

# UC Berkeley

## UC Berkeley Previously Published Works

### Title

NUMERICAL STUDY OF FORWARD SMOLDERING COMBUSTION (in Spanish)

### Permalink

<https://escholarship.org/uc/item/43s0f5hg>

### Journal

Revista Internacional de Metodos Numericos para Calculo y Diseño en Ingenieria, 18(4)

### Authors

Rein, Guillermo  
Torero, Jose Luis  
Ellzey, Janet L.

### Publication Date

2002

Peer reviewed

# Estudio numérico de combustión latente en flujo directo

Guillermo Rein

Microgravity Combustion Labs  
60A Hesse Hall  
University of California, Berkeley CA 94720 EE.UU.  
Tel.: 1-510-643 52 82; Fax: 1-510-642 18 50  
e-mail: reingu@me.berkeley.edu

José Luis Torero

Department of Fire Protection Engineering  
University of Maryland, College Park, Maryland 20742, EE.UU.  
Tel.: 1-301-405 00 43; Fax: 1-301-405 93 83  
e-mail: jltorero@eng.umd.edu

Janet Ellzey

Department of Mechanical Engineering  
University of Texas Austin, Texas 78712, EE.UU.  
Tel.: 1-512 471 70 20; Fax: 1-512 471 10 45  
e-mail: jellzey@mail.utexas.edu

## Resumen

Este artículo presenta los resultados del estudio numérico del proceso de combustión latente en flujo directo. La combustión latente es una reacción exotérmica sin llama que se propaga en combustibles porosos. El estudio se basa en el modelo transitorio desarrollado en la Universidad de Texas en Austin, pero ampliado con varias modificaciones. En el modelo se resuelven las ecuaciones de conservación de la energía y la masa. La cinética química se modela con un esquema simplificado de tres reacciones. Las ecuaciones diferenciales se discretizan en el espacio y se resuelven en función del tiempo. El modelo no fuerza el equilibrio ni térmico ni químico entre las fases sólida y gaseosa. Las modificaciones más importantes realizadas son la inclusión de la transmisión del calor por radiación, la incorporación de un nuevo proceso de ignición y la reconsideración de la microestructura de los poros del sólido. El objetivo de las ampliaciones es completar y adaptar el modelo a los experimentos publicados para comparar resultados. El modelo se calibra de nuevo a una velocidad mayor del aire de entrada. Los resultados muestran que se estima adecuadamente la velocidad de propagación del frente de combustión.

**Palabras clave:** combustión latente, smoldering, modelo numérico, simulación, calibración.

## NUMERICAL STUDY OF FORWARD SMOLDERING COMBUSTION

## Summary

This paper presents the results from the numerical study of the forward smoldering combustion process. The study is based on the transient model developed at University of Texas at Austin but extended with some modifications. In the model, the equations of conservation of energy and mass are solved. The chemistry is represented by a simplified scheme which consists of three reactions. Equations are discretized in space and solved in time. Neither thermal nor chemical equilibrium between solid and gas phases is assumed. The more important extensions made to the original model are: radiation heat transfer is included, a new ignition process is implemented and the porous structure of the solid is reconsidered. The extensions to the original model were implemented in order to predict the experimental data. The model with its extensions has been calibrated at a higher inlet air velocity and validated. The results show that the model predicts reasonably well the velocity of propagation of the smoldering front.

**Keywords:** Smoldering combustion, numerical model, simulation, calibration.

## INTRODUCCIÓN

La combustión latente es una reacción exotérmica sin llama que se propaga por el interior de materiales combustibles porosos.

Un fuente incandescente, por ejemplo un cigarro, que provoca una combustión latente en un material poroso cercano, representa una situación particularmente común de inicio de incendios. Estadísticas de 1997 referentes a EE.UU.<sup>3</sup> muestran que aproximadamente el 30 % de las muertes en incendios residenciales se debían a fuego originado en un proceso de combustión latente. Esta reacción exotérmica puede perdurar durante largos periodos de tiempo, incluso horas, propagándose lentamente y produciendo gases, hasta finalmente acabar en combustión por llama. Si bien las llamas aceleran el proceso de destrucción, los gases emitidos anteriormente pueden ser letales por sí mismos y matar a los ocupantes si estos están expuestos durante un periodo de tiempo largo.<sup>11</sup>

Otro peligro de incendio de esta combustión está presente en la ignición de grandes concentraciones de material combustible, como residuos sólidos urbanos. Son múltiples los casos conocidos de vertederos cuyas pilas de residuos albergan durante semanas una reacción exotérmica de este tipo en su interior, liberando gran cantidad de productos gaseosos, mientras se propaga de forma descontrolada.

Multitud de materiales pueden albergar esta reacción, algunos de uso común como objetos tapizados, muebles, colchones, material celulósico, espumas poliméricas, tabaco o algodón.

Existen dudas sobre la capacidad de detección de incendio de los métodos tradicionales en presencia de reacciones de este tipo. Estas dudas se basan principalmente en la observación experimental<sup>4</sup> de que el humo producido por combustión latente no asciende rápidamente hasta el techo del recinto como en la combustión con llama. Los detectores de incendios se instalan normalmente en los techos de los recintos aprovechando que la convección natural hará ascender los productos calientes. Dado que esta combustión libera menos energía, los productos gaseosos se enfrían rápidamente siendo conducidos por la ventilación del recinto y ascienden hasta menor altura que gases más calientes. A esto se une que las partículas emitidas son hasta diez veces mayores en tamaño que las de combustión por llama, lo que impone la necesidad de modificar la sensibilidad de los detectores de humo. También, los materiales porosos hacen las veces de filtro y mantienen el humo atrapado en su interior durante más tiempo.<sup>7</sup>

En la última década, en el noble intento de mejorar la protección contra incendios, se han desarrollado productos y recubrimientos no inflamables que evitan la propagación de llamas pero favorecen la propagación de un proceso de combustión latente. Esta combustión también tiene aplicaciones industriales como la incineración de residuos y neumáticos o la conversión de biomasa en energía.

## EL PROCESO FÍSICO DE COMBUSTIÓN LATENTE

La propagación de este proceso de combustión puede verse de forma simplificada como un frente de onda caliente que se mueve a través del combustible poroso. Globalmente la propagación se basa en un equilibrio entre la energía neta liberada en las reacciones químicas, la energía necesaria para elevar la temperatura del material y las pérdidas energéticas por transmisión de calor (1). Varios de los productos gaseosos son susceptibles de posterior oxidación con lo que facilitan la transición a la combustión con llama y además representan un potencial tóxico.

En el proceso real con combustible polimérico se identifican cinco fenómenos físicos que están involucrados directamente en el balance energético y en el desarrollo del proceso.<sup>10</sup>

Tres fuentes de calor:

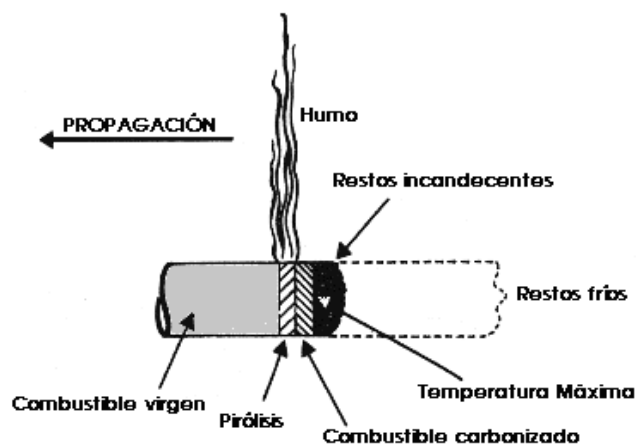
- Oxidación del combustible: todo polímero es susceptible de combinarse con el oxígeno y desprender calor a temperatura suficientemente alta. Produce restos poliméricos carbonizados y es la fuente de calor más importante.
- Oxidación de los restos carbonizados: esta reacción puede llegar a ser fuertemente exotérmica y en ocasiones su efecto resulta dominante, pero de no iniciarse en grado suficiente no aportaría calor de forma apreciable. Compite con la oxidación del combustible por el oxígeno y produce cenizas.
- Oxidación del gas: esta reacción es dominante en combustión con llama y por eso no tiene una influencia importante en combustión latente, si bien juega un papel esencial en la transición a combustión con llama.

Y dos sumideros de calor:

- Pirólisis del combustible: reacción que a temperaturas superiores a 180 °C provoca la descomposición térmica del polímero en compuestos más pequeños. Compite con la oxidación por el combustible virgen y produce restos carbonizados.
- Evaporación del agua: en materiales porosos una parte importante de su peso puede ser agua y es además producto de las reacciones de oxidación. El paso del agua de la fase condensada a vapor y viceversa afecta a la propagación de diversas maneras, con efectos antagonistas.

La ignición se produce cuando una fuente de calor está en contacto con el combustible y es capaz de elevar la temperatura de éste suficientemente. A partir de este punto pueden darse diferentes casos:

1. El oxígeno llega hasta la superficie caliente, se inicia la oxidación del sólido que es exotérmica y vuelve a repetirse el proceso (combustión latente).
2. Antes de la oxidación del sólido se inicia la degradación endotérmica de éste (pirólisis). Pueden darse otros tres casos:
  - (a) El combustible permanece en estado sólido y le sigue la reacción de oxidación propagando el frente (pirólisis seguido de combustión latente, ver Figura 1).



**Figura 1.** Diferentes zonas en un frente de combustión latente (adaptado de la referencia 6)

- (b) El combustible permanece en estado sólido pero la pirólisis capta la mayor parte de la energía liberada y no permite que se mantenga la oxidación, lo que lleva a la extinción del proceso (pirólisis seguido de extinción).
- (c) El combustible se vaporiza y se inicia la oxidación de la fase gaseosa, que es una reacción fuertemente exotérmica y puede llevar a la transición a un proceso con llamas (pirólisis seguido de combustión con llama).

El desarrollo subsiguiente de la reacción (combustión latente, con llama o extinción) se determina por el balance local de energía y masa. La combustión latente es por esto un proceso complejo donde los transportes de calor y masa compiten por llevar la reacción por diferentes caminos. La distribución de flujo en los materiales porosos es un parámetro crítico difícil de modelar. Como resultado, los estudios normalmente se desarrollan suponiendo un flujo unidimensional de masa constante a través de la zona de reacción. En este contexto, la propagación del proceso se clasifica en dos configuraciones (Figura 2): flujo directo, cuando el frente de reacción se propaga en el mismo sentido que el flujo de comburente y flujo inverso, cuando el frente de reacción se propaga en sentido contrario al flujo de comburente.

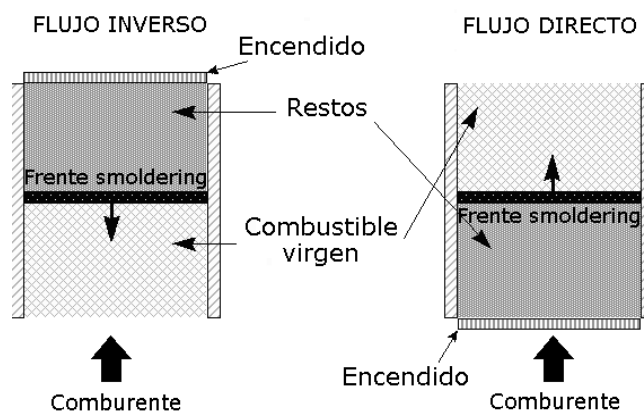


Figura 2. Dos configuraciones de propagación y flujo de aire<sup>15</sup>

La oxidación del combustible en un proceso de combustión latente no es completa, el combustible carbonizado residual corresponde a más del 90 % de la masa del combustible original y los productos de la combustión son principalmente monóxido de carbono e hidrocarburos inquemados. La energía neta liberada es baja y esto condiciona la velocidad de propagación y la temperatura máxima alcanzada. La temperatura es menor que en un proceso de llama, donde la oxidación es más completa. El rango de temperaturas de una combustión latente está entre 250 y 550 °C, mientras que la temperatura máxima de un proceso con llama típicamente está alrededor de 1600 °C. La velocidad de propagación es también baja; un colchón de tres metros de largo puede tardar en quemarse hasta cuatro horas, a 0,03 cms<sup>-1</sup> de media.

Como ejemplo común de combustión latente observado por todos, cabe mencionar la combustión de un cigarro. El tabaco de un cigarro es un combustible poroso que una vez encendido propaga el frente de reacción lentamente. La combustión normal de un cigarro no presenta llama y su temperatura máxima es baja, alrededor 400 °C.

La tendencia actual en las investigaciones de combustión latente está en centrar los esfuerzos principalmente en la realización de experimentos controlados en laboratorio, apoyando los resultados en modelos numéricos de simulación por ordenador y desarrollos analíticos. De las investigaciones que actualmente se llevan a cabo, destacan los trabajos del grupo de Fernández-Pello en colaboración con la NASA<sup>14,12</sup> para estudiar el efecto de la gravedad en

los mecanismos de transporte de masa y calor. Para determinar el comportamiento de la combustión latente este grupo ha desarrollado trabajos en condiciones de gravedad normal en la Tierra y microgravedad en el espacio.

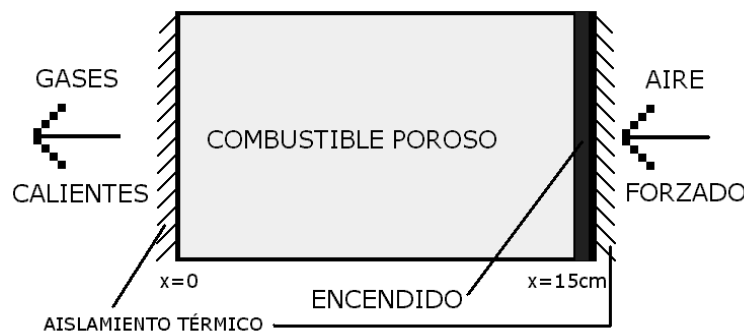
## DESCRIPCIÓN DEL MODELO Y CALIBRACIÓN

La Universidad de Texas en Austin<sup>8</sup> desarrolló en 1998 un modelo computacional para la simulación de combustión latente. La investigación que inspira este artículo se realizó empleando este modelo computacional introduciendo algunas modificaciones y calibrando de nuevo el modelo completo. En este apartado se presenta primero una descripción general del modelo para a continuación mostrar las modificaciones al modelo original.

### Descripción general del modelo

El modelo simula la propagación transitoria unidimensional de combustión latente en un combustible polimérico muy poroso con entrada forzada de aire. La simulación se desarrolla suponiendo que el proceso seguirá uno de los casos explicados en la introducción.

El combustible es una barra cilíndrica de 15 cm de largo de espuma de poliuretano de alta porosidad (Figura 3). Se eligió este combustible por ser de uso común en aislantes y tapicería. Con esta configuración la propagación es unidimensional a lo largo del eje del cilindro y no influye la gravedad. El comburente es el oxígeno disuelto en el aire seco que entra por la frontera en  $x = 15$  cm (lado derecho).



**Figura 3.** Representación esquemática. Condiciones de contorno e iniciales de la simulación

Se resuelven las ecuaciones de conservación de la energía y conservación de la masa para el sólido y el gas. No se fuerza ni el equilibrio térmico ni químico entre las fases sólida y gaseosa. Es decir, no se impone que estén a la misma temperatura por lo que se transmiten mutuamente calor por convección y se incluye un esquema cinemático para modelar el desequilibrio químico. Se plantean las ecuaciones de equilibrio y difusión de la concentración de oxígeno. El modelo maneja tres materiales en estado sólido: combustible, combustible carbonizado y cenizas.

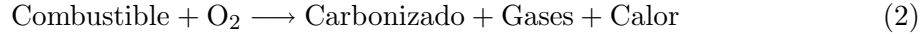
La ecuación de conservación de la energía para el estado sólido es una de las ecuaciones principales

$$\rho c \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) - \omega_o \Delta h_o - \omega_p \Delta h_p - \omega_a \Delta h_a + h_v (T_g - T_s) \quad (1)$$

Del conjunto de las reacciones químicas explicadas en el apartado anterior, para el modelo se seleccionaron tres. Este mecanismo de tres reacciones químicas representa de forma simplificada y global el conjunto de todas las reacciones químicas y fue propuesto

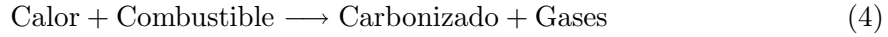
por Ohlemiller.<sup>10</sup> Las reacciones incluidas junto con la ecuación matemática que modela la velocidad de intercambio másico en el sólido para cada ecuación son:

- oxidación del combustible



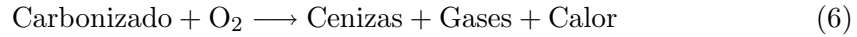
$$\omega_o = y_f^\delta \rho_f A_o y_{\text{O}_2}^\varepsilon e^{-\frac{E_{ao}}{RT}} \quad (3)$$

- pirólisis del combustible



$$\omega_p = y_f^\zeta \rho_f A_p e^{-\frac{E_{ap}}{RT}} \quad (5)$$

- oxidación del combustible carbonizado



$$\omega_a = y_c \rho_c A_a y_{\text{O}_2}^\eta e^{-\frac{E_{aa}}{RT}} \quad (7)$$

El modelo trabaja en cada nodo del dominio con propiedades ponderadas según las fracciones de masa de cada tipo de material sólido: combustible, combustible carbonizado o ceniza (8). Además, se considera que las propiedades de los restos carbonizados son iguales a las propiedades de las cenizas

$$\text{propiedad}(x) = (y_c(x) + y_a(x))\text{propiedad}_c + y_f(x)\text{propiedad}_f \quad (8)$$

## Modificaciones al modelo original

### *Apilamiento de fibras*

Se eligió una nueva estructura microscópica del material sólido que representara el apilamiento de las fibras de forma coherente con las observaciones experimentales. Se estudiaron tres posibles estructuras microscópicas: lecho de esferas, lecho de cilindros apilados y lecho de cilindros según las aristas de un cubo. Mientras que el modelo original empleaba el lecho de esferas, tras los estudios se optó como mejor modelo por el lecho de cilindros apilados en base al comportamiento de las ecuaciones de convección y radiación. Imágenes tomadas con microscopio electrónico han mostrado que esta estructura es más realista.<sup>12</sup> La estructura microscópica porosa del sólido implica el uso de dos longitudes características diferentes, para los poros y para las fibras. Los valores para el diámetro de los poros  $d_p$  (1300 y 50  $\mu\text{m}$  para los productos sólidos y combustible respectivamente) y para el diámetro de las fibras  $d_f$  (10  $\mu\text{m}$  para todos los materiales) fueron medidos en laboratorio. Si bien, se debe notar que esta microestructura no es del todo consistente con la alta porosidad de la espuma de poliuretano, aunque a efectos de la simulación es válida y los resultados se muestran correctos.

El cálculo de la relación área por volumen  $A/V$  en (9) se hizo en consecuencia a la microestructura y se eligió de la literatura<sup>5</sup> la correlación (10) del número de Nusselt para cilindros. A partir del número de Nusselt se calcula el coeficiente de película para la convección de calor.

$$h_v = h \frac{A}{V} = h \frac{4(1-\phi)}{d_p} \quad (9)$$

$$\text{Nu} = \frac{hd_f}{k_g} = 1,58 + 0,869 \text{Re}^{0,6} \text{Pr}^{0,333} \quad (10)$$

#### *Inclusión de la transmisión de calor por radiación*

Aplicando el método de la difusión<sup>2</sup> al flujo de calor por radiación se puede obtener una relación para modelar conjuntamente conducción y radiación por el sólido. Se supone que el flujo de calor por radiación es proporcional al gradiente de temperatura y se acoplan los dos fenómenos, añadiendo el término  $k_r$  (11) dependiente de la temperatura a la tercera potencia, en la conductividad del sólido  $k$  (12)

$$k_r = \frac{16\sigma d_p T^3}{3} \quad (11)$$

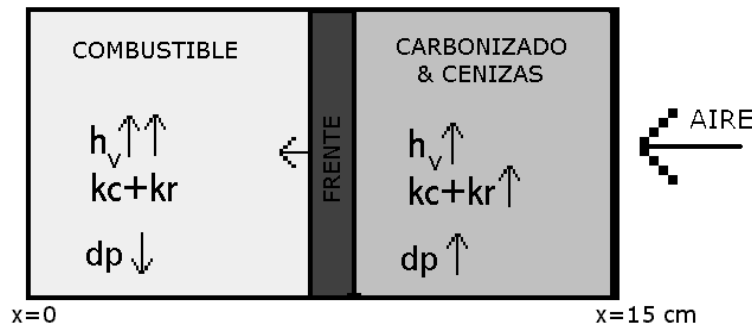
$$k = k_c + k_r \quad (12)$$

La propiedad que representa la ecuación (11) puede verse como una “conductividad de radiación”, que depende del diámetro de los poros  $d_p$ . Por ello, el flujo de calor por radiación será más importante donde los poros sean de mayor tamaño, es decir, en las cenizas y el combustible carbonizado.

#### *Dos regiones divididas por el frente de reacción*

Todas la propiedades se calculan linealmente ponderando según la fracción de masa de cada material sólido según (8).

A medida que el frente de reacción avanza, va transformando el combustible en cenizas y combustible carbonizado, creando dos regiones claramente diferenciadas por sus propiedades de conductividad, convección y radiación (Figura 4). De entre todas las propiedades, el diámetro de los poros  $d_p$  que se incluyó en esta investigación, destaca en su influencia al cambiar de  $50 \mu\text{m}$  en el combustible a  $1300 \mu\text{m}$  en las cenizas, lo que representa un ratio de 26.



**Figura 4.** Las dos regiones de propiedades diferentes que se forman en la propagación del frente de combustión

En el combustible el coeficiente volumétrico de convección de calor  $h_v$  es muy alto, el término de radiación  $k_r$  es bajo y la longitud de los poros  $d_p$  es pequeña. En cambio, en la ceniza y en el combustible carbonizado,  $h_v$  es mucho menor,  $k_r$  es alto y  $d_p$  es notablemente mayor que en el combustible.



### Condiciones de contorno e iniciales

Las condiciones de contorno e iniciales de la simulación se implementaron imitando al máximo la configuración de los experimentos llevados a cabo por Torero y Fernández-Pello.<sup>13</sup>

Inicialmente, el sólido, formado todo por combustible sin quemar, y el aire están a 300 K y la concentración en masa de oxígeno es la ambiente

$$T_s(x, 0) = T_g(x, 0) = 300 \text{ K}, \quad y_{O_2}(x, 0) = 0, 23, \quad y_c(x, 0) = 0 \quad (13)$$

El mecanismo de encendido se coloca en  $x = 15$  cm, junto a la entrada de aire, y mientras está en funcionamiento eleva localmente la temperatura del combustible hasta 600 K. Cuando el frente comienza a desplazarse el mecanismo de encendido se apaga: (14) hasta ignición y después (15).

$$T_s(15, t) = f(t) \quad (14)$$

$$\frac{\partial T_s(15, t)}{\partial x} = 0 \quad (15)$$

Por el extremo  $x = 15$  cm entra el aire en condiciones ambiente a una velocidad prescrita

$$T_g(15, t) = 300 \text{ K}, \quad y_{O_2}(15, t) = 0, 23, \quad u(15, t) = 0, 53 \text{ cms}^{-1} \quad (16)$$

Como el flujo de aire entra por la derecha  $x = 15$  cm, el frente de combustión latente se propaga de derecha a izquierda.

En el extremo  $x = 0$  cm se imponen condiciones de gradiente nulo

$$\frac{\partial T_s(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_g(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial y_{O_2}(0, t)}{\partial x} = 0 \quad (17)$$

### Resolución de las ecuaciones

Las ecuaciones diferenciales parciales se discretizan en el espacio empleando el método de las diferencias finitas y pasan a ser ecuaciones diferenciales ordinarias en la variable tiempo. Este sistema final de ecuaciones diferenciales es no lineal y rígido. Los sistemas de ecuaciones diferenciales rígidas se caracterizan porque sus soluciones contienen al menos dos constantes de tiempo muy diferentes entre sí, lo que plantea problemas de convergencia. El sistema se resuelve empleando un algoritmo numérico especial para ecuaciones rígidas: DVODE (Variable coefficient Ordinary Differential Equations solver) desarrollado a principios de esta década<sup>1</sup> que es empleado frecuentemente para resolver ecuaciones rígidas de cinética química. Este algoritmo de integración es muy robusto y controla por sí mismo el escalón de tiempo para asegurar la convergencia y la precisión.

Dado que el modelo computacional se basa en resultados sobre un mallado, se llevó a cabo un estudio completo de convergencia respecto a la discretización<sup>8</sup> que incluía el efecto del espacio entre nodos del mallado y el escalón de tiempo de integración. Este estudio mostró que los resultados numéricos del modelo convergen correctamente al reducir el tamaño de los incrementos, tanto espaciales como temporales. Tras los cambios introducidos en esta investigación no se realizaron nuevos estudios de convergencia por considerarse que los cambios no afectan significativamente ni a la estabilidad ni a la convergencia del modelo.

## Calibración

Una vez introducidos los cambios se procedió a la calibración del modelo comparándolo con los experimentos realizados por Torero y Fernández-Pell.<sup>13</sup>

Durante la calibración se varió el factor de frecuencia de la reacción de oxidación del combustible  $A_o$  de la ecuación (3), permaneciendo fijos el resto de parámetros. El objetivo era obtener la misma velocidad de propagación que uno sólo de los experimentos y emplear el resto de datos experimentales para establecer la bondad del modelo y su capacidad de predecir resultados reales. La velocidad del aire de entrada se estableció en un valor alto,  $0,53 \text{ cm s}^{-1}$ , cuando el proceso es controlado por la cinética química.

En la Figura 5 se observa el efecto del parámetro  $A_o$  en los resultados de la calibración. Cuando el factor aumenta, la velocidad del frente de reacción aumenta en proporción casi directa con la velocidad de entrada del aire forzado. Así, a baja velocidad del aire de entrada el efecto de este parámetro es menor que a alta velocidad del aire. La causa de este efecto viene del papel que juegan la difusión de oxígeno y la cinética química, como se explica más adelante en el estudio de resultados.

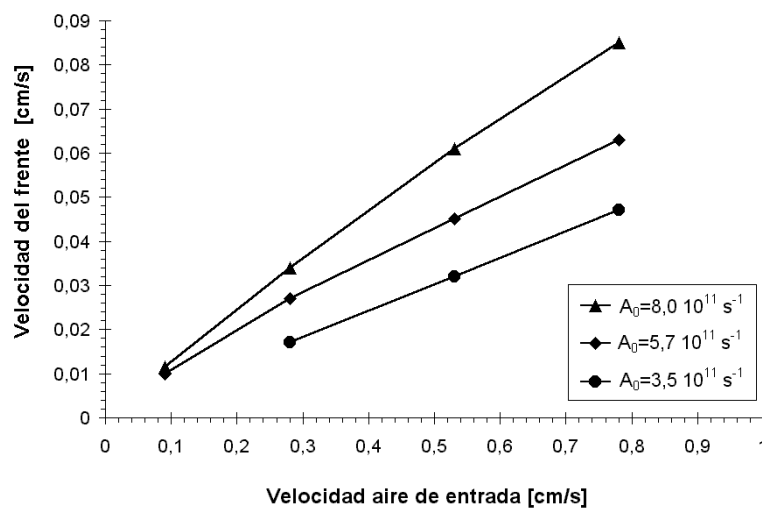


Figura 5. Efecto del factor de frecuencia de la reacción de oxidación,  $A_o$  (3), en la calibración del modelo

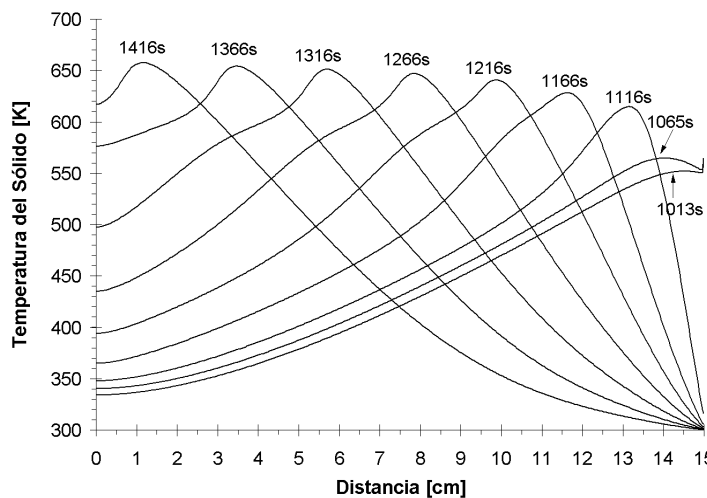
## RESULTADOS

### Descripción de resultados

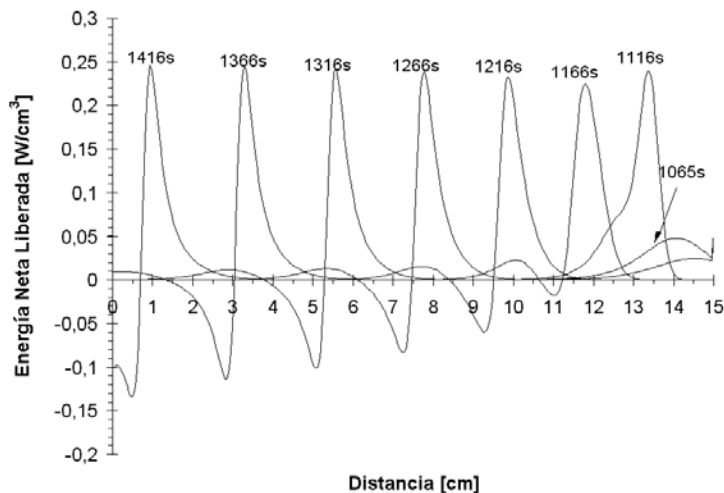
A continuación se presentan algunos de los resultados para el caso base calibrado. Más resultados obtenidos de este mismo modelo se pueden encontrar en la referencia 9.

El frente de reacción marca la división entre una región compuesta mayoritariamente por combustible y otra compuesta mayoritariamente por fracciones de ceniza y combustible carbonizado. Dado que el frente de combustión es de pequeño tamaño, del orden de 1 cm, se crea un fuerte gradiente de propiedades. Así, en las cercanías del frente de combustión, donde la temperatura ronda los 650 K, el coeficiente de radiación  $k_r$  (11) representa el 70 % del coeficiente  $k$  total (12), mientras que en las zonas frías alejadas del frente, cercanos a 350 K, este porcentaje baja hasta el 9 %. En donde la fracción de combustible  $y_f$  es alta, el coeficiente volumétrico de transmisión de calor  $h_v$  toma un valor cercano  $9,1 \times 10^3 \text{ kWm}^{-3}\text{K}$  y donde es baja a  $3,4 \times 10^3 \text{ kWm}^{-3}\text{K}$ , siendo el ratio de 26.

La Figura 6 muestra la temperatura del sólido en función de la distancia  $x$  al extremo izquierdo para diferentes instantes de tiempo. Para  $t = 0$  se activa el encendido elevando la temperatura gradualmente a 600 K hasta que el frente comienza a moverse para  $t = 1116$  s. El frente se propaga en la dirección del aire que entra por la derecha. Para cada instante de tiempo se puede ver el pico de temperatura de unos 650 K que marca la localización del frente, dominado por la reacción de oxidación. La velocidad media es de  $0,04 \text{ cm s}^{-1}$ . En los últimos instantes de tiempo es fácil observar en cada curva un punto de inflexión aproximadamente 1 cm delante del pico de temperatura. Esa inflexión marca la localización de la reacción de pirólisis. Esta distribución espacial de las reacciones a lo largo del combustible se explica en base a las ecuaciones (2) y (4) de oxidación y pirólisis del combustible. Ambas reacciones compiten por el mismo combustible y la situación que se alcanza impone que la reacción de oxidación encuentre antes al aire, con alta concentración de oxígeno, que viene de la entrada. Al pasar el aire por la región de oxidación, disminuye rápidamente el oxígeno disponible y posteriormente pasa por la región de pirólisis, que no necesita del oxígeno para desarrollarse.



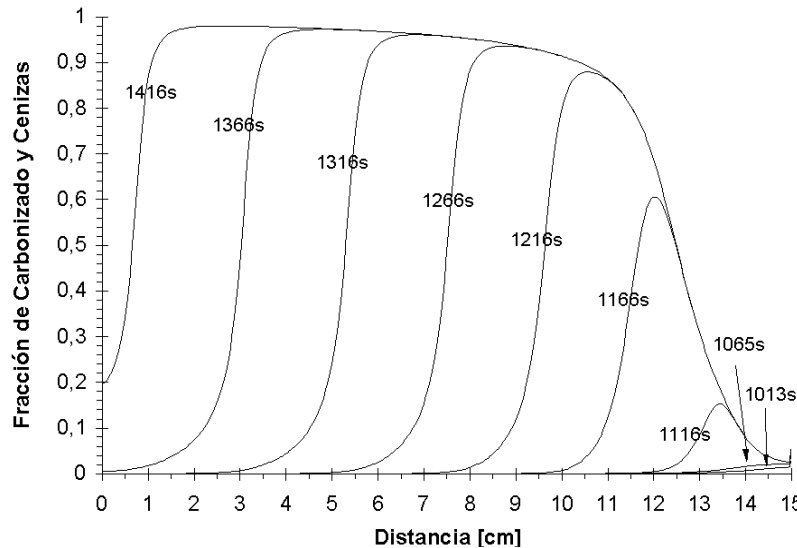
**Figura 6.** Distribución de la temperatura del sólido para diferentes instantes para el caso base



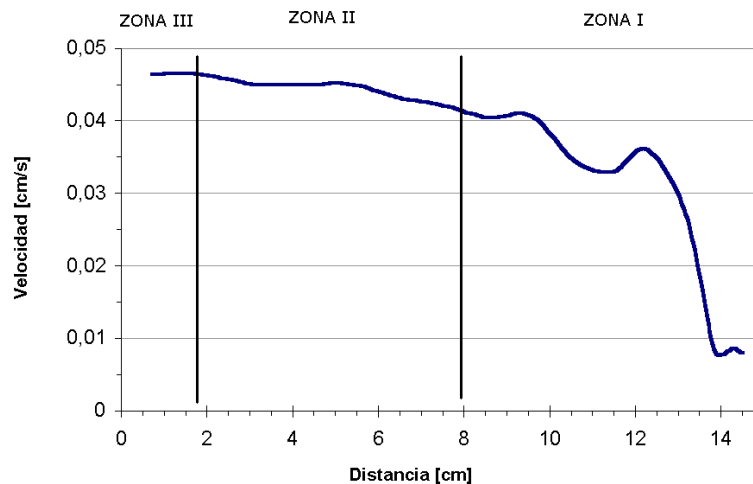
**Figura 7.** Distribución de la energía química liberada en el sólido para diferentes instantes para el caso base

La Figura 7 muestra la energía neta liberada por las tres reacciones para diferentes instantes de tiempo. Hay un pico a  $t = 1116$ s que marca el inicio de movimiento de la reacción. Para cada instante, en el pico positivo se encuentra la reacción de oxidación (2) y en el pico negativo la reacción de pirólisis (4). En los casos aquí presentados la reacción de oxidación de los restos carbonizados (6) tiene efectos muy poco apreciables.

La Figura 8 muestra la fracción en masa de los restos sólidos (combustible carbonizado  $y_c$ , más cenizas  $y_a$ ) para diferentes instantes de tiempo. Se ve claramente como al pasar el frente de reacción, esta fracción aumenta rápidamente hasta valores cercanos a la unidad en tan sólo unos centímetros, creando las dos regiones anteriormente mencionadas. En la zona cercana al encendido ( $x = 15$  cm) parte del combustible ha quedado sin quemarse (aproximadamente el 80 % en masa).



**Figura 8.** Distribución de la fracción de restos sólidos para diferentes instantes para el caso base



**Figura 9.** Velocidad de propagación del frente de oxidación a lo largo del eje espacial a medida que el proceso se propaga para el caso base

La Figura 9 muestra la velocidad del frente de oxidación a medida que se propaga a lo largo del sólido. En sus experimentos, Torero y Fernández-Pello<sup>13</sup> diferencian tres zonas a lo largo del sólido según el carácter de la velocidad de propagación. La zona I se caracteriza por una velocidad de propagación creciente e influenciada por las condiciones de la entrada; esta zona está situada cerca del mecanismo de encendido. La zona II se caracteriza por una velocidad de propagación más uniforme y poco influenciada por la entrada y la salida. La zona III presenta influencias de la salida y la velocidad es menos uniforme. Estas tres zonas están presentes también en el modelo como muestra la Figura 9, aunque en la zona III los resultados del modelo numérico difieren de los experimentos. Esto es debido a que en el modelo numérico las condiciones de contorno se corresponderían a un caso experimental ideal, en el que la velocidad del flujo de aire se mantiene constante. Porque a medida que la reacción se aproxima al final del sólido, las pérdidas de calor aumentan, pero la energía generada por la reacción se mantiene constante debido al flujo constante. En los experimentos el aumento de la porosidad de la ceniza resulta en un aumento del flujo convectivo a través del sólido a medida que la reacción avanza. El aporte de oxígeno aumenta junto con el aumento de las pérdidas de calor y, en contraste con el modelo, es difícil predecir si la velocidad de propagación resultante va a decaer o a aumentar en la zona III.<sup>12,13</sup> Por tanto, la mejor comparación entre modelo y experimentos se corresponde a la zona II.

La Figura 10 muestra la comparación de los resultados numéricos del modelo y los resultados experimentales. Se comparan las velocidades de propagación del frente de reacción en la zona II en función de la velocidad de entrada del aire. El punto de calibración es el correspondiente a una velocidad del aire de entrada de  $0,53 \text{ cm/s}$ . Esta comparación sirve a su vez para validar los resultados del modelo. Se aprecia la similitud en tendencias y proximidad de los resultados numéricos a los experimentales. Se llevaron a cabo varios estudios paramétricos<sup>9</sup> para determinar el efecto de las propiedades del combustible: el tamaño de los poros y de las fibras, la densidad, el calor específico y la conductividad. Se estudió también el efecto de la concentración de oxígeno en el aire y de los parámetros de cinética química.

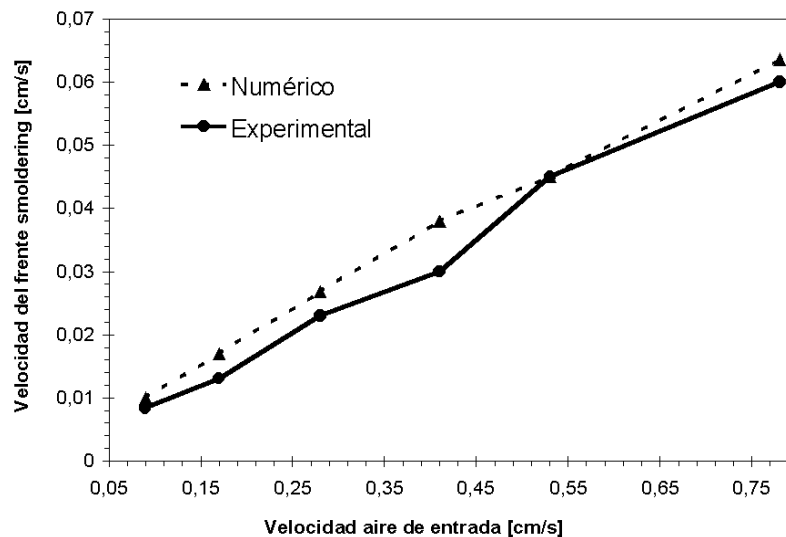


Figura 10. Comparación y validación de los resultados numéricos y experimentales

## Discusión de resultados

El estudio del efecto de la estructura de los poros indica que la velocidad de propagación no varía considerablemente con el tamaño de los poros, pero el perfil de temperatura toma una distribución muy diferente, siendo más uniforme cuanto mayores son los poros.

La convección y la radiación del calor son dos fenómenos muy influyentes. En la propagación lejos del límite de extinción, la radiación afecta principalmente a los perfiles de temperatura del sólido y la convección modifica la velocidad de propagación. Esta última observación está de acuerdo con los datos experimentales y con la interpretación de Torero y Fernández-Pell,<sup>13</sup> quienes destacaron que el oxígeno escasea en el proceso y por tanto las reacciones químicas están dominadas por el suministro de oxígeno. Los resultados obtenidos en este estudio refuerzan la observación de que la cinética química es el fenómeno dominante en la propagación del proceso cuando la velocidad de entrada del aire es alta y la reacción exotérmica fuerte. Cuando la velocidad del aire es baja, la llegada de oxígeno al combustible por convección y difusión es el fenómeno dominante.

En todos los casos presentados en este estudio, la oxidación y la pirólisis del combustible son las reacciones que provocan principalmente la propagación del frente. La reacción de oxidación de los restos carbonizados (6) tiene efectos poco apreciables inclusive cuando las velocidades son altas. En este ámbito de condiciones de contorno y si no interesa el estudio de transición a combustión con llama, esta reacción química se podría eliminar del modelo. Esta observación está en desacuerdo con los resultados de Torero y Fernández-Pello,<sup>13</sup> quienes notaron una fuerte influencia de la oxidación de los restos carbonizados, especialmente a altas velocidades. Esto podría deberse a que en el modelo las constantes de cinética química de esta reacción no son las adecuadas, pero no existen mejores datos experimentales publicados para estos parámetros.

En cualquiera de los casos, la conducción del calor no juega un papel importante frente a la radiación y a la convección, ya que los materiales porosos tienen baja conductividad. La difusividad térmica del combustible (18) se muestra como una propiedad muy influyente en el proceso y afecta a todas las propiedades en general. No es de extrañar, ya que es un término indicativo de la acumulación global de energía en el interior del combustible.

$$\alpha = \frac{k_c}{\rho c} \quad (18)$$

## CONCLUSIONES

Una vez introducidas las modificaciones al modelo original, se llevó a cabo la calibración a una velocidad mayor del aire de entrada, empleando como referenciarresultados experimentales. Posteriormente se comprobó que el modelo predecíacorrectamente los resultados para el resto de las velocidades de entrada, loque cuantifica la bondad del modelo. Una vez finalizados los estudios paramétricos,el análisis de los resultados permite evaluar la importancia relativa de los fenómenos físicos y sus efectos.

Se confirma la observación experimental de que el proceso es controlado por la llegada de oxígeno cuando la velocidad del aire de entrada es baja y por la cinética química cuando aquella es alta.

El modelo estima adecuadamente la velocidad de propagación del proceso y es una herramienta útil para propósitos ingenieriles. Este modelo, sus resultados y futuros estudios ayudados de este trabajo podrían sugerir y mejorar nuevas técnicas para la predicción de la evolución de un incendio originado por combustión latente. La evaluación adecuada de esta evolución es muy importante para el desarrollo de nuevos métodos de prevención y detección de incendios que tengan en cuenta la combustión latente. Hoy en día estos métodos aún no existen.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores quieren agradecer la ayuda recibida durante esta investigación del departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Texas en Austin y la colaboración escribiendo este manuscrito de Alberto Rodríguez Prieto.

## REFERENCIAS

- 1 P.N. Brown, G.D. Byrne y A.C. Hindmarsh, "VODE: a variable coefficient ODE solver", *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, Vol. **10**, pp. 1038–1051, (1989).
- 2 S. Dosanjh, P.J. Pagni y A.C. Fernández-Pello, "Forced concurrent smoldering combustion", *Combustion and Flame*, Vol. **68**, pp. 131–142, (1987).
- 3 J.R. Hall, *National Fire Protection Association Journal*, Vol. **92**, N° 1, pp. 56–62, (1998).
- 4 H. Hotta, Y. Oka y O. Sugawa, "Interaction between hot layer and updraft from a smoldering fire source. Part I. An experimental approach", *Fire Science and Technology*, Vol. **7**, N° 2, pp. 17–25, (1987).
- 5 F.P. Incropera y D.P. DeWitt, "*Fundamentals of Heat and Mass Transfer*", 4ª edición, John Wiley and Sons, (1990).
- 6 N.A. Moussa, T.Y. Toong y C.A. Garris, "Mechanism of smoldering of cellulosic materials", *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1447–1457, (1976).
- 7 G. Mulholland y T.J. Ohlemiller, "Aerosol characterization of a smoldering source", *Aerosol Science and Technology*, Vol. **1**, pp. 59–71, (1982).
- 8 S.V. Leach, "A Numerical Study of Smoldering Combustion", Tesis doctoral, Universidad de Texas en Austin, Departamento de Ingeniería Mecánica, (1998).
- 9 S.V. Leach, G. Rein, J.L. Ellzey, O.A. Ezekoye, J.L. Torero, "Kinetic and fuel property effects on forward smoldering combustion", *Combustion and Flame*, Vol. **120**, N° 3, pp. 346–358, (2000).
- 10 T.J. Ohlemiller, "Modeling of smoldering combustion propagation", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. **11**, pp. 277–310, (1985).
- 11 J.G. Quintiere, M. Birky, F. Macdonald y G. Smith, "An analysis of smoldering fires in closed compartments and their hazard due to carbon monoxide", *Fire and Materials*, Vol. **6**, N° 3-4, (1982).
- 12 D.P. Stocker, S.L. Olson, D. Urban, J.L. Torero, D. Walther, A.C. Fernández-Pello, "Small scale smoldering combustion experiments in microgravity", *26th Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1361–1368, (1996).
- 13 J.L. Torero y A.C. Fernández-Pello, "Forward smolder of polyurethane foam in a forced air flow", *Combustion and Flame*, Vol. **106**, pp. 89–109, (1996).
- 14 D.C. Walther, A.C. Fernández-Pello y D.L. Urban, "Space shuttle based microgravity smoldering combustion experiments", *Combustion and Flame*, Vol. **116**, N° 3, pp. 398–414, (1999).
- 15 [www.me.berkeley.edu/mcl/](http://www.me.berkeley.edu/mcl/). Página en internet de los Laboratorios de Combustión en Microgravedad de la Universidad de California Berkeley.

## ANEXO I

## Lista de símbolos empleados

Símbolo	Explicación
$A_i$	factor de frecuencia de la reacción $i$
$\frac{A}{V}$	relación de área a volumen de las fibras del sólido
$c$	calor específico
$d_p$ y $d_f$	diámetro característico de los poros del sólido y de las fibras del sólido respectivamente
$E_{a_i}$	energía de activación de la reacción $i$
$h_v$	coeficiente volumétrico de convección del calor
$\Delta h_i$	entalpía de reacción de la reacción $i$
$k, k_c$ y $k_r$	conductividad térmica total, de conducción y de radiación respectivamente
$R$	constante universal de los gases
$T$	temperatura
$y_i$	fracción de masa de la sustancia $i$
Nu, Re y Pr	números adimensionales de Nusselt, Prandtl y Reynolds
$\alpha$	difusividad térmica
$\sigma$	constante de Stefan-Boltzmann
$\rho_i$	densidad del sólido $i$
$\phi$	porosidad del sólido
$\omega_i$	velocidad de intercambio másico de la reacción $i$
$\delta, \varepsilon, \zeta$ y $\eta$	parámetros constantes del modelo
$f, c, a$ y $O_2$	subíndices que se corresponden con combustible, combustible carbonizado, cenizas y oxígeno
$s$ y $g$	subíndices que se corresponden con las fases sólido y gas respectivamente
$p, o$ y $a$	subíndices que se corresponden con las reacciones de pirólisis, oxidación del combustible y oxidación del combustible carbonizados

## ANEXO II

## Sobre el uso del anglicismo “smoldering”

Al no estar aún definido el término, en los países de la lengua española a la combustión latente se la llama a veces combustión “smoldering”. En inglés su significado hace referencia al proceso por el que un material incandescente se quema lentamente sin que se vean llamas y que desprende abundantes humos. Antes de optar por el uso del término combustión latente, varios investigadores especialistas de habla española, en comunicaciones privadas con los autores, han propuesto algunos nombres para la traducción del término técnico.

El profesor Fernández-Pello propone combustión de superficie. Si bien es cierto que el proceso físico “smoldering” es una reacción superficial, ésta puede propagarse por el interior de materiales de alta permeabilidad (como es el caso del modelo presentado en este artículo).

Los profesores Liñán y Sánchez Tarifa proponen combustión en brasas, combustión sin llama y combustión latente. Una brasa no es realmente un proceso smoldering, ya que presenta por lo general una pequeña llama en forma gaseosa cubriendo al material incandescente.



Es la opinión de los autores que el último nombre propuesto por los profesores Liñán y Sánchez Tarifa, combustión latente, parece el más acertado.

Durante la elaboración de este artículo no había un término en español comúnmente aceptado. Es de esperar que con el tiempo se llegue a un acuerdo y se adopte uno.