese trabajo, Zhang et al. [58] calcularon el radio celular (lo que llamaron radio crítico) aplicando la teoría de inestabilidades que se desarrollaron en el capítulo 2 de esta Tesis.

6. Resultados del estudio de estabilidad de la llama

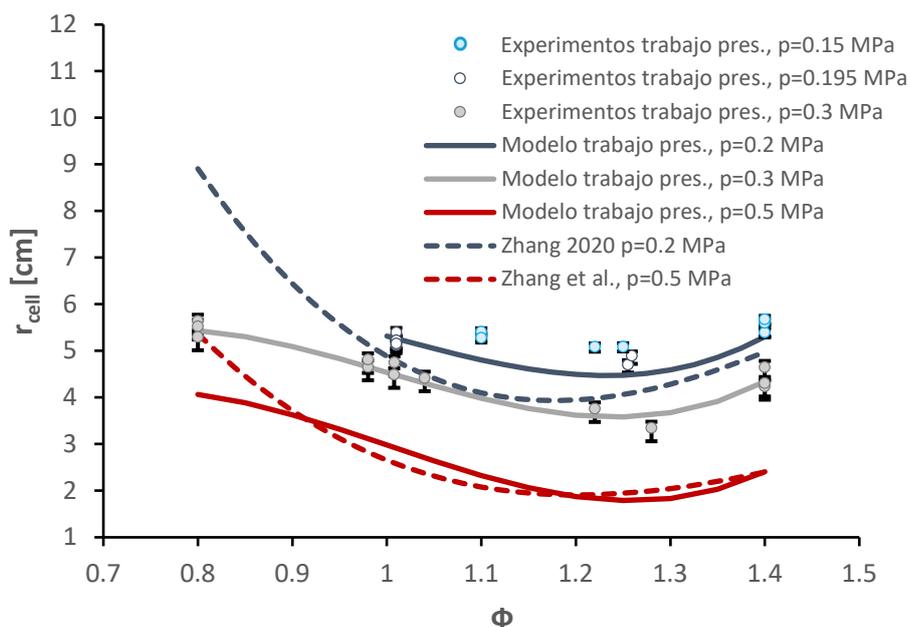


Figura 6.18. Comparación entre el radio celular dado por el modelo y por los experimentos realizados en la presente Tesis (pres.) y aquellos obtenidos por Zhang et al. [58] numéricamente y aplicando la teoría de inestabilidades.

La figura 11 muestra el gráfico comparativo de los resultados del radio celular del modelo propuesto, los resultados obtenidos directamente de los experimentos y los resultados teóricos de Zhang et al. Las líneas discontinuas corresponden al estudio de Zhang et al, mientras que las líneas continuas se refieren a los resultados del modelo del presente trabajo para el radio celular. Por otro lado, los puntos son los resultados obtenidos directamente de los experimentos (con la incertidumbre correspondiente). El color negro se corresponde con 0.2 MPa de presión inicial; el azul con 0.3 MPa y el naranja con 0.5 MPa. Zhang et al. no obtuvieron resultados para 0.3 MPa.

La tendencia global para el radio celular es la misma para todos los resultados. Zhang et al. no dieron información explícita sobre la ecuación que relaciona el radio celular, la presión y el dosado relativo, pero sus resultados podrían aproximarse a una curva polinómica con un término cúbico de dosado relativo (ϕ^3) con un $R^2=0.98$ para ambas presiones iniciales. Se trata de la misma dependencia que en el modelo para el radio celular presentado en la Figura 6.3. Las curvas de 0.5 MPa no están tan bien ajustadas como las correspondientes a 0.2 MPa. Esto podría deberse a que el modelo presentado en esta Tesis está calculado para un rango de presión de 0.15 MPa a 0.3 MPa. Aun así, la tendencia global es la misma, y se ve en ambos casos que, cuanto mayor es la presión inicial, menores son los radios críticos.

Las curvas de 0.2 MPa se ajustan adecuadamente para dosados relativos ricos y discrepan ligeramente en dosados cercanos al estequiométrico, donde los resultados de Zhang subestiman el valor del radio celular. El máximo error relativo que se da en esta condición de presión inicial es de alrededor del 12% entre 1 y 1.1 de dosado relativo, lo que

no resulta una diferencia muy grande teniendo en cuenta que se comparan resultados teóricos y experimentales. Los resultados para 0.3 MPa del modelo de la presente Tesis se sitúan entre los resultados de 0.2 MPa y 0.5 MPa, lo que concuerda perfectamente con el estudio de Zhang et al., que afirma que la presión reduce el valor del radio celular. Como conclusión de esta sección, se puede decir que las predicciones del radio celular obtenidas con el presente modelo concuerdan con los resultados obtenidos por Zhang et al. [58].

Como conclusiones generales del capítulo se tiene que las tendencias experimentales principales muestran que el dosado relativo es el factor predominante en la aparición de estructuras celulares, seguido de la presión inicial. La presión inicial amplifica el desarrollo de inestabilidades, de modo que, a mayores presiones iniciales, se amplía el rango de dosado relativo en el que se desarrollan estructuras celulares. Esto se concluye a partir de los límites de dosado relativo ($\phi \in (0.8; 1.4)$) y presión inicial ($p \in (1.5; 3)$ bar) observados en los experimentos del estudio. En cuanto a los valores máximos de los parámetros celulares, estos se obtienen en el lado pobre de las mezclas (lean) y bajo la máxima presión inicial. Por otro lado, las combustiones con una etapa más prolongada de desarrollo celular se presentan en condiciones de presiones iniciales elevadas y dosados relativos cercanos a 1.2. Los modelos de los parámetros celulares fueron validados mediante comparación con los resultados experimentales de las imágenes, demostrando que pueden predecir con precisión el inicio de la celularidad en la llama. Esto sugiere que el instante de aceleración de la velocidad de combustión es un criterio adecuado para establecer el tiempo de inicio de la celularidad.

Además, el modelo proporciona información adicional sobre la morfología de las estructuras celulares, destacando que ésta no es uniforme y depende de los valores de los parámetros celulares. Por último, el modelo del radio celular fue validado mediante comparación con resultados previos reportados en la literatura. También se ha identificado la etapa de dominancia celular (SCD) como un posible parámetro característico para describir el tipo de aceleración que experimenta la velocidad de combustión debido a la celularidad. Este parámetro se debe completar con la obtención del tiempo de activación de la celularidad (t_{trigg_cell}), ya que sólo por el parámetro SCD se pueden distinguir las aceleraciones de una etapa y dos etapas y la transición entre ellas, pero no las de múltiples etapas o progresivas. A continuación, se aporta una tabla resumen donde se establecen los criterios para determinar de los tipos de aceleraciones.

Tabla 6.15. Criterios de SCD y t_{trigg_cell} para delimitar los tipos de aceleración.

	<u>Una etapa</u>	<i>Transición*</i>	<u>Dos etapas</u>	<i>Transición*</i>	<u>Múltiples etapas o progresiva</u>
SCD	< 0.21	[0.21; 0.32)	[0.32; 0.45)	≥0.45	≥0.16
t_{trigg_cell}	< 53 ms	< 53 ms	< 53 ms	< 53 ms	>53 ms

Debido a la necesidad surgida de complementar el modelo con un análisis cuantitativo de las imágenes Schlieren, se dedica el siguiente capítulo a comparar los resultados de la velocidad de combustión y del modelo con los resultados cuantitativos de las imágenes aplicando la herramienta de Open CV recogida en el capítulo 3.

CAPÍTULO 7:

RESULTADOS DE LA COMPARACIÓN ENTRE LA VELOCIDAD DE COMBUSTIÓN Y LA MORFOLOGÍA DEL FRENTE DE LLAMA

7. RESULTADOS DE LA COMPARACIÓN ENTRE LA VELOCIDAD DE COMBUSTIÓN Y LA MORFOLOGÍA DEL FRENTE DE LLAMA

En el capítulo anterior se presentaban los resultados correspondientes al modelo de celularidad propuesto para combustiones de etanol. Éstos se comparaban con los resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea y también con las imágenes obtenidas experimentalmente durante los procesos de combustión con la fotografía Schlieren. El objeto de esta comparación es principalmente determinar toda la información que el modelo propuesto puede aportar sobre el desarrollo de la celularidad y su influencia en el proceso de combustión. Como conclusión de dicho capítulo anterior se tiene que el modelo puede indicar de manera cuantitativa el tipo de evolución (aceleración) que la velocidad de combustión sufre por el desarrollo de la celularidad. También se observó que existe una relación entre el cambio que se produce en la tendencia de la velocidad de combustión de un experimento y la aparición de la celularidad en el frente de llama. Esta conclusión se basa en la coherencia mostrada entre los resultados del modelo de celularidad propuesto (basado en el cambio de la velocidad de combustión) y las imágenes captadas durante el mismo: el modelo era capaz de predecir en las imágenes el instante de cambio por la aparición de celularidad en el frente.

Esta última comparación entre el modelo y las imágenes se hacía de una manera más bien cualitativa, apelando a la necesidad de “medir” de alguna forma cuantitativa el cambio en el frente de llama debido a la celularidad creciente en la misma. Respondiendo a esta necesidad, se decidió hacer uso de un modelo de análisis de imágenes desarrollado en Python en el contexto de esta Tesis doctoral, en el cual se emplea de la librería “OpenCV” para la cuantificación de la celularidad en las imágenes, el fundamento de dicho programa ha sido explicado en el apartado 3.3 del capítulo 3.

El objetivo del presente capítulo consiste en la comparación de los resultados experimentales de la evolución temporal de la velocidad de combustión (obtenidos experimentalmente con los registros de presión y el modelo de diagnóstico) con los resultados de la evolución temporal de la celularidad proporcionados por el programa de análisis de imágenes, y de esta forma ver si existe alguna relación entre ambos. Interesa utilizar resultados de velocidades de combustión obtenidas con las curvas de presión, porque no son velocidades de combustión laminar, sino que son velocidades de combustión. Para realizar de manera más sencilla y clara la comparación de la evolución entre ambas magnitudes se procede a la normalización y adimensionalización de ambas de tal manera que sus valores queden en el intervalo de (0, 1). La fórmula general empleada para ello se recoge en la siguiente ecuación (1.2).

$$n_x = \frac{x_i - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (1.1)$$

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

Donde x se refiere al parámetro que se desea normalizar, n_x es el parámetro ya normalizado entre 0 y 1 (velocidad de combustión instantánea, n_{vel} o densidad celular, n_{cel}) y los subíndices i , min y max se corresponden con los valores instantáneo, mínimo y máximo del parámetro en cuestión (velocidad de combustión instantánea, n_{vel} o densidad celular, n_{cel}). El valor mínimo se calcula con una regresión lineal (línea discontinua en la Figura 7.1) en el rango que queda cuando se eliminan los datos iniciales afectados por el ruido de la chispa y los datos finales a partir de que la combustión alcanza la velocidad de combustión máxima debida a la influencia de la celularidad.

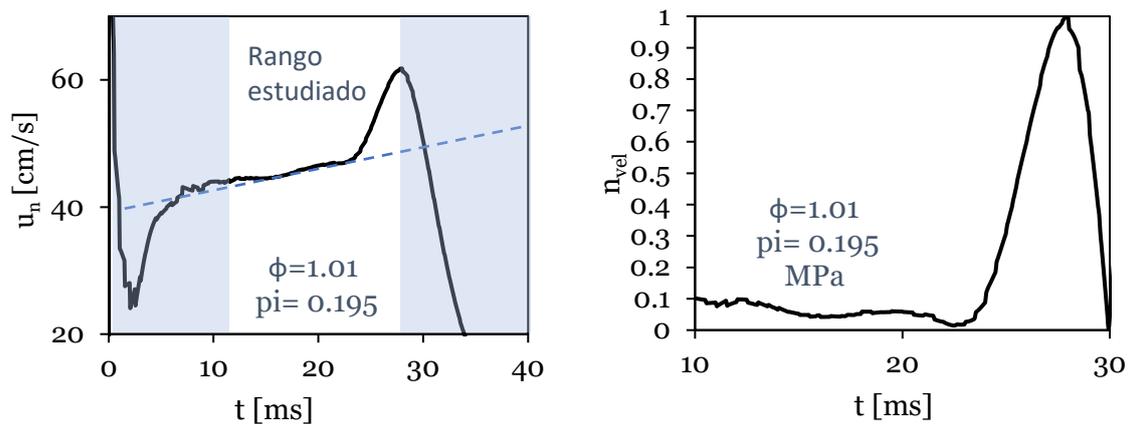


Figura 7.1. Ejemplo de la obtención del rango estudiado usando los resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto M1.01.

Para las combustiones de dosados ligeramente pobres: 0.8; 0.89; y de dosados cercanos al estequiométrico, la velocidad se normaliza teniendo en cuenta la velocidad de combustión laminar calculada mediante el mecanismo cinético desarrollado por Zhang et al. [123]; los resultados del mismo se obtienen para cada par de presión y temperatura y con un dosado global constante. En estos casos, la velocidad laminar empleada como “base” de comparación se calcula utilizando el paquete de software CHEMKIN-PRO⁶ y empleando el mecanismo cinético de Zhang et al. mencionado, que incluye 433 especies y 1004 reacciones, y es capaz de describir el comportamiento cinético de la oxidación del etanol a temperaturas moderadas y altas.

⁶ Ansys Chemkin-Pro | Chemical Kinetics Simulation Software, (n.d.). <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-chemkin-pro> (accessed June 29, 2022).

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

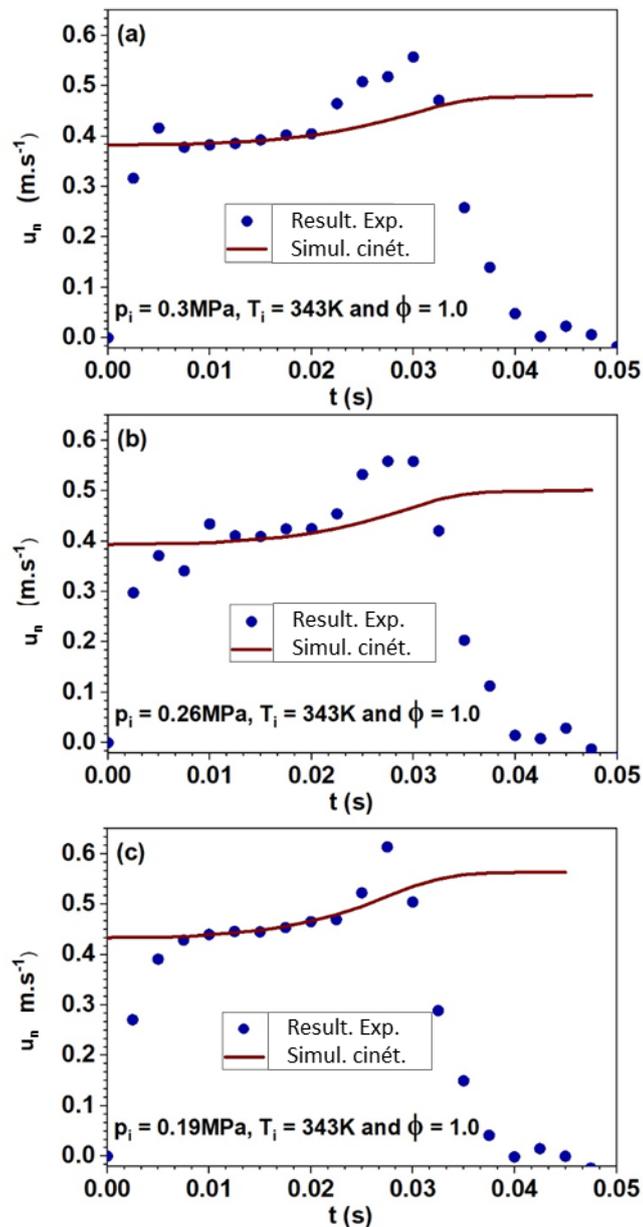


Figura 7.2. Ejemplo de la obtención del valor mínimo de la velocidad de combustión mediante simulación cinética. Traducido de

En la figura anterior se muestran unos ejemplos del resultado de tomar como base de la velocidad aquella aportada por el mecanismo cinético mencionado (línea continua), en lugar de la regresión lineal mostrada en la Figura 7.1, siendo muy similar el resultado obtenido. Estos resultados de comparación de la velocidad de combustión de resultados cinéticos y de resultados experimentales fueron aceptados para su publicación en junio de 2024, en la revista *Measurement (journal of the International Measurement Confederation)*

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

7.1. Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular

En capítulo anterior, en el punto 6.2.1, se presentaban los resultados en función del dosado relativo de las combustiones: primero las de dosado pobre y estequiométrico, seguidas de las de dosado relativo rico menor a 1.3 y terminando con las de dosado relativo muy rico igual a 1.4. La exposición de los resultados de este capítulo sigue este mismo esquema. Las condiciones que se van a analizar en este capítulo son escogidas en función del tipo de aceleración que sufre la velocidad de combustión en función de sus condiciones; esto se determinó en el capítulo anterior.

7.1.1. Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular en puntos de dosado relativo pobre o ligeramente rico

En la siguiente Tabla 7.1 se muestran las condiciones escogidas que se emplean en este capítulo para estudiar la relación entre el desarrollo de celularidad en las llamas de etanol y la velocidad de combustión de las mismas, así como los valores del parámetro de etapa de dominancia celular (SCD), definido en el apartado 4.3.1, ya que se vio que en el capítulo anterior que parecía era el más apropiado para la definición del tipo de evolución que sufre la velocidad de combustión en llamas afectadas con celularidad. Algunos puntos de estudio coinciden con aquellos analizados en el capítulo anterior, puesto que lo que se busca es, especialmente, analizar y comparar los tipos de evolución de la velocidad relacionándolos con la densidad celular. Se escogen, por consiguiente, dos condiciones de aceleración en una etapa, A0.8 y M1.01 y una condición en la que se da aceleración en dos etapas, A1.01. Se recuerda que la nomenclatura escogida para los puntos estudiados se refiere a la presión (“A” alta presión entre 0.25 y 0.3 MPa, “M” presión media ~ 0.195 MPa y “B” baja presión 0.15 MPa) la cual está seguida del dosado relativo del experimento.

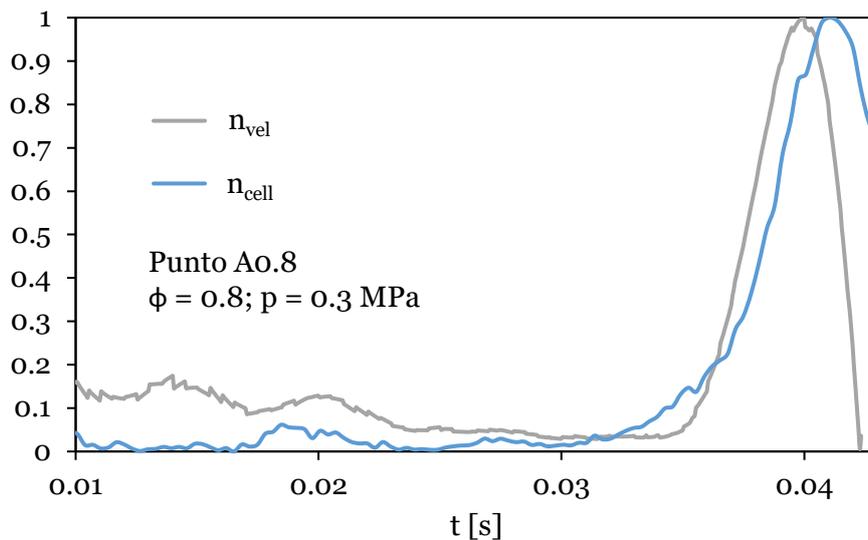
En este capítulo, además, se añade un punto más en estudio de alta presión: el punto A1. Este punto posee un dosado relativo estequiométrico que está entre 0.8 y 1.01 y sirve para estudiar la posible transición entre la aceleración en una etapa que se da en A0.8 y la aceleración en dos etapas que se da en A1.01 (explicado en el capítulo anterior).

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

Tabla 7.1. Condiciones seleccionadas para la comparación entre la evolución de la velocidad de combustión y la evolución de la densidad celular

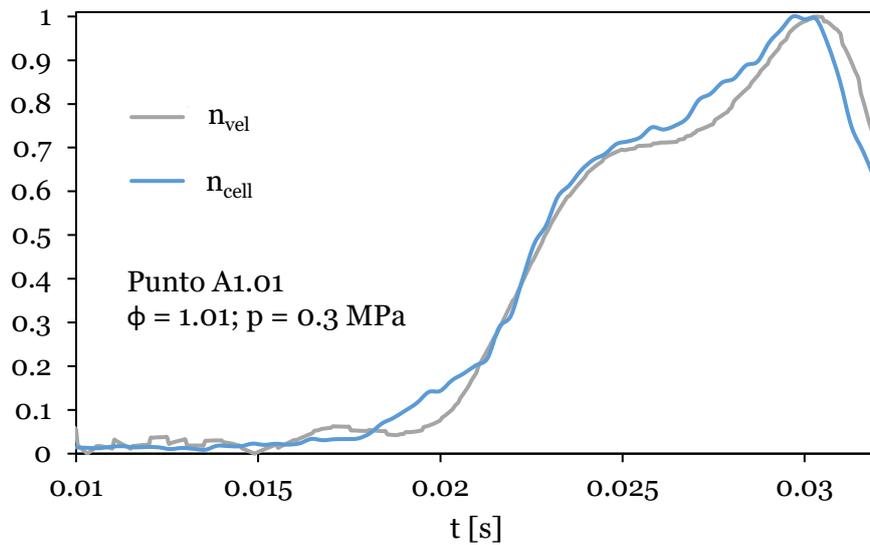
	<i>Alta presión inicial</i>			<i>Media presión inicial</i>
	Punto A0.8 (una etapa)	Punto A1* (transición)	Punto A1.01 (dos etapas)	Punto M1.01 (una etapa)
ϕ	0.8	1	1.01	1.01
Presión inicial [MPa]	0.3	0.265	0.3	0.195
SCD	0.13	0.27	0.32	0.16

En primer lugar, se muestra la comparación resultante en las condiciones del punto A0.8 y A1.01 de dosados relativos pobre (0.8) y ligeramente rico (1.01) respectivamente y de presión inicial alta (0.3 MPa). Los resultados de la comparación entre las evoluciones temporales normalizadas de la velocidad de combustión y de la densidad celular de cada experimento se muestran a continuación en la Figura 7.3.



- (i) Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto A0.8.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama



- (ii) *Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto A1.01.*

Figura 7.3. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto A1.01.

Las gráficas anteriores muestran cómo los resultados normalizados de la densidad celular y de la velocidad de combustión siguen la misma tendencia: por un lado, se puede ver que los resultados del punto A0.8 (Figura 7.3 (i)) de la densidad celular normalizada son coherentes de manera general con el tipo de evolución que sufre la velocidad, que en el capítulo anterior se ha definido como “aceleración en una etapa”. El máximo alcanzado en la densidad celular normalizada está separado 2 ms con respecto al máximo de la velocidad de combustión, lo que sería una diferencia de un 5% tomando como referencia el máximo de la velocidad de combustión. Sin embargo, cabe destacar que, en la curva de la densidad celular normalizada, ocurre un cambio de pendiente durante unos instantes justo en el tiempo de máxima velocidad de combustión (denominado tiempo de máxima influencia celular, t_{\max}), lo que podría indicar que de alguna manera la celularidad alcanza un máximo relativo en el punto de velocidad máxima para luego crecer durante 2 ms más.

Figura 7.3 (ii) muestra que en las condiciones de A1.01 el solapamiento entre ambas curvas de densidad celular y velocidad normalizadas es todavía mayor que en su predecesora en las condiciones de A0.8. Destaca que la evolución de la celularidad siga de manera general los cambios de pendientes que se dan en la velocidad de combustión durante su etapa de aceleración (este tipo de aceleración se ha denominado “en dos etapas” en el capítulo anterior). Se recuerda que ambos parámetros son obtenidos de diferentes fuentes: la velocidad de combustión se calcula de la derivada de la presión medida durante el proceso y tratada con el modelo termodinámico de dos zonas, mientras que la densidad celular se obtiene del análisis de las imágenes capturadas durante el desarrollo de la

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

combustión. El valor máximo se da en ambas prácticamente en el mismo instante, aunque se observa que la curva de densidad celular normalizada posee también un pico máximo 0.0003 s antes que el máximo de velocidad, debido a las oscilaciones de la medida del programa de Python.

En ambos casos, tanto para A0.8 como para A1.01, la densidad celular normalizada comienza a despegar del valor base mínimo tomado como referencia alrededor de 2 ms antes de producirse el cambio en la velocidad, esto se da en ambas combustiones. El criterio seguido para determinar el inicio de la aceleración es que ésta sea mayor de un 5% de la velocidad base tomada como referencia y que esto no se produzca de forma puntual, sino que, cuando se supere ese límite, la velocidad siga aumentando hasta llegar a un valor máximo claro a partir del cual ésta desciende rápidamente. Se considera el mismo criterio para la densidad celular.

En la siguiente Figura 7.4 se muestran los resultados normalizados de la velocidad y densidad celular en función del tiempo obtenidos en las condiciones del punto A1.

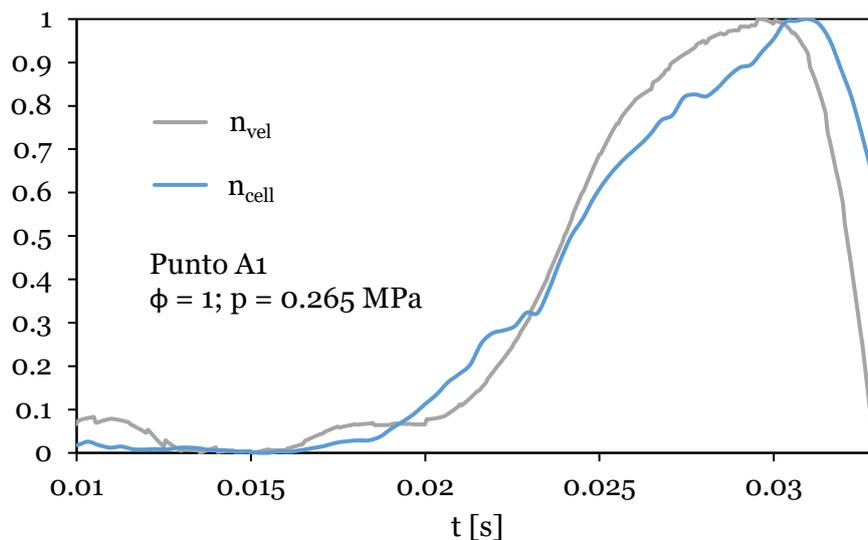


Figura 7.4. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto A1.

Este experimento se analiza puesto en detalle que se busca una combustión que se encuentre en la transición entre el tipo de aceleración en una etapa y el de dos etapas. Se puede ver en la figura anterior cómo los resultados de velocidad no se asemejan del todo ni a la del primer tipo ni a la de segundo tipo, por lo que se denomina “aceleración de transición entre una etapa y dos etapas”. Esta transición ya se había detectado bajo otras condiciones en el capítulo anterior, en el punto A1.24, el cual también se analiza en este capítulo en un apartado posterior. En el capítulo previo, se ha indicado que, con un tiempo de combustión o de activación celular pequeño (menor a 100 s o menor a 70 s respectivamente), el parámetro más significativo para determinar el tipo de aceleración

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

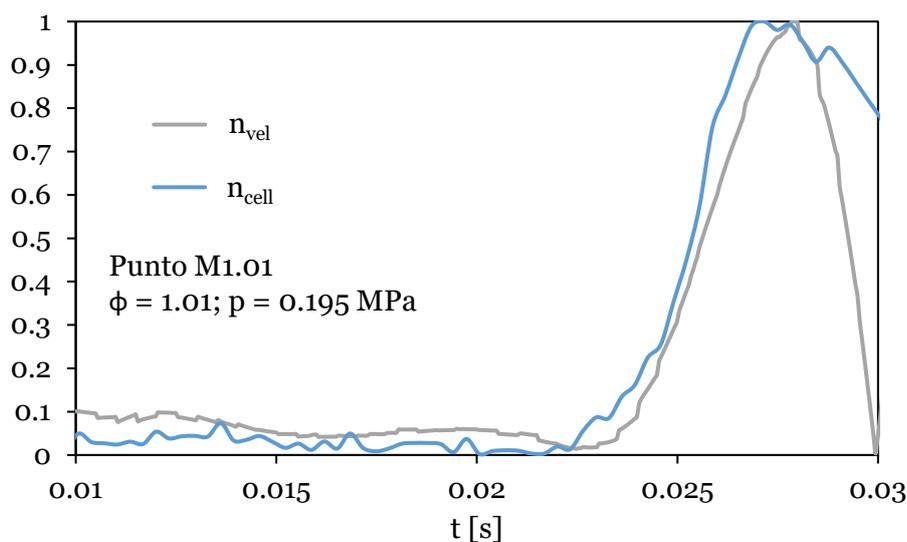
debido a la celularidad en una combustión es el periodo de dominancia celular, SCD, cuyos límites se establecieron como se indica a continuación:

- Aceleración en una etapa: $SCD < 0.21$
- Aceleración de transición entre una y dos etapas: $0.21 \leq SCD < 0.32$
- Aceleración en dos etapas: $0.32 \leq SCD < 0.45$

La aceleración en las condiciones de A1, según el modelo, tiene una etapa de dominancia celular de $SCD = 0.27$, el cual entra dentro del intervalo establecido para la aceleración de transición entre una etapa y dos etapas.

Por otro lado, se observa que el crecimiento de la densidad celular también acompaña a la evolución de la velocidad, ya que, a partir de los 0.025 s de tiempo aproximadamente, ambas curvas sufren una disminución en su pendiente, recordando a la “meseta” que se da en la aceleración en dos etapas. Cabe destacar que, en la curva de la densidad celular normalizada, en el instante de 0.029 s se observa un ligero aumento en su pendiente, cosa que no se da en la curva de la velocidad. Esto podría indicar un posible amago de una segunda etapa de aceleración cuyos efectos no se materializan en consecuencias para la velocidad de combustión. Esto confirma la suposición de que en la combustión producida en condiciones del punto A1 existe una aceleración de transición entre una y dos etapas.

En la Figura 7.5 que se muestra seguidamente se realiza una comparación entre las curvas de la velocidad de combustión y la densidad celular, ambas normalizadas, bajo las condiciones de M1.01 ($\phi = 1.01$; $p = 0.195$ MPa). La aceleración sufrida en estas condiciones se clasificó como de una etapa y se recuerda que su dominancia celular, SCD, es de 0.16, este parámetro tiene que ver con la fracción del tiempo en que la velocidad está acelerando debido a la celularidad.



7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

Figura 7.5. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto M1.01.

En el caso de este experimento, la densidad celular se adelanta ligeramente a la velocidad de combustión también en el valor máximo, con una diferencia de 0.0004 s (1.5% con respecto al tiempo máximo de la velocidad). Además, se produce otro máximo de la celularidad en el mismo instante en el que se da el máximo de la combustión. Esto se debe a ligeras imprecisiones en el resultado de la densidad celular otorgado por el programa por la oscilación en la medida del radio del frente de llama. Exceptuando este aspecto, ambas curvas muestran una tendencia muy similar, incluido el inicio del crecimiento, con un leve adelanto (menor a 0.7 ms) por parte de la densidad celular. La evolución de las curvas en las condiciones de M1.01 es muy similar a la de aquellas del punto A0.8 (ambas pertenecen al grupo de una etapa).

En los cuatro experimentos estudiados de dosado pobre o cercano al estequiométrico, se puede ver una relación clara entre la evolución de la velocidad de combustión y el crecimiento de la densidad celular captada en las imágenes, ya que la evolución de la densidad celular normalizada sigue fielmente los patrones observados en la velocidad de combustión: aceleración en una etapa, en dos etapas y aceleración de transición entre estas dos.

7.1.2. Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular en puntos de dosado relativo rico menor a 1.3

En este apartado también se usan los experimentos presentados en el apartado homólogo del capítulo anterior para realizar una comparación entre la evolución de la velocidad de combustión y el crecimiento de la densidad celular, con ambos parámetros normalizados. La siguiente Tabla 7.2 sirve como resumen y recordatorio de las condiciones de los puntos escogidos de dosados relativos ricos menores a 1.3, así como de los valores del parámetro de etapa de dominancia celular (SCD).

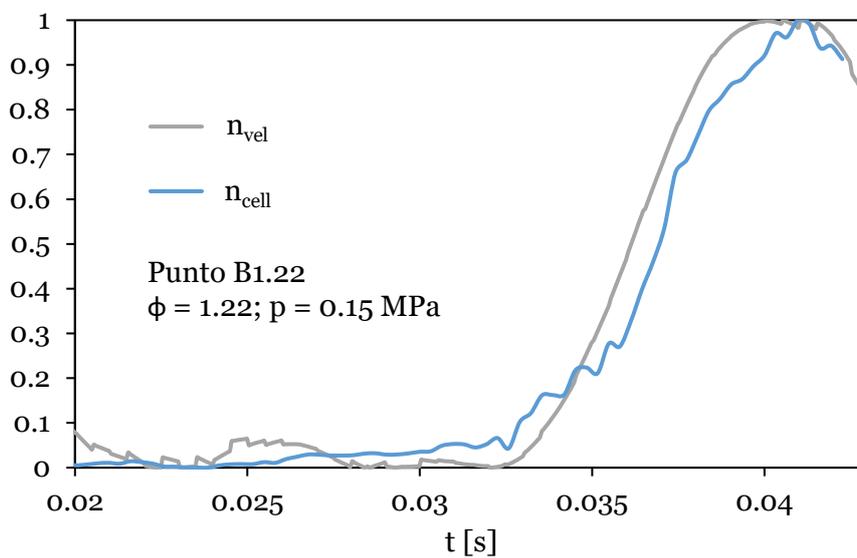
Tabla 7.2. Condiciones seleccionadas para la comparación entre la evolución de la velocidad de combustión y la evolución de la densidad celular

	<i>Baja presión inicial</i>	<i>Media presión inicial</i>	<i>Alta presión inicial</i>
	Punto B1.22*	Punto M1.26	Punto A1.24*
	(transición de 1 a 2 etapas)	(dos etapas)	(Transición de dos etapas a múltiple)
ϕ	1.22	1.26	1.24

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

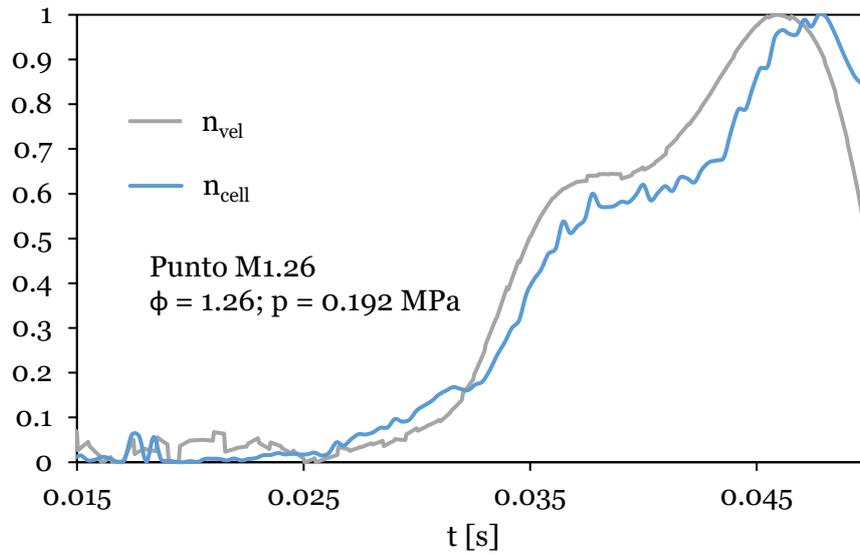
Presión inicial [MPa]	1.5	0.194	0.262
SCD	0.21	0.32	0.45

Se escogen las condiciones de la tabla anterior para estudiar en este apartado porque en los tres puntos se observó una evolución de la velocidad diferente, asociando el punto B1.22 a una aceleración de transición de una etapa a dos etapas y el punto A1.24 una aceleración de transición de dos etapas a una de múltiples. En la siguiente Figura 7.6 se muestra la comparación gráfica entre las curvas normalizadas de velocidad de combustión y densidad celular frente al tiempo o instante del proceso.

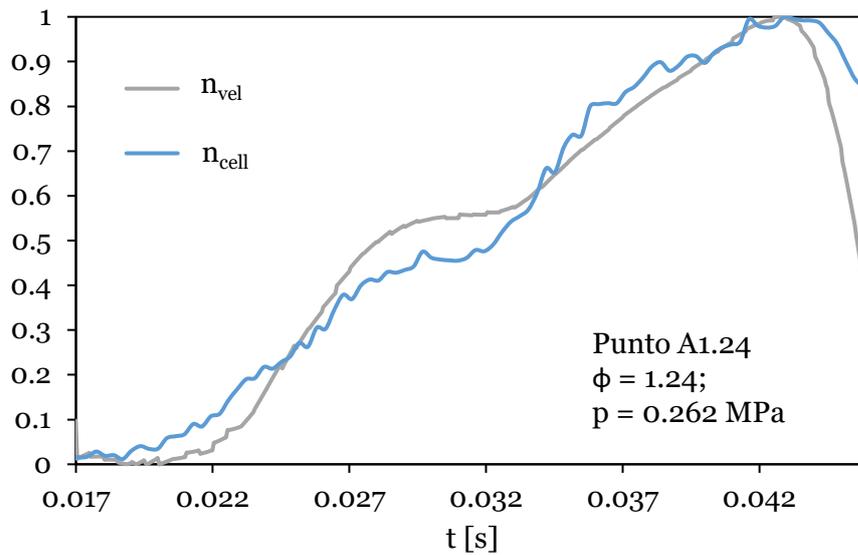


- (i) Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto B1.22.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama



(ii) Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto M1.26.



(iii) Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto A1.24.

Figura 7.6. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto M1.01.

De la gráfica en la Figura 7.6 (i) se observa cómo la evolución normalizada de la densidad celular para las condiciones de B1.22 recuerda a aquella obtenida para las

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

condiciones de A1, donde ocurría una ligera ralentización del crecimiento de la celularidad para luego crecer justo antes del instante de máxima velocidad (ver Figura 7.4). En el caso de las condiciones B1.22, la etapa de crecimiento-ralentización es más breve; debido a la etapa de dominancia celular SCD. En la combustión de A1, la $SCD=0.27$ y en la combustión que se está estudiando bajo las condiciones del punto B1.22 la $SCD =0.21$. Al tener que $SCD_{B1.22} < SCD_{A1}$, se puede decir que la presente combustión (B1.22), aunque se clasifica como de transición entre una y dos etapas, se acerca más al “lado” de una etapa (SCD más bajos) y la combustión vista anteriormente (A1), como tiene un SCD mayor, se aproxima más a una combustión de dos etapas de aceleración (SCD mayores que los de una etapa). Se concluye entonces que la SCD no sólo delimita los tipos de aceleración de la velocidad de combustión, sino que puede indicar en las aceleraciones de transición a qué tipo de aceleración “principal” (una o dos etapas) se aproximan más.

En la Figura 7.6 (ii) se tiene una aceleración de la velocidad de combustión en dos etapas y se observa que la densidad celular sigue la dinámica ya explicada de crecimiento-meseta-crecimiento. Se observa un ligero retraso de la densidad celular con respecto a la velocidad de combustión de 0.0022 s en el inicio de la segunda etapa de crecimiento; esto se corresponde con un error relativo del 5.5% con respecto al tiempo de inicio de la segunda etapa de la velocidad de combustión normalizada.

Un comentario aparte merece los resultados bajo las condiciones de A1.24, Figura 7.6 (iii). En el capítulo anterior se indicaba que la evolución de la velocidad bajo estas condiciones no se podía asociar completamente a una aceleración de dos etapas como la vista en los puntos M1.26 o A1.01. Se definió entonces como una aceleración de múltiples etapas (transición entre dos etapas y progresiva). Esto se confirma teniendo en cuenta el crecimiento normalizado de la celularidad en la Figura 7.6 (iii), especialmente a partir del tiempo de 0.032 s, en la segunda etapa, ya que se puede apreciar un crecimiento no lineal.

Se busca otro ejemplo de aceleración en transición entre dos y múltiples etapas mediante el criterio de búsqueda del valor de la etapa de dominancia celular (SCD) y uno de los puntos que cumple este criterio es el de dosado relativo 1.22 y presión inicial 0.3 MPa (punto A1.22), cuyos resultados de la velocidad y de la densidad celular normalizados se muestran en la siguiente Figura 7.7.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

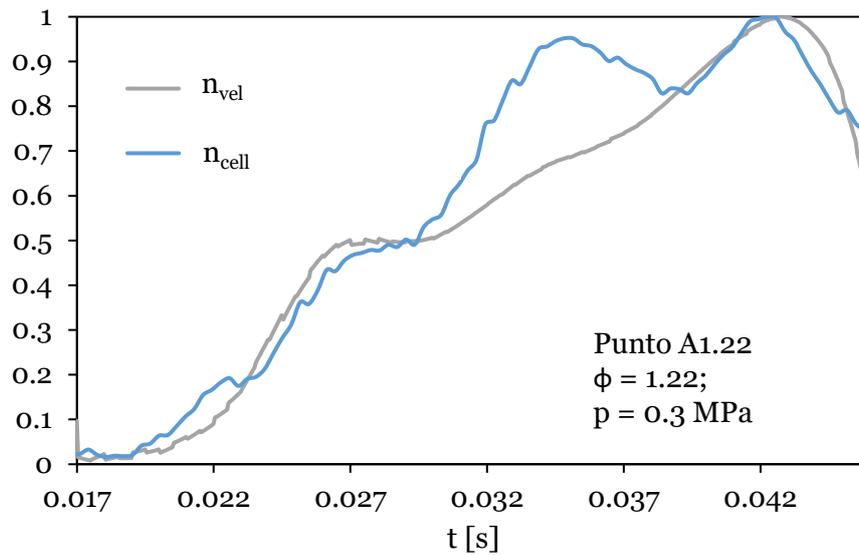


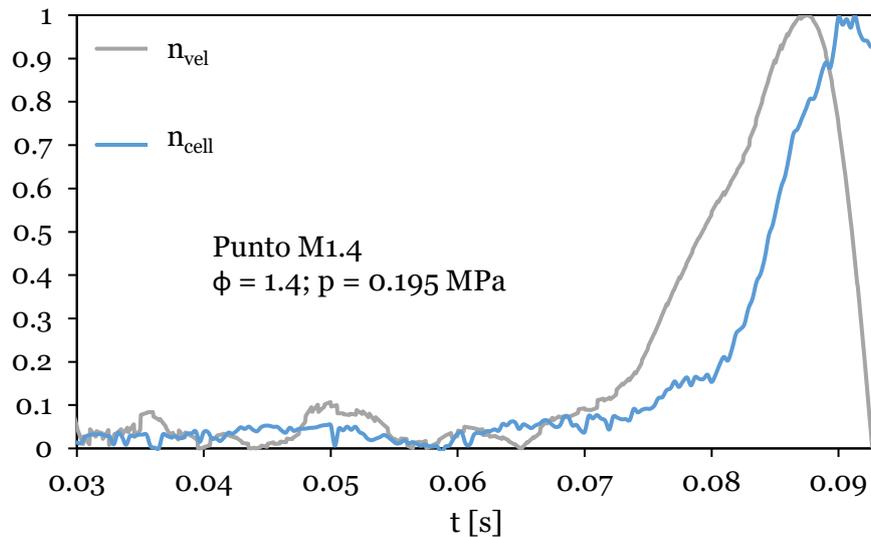
Figura 7.7. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones del punto A1.22.

En el caso de A1.22, se tiene de manera mucho más notable cómo en la segunda etapa el crecimiento no es lineal, como ocurre en las aceleraciones de dos etapas, sino que existe otra etapa de crecimiento-meseta-crecimiento dentro de la segunda etapa de la aceleración. Esto se refleja claramente en la densidad celular, donde en la segunda etapa, la tendencia es la misma que la velocidad de combustión, pero el cambio en la pendiente resulta mucho más exagerado en la celularidad; siendo más notorio que en la combustión en el punto A1.24, aunque la dinámica en ambas es la misma. Comparando la etapa de dominancia celular en ambas se tiene que $SCD_{A1.2a} < SCD_{A1.22}$ (0.45 frente a 0.5). En este caso, el valor de SCD marca nuevamente que la combustión en el punto A1.24 está más cerca de la combustión de aceleración en dos etapas que de la combustión múltiple o progresiva.

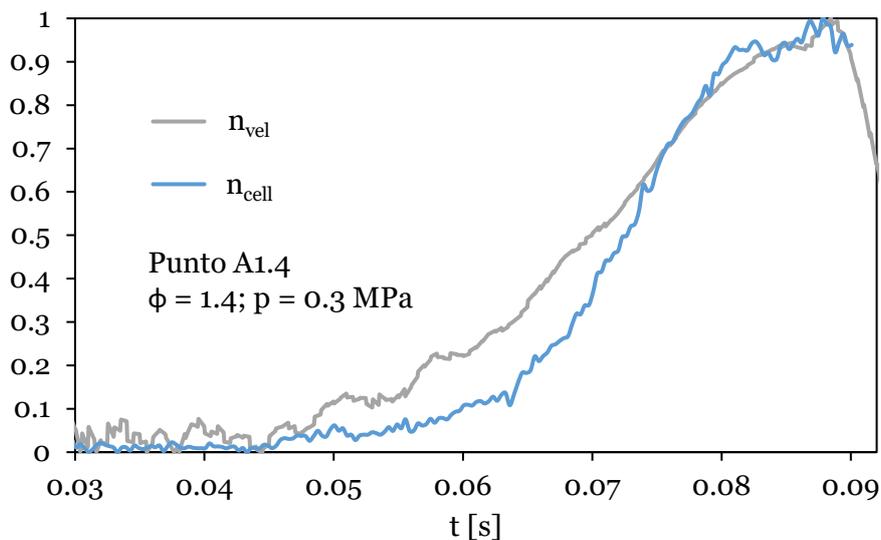
7.1.3. Comparación de la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de densidad celular en puntos de dosado relativo muy rico

Para finalizar este apartado de comparación entre la evolución de la velocidad de combustión normalizada y el crecimiento de la densidad celular normalizado, se analizan los resultados de las combustiones de dosado relativo muy rico ($\phi = 1.4$) a diferentes presiones, tomando los puntos analizados en el apartado 6.2.1.3: el punto M1.4 ($\phi = 1.4$; $p = 0.195$ MPa) y el punto A1.4 ($\phi = 1.4$; $p = 0.3$ MPa). La siguiente Figura 7.8 muestra los resultados en ambas condiciones.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama



- (i) Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto M1.4.



- (ii) Comparación de la velocidad de combustión normalizada y la densidad celular normalizada en función del tiempo en las condiciones del punto A1.4.

Figura 7.8. Resultados experimentales de la velocidad de combustión instantánea para las condiciones de los puntos M1.4 y A1.4.

En la Figura 7.8 (i), bajo las condiciones de M1.4, se observa que en esta ocasión la densidad celular no sigue tan bien la evolución de la velocidad (definida en el capítulo anterior como aceleración progresiva) y se observa un aparente retraso de ésta con respecto a la velocidad. Sin embargo, se asocia cada instante de cambio de pendiente en la

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

velocidad con un cambio de pendiente en la celularidad, con lo cual, a pesar de que la curva de la celularidad no siga tan fielmente la de velocidad normalizada como ocurre en el resto de casos estudiados, sí se observa una misma tendencia de crecimiento en varias etapas. No se puede decir que siga la forma observada en la aceleración determinada como “en dos etapas”, pero se observa un primer crecimiento de la densidad celular más paulatino, del instante 0.07 s al instante 0.08 s aproximadamente y a partir de ese punto el crecimiento de la densidad celular es más rápido. Estos cambios de pendiente se observan en los mismos intervalos en la velocidad de combustión normalizada.

La Figura 7.8 (ii) muestra en las condiciones de A1.4. un crecimiento de la velocidad de combustión y de la celularidad más acompasado que el que se daba en las condiciones de M1.4, aunque hasta el instante de 0.07 s aproximadamente también existe una diferencia entre el crecimiento de la celularidad y el de la velocidad de combustión. Al igual que en las condiciones del experimento M1.4 se observa un punto de cambio en la pendiente de la densidad celular, en esta ocasión alrededor del instante 0.063 s, a partir del cual el crecimiento de la celularidad es más rápido. Sin embargo y contrariamente a lo observado en la Figura 7.8 (i), este cambio no se ve tan claramente reflejado en la curva de la velocidad. A partir del instante 0.08s, se tienen dos picos (máximos) en la densidad celular, el segundo de ellos es coincidente con el máximo en la velocidad de combustión; sin embargo, el primero de ellos no tiene un homólogo en la velocidad de combustión. Para un entendimiento más profundo de este tipo de comportamientos observados en la Figura 7.8 se requiere de información adicional, la cual se aporta en el siguiente punto de estudio.

En este apartado se ha realizado una comparación cuantitativa de manera gráfica entre la evolución de la velocidad de combustión y el crecimiento de la celularidad (representado por la densidad celular). Se ha puesto especial atención en los tipos de aceleración observados en el punto anterior y se ha determinado que están, en general, directamente relacionados con la evolución de la celularidad en el frente de llama (ambos parámetros presentan curvas normalizadas similares). Sin embargo, a pesar de lo esclarecedor del análisis cuantitativo realizado en este punto, se considera conveniente profundizar él mediante la correlación de las imágenes Schlieren obtenidas con las gráficas anteriormente mostradas; esto se plantea para entender de manera gráfica qué ocurre con la morfología del frente de llama en los diferentes patrones de aceleración o evoluciones de la velocidad de combustión observados.

7.2. Estudio morfológico de llamas de etanol

Para concluir el análisis de la comparación entre la densidad celular y la velocidad de combustión, se considera especialmente interesante mostrar las imágenes de las combustiones en condiciones donde se den los diferentes tipos de aceleración o evolución temporal de la velocidad de combustión. Se plantea la selección de un punto para cada tipo de aceleración, excepto para la aceleración en múltiples etapas o progresiva, donde se estudian dos puntos por la disparidad de resultados obtenidos en el punto anterior.

En la tabla siguiente se muestran los tipos de aceleración estudiados y las condiciones escogidas para cada uno de ellos.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

Tabla 7.3. Condiciones seleccionadas para la comparación entre la evolución de la velocidad de combustión y la evolución de la densidad celular

	<u>Una etapa</u>	<u>Dos etapas</u>		<u>Múltiples etapas o progresiva</u>		
		Transición*		Transición*		
	M1.01	A1	A1.01	A1.24	M1.4	A1.4
ϕ	1.01	1	1.01	1.24	1.4	1.4
Presión inicial [MPa]	0.195	0.265	0.3	0.262	0.195	0.3
SCD	0.16	0.26	0.32	0.45	0.16	0.36
t_{trigg_cell}	22.64	21.84	20.5	22.70	72.59	53.62

En un apartado del capítulo 6 anterior, se determinó que existen distintos tipos de aceleración en la velocidad de combustión cuyo criterio de clasificación está basado en la dominancia celular (SCD) y el tiempo de activación celular (t_{trigg_cell}) (ver Tabla 6.15). Se determinó así mismo la hipótesis de que los tipos de aceleración y las distintas morfologías observadas en las imágenes analizadas en dicho capítulo de manera cualitativa podrían estar relacionados.

A continuación, se realiza un estudio morfológico que completa el del capítulo anterior del frente de llama en combustiones de etanol con celularidad. El planteamiento del análisis en esta sección es el siguiente: se escogen de 5 a 6 instantes concretos del proceso de combustión, que se marcan en la gráfica normalizada de velocidad y densidad celular, y se presentan las imágenes correspondientes a cada uno de esos instantes. De esta forma se puede entender mejor las dinámicas observadas en la evolución de la celularidad en función de la morfología de las imágenes.

En general los tiempos estudiados se distribuyen de la siguiente forma:

- Instante un 15% antes del tiempo correspondiente al tiempo de activación celular.
- Instante correspondiente al tiempo de activación celular, t_{trigg_cell} (determinado por el modelo); y un instante o dos intermedios entre el tiempo de activación celular y el tiempo de máxima velocidad de combustión, b_1 y b_2).
- Punto seleccionado en función de lo que se quiera estudiar en cada combustión.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

7.2.1. Morfología del frente de llama en llamas con aceleración en una etapa o lineal

En primer lugar, se presentan las imágenes de ciertos instantes correspondientes a las llamas de etanol que presentan una sola etapa de aceleración, y con condiciones del punto M1.01.

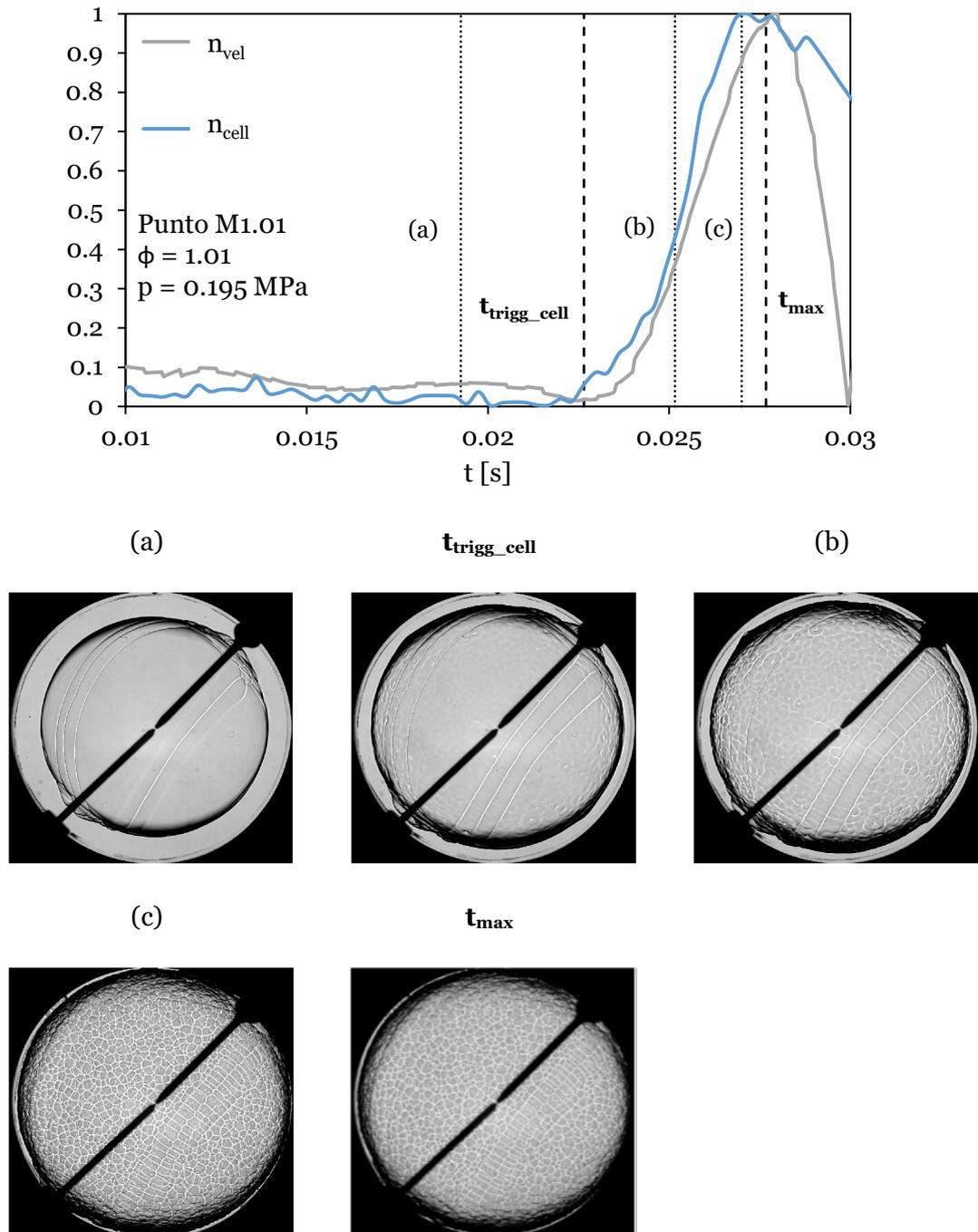


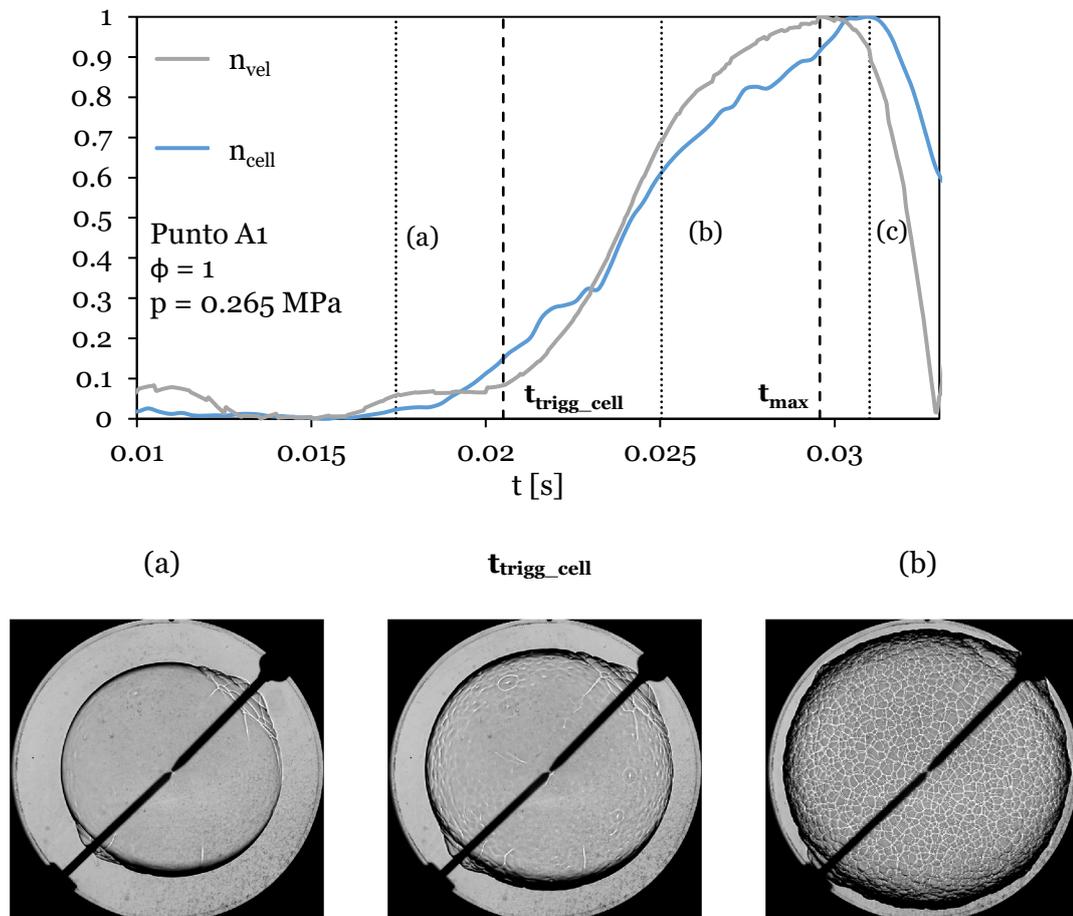
Figura 7.9. Evolución de la morfología del frente de llama celular bajo las condiciones de M1.01.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

Este tipo de aceleración de una etapa se podría asociar, observando las imágenes de los instantes seleccionados en la Figura 7.9, con una celularidad que aparece de manera instantánea y sin crecimiento notable de grietas de gran longitud más allá de las que ya posee la combustión inicialmente. Se observa también una distribución homogénea de las celdas en el frente de llama (ver instantes (b) y (c) de la Figura 7.9). Esto concuerda con lo observado en la velocidad y en la densidad celular, ya que el crecimiento se produce rápidamente y de manera prácticamente lineal. En los resultados presentados en el capítulo 5 de esta Tesis, se analizaban llamas de hidrógeno y metano, este tipo de morfología y crecimiento repentino de la celularidad se asociaba con inestabilidades derivadas del efecto hidrodinámico.

7.2.2. Morfología del frente de llama de una combustión con aceleración de transición entre una etapa y dos etapas

En la siguiente Figura 7.10 se presentan las imágenes asociadas a los instantes descritos anteriormente para una combustión que posee una aceleración de transición entre una etapa y dos etapas. Los tiempos estudiados son: (a), t_{trigg_cell} , (b), t_{max} y (c); este último punto se aplica para ver la diferencia entre el instante de máxima influencia celular o máxima velocidad de combustión (t_{max}) y el de máxima densidad celular.



7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

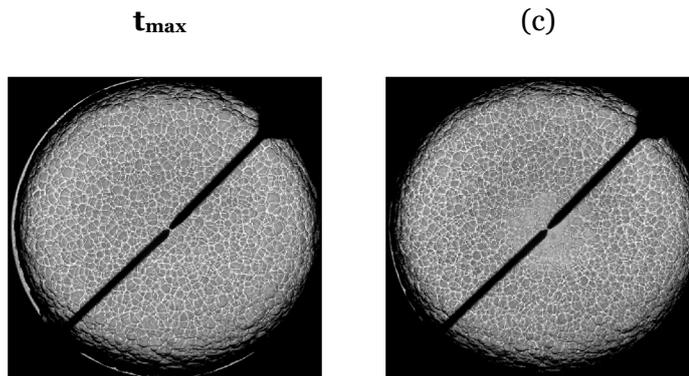


Figura 7.10. Evolución de la morfología del frente de llama celular bajo las condiciones de A1.

En las imágenes presentadas en la figura Figura 7.10 se advierte que en los instantes de (a), t_{trigg_cell} y (b) el desarrollo morfológico es similar al visto en la combustión de aceleración en una etapa, de hecho, la evolución de la densidad celular así como de la velocidad de combustión, ambas normalizadas, que también se pueden apreciar en la Figura 7.10, se puede considerar próxima a lineal hasta ese instante (b). En el siguiente tiempo estudiado, t_{max} (máximo tiempo de influencia de la celularidad), se puede observar cómo próximo a él hay un cambio en la pendiente de la celularidad, que se comentó en el apartado anterior. Observando las imágenes aportadas en la Figura 7.10, en concreto en la asociada a ese tiempo, se percibe un cambio en la morfología de las celdas, ya que se ha producido una división de las mismas, disminuyendo su tamaño, que explica el aumento de la densidad celular normalizada; esta división de las celdas se termina de apreciar en el instante (c). No existe una diferencia notable entre el tiempo de t_{max} y (c), a excepción de que en este último se aprecia en el centro de la ventana que el frente de llama toca ya los cristales de la cámara. Conviene recordar que la geometría de la cámara es cilíndrica (ver capítulo 3), por lo que el frente de llama alcanza antes las paredes en sentido transversal de la cámara que en sentido longitudinal.

Como se indicó en el apartado anterior, la velocidad no se termina de ver afectada por este cambio de morfología (debido principalmente a su proximidad a las paredes de la cámara de combustión, ya que esta se produce justo antes de que el frente de llama toque las paredes interiores de la misma, cuando la morfología del frente de llama deja de ser esférica).

7.2.3. Morfología del frente de llama de una combustión con aceleración en dos etapas

Se presenta a continuación en la Figura 7.11 las imágenes Schlieren obtenidas para la combustión seleccionada representativa de una aceleración en dos etapas (condiciones del punto A1.01).

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

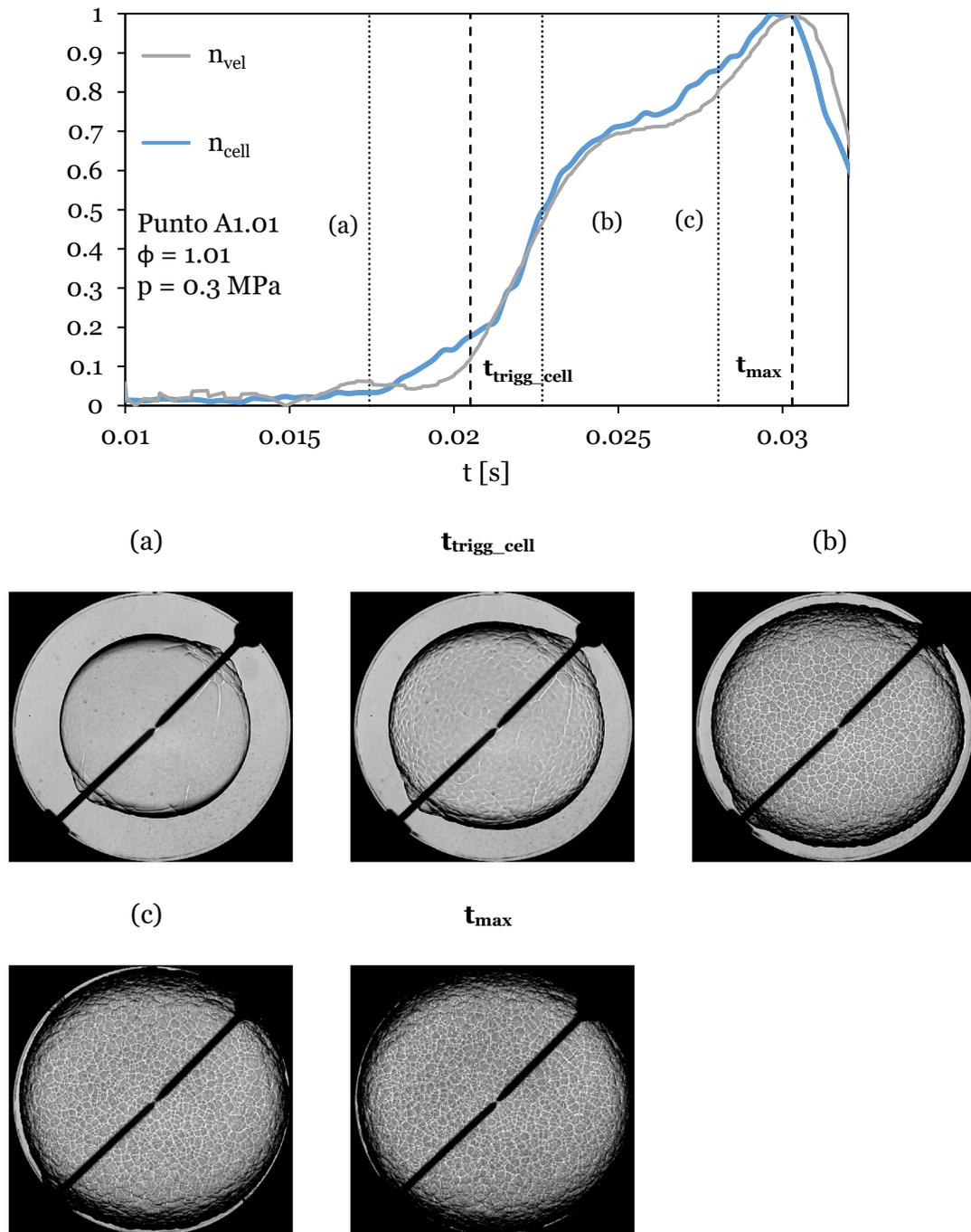


Figura 7.11 Evolución de la morfología del frente de llama celular bajo las condiciones de A1.01.

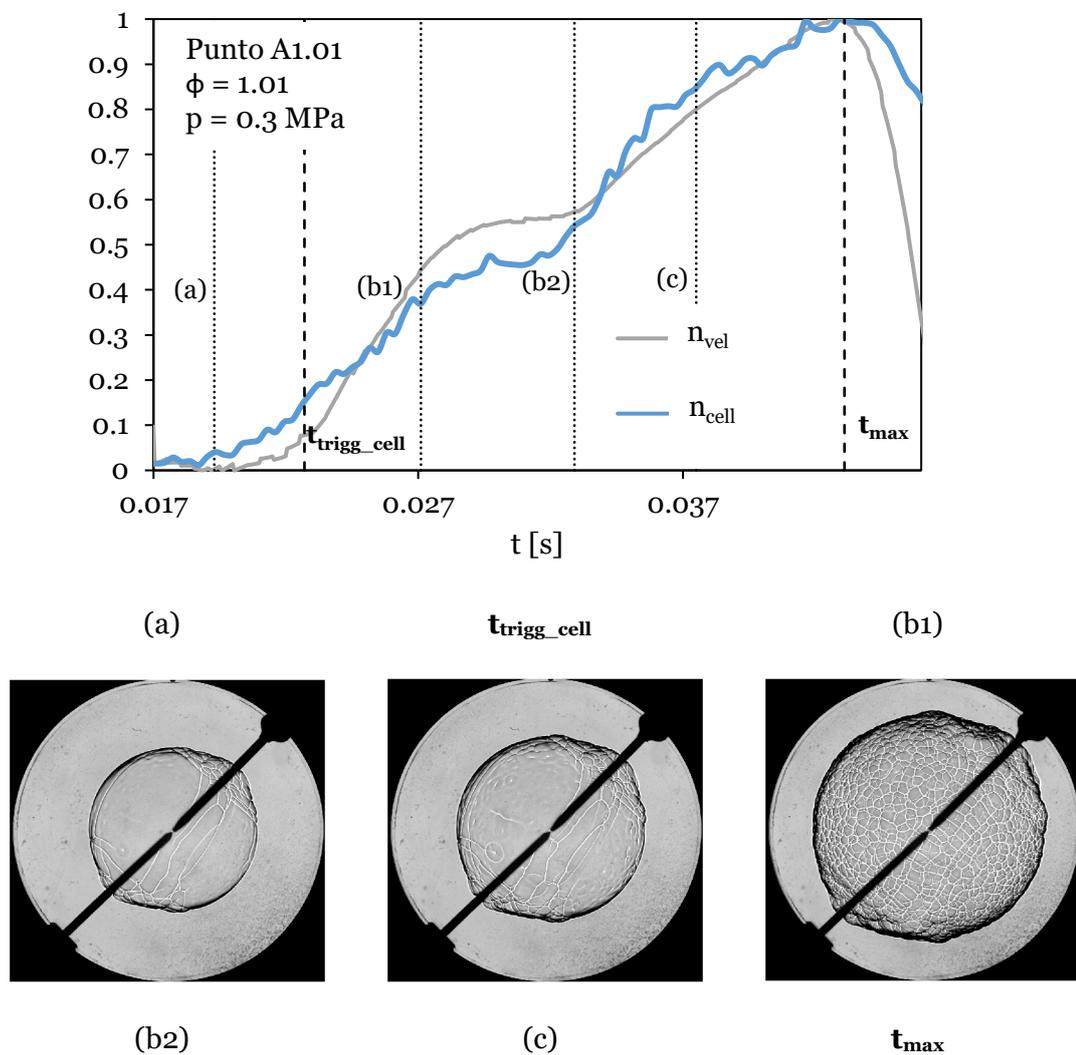
En las imágenes de la Figura 7.11 anterior se puede ver una evolución de la morfología similar a la vista en el apartado anterior de aceleración en transición. Inicialmente se puede ver cómo se desarrolla un frente de llama celular homogéneo (ver imágenes de t_{trigg_cell} y (b)) para luego pasar a una segunda etapa de división de celdas reflejada en los instantes (c) y t_{max} . Esto explica el por qué existen dos etapas en la evolución de la velocidad de combustión: la primera se da para cuando se establece la celularidad que podría

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

denominarse “primaria” y en la segunda etapa se produce la división de estas celdas dando paso a la celularidad “secundaria” que produce un aumento en la densidad celular viéndose reflejado así mismo en la velocidad de combustión.

7.2.4. Morfología del frente de llama de combustiones con aceleración de transición entre dos etapas y etapas múltiples o de tipo progresivo

Seguidamente se presentan en la Figura 7.12 los resultados de las imágenes para la combustión en las condiciones de alta presión inicial y dosado rico del punto A1.24 escogida para reflejar la evolución de la morfología en una combustión de transición entre una aceleración de dos etapas y una de etapas múltiples o progresiva.



7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

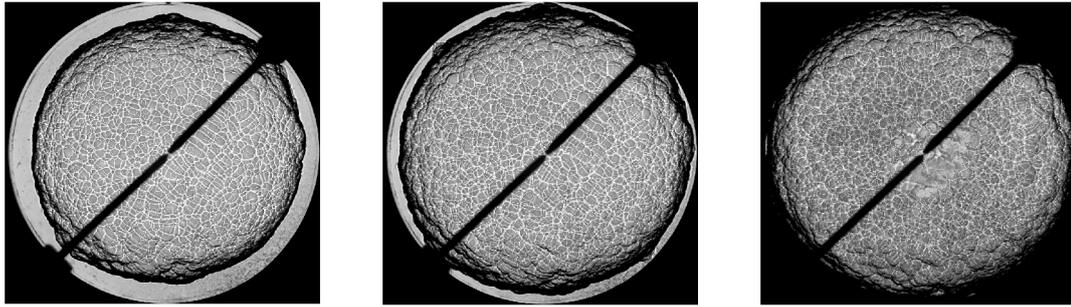


Figura 7.12 Evolución de la morfología del frente de llama celular bajo las condiciones de A1.01.

En esta ocasión, se observa un desarrollo mayor de grietas antes del inicio del crecimiento de la celularidad, instante (a). La diferencia con las grietas de gran longitud que aparecen en la Figura 7.9 es que estas son más heterogéneas en tamaño y forma y se van generando a medida que crece el frente de llama. Este crecimiento de las grietas no es suficiente como para considerarse que afecte realmente a la velocidad de combustión y, por tanto, no se considera celularidad en el frente de llama. Por lo demás se observa la misma dinámica explicada en la aceleración en dos etapas, donde se producía una celularidad “primaria” (en esta combustión también se observa en (b1)) para pasar a una celularidad “secundaria” por la división de las celdas primarias (en la Figura 7.9 se aprecia en el instante (b2)). En esta ocasión, como el tiempo de desarrollo de la llama celular es mayor que en las combustiones vistas anteriormente en este apartado, se producen más etapas de crecimiento de la densidad celular: las celdas de la celularidad “secundaria” se vuelven a dividir en nuevas celdas, provocando que el crecimiento no sea exactamente lineal ni en la densidad celular ni, por consiguiente, en la velocidad.

7.2.5. Aceleración de etapas múltiples o progresiva

En este apartado, se presentan las imágenes para las dos combustiones clasificadas con aceleración progresiva. Como se vio en el anterior capítulo algunas llamas o combustiones de etanol tienen perfiles de velocidades de combustión similares (en términos absolutos), como por ejemplo en la Figura 6.15; sin embargo al realizar una comparación normalizada y adimensionalizada se observan notables diferencias que hay que estudiar y analizar más a fondo (ver Figura 7.8). Se decidió clasificarlas en la misma categoría de aceleración “progresiva” porque presentan un comportamiento diferente en términos absolutos a las otras aceleraciones observadas (“una etapa”, “dos etapas” o aceleraciones de “transición”).

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

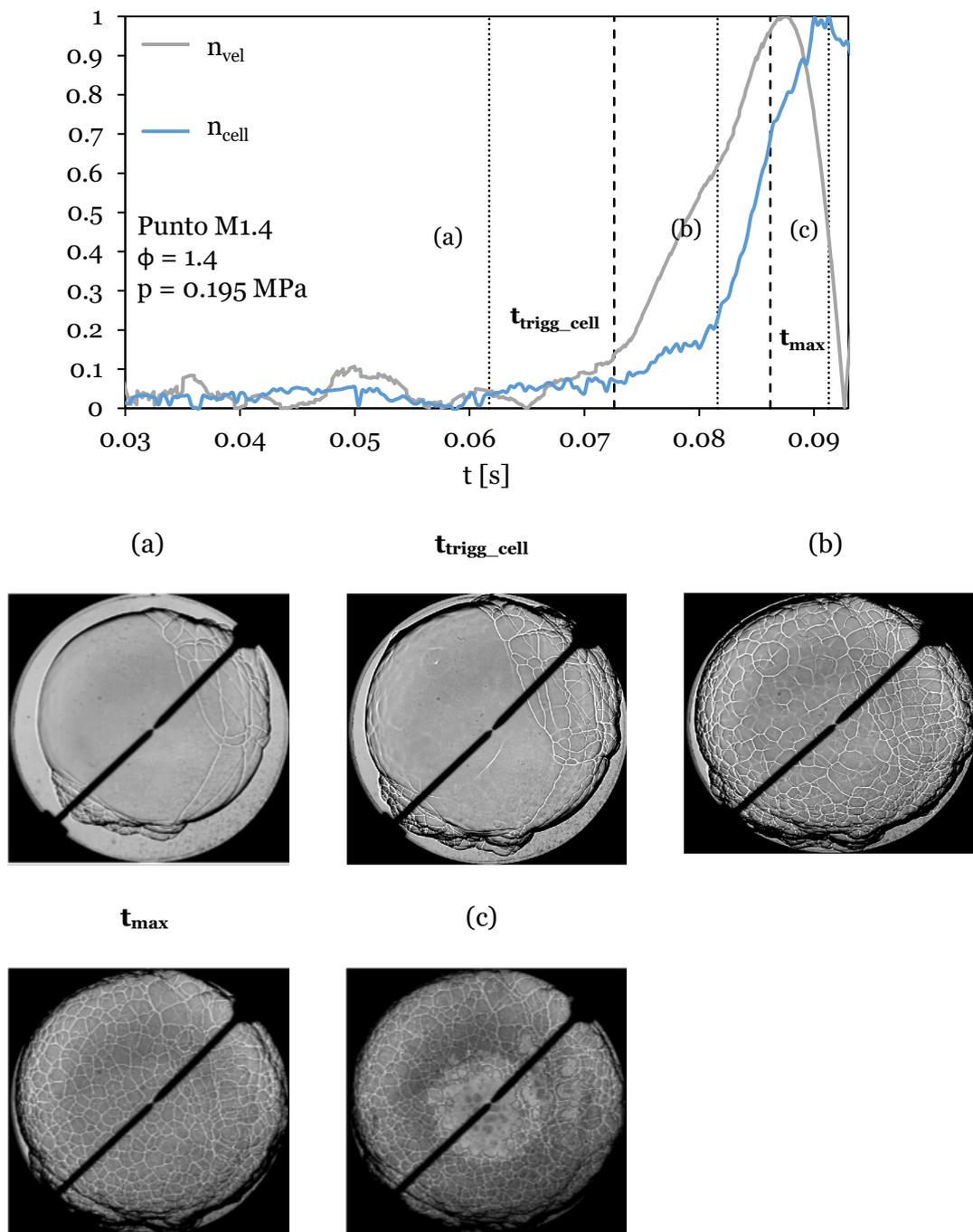


Figura 7.13 Evolución de la morfología del frente de llama celular bajo las condiciones de M1.4.

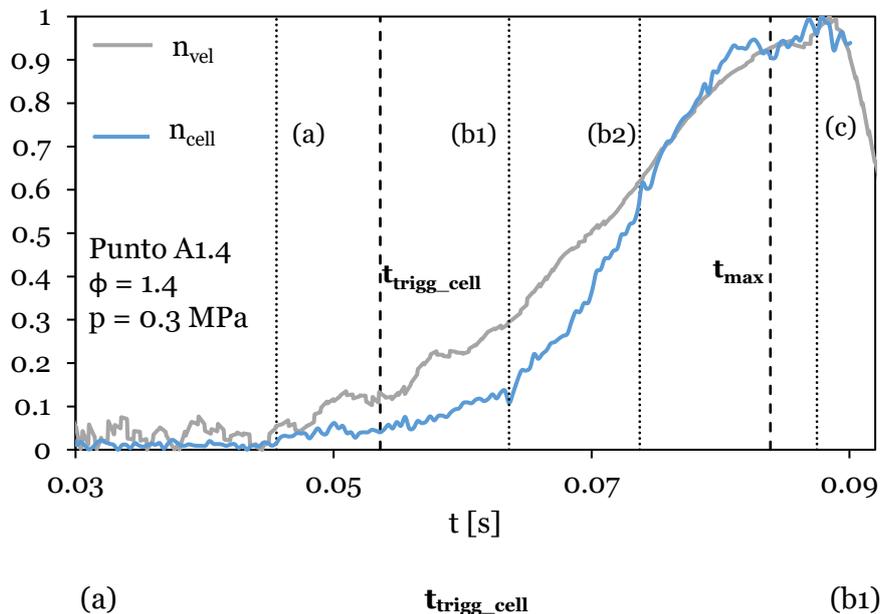
En las imágenes mostradas en la Figura 7.13, se observa la evolución de la morfología del frente de llama de 0.195 MPa de presión inicial y 1.4 de dosado relativo, condiciones del punto M1.4. Anteriormente se describió cómo la curva de la velocidad de combustión tenía dos tramos de crecimiento; en este apartado se aporta una explicación a cada uno de los tramos.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

Antes del tiempo de activación celular, se observa en el punto (a) un desarrollo de grietas en el que se detecta, incluso, una formación de celdas derivadas de la turbulencia de los electrodos. En otras combustiones se había observado también cierto desarrollo de grietas (ver Figura 7.12), pero no tan notorio como el que se observa en esta combustión. De hecho, se puede observar cómo existe un cierto crecimiento de la velocidad debido a esta formación de grietas antes del tiempo de activación celular.

A partir del punto $t_{\text{trigg_cell}}$ (tiempo de activación celular) se da claramente una formación de un frente celular, que culmina en el punto (b). De las celdas formadas se puede apreciar cómo su tamaño es mucho mayor el de aquellas observadas en las combustiones de una etapa o de dos etapas, por lo tanto, se confirma la teoría de que este tipo de aceleraciones pertenecen a otra categoría (denominada aceleración progresiva). Desde el punto (b), las celdas se dividen en unas de menor tamaño lo que da lugar a otra etapa de aceleración, aunque el proceso ocurre de manera más progresiva que en anteriores combustiones, ya que no existe una parte de “meseta” como sí se visualizaba en las aceleraciones en dos etapas.

El punto (c) se había escogido para estudiar en qué estado de la morfología de la llama se daba la máxima densidad celular, pero se observa que la llama ya ha chocado con el cristal y, por tanto, este punto máximo no se considera como válido, aunque el programa detecte la máxima celularidad en ese punto.



7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

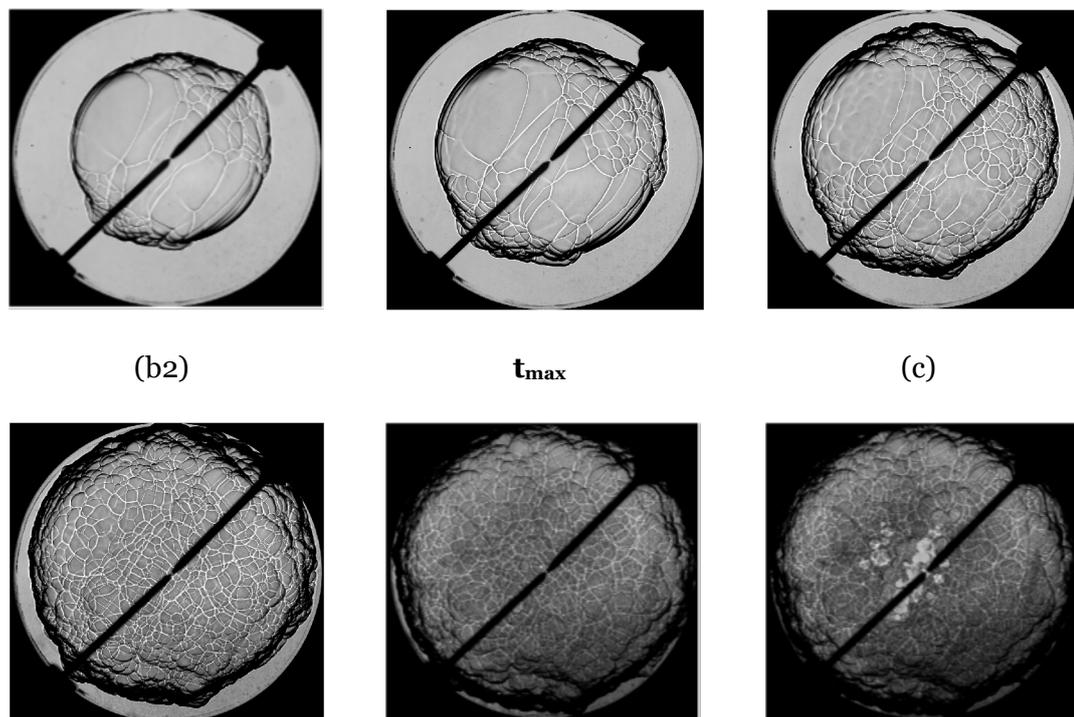


Figura 7.14 Evolución de la morfología del frente de llama celular bajo las condiciones de A1.4.

De la representación de la evolución de la morfología del frente de llama en las condiciones de alta presión y dosado relativo 1.4, A1.4, determinada por las imágenes aportadas en la Figura 7.15, se determina que, en esta ocasión, el crecimiento de los intersticios o grietas antes del punto de activación celular ($t_{\text{trigg_cell}}$) es más notable que en cualquiera del resto de combustiones (ver imágenes del punto (a) y del instante de $t_{\text{trigg_cell}}$). Al igual que en el caso anterior se forman unas primeras celdas, aunque en este caso la distribución de éstas se realiza por la mayor parte del frente de llama y no está concentrado únicamente en una zona. A partir de $t_{\text{trigg_cell}}$ se observa cómo crece la celularidad en aquellas zonas del área del frente de llama donde no se habían formado estas celdas previas a la celularidad. Aunque se observa un crecimiento en la densidad celular normalizada, en la velocidad no se tiene este cambio de aceleración; una explicación puede ser porque el aumento del área del frente de llama que se produce hasta el instante (b1) no es tan significativo como en otros casos al haberse extendido previamente las primeras celdas derivadas de grietas por el frente de llama. A partir del instante (b2) se produce una nueva división de las celdas ya formadas, pero esta resulta mucho más heterogénea al haber sido dominante el crecimiento de grietas inicialmente. Este tipo de morfología “clustered” más heterogénea como la observada en la Figura 7.13 y en la Figura 7.14 se asocia con las inestabilidades derivadas del efecto termo-difusivo, ver capítulo 5 Figura 5.22 y [45].

Para concluir el capítulo y de acuerdo con el criterio de clasificación de las aceleraciones de la velocidad de combustión recogido en la Tabla 6.15, la Figura 7.15 muestra un mapa que distribuye los tipos de aceleraciones de los experimentos realizados en el área de estudio.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

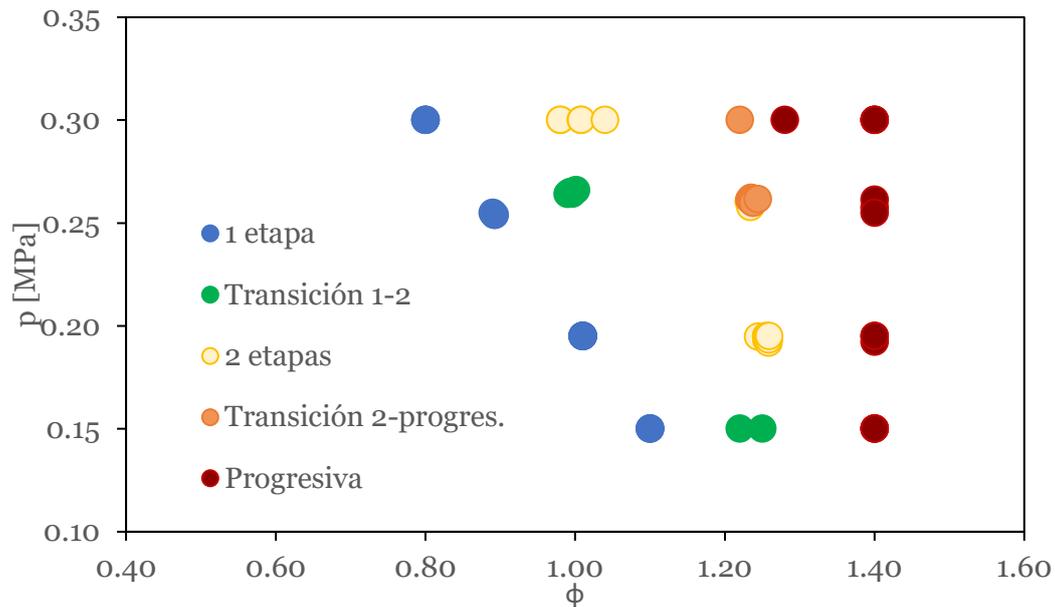


Figura 7.15. Comparación entre el radio celular dado por el modelo y por los experimentos realizados en la presente Tesis (pres.) y aquellos obtenidos por Zhang et al. [58] numéricamente y aplicando la teoría de inestabilidades.

De esta manera, se muestra visualmente la influencia que tienen la presión inicial y el dosado relativo en los tipos de aceleración. La morfología observada en las aceleraciones de una etapa, dos etapas y las transiciones, se puede asociar con aquella identificada en el capítulo 5 con el efecto hidrodinámico; mientras que la aceleración progresiva causa una morfología más similar a aquella del efecto termo-difusivo. De manera global se puede decir que el dosado más pobre favorece las aceleraciones en una etapa, las aceleraciones de transición y de dos etapas se dan en dosados relativos más ricos entre 1 y 1.22 y la aceleración progresiva se encuentra en los dosados relativos más ricos (>1.3). En dosados medios (entre 1 y 1.3), el aumento de la presión favorece el tránsito de aceleraciones de 1 etapa a aceleraciones progresivas, pasando por el resto de tipos mencionados.

En el capítulo anterior se comparó el modelo presentado con los datos experimentales obtenidos y con las imágenes, estas últimas de manera cualitativa; en el capítulo presente las imágenes se han analizado de manera cuantitativa a través de la densidad celular. Mediante la comparación de los resultados de la velocidad de combustión y la densidad celular medida en las llamas, se puede concluir que ambas están completamente relacionadas y que la celularidad (cuya medida cuantitativa es la densidad celular) es la responsable a grandes rasgos de la aceleración sufrida en el proceso de combustión reflejada en la velocidad de combustión. Mediante la normalización de la velocidad de combustión y la densidad celular se observa en la mayoría de los experimentos analizados cómo ambas curvas siguen la misma tendencia, solapándose en la mayoría de los casos. Estas tendencias son fiables ya que ambas medidas proceden de fuentes de información diferentes: la velocidad de combustión es derivada de los datos obtenidos de la presión medida durante el experimento, mientras que la densidad celular se mide directamente de

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

las imágenes captadas. Las combustiones en donde ambas medidas, de la velocidad y la celularidad, son más dispares son aquellas correspondientes a los experimentos de dosado relativo rico 1.4. Las curvas de ambos parámetros tienen una tendencia similar, pero el solapamiento no es tan evidente como en el resto de experimentos analizados. La explicación de esto último se halla cuando se incorporan las imágenes al análisis y se estudian detalladamente: en estas combustiones de dosado relativo se observa un patrón de crecimiento de la celularidad radicalmente diferente al de las otras combustiones de menores dosados. En ellas, existe un crecimiento evidente de grietas previo a la formación de la celularidad, especialmente cuando la combustión se da para dosado muy rico 1.4 y presión inicial elevada, 0.3 MPa. Para la densidad celular estas grietas no suponen una diferencia significativa, debido a su reducido número, pero para la velocidad de combustión supone una cierta influencia y aceleración previa a la provocada por la celularidad posterior.

7. Resultados de la comparación entre la velocidad de combustión y la morfología del frente de llama

CHAPTER 8:

CONCLUSIONS

8. CONCLUSIONS OF THE THESIS

The following are the conclusions drawn throughout this Doctoral Thesis, divided into General Conclusions and Specific Conclusions. Finally, future lines of work are also established, based on the research conducted during the preparation of this Thesis.

8.1. General Conclusions

The preparation of this Thesis has made it possible to study alternative fuels, such as hydrogen, methane, and ethanol, under laminar conditions. This study was conducted in a constant volume combustion chamber with optical access, which allows the acquisition of images of the combustion process using the Schlieren photography technique. Under these conditions, the nature of the instabilities that occur during the combustion process, as well as the visible consequences of these instabilities manifested in the phenomenon of cellularity in the flame front, were investigated. The analysis of the nature of the instabilities, as well as the determination of their origin, has been referred to as the "combustion process stability study" and was applied to hydrogen and methane mixtures, helping to understand the different behaviors detected in methane and hydrogen mixtures that do not clearly have a dominant fuel, as explained in Chapter 5. The analysis of the phenomenon of cellularity has been referred to as the "flame stability study" and was applied to ethanol flames, enabling the analysis of their morphology and the consequences of the cellularity phenomenon in the combustion process of this fuel.

For these stability analyses, both thermodynamic and optical diagnostic tools, as well as kinetic simulation techniques, were employed. This has made it possible to achieve the objectives set at the beginning of this document. The following are the general conclusions obtained from the main studies conducted on instabilities: "Stability study of the combustion process" and "Stability study of the flame". It is important to note that both studies examine the instabilities formed in the flame front but from different perspectives. The first study looks at instabilities from the perspective of their origin, growth rate, and the type of effect that causes them, thus classifying the combustions. The second study investigates the measurable and visible effects of the growth of these instabilities, focusing not on their origin but on their consequences, that is, it studies the phenomenon of cellularity

Stability Study of the Combustion Process

The main conclusion of the "combustion process stability study" is that the origin of the instabilities occurring during a premixed combustion process has been understood and quantified through physical parameters, such as the instability growth rate (Σ).

The stable or unstable nature of the flame is linked to the thermo-diffusive effect and the growth rate of the instabilities. However, it is not as closely related to the visible manifestation of the instabilities, since, in an infinitely large setup, all flames would

eventually develop a cellular flame front because the hydrodynamic effect is always destabilizing.

After plotting the neutral stability curves for the different combustion processes analyzed, it was observed that instabilities can be growing in a flame without developing a cellular flame front within the limits imposed by the combustion chamber.

The growth rate quantified the contributions of each effect: hydrodynamic and thermo-diffusive, with the hydrodynamic effect being destabilizing, while the thermo-diffusive effect could either be stabilizing or destabilizing, mainly depending on the relative fuel-to-air ratio and the hydrogen content in the studied combustions.

An analytical methodology has been developed that allows for the study of the stability limits of combustion processes as a function of the wavelengths or dimensionless wave numbers of the disturbances. This methodology analyzes the stable or unstable nature of the combustion and determines parameters that enable such a study, such as the instability growth rate.

This study fulfills the first primary objective of the Thesis: “To analyze and study the influence of hydrogen on the origin, development, and nature of instabilities that occur during the combustion process”.

Stability Study of the Flame

The stability of ethanol flames has been studied from the perspective of the measurable consequences of the appearance of cellularity (cellular structures) in the studied flames. This includes, first, the acceleration of the combustion velocity of the process, and second, the visible consequences related to the appearance of cracks and cells on the flame surface.

A statistical model, based on I-Optimal Design of Experiments, has been developed that, in general, allows for the prediction of the appearance of cellularity for a limited range of initial pressures and equivalence ratios in ethanol flames. This model is consistent with results found in the literature for this same fuel.

Additionally, the model provides more information on the type of acceleration experienced in the combustion velocity due to the cellularity in the flame, as well as the morphology of the cellularity. A direct relationship has also been observed between the evolution of cellularity and the evolution of combustion velocity in ethanol flames, as well as the link between the flame morphology and the type of acceleration.

The “combustion process stability study” and the “flame stability study” are related, although in this thesis they have been approached with different approaches and methodologies. On the one hand, the first refers to the study of the nature and origin of the instabilities, which, if they grow sufficiently, can cause the morphological change in the flame known as “cellularity.” The second study, on the other hand, is a consequence of the

first one and but it focuses on the measurable and visible consequences of the growth of these instabilities.

This study fulfills the second primary objective of the Thesis: “To quantitatively analyze the visible consequences of instabilities in ethanol flames, focusing specifically on the study of the cellularity phenomenon in such flames”

8.2. Specific Conclusions

As specific conclusions from the development of this thesis, the following points are presented:

A comprehensive review of the state of the art has been conducted, which is outlined in Chapter 2 (related with the first and second secondary objectives). This chapter explains the structure of both flat and spherical flames. The theory studying the origin, formation, nature, and development of the instabilities generated in a combustion process is also explained in detail. More specifically, this theory is outlined for flames with a global spherical geometry. Additionally, in this literature review, the concept of "self-acceleration" is explained, showing the measurable consequences of the growth of instabilities at the flame front. Finally, this second chapter of the document presents a review of the most recent and significant studies on the theory of instabilities applied to the fuels studied in this thesis: hydrogen, methane, and their mixtures, as well as ethanol and Biomass Producer Gas (BPG).

The installation used for conducting the experiments, a constant-volume combustion bomb, is described, as well as the instrumentation needed for data acquisition. The two main data sources used for obtaining the results of this thesis are the pressure evolution during the combustion process inside the chamber and the images showing the progression of the radius and morphology of the flame front, obtained through Schlieren photography. The experimental methodology followed for conducting the necessary experiments for the research is also described. Additionally, the main tools used for processing the aforementioned data are explained: an image processing and analysis tool developed in OpenCV within the context of this thesis; a pressure data processing tool, which consists of a two-zone thermodynamic model; and the extension of this code for calculating the growth rates of instabilities used in the "combustion process stability study."

Three methodologies for calculating instabilities in general have been proposed. The first refers to the different methods for obtaining the laminar combustion velocity, a basic parameter for the "combustion process stability study" and the "flame stability study." The results of this methodology for calculating combustion velocities are not directly presented in this thesis but are collected throughout the attached papers in this work, which have already been published.

8.2.1. Specific conclusions from the "combustion process stability study" in hydrogen and methane combustion processes

The second methodology for calculating instabilities refers to the aforementioned "combustion process stability study" (related to the third and fourth secondary objectives). This methodology allows for:

- Characterizing the stability limits of the flames.
- Defining the nature of the combustion, considering the origin and nature of the instabilities.
- Representing the growth rates of the instabilities for different radii, as well as the contribution of the hydrodynamic and thermo-diffusive effects.
- Studying qualitatively the influencing factors in the development of cellularity.

The "combustion process stability study" has been applied to hydrogen and methane combustions and their mixtures, which have been divided into two study groups: the first group with stoichiometric equivalence ratio and the second group with lean equivalence ratio ($\phi=0.7$). In both groups, different hydrogen percentages were studied: 0%, 20%, 50%, 80%, and 100%. For both study groups, the neutral stability curves were represented and characterized, which represent the flame instability limits as a function of the instability wavelengths.

The effective Lewis number and the critical effective Lewis number are shown as key parameters in studying the stable or unstable nature of the combustion process. Depending on the relationship between the effective Lewis number (Le_{eff}) and its critical value (Le_{eff}^*), the nature of the combustion process is defined. If $Le_{eff} > Le_{eff}^*$, the combustion is defined as stable, and the shape of its stability curve adopts a "peninsula" form. If, on the contrary, $Le_{eff} < Le_{eff}^*$, the combustion is defined as unstable, and the neutral stability curve consists only of a line, with instabilities developing from the onset of combustion. In this respect, equivalence ratio is defined as a key parameter in medium- and high-hydrogen content combustions (from 50% onward), as the nature of these combustions changes drastically between stoichiometric equivalence ratio and lean equivalence ratio. Stable combustions belong to the former, while combustion processes defined as unstable belong to the lean equivalence ratio group. Conversely, for low hydrogen content combustions (or high methane content), equivalence ratio is not a significant parameter, as both the Lewis number and instability peninsulas are very similar in both situations (stoichiometric and lean equivalence ratio).

Another conclusion obtained regarding the Lewis number is that as Le_{eff} approaches its critical value, instabilities begin to develop earlier, as seen in the stoichiometric mixture of 50% hydrogen and 50% methane, whose situation approaches the limiting case.

The growth rates of instabilities for both groups have been analyzed, as well as the separate contributions of hydrodynamic and thermo-diffusive effects to the instability growth rate. The effect of each on the analyzed combustions was observed: the thermo-

diffusive effect has a stabilizing effect in stoichiometric equivalence ratio combustions, while the hydrodynamic effect has the opposite effect. However, the thermo-diffusive effect has a destabilizing character in combustion processes defined as unstable (lean equivalence ratio and medium and high hydrogen content). In general, when dealing with unstable combustion, with both effects being destabilizing, the thermo-diffusive effect is more significant at smaller radii, but as the flame front radius grows, it loses dominance compared to the hydrodynamic effect.

Regarding the appearance of cellularity in the hydrogen and methane flames qualitatively analyzed in Chapter 5, it is observed that the starting point of instability growth (critical Peclet number or the situation of the neutral stability curve) is not as significant as the speed or rate at which these instabilities grow. The hydrogen content positively influences the appearance of a cellular flame front. Additionally, two different cellular morphologies were observed in the Schlieren images, corresponding to the two types of combustion nature: stable and unstable. More sudden and homogeneous cellularity is associated with combustions defined as stable (stoichiometric equivalence ratio or lean equivalence ratio with high methane content), while the morphology of cellularity is defined as heterogeneous and "clustered" for combustions defined as unstable, as these show significant crack growth prior to the appearance of the cells that cover the entire flame front (cellularity). In the flames with higher methane content, no cellularity was observed within the limits of the combustion chamber geometry.

8.2.2. Specific conclusions from the "study of flame stability" in ethanol combustion processes

The third methodology presented in this Thesis refers to the "study of flame stability", (related to the fifth, sixth, and seventh secondary objectives) which was applied to ethyl alcohol (ethanol) experiments. For this methodology, the development of a predictive model was proposed, obtained through the statistical tool of Design of Experiments (DOE). The following steps were applied to obtain the model using this tool:

- **Choice and definition of the parameter(s) characterizing cellularity in flames: cellular parameters.** Six parameters were defined as "cellular parameters" to characterize the cellularity in ethanol flames: they were divided into two groups based on whether they were dimensional or dimensionless. The dimensional parameters were: cell activation time ($t_{\text{trigg_cell}}$), cellular radius (r_{cell}), maximum cellular influence time (t_{max}), and combustion time or combustion duration (t_{comb}). The dimensionless parameters were defined as: Stage of Cellular Dominance (SCD) and Cellular Combustion Stage (CCS).
- **Defining the area of interest for the study of flame cellularity and pilot experiment series:** Based on experiments and literature, an area of interest was defined at a temperature of 343 K, a relative equivalence ratio in the range of [0.8; 1.4], and an initial pressure between 0.15 MPa and 0.3 MPa.

- **Calculation of cellular parameters for the pilot experiment series:** An initial series of pilot experiments was conducted, which was necessary for an initial study of the behavior and approximation of the cellular parameters within the defined area of interest.
- **Selection of the best experimental design for the study of flame cellularity:** An I-optimal design was selected to develop the model covering all the cellular parameters based on efficiency, variance, and response estimation within the area of interest.
- **Development of the predictive model for each selected cellular parameter:** 60 experiments were designed under the most significant conditions of the area of study, and based on these results, the predictive model was developed using the JMP software. This model was a cubic function of the relative equivalence ratio and a quadratic function of pressure. For the dimensional cellular parameters, the most influential factor in the responses was the relative equivalence ratio, while for the dimensionless parameters, although the relative equivalence ratio was important, pressure also played a determining role in the response values.

The response curves of the model were presented for each of the cellular parameters as a function of the relative equivalence ratio and the initial pressure. Subsequently, the results provided by the model for the cellular parameters were compared with the combustion velocities obtained experimentally. This was done to check the model's adequacy and, especially, to determine if the model could predict more features of the combustion velocity evolution. It was determined that there were several acceleration patterns of combustion velocity due to cellularity, which were grouped into: "single-stage" acceleration, "transition between one and two stages", "two-stages", "transition between two stages and progressive," and "progressive" acceleration. It was concluded that the model, in addition to predicting the onset of acceleration and thus cellularity, could also predict the type of acceleration experienced by the combustion velocity due to cellularity. For this purpose, the cellular parameters "Stage of Cellular Dominance" (SCD) and "cellular activation time" ($t_{\text{trigg_cell}}$) were particularly useful.

The limits of each of the mentioned acceleration types were defined according to the following criteria: a combustion process is said to have a "single-stage" combustion velocity acceleration if it satisfies that $\text{SCD} < 0.21$ and $t_{\text{trigg_cell}} < 53$ ms. Secondly, combustion processes with accelerations transitioning from one stage to two are delimited by an SCD within the range of $[0.21; 0.32)$ and $t_{\text{trigg_cell}} < 53$ ms. The accelerations "transition between two stages and progressive" are identified by an $\text{SCD} \geq 0.45$ and $t_{\text{trigg_cell}} < 53$ ms. Finally, "progressive" accelerations are characterized by having a very broad SCD range, with the restriction that $\text{SCD} \geq 0.16$, but the key feature is that $t_{\text{trigg_cell}} \geq 53$ ms, as they are associated with slow, long-duration combustion processes.

The model was not as adequate in predicting the onset of cellularity in very rich equivalence ratio combustion processes (1.4), which undergo “progressive” acceleration. This is because the criterion for the onset of cellularity through combustion velocity acceleration is more diffuse under these conditions, and the chosen I-optimal design maximizes efficiency (or minimizes variance) within the area of interest and reduces experiments under extreme conditions (such as the relative equivalence ratio of 1.4, at the boundary of the area of study).

Globally, it can be said that the leaner equivalence ratio favors single-stage accelerations, accelerations transitioning between stages and two-stage accelerations occur in richer relative equivalence ratios between 1 and 1.22, and progressive acceleration is found in richer relative equivalence ratios (>1.3). In medium equivalence ratios (between 1 and 1.3), increasing pressure favors the transition from one-stage accelerations to progressive accelerations, passing through the other types mentioned.

Finally, to complete the model analysis, the images were quantitatively analyzed using a parameter called "cellular density" (ρ_{cell}), obtained as a result of a Python program developed in OpenCV within the context of this Thesis for image analysis. Cellular density is the number of objects per unit area of the flame front detected by the program at each instant.

The evolution of the combustion velocity from the ethanol experiments was compared with the evolution of the cellular density (quantitative cellularity) in the same experiment. To compare the trends of both parameters, they were normalized between 0 and 1 (minimum and maximum value of each) and the resulting curves were compared. As a result and conclusion of this analysis, it was found that, in the vast majority of combustion processes, the normalized combustion velocity curve and the normalized cellularity curve overlapped, with very similar growth observed in both. This means that cellularity has a direct influence not only on the acceleration of the combustion velocity but also on the way in which it accelerates (different types of acceleration, as mentioned earlier). Additionally, it was determined that the morphology of the flame observed qualitatively in the images clearly accompanied the evolution of the cellular density and, therefore, the evolution of the combustion velocity.

Again, this analysis was not as clear in very rich equivalence ratio combustion processes (1.4), although a clear relationship between cellular density, combustion velocity, and images could still be observed, albeit less evident than in combustion processes under other conditions.

Finally, parallels were found between the cellularity patterns of the one- and two-stage ethanol combustion processes, and transitional stages, with those flames from stable hydrogen and methane combustion processes also analyzed in this Thesis, associated with the hydrodynamic effect. On the other hand, the morphology of combustion processes with progressive acceleration resembled those flames obtained in unstable hydrogen and methane combustion processes.

8.3. Future work

As future work based on the research conducted throughout this Doctoral Thesis, the following lines of investigation are proposed. First, the application of the “stability study of the combustion process” to the combustion processes studied with ethanol, and vice versa, the application of the “stability study of the flame” to the hydrogen and methane mixtures studied in this Thesis. Secondly, it is proposed to expand both studies, the “stability study of the combustion process” and “stability study of the flame”, to other high-interest fuels, such as ammonia and its mixtures with hydrogen. Finally, the results that have not yet been published will be submitted to high-impact scientific journals, such as those belonging to Chapter 7 of this Thesis.

CHAPTER 9:

BIBLIOGRAPHY

9. BIBLIOGRAPHY

- [1] P. K. Panigrahi and K. Muralidhar, *Schlieren and Shadowgraph Methods in Heat and Mass Transfer*, vol. 2, 2012. [Online]. Available: <http://www.springerlink.com/index/10.1007/978-1-4614-4535-7%5Cnhttp://books.google.com/books?id=mUAC5oioRJIC&pgis=1>
- [2] M. Reyes, F. V. Tinaut, B. Giménez, and A. Camaño, “Combustion and Flame Front Morphology Characterization of H₂–CO Syngas Blends in Constant Volume Combustion Bombs,” *Energy & Fuels*, Jan. 2021, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c03598.
- [3] F. V. Tinaut, M. Reyes, A. Melgar, and B. Giménez, “Optical characterization of hydrogen-air laminar combustion under cellularity conditions,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 25, pp. 12857–12871, 2019, doi: 10.1016/j.ijhydene.2018.11.134.
- [4] Y. Cao, M. Dahari, I. Tlili, and A. Raise, “Investigation on the laminar flame speed of CH₄/CO₂/air mixture at atmospheric and high pressures using Schlieren photography,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 55, pp. 31151–31161, Nov. 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.08.061.
- [5] J. M. a Desantes Fernández and M. Lapuerta Amigó, *Fundamentos de combustión*. Valencia: Universidad Politécnica de Valencia, Servicio de Publicaciones, 1991.
- [6] F. Payri and J. M. Desantes, Eds., *Motores de Combustión Interna Alternativos*, vol. 1. Reverté S. A., 2011.
- [7] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engin Fundamentals*. United States of America: McGraw-Hill, Inc., 1988.
- [8] P. Clavin, “Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows,” *Prog Energy Combust Sci*, vol. 11, no. 1, pp. 1–59, 1985, doi: 10.1016/0360-1285(85)90012-7.
- [9] C. K. Law and C. J. Sung, “Structure, aerodynamics, and geometry of premixed flamelets,” *Prog Energy Combust Sci*, vol. 26, no. 4, pp. 459–505, 2000, doi: 10.1016/S0360-1285(00)00018-6.
- [10] M. Reyes, R. Sastre, B. Giménez, and C. Sesma, “Experimental, Kinetic Modeling and Morphologic Study of the Premixed Combustion of Hydrogen/Methane Mixtures,” *Energies (Basel)*, vol. 15, no. 10, p. 3722, 2022, doi: 10.3390/en15103722.
- [11] F. A. Williams, *Combustion Theory, (1985)*. 1985.

9. Bibliography

- [12] G. H. Markstein, Ed., *Non-steady Flame Propagation*. New York: Pergamon Press, 1964. [Online]. Available: <https://books.google.es/books?id=wICoBQAAQBAJ&lpg=PP1&ots=k96aSYcRhD&lr&hl=es&pg=PR4#v=onepage&q&f=false>
- [13] D. R. Dowdy, D. B. Smith, S. C. Taylor, and A. Williams, "The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures," *Symposium (International) on Combustion*, vol. 23, no. 1, pp. 325–332, 1991, doi: 10.1016/S0082-0784(06)80275-4.
- [14] S. G. Davis, J. Quinard, and G. Searby, "Determination of Markstein numbers in counterflow premixed flames," *Combust Flame*, vol. 130, no. 1–2, pp. 112–122, 2002, doi: 10.1016/S0010-2180(02)00369-3.
- [15] Á. Lafuente, *Metodología para el diagnóstico de la velocidad de combustión laminar de mezclas de gases combustibles a partir de la medida de la presión instantánea en una bomba de combustión a volumen constante*. Valladolid: Universidad de Valladolid, 2008.
- [16] P. Clavin and J. C. Graña-Otero, "Curved and stretched flames: The two Markstein numbers," *J Fluid Mech*, vol. 686, pp. 187–217, 2011, doi: 10.1017/jfm.2011.318.
- [17] A. G. Gaydon and H. G. Wolfhard, *Flames. Their structure, radiation and temperature*, Fourth edi. London: Chapman and Hall, 1979.
- [18] M. Lackner, F. Winter, and A. K. Agarwal, Eds., *Handbook of Combustion Vol. 1: Fundamentals and Safety*. Weinheim: WILEY-VCH, 2010.
- [19] T. García Armingol, *Operational issues and advanced monitoring in lean premixed syngas combustion*. Zaragoza: Departament of Materials and Fluids Science and Technology School of Engineering and architecture, University of Zaragoza, 2014.
- [20] M. Reyes Serrano, *Caracterización de la combustión y el autoencendido de combustibles líquidos en mezclas homogéneas para su uso en motores térmicos en modo HCCI*. Valladolid: Universidad de Valladolid, 2008.
- [21] A. G. Gaydon, *The Spectroscopy of Flames*, Second edi. London: Chapman and Hall, 1974.
- [22] B. S. Ludwig Christian Haber, *An investigation into the origin, measurement and application of chemiluminescence light emissions from premixed flames*. Blacksburg, Virginia: Virginia Polytechnic Institute and State University, 2000.
- [23] P. K. Panigrahi and K. Muralidhar, *Schlieren and Shadowgraph Methods in Heat and Mass Transfer*, vol. 2. 2012.

- [24] G. S. Settles, *Schlieren und shadowgraph techniques: visualizing phenomena in transparent media - Experimental Fluid Mechanics*. 2001.
- [25] S. Kook, M. K. Le, S. Padala, and E. R. Hawkes, “Z-type schlieren setup and its application to high-speed imaging of gasoline sprays,” *SAE Technical Papers*, no. August, 2011, doi: 10.4271/2011-01-1981.
- [26] D. Bradley and C. M. Harper, “The development of instabilities in laminar explosion flames,” *Combust Flame*, vol. 99, no. 3–4, pp. 562–572, Dec. 1994, doi: 10.1016/0010-2180(94)90049-3.
- [27] B. Nawaz *et al.*, “Optical Characterization of cellular instabilities in spherically expanding ammonia-hydrogen flames,” *13th U.S. National Combustion Meeting Organized by the Central States Section of the Combustion Institute*, no. Pre-Print, p. Pre-Print, 2023, doi: <https://doi.org/10.31224/3018>.
- [28] G. Gu, J. Huang, W. Han, and C. Wang, “Propagation of hydrogen–oxygen flames in Hele-Shaw cells,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 21, pp. 12009–12015, Mar. 2021, doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.01.071.
- [29] F. Li, C. fon Lee, Z. Wang, H. Wu, and G. Lu, “Schlieren investigation on impacts of duct size on macroscopic spray characteristics of ducted fuel injection,” *Appl Therm Eng*, vol. 176, p. 115440, Jul. 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.115440>.
- [30] Y. Yu, “Experimental study on effects of ethanol-diesel fuel blended on spray characteristics under ultra-high injection pressure up to 350 MPa,” *Energy*, vol. 186, p. 115768, Nov. 2019, doi: 10.1016/j.energy.2019.07.098.
- [31] B. Giménez, A. Melgar, A. Horrillo, and F. V. Tinaut, “A correlation for turbulent combustion speed accounting for instabilities and expansion speed in a hydrogen-natural gas spark ignition engine,” *Combust Flame*, vol. 223, pp. 15–27, 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.09.026>.
- [32] M. Matalon, “Intrinsic flame instabilities in premixed and nonpremixed combustion,” *Annu Rev Fluid Mech*, vol. 39, pp. 163–191, 2007, doi: 10.1146/annurev.fluid.38.050304.092153.
- [33] A. G. Istratov and V. B. Librovich, “On the stability of propagation of spherical flames,” *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, vol. 7, no. 1, pp. 43–50, 1966, doi: 10.1007/BF00912830.
- [34] V. V. Bychkov and M. A. Liberman, “Dynamics and stability of premixed flames,” *Physics Report*, vol. 325, no. 4–5, pp. 115–237, 2000, doi: 10.1016/S0370-1573(99)00081-2.

- [35] F. Oppong, Z. Luo, X. Li, Y. Song, and C. Xu, "Intrinsic instability of different fuels spherically expanding flames: A review," *Fuel Processing Technology*, vol. 234, p. 107325, Sep. 2022, doi: 10.1016/J.FUPROC.2022.107325.
- [36] D. Lapalme, "Impact de la composition du syngas sur la vitesse de flamme et la stabilité du front de flamme," École de Technologie Supérieure, Université du Québec, Montréal, 2017.
- [37] R. Addabbo, J. K. Bechtold, and M. Matalon, "Wrinkling of spherically expanding flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 2, pp. 1527–1535, 2002, doi: 10.1016/S1540-7489(02)80187-0.
- [38] F. Oppong, L. Zhongyang, X. Li, and C. Xu, "Inherent instabilities in ethyl acetate premixed flames," *Fuel*, vol. 290, no. December 2020, p. 120000, 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2020.120000.
- [39] R. Addabbo, *The Structure and Stability of Spanding and Converging Near-Stoichiometric Flames*. New Jersey: Faculty of New Jersey Institute of Technology and Rutgers, 2001.
- [40] H. Zhao, J. Wang, Z. Bian, X. Cai, X. Li, and Z. Huang, "Onset of cellular instability and self-acceleration propagation of syngas spherically expanding flames at elevated pressures," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 51, pp. 27995–28006, 2019, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.09.038.
- [41] D. Bradley, "Instabilities and flame speeds in large-scale premixed gaseous explosions," *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 358, no. 1764, pp. 3567–3581, 2000, doi: 10.1098/rsta.1999.0510.
- [42] M. Matalon, "Intrinsic flame instabilities in premixed and nonpremixed combustion," *Annu Rev Fluid Mech*, vol. 39, pp. 163–191, 2007, doi: 10.1146/annurev.fluid.38.050304.092153.
- [43] M. Matalon, "The Darrieus-Landau instability of premixed flames," *Fluid Dyn Res*, vol. 50, no. 5, p. 51412, 2018, doi: 10.1088/1873-7005/aab510.
- [44] R. Addabbo, "The structure and stability of expanding and converging near-stoichiometric flames," [PhD Thesis], New Jersey's Science and Technology University, Newark, New Jersey, 2001.
- [45] M. Reyes, R. Sastre, F. V. Tinaut, and J. Rodríguez-Fernández, "Study and characterization of the instabilities generated in expanding spherical flames of hydrogen/methane/air mixtures," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 7, pp. 22616–22632, 2022, doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.05.063.

- [46] X. Cai, J. Wang, Z. Bian, H. Zhao, H. Dai, and Z. Huang, "On transition to self-similar acceleration of spherically expanding flames with cellular instabilities," *Combust Flame*, vol. 215, pp. 364–375, 2020, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.02.001.
- [47] W. Kim, Y. Sato, T. Johzaki, and T. Endo, "Experimental study on the onset of flame acceleration due to cellular instabilities," *J Loss Prev Process Ind*, vol. 60, no. May, pp. 264–268, 2019, doi: 10.1016/j.jlp.2019.05.008.
- [48] D. Bradley, C. G. W. Sheppard, R. Woolley, D. A. Greenhalgh, and R. D. Lockett, "The development and structure of flame instabilities and cellularity at low Markstein numbers in explosions," *Combust Flame*, vol. 122, no. 1–2, pp. 195–209, 2000, doi: 10.1016/S0010-2180(00)00113-9.
- [49] J. K. Bechtold and M. Matalon, "Hydrodynamic and diffusion effects on the stability of spherically expanding flames," *Combust Flame*, vol. 67, no. 1, pp. 77–90, 1987, doi: 10.1016/0010-2180(87)90015-0.
- [50] D. Bradley, C. G. W. W. Sheppard, R. Woolley, D. A. Greenhalgh, and R. D. Lockett, "The development and structure of flame instabilities and cellularity at low Markstein numbers in explosions," *Combust Flame*, vol. 122, no. 1–2, pp. 195–209, Jul. 2000, doi: 10.1016/S0010-2180(00)00113-9.
- [51] Y. H. Jiang, G. X. Li, H. M. Li, L. Li, and L. L. Tian, "Study on the influence of flame inherent instabilities on crack propagation of expanding premixed flame," *Fuel*, vol. 233, no. May, pp. 504–512, 2018, doi: 10.1016/j.fuel.2018.06.088.
- [52] C. K. Law, G. Jomaas, and J. K. Bechtold, "Cellular instabilities of expanding hydrogen/propane spherical flames at elevated pressures: Theory and experiment," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, no. 1, pp. 159–167, 2005, doi: 10.1016/j.proci.2004.08.266.
- [53] O. C. Kwon, G. Rozenchan, and C. K. Law, "Cellular instabilities and self-acceleration of outwardly propagating spherical flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 2, pp. 1775–1783, 2002, doi: 10.1016/S1540-7489(02)80215-2.
- [54] G. Jomaas, C. K. Law, and J. K. Bechtold, "On transition to cellularity in expanding spherical flames," *J Fluid Mech*, vol. 583, pp. 1–26, 2007, doi: 10.1017/S0022112007005885.
- [55] T. Li *et al.*, "Investigation on hydrogen/ethanol intrinsic flame instability," *Combust Flame*, vol. 241, p. 112064, 2022, doi: 10.1016/j.combustflame.2022.112064.
- [56] H. Wu, J. Zheng, X. Dong, S. Zhang, and Y. Ding, "Investigations on the cellular instabilities of expanding hydrogen/methanol spherical flame," *Int J Hydrogen*

- Energy*, vol. 46, no. 67, pp. 33601–33615, 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.07.194>.
- [57] X. Li, Q. Wang, F. Oppong, W. Liu, and C. Xu, “Cellularization characteristics of ethyl acetate spherical expanding flame,” *Fuel*, vol. 291, p. 120213, May 2021, doi: [10.1016/J.FUEL.2021.120213](https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2021.120213).
- [58] N. Zhang *et al.*, “Numerical and theoretical investigation of ethanol/air flame instability,” *Combustion Theory and Modelling*, vol. 24, no. 6, pp. 1108–1129, 2020, doi: [10.1080/13647830.2020.1820578](https://doi.org/10.1080/13647830.2020.1820578).
- [59] F. Liu *et al.*, “Numerical study and cellular instability analysis of E30-air mixtures at elevated temperatures and pressures,” *Fuel*, vol. 271, no. November 2019, p. 117458, Jul. 2020, doi: [10.1016/j.fuel.2020.117458](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117458).
- [60] H. J. Kim, K. Van, D. K. Lee, C. S. Yoo, J. Park, and S. H. Chung, “Laminar flame speed, Markstein length, and cellular instability for spherically propagating methane/ethylene–air premixed flames,” *Combust Flame*, vol. 214, pp. 464–474, 2020, doi: [10.1016/j.combustflame.2020.01.011](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.01.011).
- [61] Z. Wang, “Experimental and theoretical studies of laminar burning speed and flame instability of alternative fuels and refrigerants,” [PhD Thesis], Northeastern University, Boston, Massachusetts, 2020.
- [62] J. Beeckmann *et al.*, “Propagation speed and stability of spherically expanding hydrogen/air flames: Experimental study and asymptotics,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, no. 1, pp. 1531–1538, 2017, doi: [10.1016/j.proci.2016.06.194](https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.194).
- [63] M. Reyes, F. V. Tinaut, A. Horrillo, and A. Lafuente, “Experimental characterization of burning velocities of premixed methane-air and hydrogen-air mixtures in a constant volume combustion bomb at moderate pressure and temperature,” *Appl Therm Eng*, vol. 130, pp. 684–697, Feb. 2018, doi: [10.1016/j.applthermaleng.2017.10.165](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.10.165).
- [64] E. Hu, Z. Huang, J. He, J. Zheng, and H. Miao, “Measurements of laminar burning velocities and onset of cellular instabilities of methane-hydrogen-air flames at elevated pressures and temperatures,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 13, pp. 5574–5584, 2009, doi: [10.1016/j.ijhydene.2009.04.058](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.04.058).
- [65] S. Huang, R. Huang, Y. Zhang, P. Zhou, Z. Wang, and Z. Yin, “Relationship between cellular morphology and self-acceleration in lean hydrogen-air expanding flames,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 59, pp. 31531–31543, 2019, doi: [10.1016/j.ijhydene.2019.09.229](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.09.229).

- [66] Y. huan Jiang, G. xiu Li, H. meng Li, G. peng Zhang, and J. cheng Lv, "Experimental study on the Influence of Hydrogen Fraction on Self-acceleration of H₂/CO/air laminar premixed flame," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 3, pp. 2351–2359, 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.11.044.
- [67] S. Yang, A. Saha, F. Wu, and C. K. Law, "Morphology and self-acceleration of expanding laminar flames with flame-front cellular instabilities," *Combust Flame*, vol. 171, pp. 112–118, Sep. 2016, doi: 10.1016/j.combustflame.2016.05.017.
- [68] N. I. D. Hinton, "Measuring laminar burning velocities using constant volume combustion vessel technique," [PhD Thesis], University of Oxford, Michaelmas, 2014.
- [69] B. Giménez, A. Melgar, A. Horrillo, and F. Tinaut, "Combustion speed in ICE: thermodynamic model for combustion speed, expansion speed, data base," 2019, *Mendeley Data*, V1. doi: 10.17632/wskmmkg6rk.1.
- [70] A. Omari and L. Tartakovsky, "Measurement of the laminar burning velocity using the confined and unconfined spherical flame methods – A comparative analysis," *Combust Flame*, vol. 168, pp. 127–137, 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.03.012>.
- [71] E. Robert and P. A. Monkewitz, "Thermal-diffusive instabilities in unstretched, planar diffusion flames," *Combust Flame*, vol. 159, no. 3, pp. 1228–1238, 2012.
- [72] J. D. Naber, D. L. Siebers, S. S. Di Julio, and C. K. Westbrook, "Effects of natural gas composition on ignition delay under diesel conditions," *Combust Flame*, vol. 99, no. 2, pp. 192–200, 1994, doi: 10.1016/0010-2180(94)90122-8.
- [73] B. González del Regueral González del Corral, "Aprovechamiento de la exergía física del GNL," Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas, Universidad Politécnica de Madrid, 2010. doi: <https://doi.org/10.20868/UPM.thesis.5630>.
- [74] P. Lott and O. Deutschmann, "Lean-Burn Natural Gas Engines: Challenges and Concepts for an Efficient Exhaust Gas Aftertreatment System," *Emission Control Science and Technology*, vol. 7, no. 1, pp. 1–6, 2021, doi: 10.1007/s40825-020-00176-w.
- [75] M. Reyes, A. Melgar, A. Pérez, and B. Giménez, "Study of the cycle-to-cycle variations of an internal combustion engine fuelled with natural gas/hydrogen blends from the diagnosis of combustion pressure," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 35, pp. 15477–15487, 2013, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.09.071.
- [76] D. Deublein and A. Steinhauser, *Biogas from Waste and Renewable Sources*. Geggendorf, Germany: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008.

- [77] T. M. Lima *et al.*, “An Overview of Hydrogen Production from Renewable Sources and Its Main Applications,” *ChemistrySelect*, vol. 9, no. 35, 2024, doi: 10.1002/slct.202401237.
- [78] M. Reyes, F. V. Tinaut, B. Giménez, and J. V. Pastor, “Effect of hydrogen addition on the OH* and CH* chemiluminescence emissions of premixed combustion of methane-air mixtures,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 42, pp. 19778–19791, 2018, doi: 10.1016/j.ijhydene.2018.09.005.
- [79] C. Tang *et al.*, “Measurements of laminar burning velocities and Markstein lengths of propane-hydrogen-air mixtures at elevated pressures and temperatures,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 23, pp. 7274–7285, 2008, doi: 10.1016/j.ijhydene.2008.08.053.
- [80] M. Reyes, F. V. Tinaut, A. Melgar, and A. Pérez, “Characterization of the combustion process and cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine fuelled with natural gas/hydrogen mixtures,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 3, pp. 2064–2074, 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2015.10.082.
- [81] S. Verhelst and T. Wallner, “Hydrogen-fueled internal combustion engines,” *Prog Energy Combust Sci*, vol. 35, no. 6, pp. 490–527, 2009, doi: 10.1016/j.pecs.2009.08.001.
- [82] Z. Y. Sun, F. S. Liu, X. C. Bao, and X. H. Liu, “Research on cellular instabilities in outwardly propagating spherical hydrogen-air flames,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 9, pp. 7889–7899, 2012, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.02.011.
- [83] F. Wu, G. Jomaas, and C. K. Law, “An experimental investigation on self-acceleration of cellular spherical flames,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, no. 1, pp. 937–945, 2013, doi: 10.1016/j.proci.2012.05.068.
- [84] Y. H. Jiang, G. X. Li, F. S. Li, Z. Y. Sun, and H. M. Li, “Experimental investigation of correlation between cellular structure of the flame front and pressure,” *Fuel*, vol. 199, pp. 65–75, Jul. 2017, doi: 10.1016/J.FUEL.2017.02.036.
- [85] C. K. Law and O. C. Kwon, “Effects of hydrocarbon substitution on atmospheric hydrogen-air flame propagation,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 29, no. 8, pp. 867–879, 2004, doi: 10.1016/j.ijhydene.2003.09.012.
- [86] A. SMALLBONE, K. TSUNEYOSHI, and T. KITAGAWA, “Turbulent and Stable/Unstable Laminar Burning Velocity Measurements from Outwardly Propagating Spherical Hydrogen-Air Flames at Elevated Pressures,” *Journal of Thermal Science and Technology*, vol. 1, no. 1, pp. 31–41, 2006, doi: 10.1299/jtst.1.31.

- [87] M. Zhang, Y. Ge, X. Wang, H. Xu, J. Tan, and L. Hao, "Effects of ethanol and aromatic compositions on regulated and unregulated emissions of E10-fuelled China-6 compliant gasoline direct injection vehicles," *Renew Energy*, vol. 176, pp. 322–333, 2021, doi: 10.1016/j.renene.2021.03.029.
- [88] D. Jin, K. Choi, C.-L. Myung, Y. Lim, J. Lee, and S. Park, "The impact of various ethanol-gasoline blends on particulates and unregulated gaseous emissions characteristics from a spark ignition direct injection (SIDI) passenger vehicle," *Fuel*, vol. 209, pp. 702–712, 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.08.063>.
- [89] I. S. Horváth, M. Tabatabaei, K. Karimi, and R. Kumar, "Recent updates on biogas production - A review," 2016, *Green Wave Publishing of Canada*. doi: 10.18331/BRJ2016.3.2.4.
- [90] H. Zabed, J. N. Sahu, A. Suely, A. N. Boyce, and G. Faruq, "Bioethanol production from renewable sources: Current perspectives and technological progress," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 71, pp. 475–501, May 2017, doi: 10.1016/J.RSER.2016.12.076.
- [91] L. F. M. Gárzon Lama, L. Pizzuti, J. Sotton, and C. A. Martins, "Experimental investigation of hydrous ethanol/air flame front instabilities at elevated temperature and pressures," *Fuel*, vol. 287, no. November 2020, 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2020.119555.
- [92] N. Zhang *et al.*, "Numerical and theoretical investigation of ethanol/air flame instability," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 24, no. 6, pp. 1108–1129, 2020, doi: 10.1080/13647830.2020.1820578.
- [93] F. Liu *et al.*, "Numerical study and cellular instability analysis of E30-air mixtures at elevated temperatures and pressures," *Fuel*, vol. 271, no. November 2019, 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2020.117458.
- [94] M. Reyes, J. F. Pérez, and R. Sastre, "Combustion performance and flame front morphology of producer gas from a biomass gasification-based cookstove," *Fuel*, vol. 362, no. December 2023, 2024, doi: 10.1016/j.fuel.2023.130763.
- [95] J. Jetter *et al.*, "Pollutant Emissions and Energy Efficiency under Controlled Conditions for Household Biomass Cookstoves and Implications for Metrics Useful in Setting International Test Standards," *Environ Sci Technol*, vol. 46, no. 19, pp. 10827–10834, Oct. 2012, doi: 10.1021/es301693f.
- [96] J. Wilke, O. Vogel, and L. Vogt, "Why are you running and does it hurt? Pain, motivations and beliefs about injury prevention among participants of a large-scale public running event," *Int J Environ Res Public Health*, vol. 16, no. 19, 2019, doi: 10.3390/ijerph16193766.

9. Bibliography

- [97] J. Tryner, J. W. Tillotson, M. E. Baumgardner, J. T. Mohr, M. W. DeFoort, and A. J. Marchese, “The Effects of Air Flow Rates, Secondary Air Inlet Geometry, Fuel Type, and Operating Mode on the Performance of Gasifier Cookstoves,” *Environ Sci Technol*, vol. 50, no. 17, pp. 9754–9763, 2016, doi: 10.1021/acs.est.6b00440.
- [98] E. Monteiro and A. Rouboa, “Measurements of the Laminar Burning Velocities for Typical Syngas–Air Mixtures at Elevated Pressures,” *J Energy Resour Technol*, vol. 133, no. 3, Sep. 2011, doi: 10.1115/1.4004607.
- [99] L. van Treek, M. Lubrano Lavadera, L. Seidel, F. Mauss, and A. A. Konnov, “Experimental and modelling study of laminar burning velocity of aqueous ethanol,” *Fuel*, vol. 257, p. 116069, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116069>.
- [100] X. Wang *et al.*, “Evaluation of hydrous ethanol as a fuel for internal combustion engines: A review,” *Renew Energy*, vol. 194, pp. 504–525, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2022.05.132>.
- [101] B. I. López García, R. Sastre Zamora, and M. Reyes Serrano, *Desarrollo de un programa en Python para seguimiento de imágenes de llamas esféricas*. Valladolid: Universidad de Valladolid, 2024. [Online]. Available: <https://uvadoc.uva.es/handle/10324/68758>
- [102] A.-J. Horrillo Güemes, *Utilización de modelos multizona para la predicción de las emisiones contaminantes de escape en motores de encendido provocado*. Valladolid: Universidad de Valladolid, 1998.
- [103] D. Iglesias Hoyos, “Caracterización de mezclas de combustibles para motores térmicos en una bomba de combustión a volumen constante,” Escuela de Ingenieros Industriales, Universidad de Valladolid, 2015. doi: 10.35376/10324/35354.
- [104] National and I. of S. and Technology, “NIST Scientific and Technical Database.” [Online]. Available: www.nist.gov
- [105] S. P. Marshall, S. Taylor, C. R. Stone, T. J. Davies, and R. F. Cracknell, “Laminar burning velocity measurements of liquid fuels at elevated pressures and temperatures with combustion residuals,” *Combust Flame*, vol. 158, no. 10, pp. 1920–1932, 2011, doi: 10.1016/j.combustflame.2011.02.016.
- [106] N. Sekularac, X. H. Fang, V. Shankar, S. J. Baker, F. C. P. Leach, and M. H. Davy, “Development of a laminar burning velocity empirical correlation for combustion of iso-octane/ethanol blends in air,” *Fuel*, vol. 307, no. September 2021, p. 121880, 2022, doi: 10.1016/j.fuel.2021.121880.
- [107] D. Bradley, P. H. Gaskell, and X. J. Gu, “Burning velocities, markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames: A computational study,”

9. Bibliography

- Combust Flame*, vol. 104, no. 1, pp. 176–198, 1996, doi: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(95\)00115-8](https://doi.org/10.1016/0010-2180(95)00115-8).
- [108] X. J. Gu, M. Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley, “Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane-air mixtures,” *Combust Flame*, vol. 121, no. 1–2, pp. 41–58, 2000, doi: [10.1016/S0010-2180\(99\)00142-X](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(99)00142-X).
- [109] D. Bradley, R. A. Hicks, M. Lawes, C. G. W. Sheppard, and R. Woolley, “The Measurement of Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers for Iso-octane-Air and Iso-octane-n-Heptane-Air Mixtures at Elevated Temperatures and Pressures in an Explosion Bomb,” 1998.
- [110] A. L. Camaño Camaño, “Estudio experimental y modelado CFD del proceso de combustión de mezclas combustibles de hidrógeno, metano y gas de síntesis en una bomba cilíndrica con acceso óptico,” 2021, [Online]. Available: <https://uvadoc.uva.es/handle/10324/51848>
- [111] and Z. Q. Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, “GRI-MECH 3.0.” Accessed: Nov. 23, 2024. [Online]. Available: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [112] A. R. Khan, M. R. Ravi, and A. Ray, “Experimental and chemical kinetic studies of the effect of H₂ enrichment on the laminar burning velocity and flame stability of various multicomponent natural gas blends,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 2, pp. 1192–1212, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.207>.
- [113] T. Wang, X. Zhang, J. Zhang, and X. Hou, “Automatic generation of a kinetic skeletal mechanism for methane-hydrogen blends with nitrogen chemistry,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 6, pp. 3330–3341, 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.12.116>.
- [114] D. Bradley, M. Lawes, and M. S. Mansour, “Explosion bomb measurements of ethanol–air laminar gaseous flame characteristics at pressures up to 1.4MPa,” *Combust Flame*, vol. 156, no. 7, pp. 1462–1470, 2009, doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.02.007>.
- [115] Q. Wang, Y. Song, K. Liu, X. Li, and C. Xu, “Laminar combustion characteristics of methane/methanol/air mixtures: Experimental and kinetic investigations,” *Case Studies in Thermal Engineering*, vol. 41, p. 102593, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.csite.2022.102593>.
- [116] J. R. Taylor, *Introducción al análisis de errores*. Barcelona: Editorial Reverté, 2014.

- [117] M. G. Kenward and J. H. Roger, “Small sample inference for fixed effects from restricted maximum likelihood,” *Biometrics*, vol. 53, no. 3, pp. 983–997, 1997.
- [118] M. G. Kenward and J. H. Roger, “An improved approximation to the precision of fixed effects from restricted maximum likelihood,” *Comput Stat Data Anal*, vol. 53, no. 7, pp. 2583–2595, 2009.
- [119] J. M. Rodríguez-Díaz and G. Sánchez-León, “Optimal designs for multiresponse models with double covariance structure,” *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 189, no. March, pp. 1–7, 2019, doi: 10.1016/j.chemolab.2019.03.009.
- [120] J. Z. Ho, M. Talei, and R. L. Gordon, “Direct numerical simulation of stoichiometric hydrogen/methane premixed jet flames,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 81, pp. 831–841, Sep. 2024, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2024.07.283.
- [121] E. C. Okafor, A. Hayakawa, Y. Nagano, and T. Kitagawa, “Effects of hydrogen concentration on premixed laminar flames of hydrogen-methane-air,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 5, pp. 2409–2417, 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.11.128.
- [122] S. Huang, R. Huang, P. Zhou, Y. Zhang, Z. Yin, and Z. Wang, “Role of cellular wavelengths in self-acceleration of lean hydrogen-air expanding flames under turbulent conditions,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 17, pp. 10494–10505, 2021, doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.12.124.
- [123] Y. Zhang, H. El-Merhubi, B. Lefort, L. Le Moyne, H. J. Curran, and A. Kéromnès, “Probing the low-temperature chemistry of ethanol via the addition of dimethyl ether,” *Combust Flame*, vol. 190, pp. 74–86, 2018, doi: 10.1016/j.combustflame.2017.11.011.

ANEXO 1

TABLAS ANOVA

ANEXO 1 – TABLAS ANOVA

PARÁMETROS DIMENSIONALES - DIMENSIONAL PARAMETERS¹

-
- Tiempo de activación celular - Cellular trigger time (t_{trigg_cell}) [ms]

Out[*]=

$$-707.913 + 2197.03 X1 - 2237.55 X1^2 + 774.597 X1^3 + 394.559 X2 - 410.375 X1 X2$$

In[*]:= **fit2["ANOVATable"]**

Out[*]=

	DF	SS	MS	F-Statistic	P-Value
X1	1	7947.9	7947.9	559.744	3.56422×10^{-30}
X2	1	256.473	256.473	18.0625	0.0000850954
X1 X2	1	3709.86	3709.86	261.273	2.41558×10^{-22}
X1 ²	1	5932.59	5932.59	417.813	4.38517×10^{-27}
X1 ³	1	1129.08	1129.08	79.5175	3.35932×10^{-12}
Error	54	766.755	14.1992		
Total	59	19742.7			

-
- Radio celular - Cellular radius (r_{cell}) [cm]

Out[*]=

$$-23.4083 + 99.5731 X1 - 103.795 X1^2 + 34.5044 X1^3 - 3.09406 X2 - 4.69137 X1 X2$$

In[*]:= **fit2["ANOVATable"]**

Out[*]=

	DF	SS	MS	F-Statistic	P-Value
X1	1	1.82058	1.82058	41.1247	3.6887×10^{-8}
X2	1	7.09633	7.09633	160.297	8.53851×10^{-18}
X1 X2	1	1.79991	1.79991	40.6578	4.22546×10^{-8}
X1 ²	1	6.84985	6.84985	154.73	1.74555×10^{-17}
X1 ³	1	2.23817	2.23817	50.5574	2.72667×10^{-9}
Error	54	2.39057	0.0442698		
Total	59	22.1954			

¹ X1: presión inicial en MPa – initial pressure in MPa
X2: Dosado relativo – Equivalence ratio

- Tiempo de máxima influencia celular – Maximum cellular influence time (t_{max}) [ms]

Out[*]=

$$-238.122 + 962.759 X1 - 1156.84 X1^2 + 454.824 X1^3 + 146.079 X2 - 119.764 X1 X2$$

In[*]:= fit2["ANOVAtable"]

Out[*]=

	DF	SS	MS	F-Statistic	P-Value
X1	1	16556.4	16556.4	1847.68	1.89543×10^{-43}
X2	1	450.989	450.989	50.3297	2.89514×10^{-9}
X1 X2	1	2055.04	2055.04	229.339	4.36698×10^{-21}
X1 ²	1	5773.85	5773.85	644.354	1.08431×10^{-31}
X1 ³	1	388.893	388.893	43.4	1.92144×10^{-8}
Error	54	483.877	8.96068		
Total	59	25709.1			

- Tiempo de combustion – Combustion time (t_{comb}) [ms]

Out[*]=

$$-515.46 + 1731.89 X1 - 1912.46 X1^2 + 703.588 X1^3 + 447.011 X2 - 133.592 X1 X2 - 602.52 X2^2$$

In[*]:= fit2["ANOVAtable"]

Out[*]=

	DF	SS	MS	F-Statistic	P-Value
X1	1	27357.9	27357.9	2076.56	3.44058×10^{-44}
X2	1	832.734	832.734	63.2076	1.34336×10^{-10}
X1 X2	1	2514.28	2514.28	190.843	3.33968×10^{-19}
X1 ²	1	8558.02	8558.02	649.585	2.04146×10^{-31}
X2 ²	1	60.4353	60.4353	4.58726	0.0368252
X1 ³	1	927.55	927.55	70.4044	2.67243×10^{-11}
Error	53	698.254	13.1746		
Total	59	40949.2			

PARÁMETROS DIMENSIONALES - DIMENSIONAL PARAMETERS

- Etapa de dominancia celular – Stage of Cellular Dominance (SCD)

Out[*]=

$$5.845 - 20.5204 X1 + 21.2796 X1^2 - 7.04137 X1^3 + 3.01835 X2 + 0.942825 X1 X2 - 4.8792 X2^2$$

In[*]:= fit2["ANOVAtable"]

Out[*]=

	DF	SS	MS	F-Statistic	P-Value
X1	1	0.0815877	0.0815877	67.6147	4.93905×10^{-11}
X2	1	0.361325	0.361325	299.443	1.85017×10^{-23}
X1 X2	1	0.0808933	0.0808933	67.0392	5.61635×10^{-11}
X1 ²	1	0.274091	0.274091	227.149	8.29803×10^{-21}
X2 ²	1	0.00890326	0.00890326	7.37846	0.00889448
X1 ³	1	0.0930043	0.0930043	77.0761	6.50425×10^{-12}
Error	53	0.0639528	0.00120666		
Total	59	0.963757			

- Etapa de combustión celular – Cellular Combustion Stage (CCS)

Out[*]=

$$- 515.46 + 1731.89 X1 - 1912.46 X1^2 + 703.588 X1^3 + 447.011 X2 - 133.592 X1 X2 - 602.52 X2^2$$

In[*]:= **fit2["ANOVATable"]**

Out[*]=

	DF	SS	MS	F-Statistic	P-Value
X1	1	27357.9	27357.9	2076.56	3.44058×10^{-44}
X2	1	832.734	832.734	63.2076	1.34336×10^{-10}
X1 X2	1	2514.28	2514.28	190.843	3.33968×10^{-19}
X1 ²	1	8558.02	8558.02	649.585	2.04146×10^{-31}
X2 ²	1	60.4353	60.4353	4.58726	0.0368252
X1 ³	1	927.55	927.55	70.4044	2.67243×10^{-11}
Error	53	698.254	13.1746		
Total	59	40949.2			

ANEXO 2

ARTÍCULOS PUBLICADOS – PUBLISHED PAPERS

Publicación 1 – Paper 1

	Title	Authors	Year	Journal (quartile), editor
1	<i>Characterization of cellular structure appearance in ethanol expanding spherical flames</i>	Sastre Zamora, Rosaura Reyes Serrano, Miriam Rodríguez Díaz, Juan Manuel Lacey, Josh	2025	<i>Fuel (Q1), Elsevier</i>

Abstract

The objective of this work is to characterize the combustion process of ethanol flames under cellular conditions. Ethanol is considered an alternative fuel and can be used to replace fossil fuels. To investigate the behavior of ethanol as a fuel, some of its combustion properties are measured and characterized, such as laminar burning velocity and flame front stability, which strongly depend on the appearance of cellularity on the flame. The study is developed in a cylindrical constant volume combustion bomb instrumented with Schlieren technique to visualize ethanol flames and make an optical diagnosis of the combustion process. Some cellular parameters are proposed to characterize the cellular structure of the flame, which quantitatively define the appearance and cellularity development, such as cellular radius, the time for the cellular structure apparition on the flame and the influence of cellularity on the burning velocity. Other dimensionless parameters that can help to determine the influence of cellularity in the combustion process and compare between different flames. An I-Optimal design of experiments is proposed in this work to characterize the flame stability of ethanol, design the experimental testing and develop predictive models for the proposed cellular parameters. The proposed area of study to assure cellular flames is delimited by an initial temperature of 343K, initial pressures from 0.15 MPa to 0.30 MPa and equivalence ratios ranging from 0.8 to 1.4. Images confirm that models predict correctly the cellular radius and others cellular parameters, and the appearance of cellularity affects the burning velocity generating an auto-turbulence in the flame which enhance it. Predictions of cellular radius obtained with developed model are in accordance with the results obtained by other works.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133785>

Publicación 2 – Paper 2

	Title	Authors	Year	Journal (quartile), editor
2	<i>Impact of cellularity in the flame front on the burning velocity of ethanol/air flame in constant volume combustion bomb</i>	Sastre Zamora, Rosaura Reyes Serrano, Miriam Do, Hong-Quan Lefort, Benoîte (†)	Accepted* Jun 2024	<i>Measurement (Q1), Elsevier</i>

*To appear in Measurement shortly. Proof of acceptance is attached.

Abstract

The objective of this study was to characterize the impact of cellularity in the flame front on the burning velocity of ethanol/air flame in Constant Volume Combustion Bomb (CVCB) by varying the ethanol/air equivalence ratio (0.8-1.4), initial pressure (0.15-0.3MPa) and initial temperature (343-373K). The cellularity in the flame front is studied through instantaneous Schlieren images of the flame morphology with a high-speed camera. Results show that ethanol-air flames tend to develop cellularity in the flame front as the equivalence ratio increases in rich mixtures and with the increment of initial pressure and temperature, which generates an acceleration of the burning velocity. Although the acceleration in the burning velocity is noticeable in each of the experiments performed, not all of them develop in the same way: it could be a relation between the morphology of the time curve of the burning velocity and the kind of cellularity (instabilities) that occur in the flame front in each combustion. The latter depends on the conditions of the experiment. The flame front structure and the instabilities that could provoke the cellularity phenomenon during the combustion could be important to understand the transition to a turbulent combustion and characterize the increment in the burning velocity and its acceleration in premixed flames, by comparing with laminar burning velocity results obtained with kinetic modelling using Zhang *et al.*'s model.

IMEKO 2024 XXIV World Congress

Paper assessment ref #688

Dear **BENOITE**,

Your paper **Impact of cellularity in the flame front on the burning velocity of ethanol/air flame in Constant Volume Combustion Bomb** has been **accepted!**

No further actions are required.

Comment:

Dear Authors Your revised paper has been accepted for publication. **Congratulations!** Regards

To see your paper please use the following link:

<https://conferences.imeko.org/event/9/papers/823/>

Indico :: Examen par les Pairs des Articles

Publicación 3 – Paper 3

	Title	Authors	Year	Journal (quartile), editor
3	<i>Combustion performance and flame front morphology of producer gas from a biomass gasification-based cookstove</i>	Reyes Serrano, Miriam Pérez Bayer, Juan Fernando Sastre Zamora, Rosaura	2024	<i>Fuel (Q1), Elsevier</i>

Abstract

The present work investigates the last phase of the biomass gasification-based cookstove, which is the combustion process of biomass producer gas (BGP). A constant volume combustion bomb and kinetic simulation are used to characterize the behavior of the biomass producer gas and its pollutant emissions under a conventional premixed combustion process. The BGP combustion processes of two types of biomasses available in Colombia (*Pinus Patula* and *Cordia Alliodora*) are studied under certain conditions of pressure, temperature, and equivalence ratio. To characterize the combustible mixture of gases obtained after biomass gasification, a combustion chamber with cylindrical geometry equipped with a Schlieren optical diagnostic system to visualize the combustion process, and a piezoelectric pressure transducer to register the instantaneous pressure are used. By visualizing the flame front, the flame propagation speed at which the flame propagates through the combustion chamber and the morphology of the flame are studied. Instantaneous pressure is the input of a two-zone diagnostic model through which variables, such as burning velocity, temperature, mass burned fraction, etc., are obtained to characterize the combustion process of the mentioned gasification gases. Experimental results are compared and complemented with kinetic modeling results obtained with the Cantera package using the Gri-Mech 3.0 and Aramko 1.3 kinetic mechanisms, in terms of laminar burning velocity and NO, NO₂, CO, and CO₂ exhaust emissions. Results show that *Cordia Alliodora* presents higher burning velocities than *Pinus Patula* BP. However, lower CO₂ emissions are obtained during the *Cordia Alliodora* combustion, and NO_x emissions are not influenced by the type of biomass considered.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.130763>

Publicación 4 – Paper 4

	Title	Authors	Year	Journal (quartile), editor
4	<i>Study and characterization of the instabilities generated in expanding spherical flames of hydrogen/methane/air mixtures</i>	Reyes Serrano, Miriam Sastre Zamora, Rosaura Tinaut Fluixá, Francisco Vicente Rodríguez Fernández, José	2022	<i>International Journal of Hydrogen Energy (Q1), Elsevier</i>

Abstract

In the present work an analysis of the origin and nature of intrinsic instabilities in combustion processes with different hydrogen/methane mixtures is developed. These expanding spherical flame front experiments have been developed in a cylindrical constant volume combustion bomb, which allows recording the process through Schlieren photography method. The stability study in combustion processes has a great importance to assure their security and control, since the understanding of flame instabilities is necessary for improving the internal combustion engines performance. To carry out this mentioned study, a review of the concepts and parameters used in spherical flame front instabilities research is first proposed, as well as a physical explanation of each concept and the relations among them. Additionally, a methodology that aims to determine the influence of the fuel mixtures in the origin and development of the flame front instabilities is suggested. Moreover, the intrinsic effects of the combustion process, such as the thermal-diffusive and the hydrodynamic effect, are separately studied, including their individual contributions to the growth rate of instabilities which allows to determine combustion nature and to obtain the instability peninsula of each fuel mixture.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.05.063>

Publicación 5 – Paper 5

	Title	Authors	Year	Journal (quartile), editor
5	<i>Experimental, kinetic modeling and morphologic study of the premixed combustion of hydrogen/methane mixtures</i>	Reyes Serrano, Miriam Sastre Zamora, Rosaura Giménez Olavarría, Blanca Sesma Gutiérrez, Clara	2022	<i>Energies (Q3) MDPI</i>

Abstract

In this work, an experimental study and kinetic characterization of the combustion process and a morphologic study of hydrogen/methane–air mixtures are presented. The experimental study was performed in an optical access cylindrical constant-volume combustion bomb. This bomb is equipped to register the instantaneous pressure during combustion and records the combustion images using the high-speed Schlieren optical technique. This provides straightforward information to compute the flame propagation speed and direct evidence of the apparition of cellularity on the flame front. Through the images of the combustion process, it is possible to conduct a morphological study of the process using a flame monitoring model. Simultaneously, by means of a two-zone thermodynamical model, with the temporal evolution of pressure as the main intake, significant parameters are determined during the combustion process of different fuels under premixed conditions: burning velocity, rate of combustion, burned and unburned temperature, burned mass fraction, and rate of heat release, among others. Experimental results are compared with kinetic modeling results obtained with the Cantera package using the Gri-Mech 3.0 kinetic mechanism. Results show that a greater percentage of hydrogen in the fuel mixture increases the burning velocity and the cellularity of the flame front surface. At the same time, leaner mixtures and higher equivalence ratios enhance the apparition of the cellularity onset in the flames. Burning velocity increases with the increase in the initial temperature and the fuel/air mixture equivalence ratio. All the results obtained were validated with other data from the literature.

DOI: <https://doi.org/10.3390/en15103722>

