



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

TRABAJO FIN DE MÁSTER EN INGENIERÍA QUÍMICA

ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE LA
COMBUSTIÓN DE OMEX EN
CONDICIONES DE MOTORES DE
ENCENDIDO POR COMPRESIÓN

AUTOR: ADRIÀ SANZ VILA

TUTOR: HÉCTOR CLIMENT PUCHADES

COTUTOR: JOSÉ MARÍA GARCÍA OLIVER

CURSO ACADÉMICO: 2021-22

ÍNDICE

DOCUMENTO I. MEMORIA.	1
1. INTRODUCCIÓN	3
1.1. Contexto y antecedentes.	3
1.2. Combustibles renovables.	6
1.3. Objetivo del trabajo.	8
1.4. Estructura del trabajo.	8
2. PROCESO DE COMBUSTIÓN	10
2.1. Funcionamiento de un motor.	10
2.2. Parámetros importantes para la caracterización de la combustión.	12
3. MODELADO CFD	15
3.1. Lanzamiento de casos CONVERGE	17
3.2. Postprocesado MATLAB	19
4. RESULTADOS	21
4.1. Resultados con OME ₁ .	22
4.2. Resultados con OME _x .	27
4.3. Comparación del efecto del tipo de combustible.	32
5. CONCLUSIONES	37
6. BIBLIOGRAFÍA	38
DOCUMENTO II. PRESUPUESTO.	41
1. INTRODUCCIÓN	43
2. PRECIOS UNITARIOS	44
3. PRECIOS DESCOMPUESTOS	46
4. PRESUPUESTO	48
ANEXO A. CÁLCULO DE LA ZST Y FST PARA AMBOS COMBUSTIBLES.	50

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1. Ejemplos de combustibles fósiles. Carbón, gas natural y petróleo, respectivamente.	3
Fig. 2. Evolución del porcentaje de las reservas de petróleo y las concentraciones de dióxido de carbono en la atmósfera en el siglo XX. (F. Bullón, 2005)	4
Fig. 3. Coche eléctrico durante el proceso de recarga. (Europa Press, 2019)	5
Fig. 4. Esquema del ciclo de fabricación de los combustibles sintéticos.	6
Fig. 5. Motor de encendido por compresión.	11
Fig. 6. Funcionamiento de un motor Diesel de 4 tiempos.	11
Fig. 7. Fases de una llama de combustión.	12
Fig. 8. Propiedades importantes para caracterizar la combustión.	14
Fig. 9. Evolución de la tasa de inyección de combustible.	18
Fig. 10. Comparación entre el SD y SA para el OME1 a 900K del LOL y tip penetration.	22
Fig. 11. Comparación entre el SD y SA para el OME1 a 900K del ID y LOL.	23
Fig. 12. Campos de formaldehído (CH ₂ O) para el OME1 a 900K.	24
Fig. 13. Campos de radical hidroxilo (OH) para el OME1 a 900K.	25
Fig. 14. Comparación entre temperaturas para el tiempo de retraso (ID) para el OME1 con la tobera SD.	26
Fig. 15. Comparación entre temperaturas para la longitud de Lift-Off (LOL) y penetración del spray (tip penetration) para el OME1 con la tobera Spray D.	26
Fig. 16. Comparación entre el SD y SA para el OMEx a 900K del ID y LOL.	27
Fig. 17. Comparación entre el SD y SA para el OMEx a 900K del LOL y tip penetration.	28
Fig. 18. Campos de formaldehído (CH ₂ O) para el OMEx a 900K.	29
Fig. 19. Campos de radical hidroxilo (OH) para el OMEx a 900K.	30
Fig. 20. Comparación entre temperaturas para el tiempo de retraso (ID) para el OMEx con la tobera Spray D.	31
Fig. 21. Comparación entre temperaturas para la longitud de Lift-Off (LOL) y penetración del spray (tip penetration) para el OMEx con la tobera Spray D.	31
Fig. 22. Campo de temperaturas para el OME1 a los tiempos de 390, 1400 y 4501 μ s.	33
Fig. 23. Campo de temperaturas para el OMEx a los tiempos de 390, 1401 y 4501 μ s.	33
Fig. 24. Campo de temperaturas para el dodecano a los tiempos, de arriba a abajo, de 390, 1400 y 4500 μ s.	34
Fig. 25. Comparación del ID entre el OME1 y OMEx a 900K.	35
Fig. 26. Comparación del LOL y tip penetration entre el OME1 y OMEx a 900K.	35

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Propiedades de los OMEn con n=1-6.....	7
Tabla 2. Los casos que se van a calcular.	21
Tabla 3. Precios unitarios de la mano de obra.	44
Tabla 4. Precios unitarios de materiales, equipos informáticos y licencias.	44
Tabla 5. Precios unitarios del consumo de electricidad.....	45
Tabla 6. Precios descompuestos para la búsqueda de información inicial.....	46
Tabla 7. Precios descompuestos para la preparación y lanzamiento de casos.	46
Tabla 8. Precios descompuestos para el postprocesado de los casos.	47
Tabla 9. Precios descompuestos para la redacción de la memoria.....	47
Tabla 10. Presupuesto de la realización de la memoria.....	48

RESUMEN

El uso de combustibles líquidos de origen renovable en motores de combustión es un ámbito de gran actividad actual en el sector del transporte, especialmente en aplicaciones en las que la autonomía del vehículo juega un papel decisivo. Se trata de combustibles obtenidos por algún proceso de síntesis químico que utiliza como una de sus sustancias de partida el hidrógeno. Este último puede ser producido a partir de hidrólisis del agua utilizando electricidad de origen potencialmente renovable.

En particular, el sector de los motores de encendido por compresión está llevando a cabo estudios detallados con OME_x (en inglés Oxymethylene diMethyl Ethers), una familia de compuestos que pueden ser sintetizados con una eficiencia razonable y que tienen unas prestaciones adecuadas a este tipo de motores. El presente trabajo pretende comparar dos tipos de combustibles de esta familia mediante la aplicación de la dinámica de fluidos computacional (CFD). Ambos combustibles son inyectados en una atmósfera con condiciones termodinámicas y de composición análogas a las que se dan en la cámara de combustión de un motor. Se comparan además una configuración de inyección de un motor de transporte pesado y uno de automoción mediante una modificación del diámetro de orificio. Se ha configurado, calculado y post-procesado una serie de casos con diferentes condiciones de funcionamiento, con el fin de comparar los cambios en el encendido y la estructura de llama al emplear los diferentes combustibles y diámetros de orificio. Los resultados del modelo se compararán con medidas experimentales, con el fin de analizar la capacidad predictiva del modelo.

Palabras clave:

CFD; combustión; OME_x; motor de encendido por compresión

RESUM

L'ús de combustibles líquids d'origen renovable en motors de combustió és un àmbit de gran activitat actual en el sector del transport, especialment en aplicacions en les quals l'autonomia del vehicle juga un paper decisiu. Es trata de combustibles obtinguts per algun procés de síntesi química que utilitza com una de les seues substàncies de partida l'hidrògen. Aquest últim pot ser produït a partir d'hidròlisi de l'aigua utilitzant electricitat d'origen potencialment renovable.

En particular, el sector dels motors d'encesa per compressió està duent a terme estudis detallats amb OME_x (en anglés Oxymethylene diMethyl Ethers), una família de compostos que poden ser sintetitzats amb una eficiència raonable i que tenen unes prestacions adequades a aquesta tipus de motors. El present treball pretén comparar dos tipus de combustibles d'aquesta família mitjançant l'aplicació de la dinàmica de fluids computacional (CFD). Tots dos combustibles són injectats en una atmosfera amb condicions termodinàmiques i de composició anàlogues a les que es donen en la cambra de combustió d'un motor. Es comparen a més una configuració d'injecció d'un motor de transport pesat i un d'automoció mitjançant una modificació del diàmetre d'orifici. S'han configurat, calculat i post-processat una sèrie de casos amb diferents condicions de funcionament, amb la finalitat de comparar els canvis en l'encesa i l'estructura de flama en emprar els diferents combustibles i diàmetres d'orifici. Els resultats del model es compararan amb mesures experimentals, amb la finalitat d'analitzar la capacitat predictiva del model.

Paraules clau:

CFD; combustión; OME_x; motor de encendido por compresión

ABSTRACT

The use of liquid fuels of renewable origin in combustion engines is an area of great current activity in the transport sector, especially in applications in which vehicle autonomy plays a decisive role. These are fuels obtained by a chemical synthesis process that uses hydrogen as one of its starting substances. The latter can be produced by hydrolysis of water using electricity of potentially renewable origin.

In particular, the compression ignition engine sector is carrying out detailed studies with OMEx (Oxymethylene diMethyl Ethers), a family of compounds that can be synthesized with reasonable efficiency and that have a performance suitable for this type of engine. The present work aims to compare two types of fuels from this family by applying computational fluid dynamics (CFD). Both fuels are injected into an atmosphere with thermodynamic and compositional conditions analogous to those found in the combustion chamber of an engine. An injection configuration of a heavy transport engine and an automotive engine is also compared by means of a modification of the orifice diameter. A number of cases have been setup, calculated and post-processed with different operating conditions, in order to compare the changes in ignition and flame structure when using different fuels and orifice diameters. The model results will be compared with experimental measurements in order to analyze the predictive capability of the model.

Keywords:

CFD; combustion; OMEx; compression ignition engine

DOCUMENTO I.

MEMORIA.

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Contexto y antecedentes.

En la actualidad los combustibles fósiles representan un 80% de la energía primaria a nivel mundial debido a diferentes motivos, en primer lugar, proporcionan una gran cantidad de energía a un precio relativamente bajo, también hay abundantes yacimientos y su transporte y almacenamiento es fácil y barato [1,2].

Por otra parte, los principales problemas de estos combustibles son los medioambientales, sobre el 80% de las emisiones de dióxido de carbono emitidas provienen de los combustibles fósiles, esto está provocando el calentamiento global, debido a que el dióxido de carbono es opaco a la radiación infrarroja emitida por la tierra, provocando el conocido cambio climático, otro problema medioambiental es la lluvia ácida, ya que mediante la quema de combustibles fósiles se emiten óxidos de azufre y de nitrógeno que reaccionan haciendo que precipiten ácidos sulfúricos y nítricos [2,3].



Fig. 1. Ejemplos de combustibles fósiles. Carbón, gas natural y petróleo, respectivamente.

Los combustibles fósiles son fuentes de energía no renovables, esto ya nos dice otro de sus principales problemas, son un recurso finito ya que existen en capas profundas de la tierra y necesitan del orden de siglos para ser formados [1].

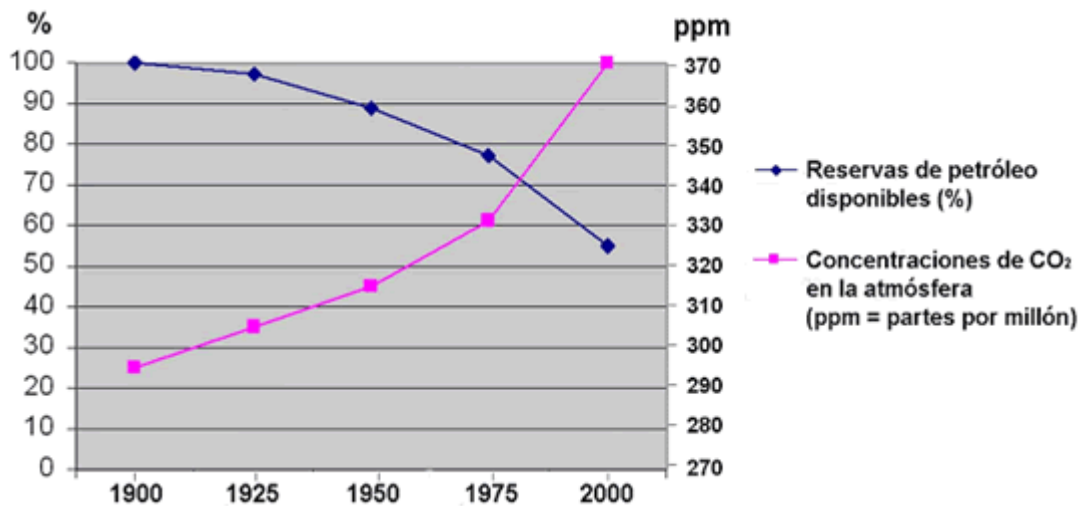


Fig. 2. Evolución del porcentaje de las reservas de petróleo y las concentraciones de dióxido de carbono en la atmósfera en el siglo XX. (F. Bullón, 2005)

Los principales usos de estos combustibles fósiles son para la generar electricidad y para generar energía mecánica, en el presente trabajo la parte que nos interesa es la segunda, ya que estos combustibles se utilizan en la automoción, y en este uso de estos es el que se va a estudiar. En la actualidad los combustibles utilizados para la automoción provienen del petróleo y se reducen en Diesel y gasolina, la principal diferencia entre ellos es que la gasolina es más volátil, al tener una cadena más corta, mientras que el Diesel es más denso y aceitoso.

Por lo que se ha comentado anteriormente desde hace ya unos años se están buscando alternativas reales para el uso de estos combustibles, en primer lugar, tenemos el gas natural (licuado o comprimido), aunque realmente proviene del petróleo también, tiene un gran potencial ya que reduce el gasto de combustible y las emisiones de contaminantes, los vehículos de gas abaratan los desplazamientos y son más silenciosos, pero la mayor desventaja es que aún no hay demasiados puntos de repostaje en España, también hay otro gas, llamado AutoGas (GLP), una mezcla entre propano y butano, que tiene un poco menos autonomía que el gas natural pero la red de repostaje es mucho mayor y se utiliza en vehículos con motores gasolina y con dos depósitos, el de la propia gasolina y el del AutoGas [4].

Otra de las opciones que viene con mucha fuerza y de la que todos hemos escuchado hablar es la electricidad, cada vez hay más vehículos eléctricos. Esta opción es más limpia, pero esto depende de la forma de obtenerla, ya que, por ejemplo, se puede obtener a partir de combustibles fósiles, pero lo interesante, obviamente, es obtenerla a partir de fuentes renovables, sus principales ventajas son, en primer lugar, disminuir la dependencia de los combustibles fósiles. Además, reducen la contaminación y el ruido en grandes ciudades, su mayor problema es la autonomía y los vehículos son más caros, también existe la variante híbrida, que combinan la propulsión eléctrica con la de un combustible, aumentando así considerablemente su autonomía [4].



Fig. 3. Coche eléctrico durante el proceso de recarga. (Europa Press, 2019)

Una de las opciones que está sonando con mucha fuerza en los últimos años es utilizar el hidrógeno como combustible, es una alternativa con muchísimo potencial, pero es difícil de obtener y esto hace que su distribución sea escasa. La obtención del hidrógeno se hace mediante el proceso de electrólisis del agua, que separa las moléculas de oxígeno y las del hidrógeno, para este proceso se necesita mucha energía eléctrica, que en muchos casos no proviene de fuentes renovables, por tanto, es una fuente de energía que tiene un muy alto potencial y es limpia a la hora de utilizarla como combustible, pero para que ello tenga sentido se tiene que obtener de forma limpia, a partir de energías renovables [4].

Por último, se tienen los biocombustibles, que son combustibles que provienen de la biomasa y por ello son renovables, existen el bioDiesel, el bioetanol y el biogás, el primero es un sustituto del Diesel, el segundo de la gasolina y el tercero puede remplazar ambos además de ser utilizado en vehículos híbridos. Las ventajas son que tienen un origen renovable y pueden ser utilizados en todo tipo de vehículos, el principal problema es que su producción resulta más cara que para los combustibles utilizados actualmente [4]. Por último, se tienen los combustibles sintéticos o e-fuel, en los que se basa este trabajo, por ello se va a hablar de ellos en los siguientes apartados de este mismo trabajo.

1.2. Combustibles renovables.

Actualmente, una de las opciones más estudiada son los combustibles sintéticos o e-fuel. Hay muchos trabajos en curso incluso de importantes marcas de automoción debido a que no se tendría que variar la tecnología utilizada actualmente debido a sus grandes similitudes con los combustibles usados en este momento [5].

Los combustibles sintéticos se basan en obtener carburantes líquidos similares a los utilizados actualmente mediante procesos químicos a partir de hidrógeno. En primer lugar, se obtiene el hidrógeno a partir del agua mediante el proceso de electrólisis, luego ese hidrógeno se combinaría con el dióxido de carbono formando el combustible sintético. Si la energía utilizada para la electrólisis es verde, se considera un combustible neutro de carbono, debido a que el dióxido de carbono emitido al quemarlo se ha capturado en su proceso de fabricación, en resumen, no aporta más dióxido de carbono al aire del que ya había antes de fabricarlo [5].



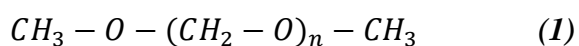
Fig. 4. Esquema del ciclo de fabricación de los combustibles sintéticos.

Los planes de la Unión Europea consideran que el hidrógeno y los combustibles sintéticos deben tener una gran importancia en el sector transporte para alcanzar el objetivo de la neutralidad de carbono para el año 2050. Aunque el futuro de la automoción parece ser que pasa por los coches eléctricos se tienen serias dudas de la viabilidad de que los modos de transporte más grandes, por ejemplo, aviones, barcos y camiones, puedan funcionar solo con electricidad, a esto hay que añadirle el tamaño y peso de esas baterías, por lo tanto, se deben buscar otras soluciones para, como mínimo, estos medios de transporte [5].

Entrando más aun en el tema de los combustibles sintéticos, dentro de estos existen los combustibles sintéticos oxigenados, como alcoholes, ésteres y éteres, los primeros solo contienen un grupo hidroxilo (-OH), el segundo contiene un grupo éster (-COO-), mientras que los éteres con múltiples grupos derivados de aldehídos (-CH₂O-) aumentan el número de cetano del combustible, este número mide el retraso de ignición, cuánto mayor es el número el combustible tiene un menor retraso [6].

Estos éteres tienen un contenido en oxígeno más alto, esto provoca que el número de hidrocarburos no quemado y la cantidad de hollín sea menor que otros tipos de combustibles, debido a que se suprimen los enlaces C-C [6].

Dentro de los éteres comentados anteriormente los que más destacan son los polioximetilen-dimetiléteres (OME_n), estos combustibles sintéticos se componen mediante la fórmula química (1) [6].



Estos éteres se obtienen por polimerización a partir de un radical metoxilo (CH₃-O-), un radical metilo (CH₃-) y varios grupos derivados de aldehídos (-CH₂-O-). Estos éteres se pueden obtener mediante un proceso de destilación catalítica del formaldehído y metanol por debajo de 100°C con un coste de producción bajo [6].

Las propiedades de estos combustibles varían con la cantidad de grupos derivados de aldehídos (-CH₂-O-) como se puede ver en la Tabla 1.

Tabla 1. Propiedades de los OME_n con n=1-6.

Molécula	Densidad a 25°C (g/cm ³)	Punto de fusión (°C)	Punto de evaporación (°C)	Número de cetano	Contenido en oxígeno	Poder calorífico inferior (MJ/kg)
OME ₁	0,86	-105	42	29	42,1	22,4
OME ₂	0,96	-65	105	63	45,3	20,3
OME ₃	1,02	-41	156	78	47,1	19,1
OME ₄	1,06	-7	202	90	48,2	18,4
OME ₅	1,1	18,5	242	100	49	17,9
OME ₆	1,13	58	280	104	49,6	17,5

1.3. Objetivo del trabajo.

El presente trabajo tiene dos objetivos. El primero se centra en la aplicación del modelado mediante la dinámica de fluidos computacional (CFD) para la inyección de un chorro de combustible en condiciones de la cámara de combustión de un motor de encendido por compresión. Los combustibles que se van a estudiar son dos combustibles sintéticos, más concretamente, polioximetilen-dimetiléteres (OME_n), dentro de estos tipos de combustible se va a estudiar particularmente los siguientes el OME_1 y el OME_x , este último se compone de una mezcla entre el OME_3 y OME_4 . Además, se va a comparar dos diferentes toberas de inyección, en primer lugar, una con un diámetro de orificio más pequeño, utilizado en automoción y, por otra parte, una con el diámetro del orificio más grande, utilizado en motores de transportes pesados. Los cálculos realizados en el presente trabajo serán para la segunda tobera, debido a que para la primera ya se tienen los cálculos realizados en el Departamento de Motores Térmicos (CMT) de la Universitat Politècnica de València. Para conseguir estos resultados se va a emplear el programa Converge CFD Software. Para ello se van a tener que preparar los casos, y luego se va a realizar el postprocesado mediante el programa Matlab.

El segundo objetivo es la realización del trabajo final de máster para la obtención del título de Máster Universitario en Ingeniería Química por la Universitat Politècnica de València.

1.4. Estructura del trabajo.

Este trabajo de Fin de Máster está formado por dos documentos, en primer lugar, la memoria del trabajo y, en segundo lugar, el presupuesto. El presente documento es el primero, la memoria del trabajo, durante este documento se va a analizar los resultados, previamente se van a explicar los conocimientos necesarios para poder contextualizarlos. Los capítulos son los siguientes:

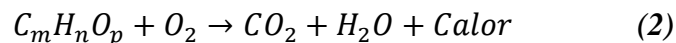
1. Introducción que es el presente capítulo donde se ha hecho una explicación del contexto y los antecedentes del trabajo, adentrándose un poco en los combustibles renovables, además de exponer los objetivos del mismo.
2. Proceso de combustión donde se explica el funcionamiento de un motor de combustión y se van a definir los parámetros necesarios para poder analizar el proceso de combustión.
3. Modelado CFD, en este capítulo se va a explicar la herramienta utilizada, que es el análisis CFD, este capítulo se divide en dos partes, el primero, el lanzamiento de casos en Converge y, el segundo, el postprocesado en Matlab.
4. Resultados donde se muestran los resultados obtenidos para las diferentes condiciones de modelado y se han analizado y comparado con otros casos
5. Conclusiones que es donde se resume el trabajo realizado y los resultados obtenidos del mismo.
6. Bibliografía

El segundo documento es el presupuesto del coste de elaboración del presente trabajo, que sea dividido en 4 capítulos:

1. Introducción donde se explica brevemente este segundo documento del presente trabajo
2. Precios unitarios, en este capítulo se indican los precios unitarios tanto de mano de obra, como de material, equipos informáticos y licencias y de consumo de electricidad
3. Precios descompuestos donde el trabajo se ha dividido en cuatro partes que son búsqueda inicial de información, preparación y lanzamiento de los casos, postprocesado de los resultados obtenidos y redacción de la memoria del presente trabajo.
4. Presupuesto final, obtenido a partir de los precios calculados anteriormente y añadiéndole los impuestos necesarios.

2. PROCESO DE COMBUSTIÓN

Una buena forma de empezar el trabajo es con la definición de combustión, que sería la siguiente: reacción química entre el oxígeno y un material oxidable, acompañada de desprendimiento de energía y que habitualmente se manifiesta por incandescencia o llama. Por lo tanto, se deduce la importancia de las reacciones químicas, en resumen, el proceso de combustión transforma la energía almacenada en los enlaces químicos en calor que puede ser utilizado con diferentes finalidades [7].



2.1. Funcionamiento de un motor.

Se tienen dos tipos de motores de combustión interna, en primer lugar, el de encendido por compresión (*Fig. 5*), o motor Diesel, su funcionamiento es, primero, se comprime el aire, esto genera que este aire aumente de temperatura, en este momento se pulveriza el combustible en el cilindro mediante el sistema de inyección, como el aire está caliente el combustible se enciende aumenta la presión dentro del cilindro, moviendo el pistón y generando el trabajo del motor. En segundo lugar, se tiene el motor de encendido provocado, que habitualmente emplea gasolina como combustible (aunque también puede usar otros combustibles ligeros, como gas natural). El funcionamiento de estos tipos de motores comienza con la introducción de aire y el combustible mezclados al cilindro, luego el pistón comprime la mezcla y cuando ya se ha presurizado se enciende una chispa que provoca la explosión del combustible, y a partir de aquí el funcionamiento es el mismo que para el caso anterior, la explosión mueve el pistón que genera el trabajo del motor. El motor utilizado para el seguimiento de este trabajo es el primero, el motor de encendido por compresión o motor Diesel (*Fig. 6*), en este trabajo se va a estudiar el proceso de combustión más que el funcionamiento del motor, pero cabe destacar que los vehículos con motores Diesel suelen llevar motores de 4 tiempos donde estos tiempos son admisión, compresión, expansión y escape (*Fig. 6*) [8].



Fig. 5. Motor de encendido por compresión.

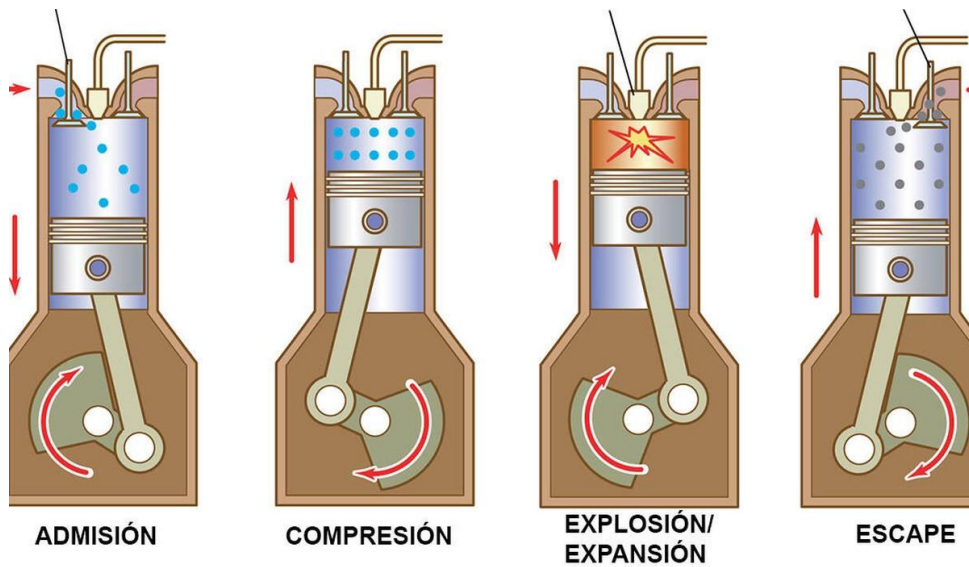


Fig. 6. Funcionamiento de un motor Diesel de 4 tiempos.

2.2. Parámetros importantes para la caracterización de la combustión.

Para estudiar la evolución del proceso de combustión en motores de encendido por compresión la mejor manera es la comparación entre la masa de combustible inyectada por unidad de tiempo y la energía liberada durante el proceso de combustión también por unidad de tiempo. Esto nos da la secuencia de fases que describe el proceso y que se puede observar en la Fig. 7.

- **Tiempo de retraso o *Ignition Delay (ID)*:** Esta primera fase va desde la inyección de combustible hasta que se inicia la combustión, más concretamente donde la derivada de la temperatura máxima es máxima en el dominio estudiado. En esta fase el combustible se mezcla con el aire mediante procesos químicos que se explicarán posteriormente en este mismo apartado.
- **Combustión premezclada:** Esta es la fase que sigue al tiempo de retraso, es donde se produce la oxidación rápida del combustible mezclado con aire hasta ese momento, la cinética química es más rápida debido a las altas temperaturas consumiéndose el combustible a mayor velocidad y liberando una gran cantidad de calor.
- **Combustión por difusión:** Cuando se ha consumido la masa de la mezcla obtenida en el tiempo de retraso, se sigue liberando calor, aunque en menor medida, ese calor es correspondiente a la fase de combustión por difusión, esta fase está controlada por el proceso de mezcla entre el aire y el combustible evaporado, llegando a un periodo cuasi-estacionario mientras se siga introduciendo combustible.
- **Combustión por difusión tardía:** Cuando se deja de inyectar combustible, acaba la fase de combustión por difusión, en esta última fase se observa cómo va disminuyendo progresivamente la liberación de calor hasta que se acabe todo el combustible inyectado.

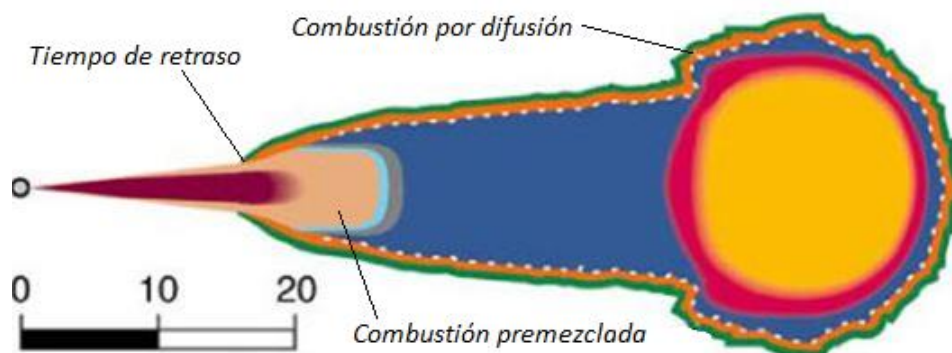


Fig. 7. Fases de una llama de combustión.

Durante el proceso de inyección el chorro de combustible debe mezclarse con el aire para que empiece el proceso de combustión. Esta mezcla es un proceso simplemente físico del cual depende de los siguientes puntos:

- **Flujo interno:** El flujo depende directamente de la geometría de la tobera de inyección, que afecta directamente a las características del chorro y consecuentemente al proceso de mezcla.
- **Atomización y coalescencia:** Al inyectarse el combustible se produce el proceso de atomización, este proceso consiste en que el combustible deja de ser un medio continuo para separarse en diferentes gotas y ligamentos de diferentes tamaños. Este factor es importante porque cuanto menor sean las gotas la relación superficie de combustible en contacto con el aire caliente por unidad de masa de combustible será mayor, esto provoca una mayor eficiencia para el proceso de combustión. Cuando el chorro líquido se ha convertido en gotas, estas pueden chocar entre sí formando gotas más grandes, este fenómeno es conocido como coalescencia.
- **Evaporación y mezcla:** Cuando el chorro de líquido se ha separado en forma de gotas, estas empiezan a avanzar por la cámara de combustión. A partir de este momento lo más importante es la mezcla, además como el aire está a alta temperatura las gotas de combustible van aumentando su temperatura y como consecuencia se va produciendo el cambio de fase.

Otras propiedades importantes para caracterizar la combustión se van a explicar a continuación y a describir en la *Fig. 8*.

- **Longitud Líquida (LL):** es la distancia transcurrida por el combustible desde su salida por el orificio de la tobera hasta que está en las condiciones necesarias para su completa evaporación, esto indica la capacidad de vaporización del combustible.
- **Ángulo del chorro:** Es el ángulo que forman las dos rectas que componen el contorno del chorro y que se cruzan en el orificio de la tobera.
- **Longitud de Lift-Off (LOL):** Es la distancia entre la tobera y el inicio de la zona de reacción, para este trabajo se ha definido esta zona donde hay un 14% del valor máximo de OH en el dominio estudiado, esta distancia existe debido a que mientras exista aporte de combustible este necesita una zona para pasar por los procesos explicados anteriormente, como atomización y evaporación, que son los procesos previos a la combustión, además también debe mezclarse con el aire hasta llegar a las condiciones de autoignición.
- **Penetración del spray o tip penetration:** Se define como la distancia axial entre la punta de la tobera de inyección y donde la fracción de mezcla alcanza el valor de 0,001.

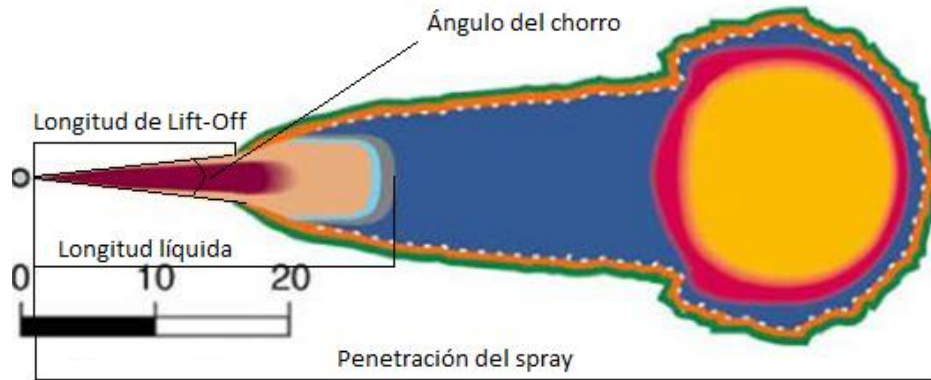


Fig. 8. Propiedades importantes para caracterizar la combustión.

También se deben comentar un fenómeno fisicoquímico, este fenómeno es el autoencendido, este proceso empieza con una primera fase de reacción de baja temperatura donde se consume combustible con reacciones de rotura de cadena formando radicales libres, apareciendo así elementos como el formaldehído (CH_2O). Esta sustancia se puede utilizar como indicador de bajas temperaturas de llama. La temperatura sigue aumentando debido al aire y a las reacciones de baja temperatura, y esto provoca la segunda fase de la combustión, la de alta temperatura [9].

3. MODELADO CFD

Para estudiar las diferentes características de las combustiones y las diferentes estructuras de llama se va a utilizar una herramienta computacional denominada dinámica de flujo computacional, CFD por sus siglas en inglés (*computational fluid dynamics*). Esta herramienta sirve para analizar y resolver problemas de flujo de fluidos como composiciones químicas, densidad y velocidad, esta herramienta garantiza que se utilicen los mejores conceptos de flujo permitiendo que los componentes funcionen de manera eficiente en diferentes condiciones [10].

El análisis CFD se compone de tres fases, la primera, el preprocesamiento, en esta fase se define o importa la geometría, se seleccionan los modelos a utilizar, además se deben definir las propiedades físicas y químicas de los componentes del problema, creando la malla deseada y aplicando las condiciones de contorno para el caso que se va a estudiar durante el proceso. La segunda fase es la resolución del cálculo CFD utilizando potentes estaciones de trabajo que realizan los cálculos a partir de las ecuaciones de flujo de fluidos y químicas dando soluciones precisas. Por último, está el postprocesado, donde se procesan los resultados obtenidos en la fase anterior, para poder ser analizados, además, luego se pueden construir las tablas, gráficas o imágenes deseados para que el análisis de los resultados se pueda interpretar mejor, además de hacer diferentes comparaciones con la misma finalidad [10].

El dominio del caso es un cilindro con 102 mm de longitud y 50 mm de radio. La malla de cálculo está formada por cubos de 2 mm que son autogenerados por Converge mediante el método cartesiano, cerca de la tobera de inyección la red de cálculo se añade con la forma de un cono truncado. El tamaño de celda adaptativo es una de las propiedades perfeccionadas por Converge que, basándose en la velocidad, temperatura y gradiente de la fracción de masa del combustible, minimiza el tamaño de celda y así los resultados son calculados más precisamente [11].

Para la descripción de la fase líquida se utiliza el modelo lagrangiano, este modelo consiste en el seguimiento de las partículas durante el proceso estudiado, mientras que el modelo utilizado para la fase gas es el euleriano, este modelo se basa en fijar el eje y observar las partículas que atraviesan esa zona puntual durante el proceso estudiado, para ello se utilizan las ecuaciones de Navier-Stokes, si a esto se le añade el modelo de turbulencia el modelo pasa a llamarse Reynold Averaged Navier Stokes que es el método utilizado que también es conocido con sus siglas RANS. Para el modelo de combustión se pueden tomar una de las dos suposiciones, en primer lugar, se puede asumir que la condición de mezcla perfecta o *well-mixed* (WM), que como su nombre indica es que se asume que para cada celda en la que se van a resolver las ecuaciones químicas se asume un mezclado adecuado previo a la reacción, de esta forma lo único que afecta en la reacción es la temperatura. La segunda suposición es flamelets no estacionarias/variables de progreso o *Unsteady Flamelet Progress Variable* (UFPV) para esta hipótesis se asume que la estructura de la llama turbulenta puede ser representada por un conjunto de llamas en régimen laminar (flamelets). Para el caso estudiado en este trabajo se va a utilizar la segunda suposición explicada, la de flamelets no estacionarias/variables de progreso o *Unsteady Flamelet Progress Variable* (UFPV) [11].

Pasando a estudiar las ecuaciones que se van a utilizar mediante el modelo CFD, estas son las ecuaciones de conservación de la masa (3), del momento (4) y de la energía (7). En primer lugar, la ecuación de conservación de la masa es la siguiente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S \quad (3)$$

Donde u es la velocidad, ρ es la densidad y S es el término fuente.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (4)$$

Donde P es la presión y σ_{ij} representa el tensor a esfuerzo de la viscosidad y viene dado por la siguiente expresión:

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu' - \frac{2}{3} \mu \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (5)$$

Donde μ es la viscosidad, μ' es la viscosidad de dilatación y δ es la delta de Kronecker. Estas ecuaciones se pueden resolver para flujos compresibles e incompresibles, en este caso, se va a utilizar el primero, por tanto, se necesita una ecuación de estado que relacione presión, densidad y temperatura, en este caso va a ser la ley de los gases ideales.

$$\frac{P}{\rho} = \frac{R \cdot T}{W} \quad (6)$$

Donde W es el peso molecular y R la constante de los gases ideales.

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial u_j \rho e}{\partial x_j} = -P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S \quad (7)$$

Donde Y_m es la fracción másica de las especies m, D es el coeficiente de difusión másico, e es la energía interna específica, K es la conductividad, h_m es la entalpía de las especies y T es la temperatura.

3.1. Lanzamiento de casos CONVERGE

Para la resolución de los casos CFD se utiliza el software Converse, y antes de realizar la simulación en este software se necesita preparar los ficheros de entrada para el caso que se va a estudiar. Hay diferentes tipos de archivos de entrada.

En primer lugar, se tienen los archivos de entrada al cálculo. Algunos de los ficheros más relevantes son los siguientes:

- liquid.dat para las propiedades del combustible en fase líquida
- gas.dat contiene las propiedades del aire, por lo tanto, este no cambia de un combustible a otro.
- mech.dat que para el modelo UFPV contiene las especies químicas transportadas, tanto reactivos y productos como sustancias intermedias. Este fichero varía al cambiar de combustible, debido a que los compuestos no son los mismos.
- El fichero surface.dat define los límites de la superficie de trabajo, que para este caso es un cilindro de 102 mm de altura y 100 mm de diámetro.
- Por último, se tiene el therm.dat que contiene los datos termodinámicos de todas las especies contenidas en el mecanismo de reacción, esto son las constantes para el polinomio que define estas propiedades, también varía este archivo dependiendo del combustible utilizado.

Los otros tipos de ficheros de entradas son los que tienen la extensión .in, estos ficheros contienen parámetros del modelo, condiciones iniciales y de contorno, los más importantes son:

- En el de inputs.in se definen que ficheros se deben coger tanto para las condiciones de contorno (surface) como para el mech y los datos termodinámicos (therm), además se define la malla con el paso por cada coordenada, también contiene más información de otros archivos .in.
- El archivo solver.in contiene parámetros para las ecuaciones de Navier-Stokes, para el régimen turbulento y para la resolución para las ecuaciones de estado estacionario.
- En el de boundary se describen las condiciones de la pared y de la corriente, es uno de los archivos que se debe modificar al cambiar de un caso a otro debido a que se debe indicar la temperatura y presión y la fracción molar de oxígeno,
- por último, en el de initialize se definen ciertos parámetros iniciales donde también se debe indicar tanto temperatura como presión.
- spray.in ya que hay que indicar el combustible utilizado y decir que tipo de tobera se ha utilizado, para los casos estudiados se ha utilizado la tobera denominada spray D, las dimensiones de esta tobera se definirán posteriormente.
- En el de combust.in se debe indicar el combustible que se va a utilizar.
- En los ficheros species.in y post.in también dependen del combustible.
- Por último, hay un fichero llamado jrjproperties donde se tiene que añadir la ruta hasta las tablas de cada combustible para las condiciones de operación, temperatura y porcentaje de oxígeno.

Cuando se tienen todos estos ficheros preparados y revisados ya se puede lanzar el caso, en nuestro caso se lanza mediante el terminal a través de Linux con el comando `mpirun`, esto se ha realizado mediante el clúster del CMT, con un máximo de 144 procesadores y también se ha lanzado algún caso en local, con un máximo de 12 procesadores. Los ficheros de salida están en forma binaria y, por tanto, se necesita un postratamiento. Al lanzar el caso se obtiene un fichero con extensión `.out` para cada instante de tiempo de la simulación, estos archivos se tienen que convertir para poder ser leídos e interpretados, como se explicará en el siguiente apartado.

Se ha comentado anteriormente que se tiene que indicar el tamaño de la tobera, esto se debe a que se van a estudiar dos tipos de diámetro de inyección, el primero, denominado Spray A (SA), tiene un diámetro de orificio más pequeño, más concretamente, $89,4 \mu\text{m}$, y su uso es para la automoción, mientras que el segundo, denominado Spray D (SD) cuya boquilla tiene un mayor diámetro, $190,3 \mu\text{m}$, y su uso es para transportes pesados. En cuanto a la entrada de la tasa de inyección se va a mostrar en la *Fig. 9* como se distribuye esta durante los $0,005\text{s}$ que dura la misma.



Fig. 9. Evolución de la tasa de inyección de combustible.

3.2. Postprocesado MATLAB

Cuando llega el momento de trabajar con esos ficheros generados anteriormente, se deben convertir a otro formato porque en binario no se pueden analizar, para solucionar este problema se utiliza el programa Matlab para poder leer estos ficheros, generar estructuras de este programa (.mat) y calcular los parámetros de interés para cada caso, además de realizar las gráficas necesarias para poder interpretar los datos correctamente.



Esquema 1. Diagrama de flujo del postprocesado.

Para ello se utiliza un script que, en primer lugar, convierte los ficheros binarios a ficheros tipo columna (.col), también se crean unos ficheros .par que no son necesarios y por tanto son eliminados instantáneamente. A partir de los ficheros .col se generan estructuras de este programa (.mat) y se calculan los parámetros de interés para cada caso, además de realizar las gráficas necesarias para poder interpretar los datos correctamente.

Es importante saber que parámetros son los de mayor interés porque en esos ficheros binarios hay mucha información que no va a ser utilizada. En este caso los parámetros que son importantes y se van a convertir son la fracción de acetileno ($y_{C_2H_2}$), que es un precursor de hollín, la fracción de mezcla, con la que se analiza en que punto de la reacción se está en cada momento, la fracción de formaldehído (y_{CH_2O}), que nos indica temperaturas bajas de llama, la fracción del radical hidroxilo (y_{OH}), que es un indicador de temperaturas altas de llama, la fracción de OME_1 ($y_{CH_3OCH_2OCH_3}$), que nos indica como se está consumiendo el combustible y la fracción del radical excitado del grupo hidroxilo (y_{OH^*}), que es un indicador de altas temperaturas cerca de la superficie estequiométrica.

Para utilizar este script, en primer lugar, se tienen que definir diferentes parámetros como, por ejemplo, si se genera hollín, el tipo de tobera utilizada, tipo de modelo de combustión y si hay reacción, entre muchos otros parámetros. También se indican los modelos utilizados, valores máximos y mínimos y los parámetros de la malla. Por último, se define el dosado estequiométrico (Fst) y con ello la fracción de mezcla estequiométrica (Zst).

Luego se inicializan las variables que se van a necesitar, luego mediante un bucle se leen uno a uno los ficheros columna y se interpolan los resultados para poder ser analizados, reduciendo el caso de tres dimensiones a dos para aumentar la velocidad del cálculo, luego se hacen los cálculos necesarios para obtener más parámetros, como por ejemplo el LOL, y luego se grafican para cada instante de tiempo los diferentes parámetros estudiados, como por ejemplo la evolución de fracción de mezcla, del formaldehído o el campo de temperaturas. Por último, se guardan los resultados de las especies relevantes, fracción de mezcla y temperatura.

Por último, una vez ejecutado el script anteriormente mencionado, se tiene que ejecutar otro script para generar las gráficas. Para ejecutarlo se necesitan los resultados obtenidos durante todo el proceso anterior y además los resultados experimentales, de este modo con este script obtenemos comparaciones entre los valores calculados y los experimentales para ver la viabilidad del modelo utilizado. Las gráficas calculadas son, en primer lugar, la penetración del spray o *tip penetration*, en segundo lugar, el tiempo de retraso o *ignition delay* (ID), luego la longitud de Lift-Off (LOL), también se hace una gráfica de barras con el valor del tiempo de retraso y el valor medio de la longitud de Lift-Off y, por último, el perfil de la velocidad axial. Para todas las gráficas explicadas anteriormente se comparan el valor calculado con el valor experimentado obtenido por pruebas realizadas en el CMT.

Una vez se tienen todas las gráficas, ya se tiene el caso completo, ya solo queda analizar los resultados y modificar las gráficas obtenidas. Con Matlab es fácil juntar diferentes gráficas para poder comparadas como, por ejemplo, se pueden poner en una misma gráfica los parámetros calculados para diferentes temperaturas y así poder fácilmente analizar los resultados y el efecto de la temperatura para este ejemplo en concreto.

4. RESULTADOS

En el siguiente apartado se van a presentar los resultados de las simulaciones realizadas para el presente trabajo y diferentes análisis y comparaciones de estos. Los combustibles utilizados son, como ya se ha comentado anteriormente, el OME₁ y el OME_x, que es una mezcla de OME₃ y OME₄, con una proporción másica de 59,14% y 40,86%, respectivamente. Otro efecto que se va a estudiar es la variación de la temperatura de la cámara de combustión, para esto, se van a estudiar tres diferentes temperaturas, 800K, 900K y 1000K, todas ellas para ambos combustibles. Por otra parte, la fracción molar de oxígeno para todos los casos estudiados es de 15%, que en fracción másica es 16,78%, como se ha calculado anteriormente. Por último, el diámetro del inyector que se va a estudiar es el más grande, denominado Spray D, este diámetro es de 190,3 μm , aunque también se van a comparar con el otro diámetro del inyector, Spray A, cuyo tamaño es de 89,4 μm . Cabe destacar que para los valores del Spray A que se van a comparar provienen de un trabajo interno del CMT, estos se han realizado exactamente igual que para la otra tobera, que se ha explicado anteriormente como han sido calculados. Por tanto, los casos que se van a calcular se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Los casos que se van a calcular.

Combustible	Temperatura (K)
OME ₁	800
	900
	1000
OME _x	800
	900
	1000

El análisis se va a estructurar como sigue:

- En primer lugar, se va a analizar el OME₁ a 900K para el Spray D:
 - Se va a comparar con el Spray A, y así analizar a la vez las diferencias al variar la tobera, para ello se compara el tiempo de retraso (ID), la longitud de Lift-Off (LOL) y la penetración del spray (tip penetration). En segundo lugar, se va a analizar, para el mismo combustible, misma temperatura y la tobera a estudiar (SD) los campos de formaldehído (CH₂O) y radical hidroxilo (OH), para cuatro instantes de tiempo diferentes, más concretamente, para 1050, 1350, 1450 y 2000 μs .
- A continuación, se van a mostrar los resultados para el OME₁ a las tres diferentes temperaturas estudiadas, para ello se compara el tiempo de retraso (ID), la longitud de Lift-Off (LOL) y la penetración del spray (tip penetration).
- Luego, se va a realizar el mismo proceso para el OME_x, en primer lugar, se va a analizar a 900K:
 - Se va a comparar con la tobera pequeña (SA), luego se va a mostrar los mismos campos mencionados para el OME₁, pero a diferentes tiempos, concretamente, 300, 420, 750 y 950 μs .

- Y, a continuación, se van a comparar para las tres temperaturas los mismos parámetros mencionados para el OME₁.
- Por último, se va a comparar el OME₁ y el OME_x, para la temperatura de 900K.

Los datos experimentales se han realizado, en lugar de en una cámara de combustión de un motor se ha realizado inyectando el combustible en una maqueta a alta presión y temperatura, donde las condiciones termodinámicas y de composición de aire son como las de un motor. Los inyectores utilizados en esta maqueta son mono-orificio, por lo que se controla exactamente el flujo de combustible que entra a la cámara. Tanto los diámetros de los orificios como la presión de inyección son representativas de los que tiene un inyector real de un motor.

4.1. Resultados con OME₁.

Para empezar con el análisis de los resultados se va a analizar el OME₁ a 900K para la tobera grande (SD) y se va a comparar con la pequeña (SA).

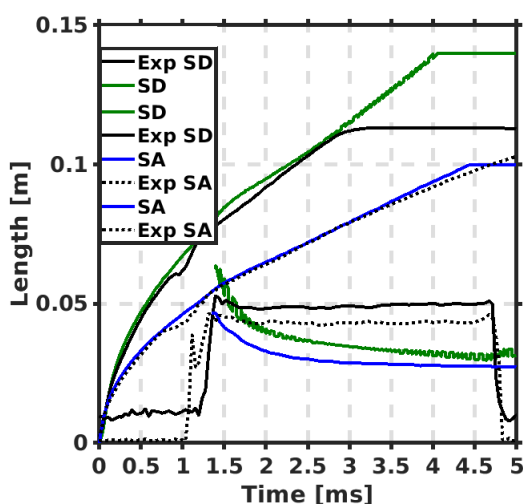


Fig. 10. Comparación entre el SD y SA para el OME₁ a 900K del LOL y tip penetration.

La Fig. 10 muestra la evolución temporal de la penetración del chorro y el lift-off con OME₁ para las dos toberas SD y SA. La penetración del chorro tiene una tendencia creciente con el tiempo desde el inicio de la inyección, mientras que la distancia de lift-off (LOL) aparece en el instante de inicio de combustión (ID) y tiene una evolución relativamente plana con el tiempo. Esta última distancia decrece tras el final de inyección (en la figura, en torno a 4.7 ms).

Tanto la penetración como la longitud de Lift-Off (LOL) para la tobera grande (SD) son más largas que para la tobera pequeña (SA), esto se debe a que para esta última la mezcla es más rápida, por tanto, la reacción empieza antes. También se observa que para los valores calculados hay un retroceso del LOL, mientras que en los casos experimentales estos se mantienen en un valor constante. También se observa que el caso experimental para la tobera grande (SD) acaba antes, esto se debe a que en la cámara de combustión donde se han llevado

a cabo los experimentos para sacar esos datos tiene esas dimensiones, por lo tanto, no puede observar más distancia del chorro.

La Fig. 11 muestra el tiempo de retraso al autoencendido (ID) y la media de la longitud de Lift-Off (LOL) durante la fase estabilizada (entre aproximadamente 4 y 4.5 ms).

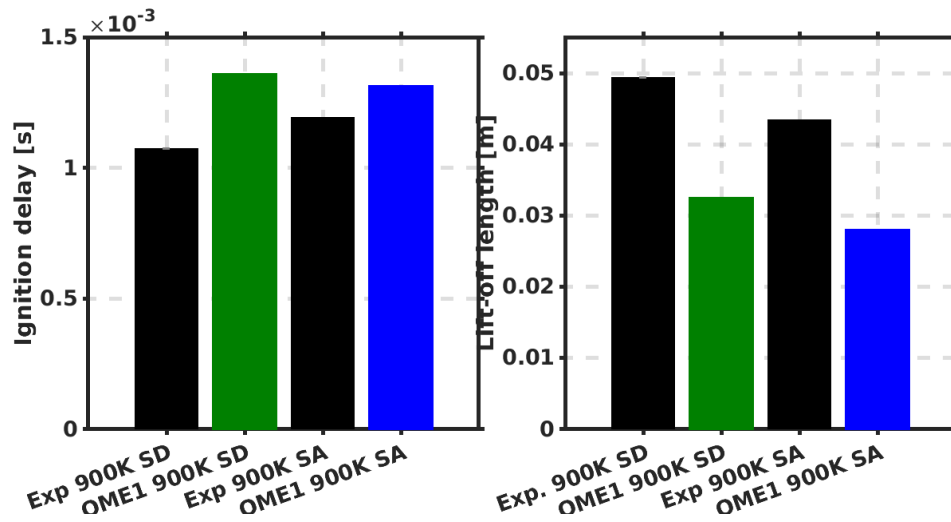


Fig. 11. Comparación entre el SD y SA para el OME1 a 900K del ID y LOL.

En relación con el tiempo de retraso (ID) para la tobera grande (SD), se observa que para el caso calculado el valor es un poco más alto que en los experimentos, pero analizando para el caso de la tobera pequeña se ve que ocurre lo mismo, por lo tanto, para ambas toberas sigue la misma tendencia. Para el caso de la media de la longitud de Lift-Off (LOL) ocurre una situación un poco inversa, para la tobera grande (SD) el valor experimental es mayor que el obtenido mediante el modelo, para el caso de la otra tobera (SA) se ve que sigue la misma tendencia. Aparte de la exactitud de los resultados, se observa que los valores para la tobera grande (SD) son más altos que para la otra tobera (SA), tal como se ha indicado anteriormente.

Para completar el análisis anterior, se van a analizar la evolución de los campos tanto de formaldehído (CH₂O) como del radical hidroxilo (OH) para diferentes tiempos, ya que estos dos compuestos nos dan información de la combustión. La Fig. 12 muestra estos campos se van a estudiar para el OME₁ a la temperatura de 900K.

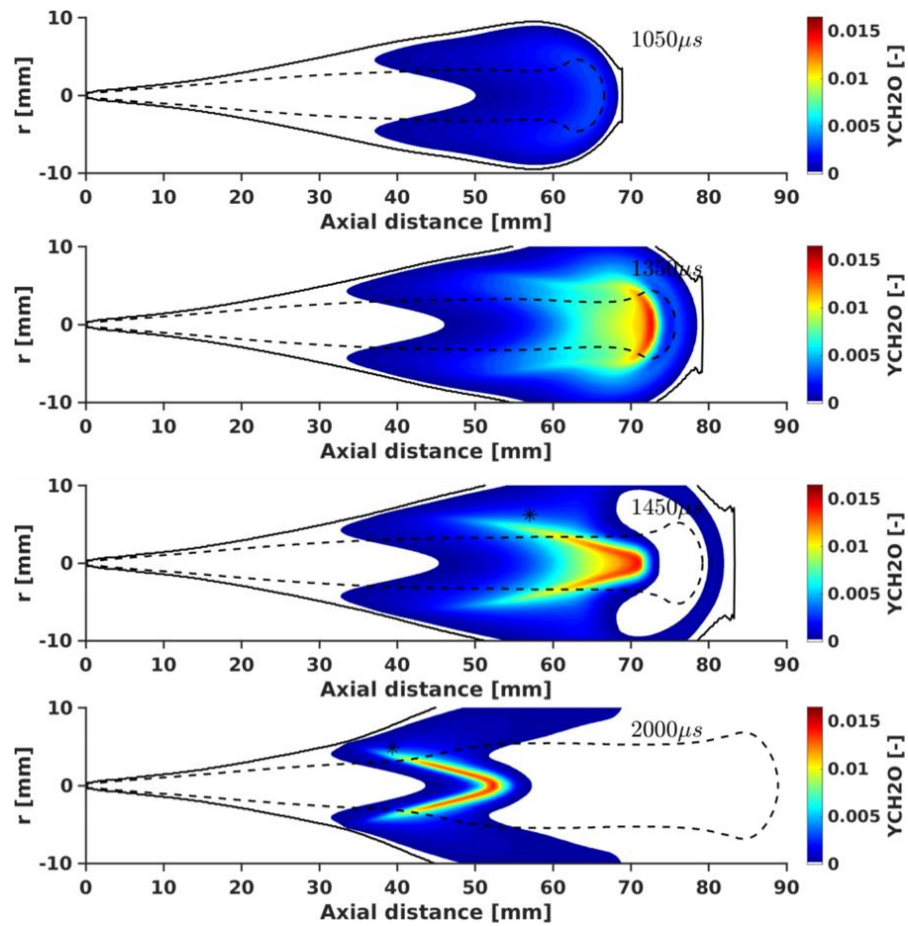


Fig. 12. Campos de formaldehído (CH_2O) para el OME1 a 900K.

En los perfiles mostrados anteriormente se puede observar que las altas concentraciones de formaldehído son en el centro de la llama, estas empiezan a formarse sobre 70 mm y a partir de 1350 μs y a partir de ahí esta distancia va menguando hasta sobre 50 mm a 2000 μs . Las altas concentraciones del formaldehído son un indicador de las fases iniciales de la combustión a baja temperatura.

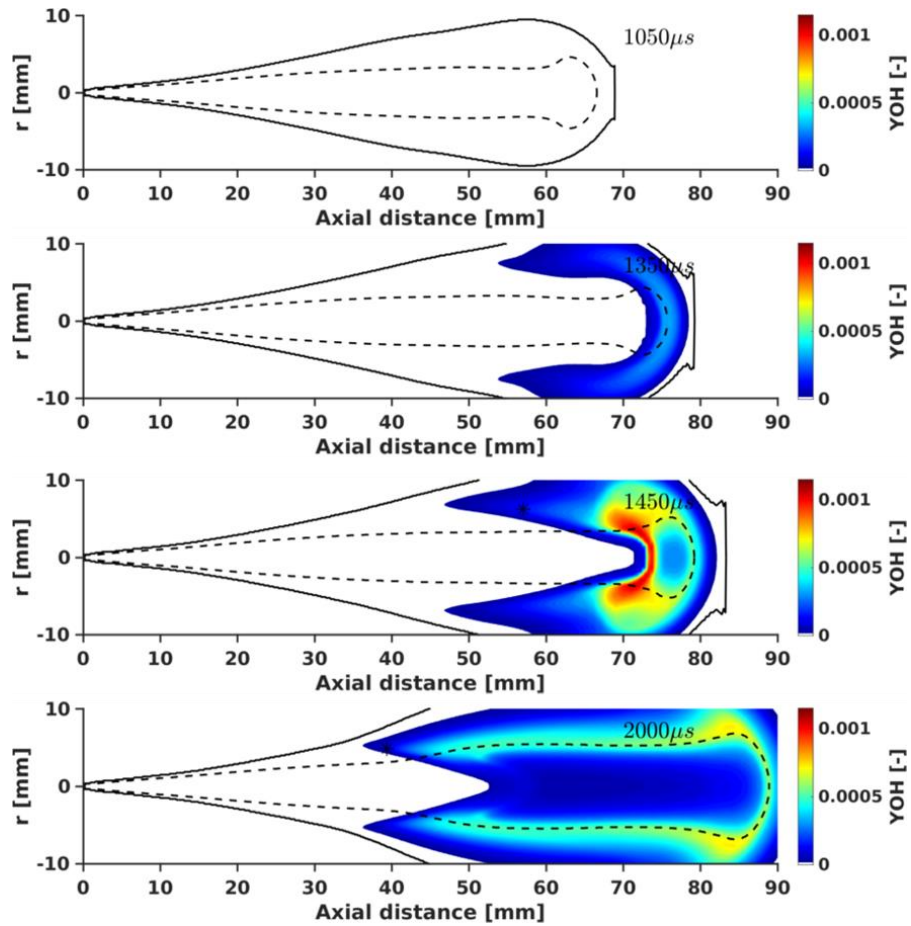


Fig. 13. Campos de radical hidroxilo (OH) para el OME1 a 900K.

En el caso de los perfiles del radical hidroxilo en la Fig. 13 se observa que los valores de alta concentración están sobre la superficie estequiométrica (línea discontinua), se observa que los valores más altos se encuentran sobre los 70 mm y 1540 μ s, y luego ya disminuye la concentración. Esta sustancia se utiliza como un indicador de altas temperaturas de llama, por ello está cerca de la superficie estequiométrica que es donde ocurre la reacción de forma óptima.

Como se ha observado en las Fig. 12 y Fig. 13 estas dos sustancias, formaldehído (CH₂O) y radical hidroxilo (OH), son complementarios el uno del otro, en primer lugar, viene la etapa de baja temperatura de llama, esta fase está relacionada con el formaldehído (CH₂O) y, luego, viene la etapa de alta temperatura de llama, siendo esta observada mediante la presencia del radical hidroxilo (OH).

A continuación, se va a estudiar el efecto de la temperatura del aire ambiente para los parámetros estudiados anteriormente para el OME₁. En primer lugar, se va a comentar la variación del tiempo de retraso (ID).

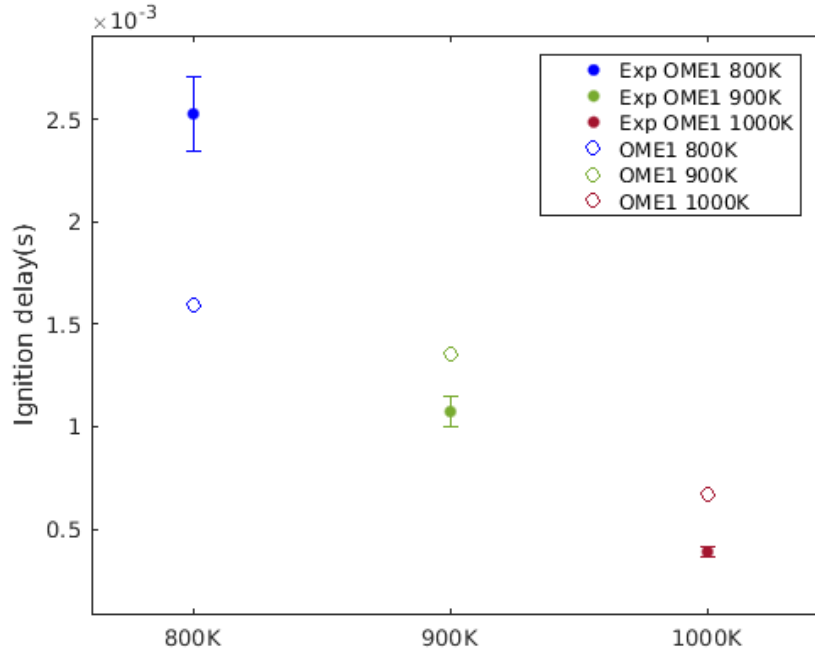


Fig. 14. Comparación entre temperaturas para el tiempo de retraso (ID) para el OME1 con la tobera SD.

Como se observa en la Fig. 14, para el caso de 800K hay bastante diferencia del valor modelado con el valor experimental, mientras que tanto para 900K como para 1000K, las diferencias son mucho menores. Pasando a la comparación entre las diferentes temperaturas se observa que para 800K se tiene el ID más alto mientras que para 1000K el más bajo, por lo que a mayor temperatura va disminuyendo el ID, esto es lógico, debido a que cuanto mayor sea la temperatura del aire ambiente, la mezcla aire-combustible es más reactiva y la combustión empezará antes disminuyendo el tiempo de retraso (ID).

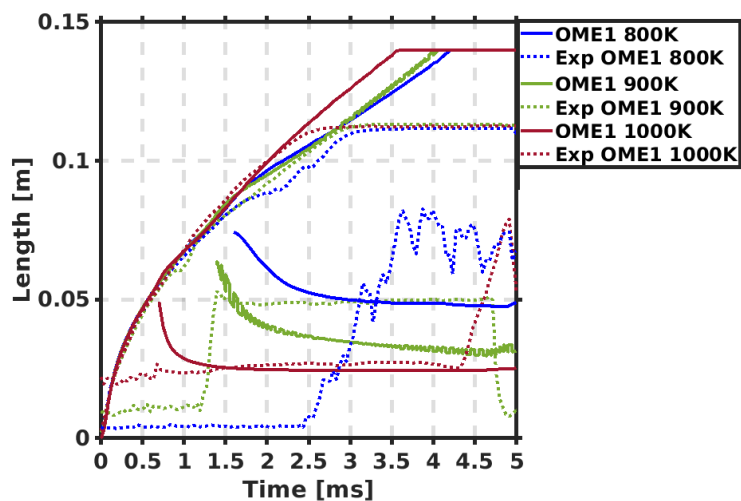


Fig. 15. Comparación entre temperaturas para la longitud de Lift-Off (LOL) y penetración del spray (tip penetration) para el OME1 con la tobera Spray D.

En la *Fig. 15* se observa la evolución temporal de la penetración del chorro y la longitud de lift-off para las tres temperaturas de aire estudiadas. En primer lugar, la penetración del spray (tip penetration), para las tres temperaturas es prácticamente igual a la experimental, como se ha comentado anteriormente, las curvas experimentales se quedan en un valor más bajo debido a las dimensiones de la cámara de combustión donde se han llevado a cabo los experimentos. También hay que comentar que para las tres temperaturas la penetración va igual hasta el momento en el que enciende, ahí se separan, aunque no mucho, cuanto menor es la temperatura menor es la penetración. En segundo lugar, la longitud de Lift-Off (LOL), se observa que para la temperatura de 1000K es prácticamente idéntico al experimental, además de no haber una decaída como para los otros dos casos. También se puede ver que a 1000K se obtiene el mínimo valor de LOL, esto es debido a que a mayor temperatura la mezcla es más reactiva y empieza la reacción antes, por lo tanto, a 900K se tiene un LOL más corto que a 800K.

4.2. Resultados con OME_x.

A continuación, se va a cambiar de combustible, y se va a estudiar el comportamiento del OME_x, que como se ha explicado anteriormente es una mezcla de OME₃ y OME₄ con una fracción para el primero de 59,14% y para el segundo 40,86%. En primer lugar, se va a comparar para este combustible las dos diferentes toberas.

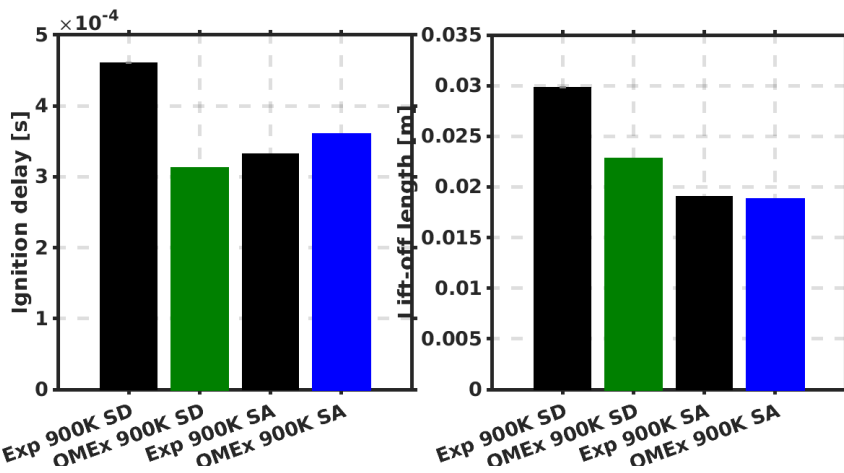


Fig. 16. Comparación entre el SD y SA para el OME_x a 900K del ID y LOL.

El tiempo de retraso (ID) se observa en la *Fig. 16* que es un menor que el experimental para la tobera grande (SD), mientras que para la tobera pequeña (SA) son más parecidos entre sí y menores que para la tobera grande (SD). Pasando a analizar la media de la longitud de Lift-Off (LOL) se observa que, al igual que para el caso del OME₁, el valor para la tobera grande (SD) es también mayor que para la tobera pequeña (SA), como se va a explicar a continuación a partir de la *Fig. 17*.

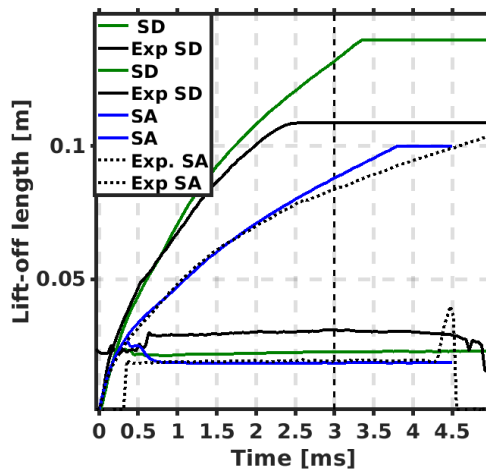


Fig. 17. Comparación entre el SD y SA para el OME_x a 900K del LOL y tip penetration.

Siguiendo con el análisis temporal de la longitud de Lift-Off, a partir de la Fig. 17, se observa que para ambas toberas los resultados van prácticamente idénticos a los experimentales, aunque la tobera grande sí que tiene un valor un poco más bajo. Por otra parte, se observa también que para la tobera grande (SD) los valores son mayores, debido a que la mezcla es más lenta y la reacción tarda más en empezar. Pasando a analizar la penetración del spray se observa que para ambas toberas sigue bastante bien la curva experimental. Para la tobera grande (SD) hay una penetración más rápida que para el caso de la tobera pequeña (SA). También se debe comentar que para la tobera grande se observa que el valor de penetración experimental se vuelve constante y esto es debido a que, como se ha comentado anteriormente, la cámara de combustión donde se han realizado los experimentos tiene ese tamaño.

A continuación, se va a pasar a estudiar los campos del formaldehído (CH₂O) y del radical hidroxilo (OH) para diferentes tiempos, debido a que son importantes para analizar la llama formada, estos se van a mostrar para el OME_x a la temperatura del 900K.

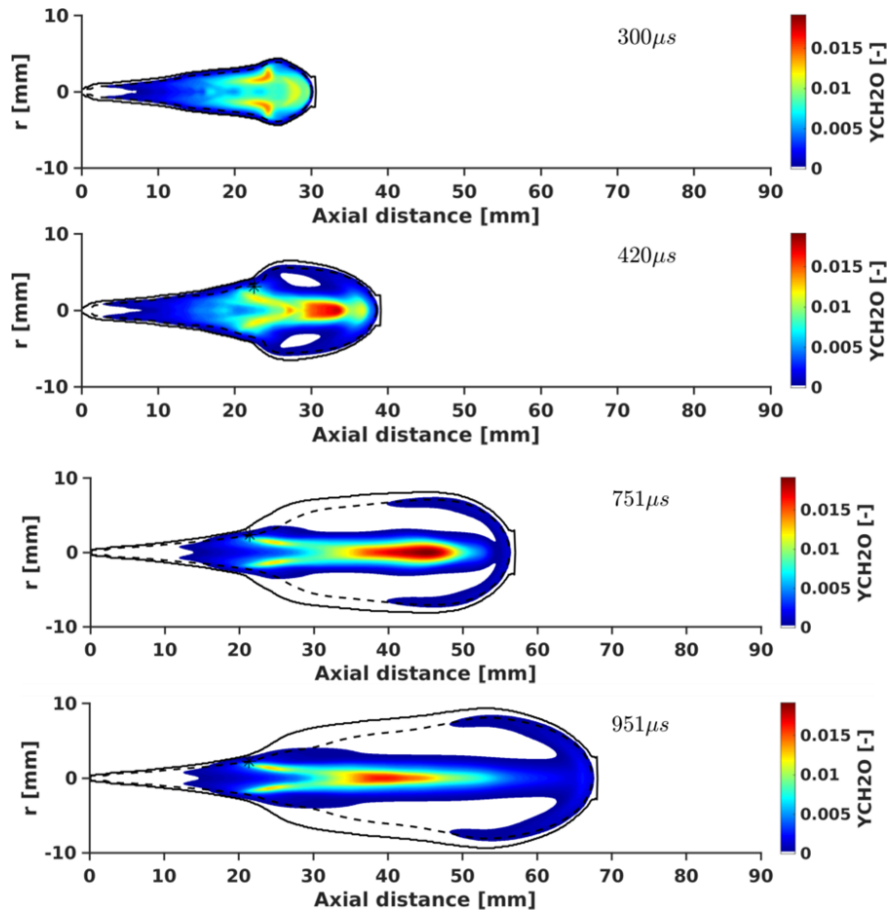


Fig. 18. Campos de formaldehído (CH_2O) para el OME_x a 900K.

En la Fig. 18 se observa que a partir de los 420 μs se empiezan a formar las altas concentraciones de formaldehído (CH_2O) en el centro de la llama y sobre 30 mm, luego a los 750 μs aumenta un poco la concentración y la distancia a entre 40 y 50 mm y luego ya baja a 40 mm a los 950 μs . Como se ha comentado anteriormente, esta sustancia es un indicador de bajas temperaturas de llama por ello las concentraciones altas se ubican en el interior de la llama.

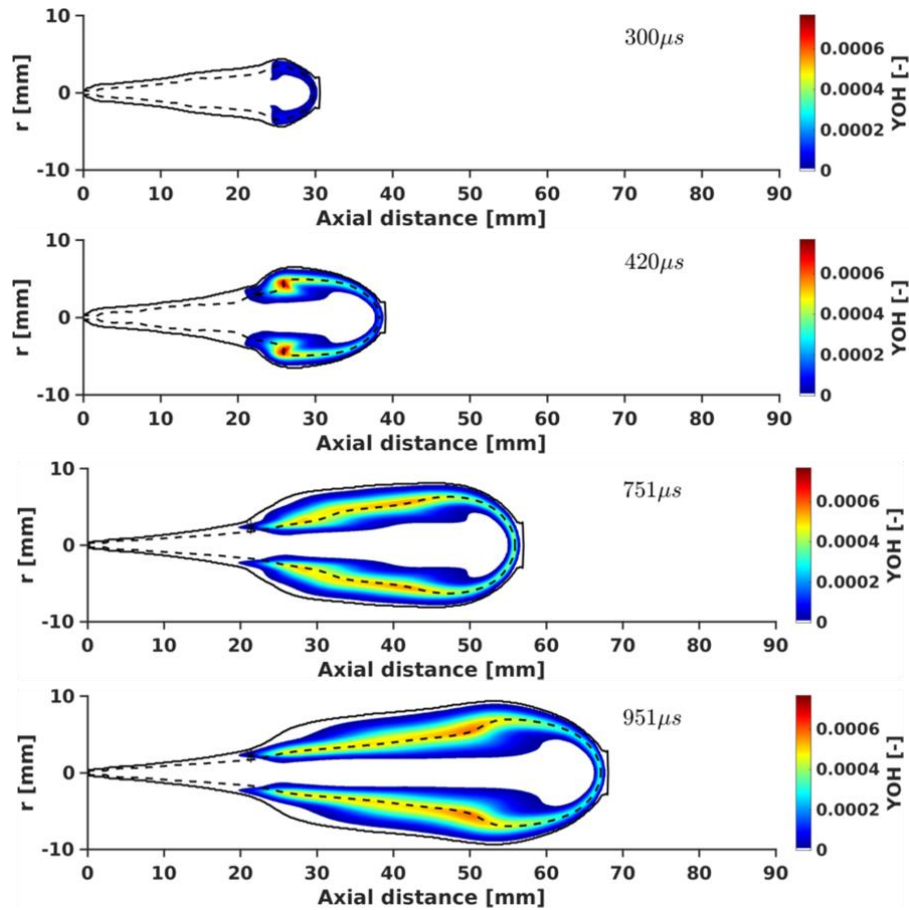


Fig. 19. Campos de radical hidroxilo (OH) para el OME_x a 900K.

Para el caso del radical hidroxilo (OH), al igual que para el caso de OME₁, para el OME_x se observa en la Fig. 19 que las concentraciones más altas de esta sustancia están situadas en la zona más cercana a la superficie estequiométrica (línea discontinua), en el que se ve que la mayor concentración se llega sobre 25 mm y 420 μs, luego esta concentración se extiende más por la superficie estequiométrica, pero con un valor más bajo. Como se ha comentado anteriormente esta sustancia es un indicador de altas temperaturas de llama, por ello se sitúa sobre la superficie estequiométrica.

Como se ha observado en las Fig. 18 y Fig. 19 estas dos sustancias, formaldehído (CH₂O) y radical hidroxilo (OH), son complementarios el uno del otro, en primer lugar, viene la etapa de baja temperatura de llama, esta fase está relacionada con el formaldehído (CH₂O) y, luego, viene la etapa de alta temperatura de llama, siendo está observada mediante la presencia del radical hidroxilo (OH).

Finalmente, se va a analizar el efecto de la temperatura sobre el tiempo de retraso (ID), la longitud de Lift-Off (LOL) y la penetración del spray (tip penetration) para el OME_x a las tres temperaturas que se van a estudiar 800K, 900K y 1000K.

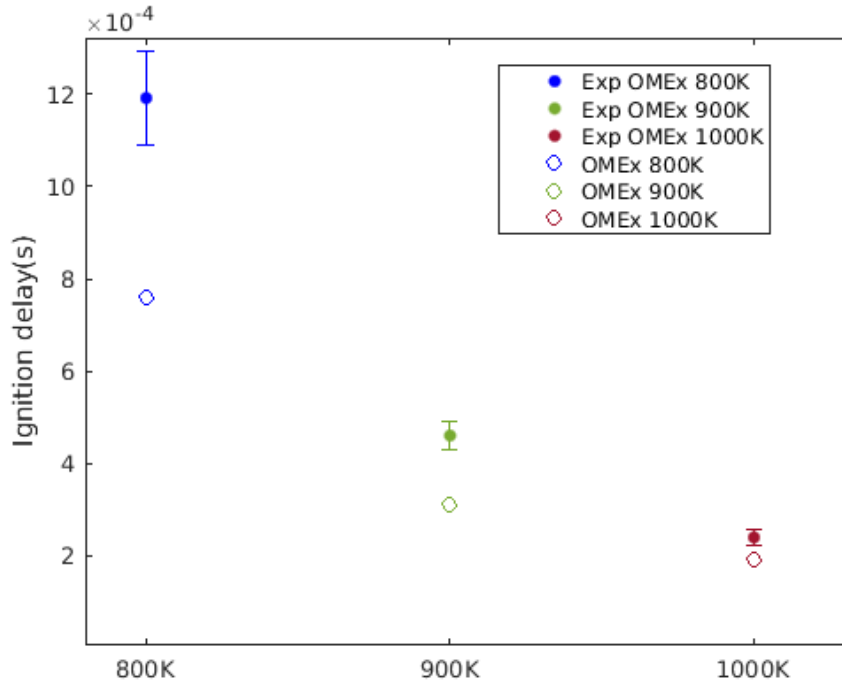


Fig. 20. Comparación entre temperaturas para el tiempo de retraso (ID) para el OME_x con la tobera Spray D.

Como se observa en la Fig. 20, e igual que para el caso del OME₁, para el caso de 800K es para el que el valor difiere más entre el cálculo y el valor experimental, mientras que para 900K es mucho menor y para 1000K es casi el mismo. Pasando a estudiar la variación entre temperaturas se observa que conforme aumentamos la temperatura el tiempo de retraso (ID) es menor, cosa lógica, debido a que con este aumento de temperatura favorecemos el proceso de combustión, iniciándose más rápidamente el mismo.

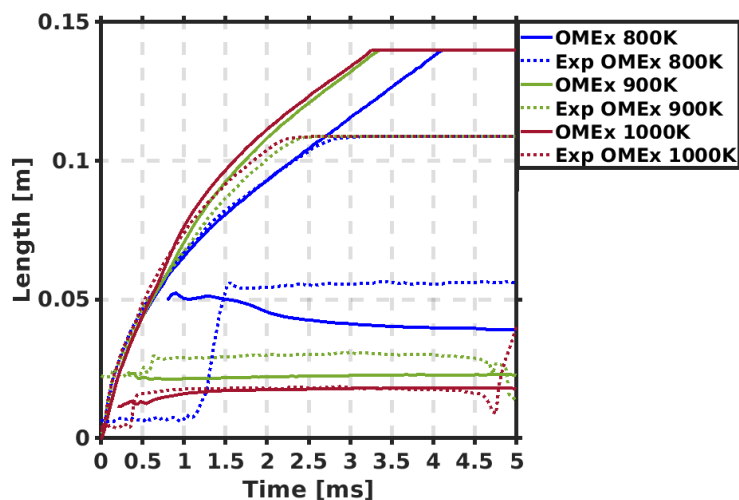


Fig. 21. Comparación entre temperaturas para la longitud de Lift-Off (LOL) y penetración del spray (tip penetration) para el OME_x con la tobera Spray D.

En la *Fig. 21*, se observa que, en primer lugar, las curvas de la penetración del spray para las tres temperaturas van superpuestas hasta el momento en el que el combustible enciende que es cuando se separan, penetrando más cuanto más alta es la temperatura, y además hay más diferencia entre las 800 y 900K que entre 900 y 1000K, cabe destacar que las curvas experimentales paran antes debido al tamaño de la cámara de combustión donde se han hecho los experimentos. En segundo lugar, para la longitud de Lift-Off, se observa que, al igual que para el caso del OME₁, para la temperatura más alta, 1000K, la curva se adapta perfectamente a la experimental, mientras que para las otras dos temperaturas el valor experimental es un poco mayor, cabe destacar que para 800K la curva empieza en un valor similar al experimental pero tiene una pequeña decaída, por otra parte, cuanto más aumentamos la temperatura más disminuye la longitud de Lift-Off (LOL), esto es lógico debido a que cuanto mayor sea la temperatura el combustible es más reactivo, por lo tanto, el valor más pequeño es para el caso con la temperatura de 1000K, luego para 900K y el valor más alto para 800K.

4.3. Comparación del efecto del tipo de combustible.

En primer lugar, se va a comparar diferentes mapas de temperatura para ambos combustibles, además, se van a mostrar para los mismos tiempos de reacción el mapa de temperatura para el dodecano, este combustible es tipo Diesel que sirve de referencia en el campo de la investigación [12].

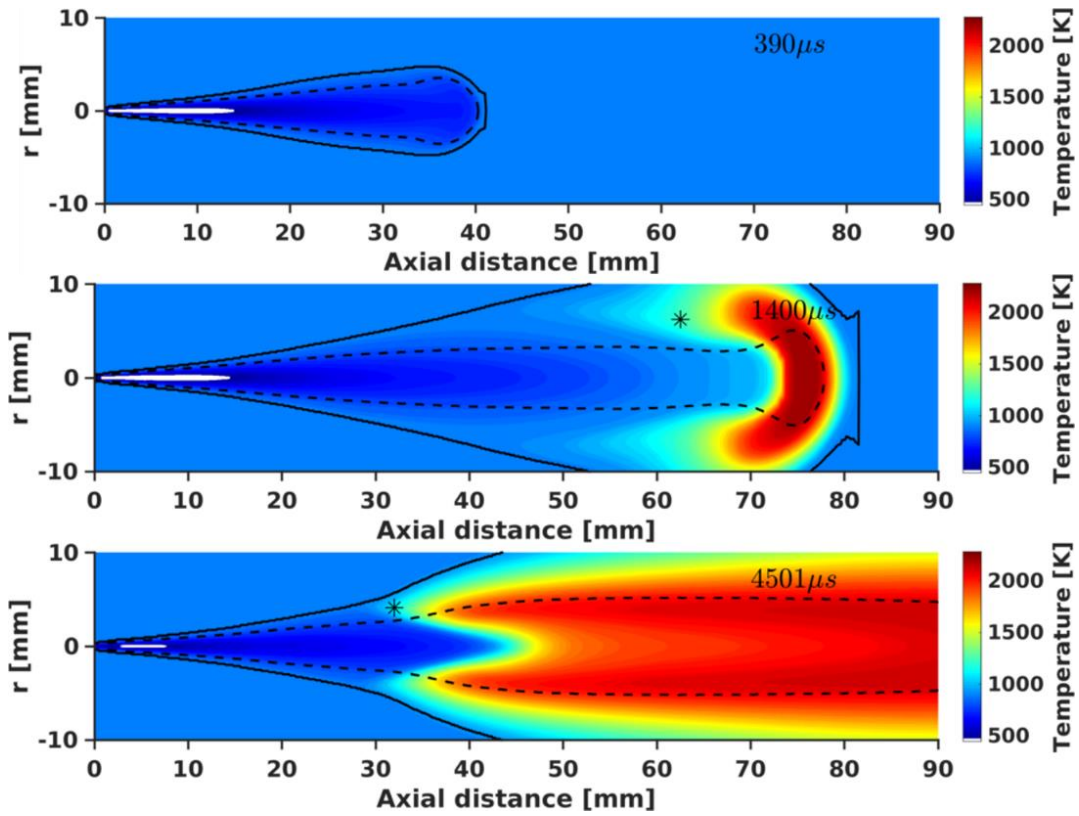


Fig. 22. Campo de temperaturas para el OME1 a los tiempos de 390, 1400 y 4501 μs .

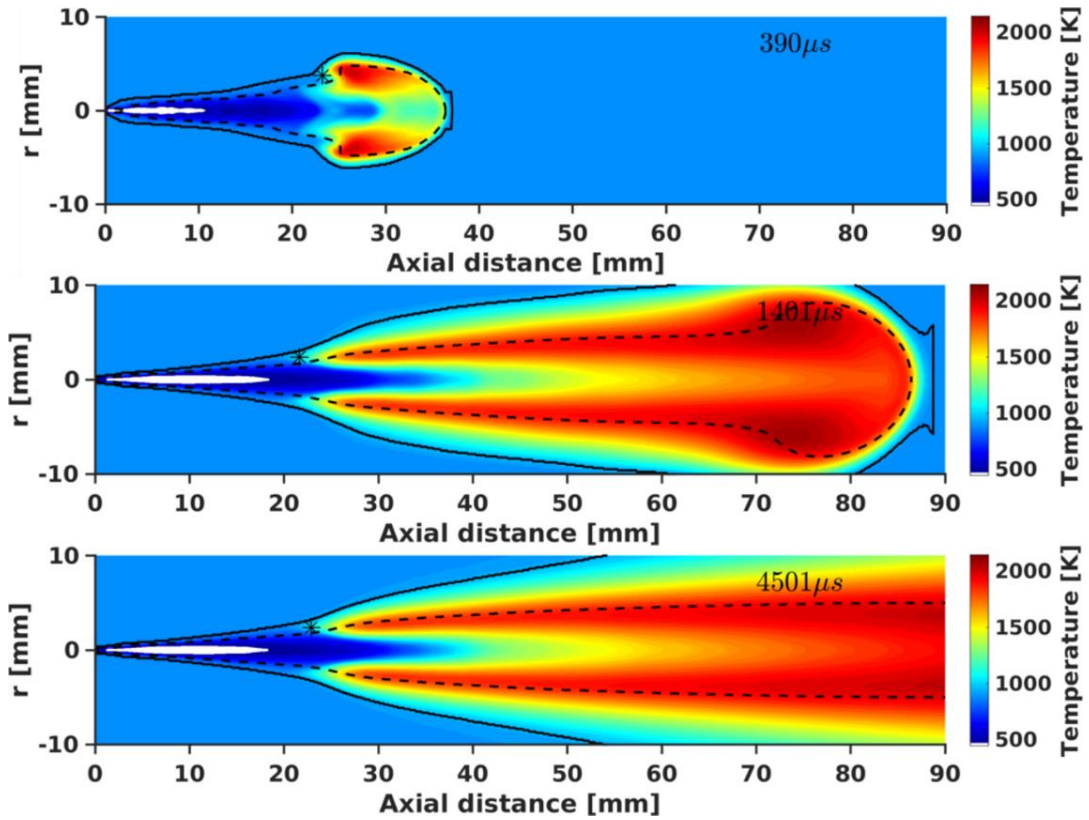


Fig. 23. Campo de temperaturas para el OMEx a los tiempos de 390, 1401 y 4501 μs .

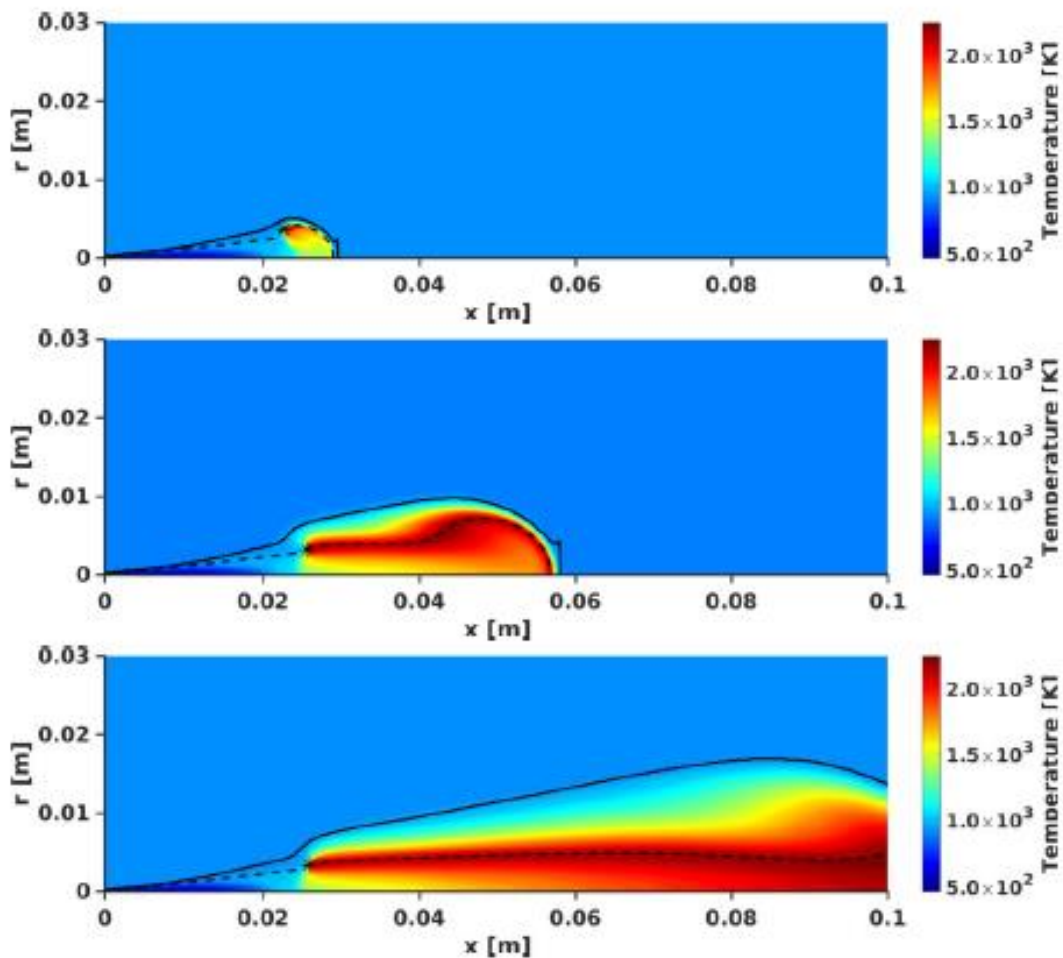


Fig. 24. Campo de temperaturas para el dodecano a los tiempos, de arriba a abajo, de 390, 1400 y 4500 μ s.

A partir de las Fig. 22, Fig. 23 y Fig. 24 se puede observar que la llama para el OME_x (Fig. 23) es más parecida a la llama para el dodecano (Fig. 24) mientras que la llama para el OME₁ (Fig. 22) difiere un poco más, esto se debe a que el OME₁ tiene una estructura de llama altamente premezclada mientras que en los otros dos combustibles predomina la combustión por difusión.

A continuación, se va a comparar los dos diferentes combustibles estudiados durante el presente trabajo entre ellos. La comparación se va a realizar para los datos a 900K con la tobera Spray D, y los parámetros que se van a estudiar son los mismos que para los casos anteriores, que son el tiempo de retraso (ID), la longitud de Lift-Off (LOL) y la penetración del spray (tip penetration). En primer lugar, se va a comparar el tiempo de retraso (ID) para ambos combustibles.

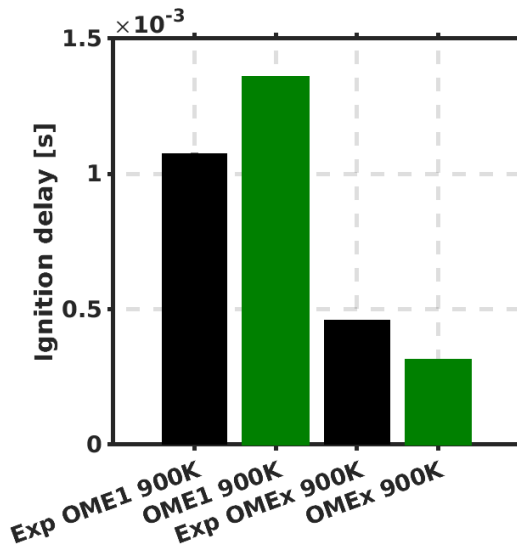


Fig. 25. Comparación del ID entre el OME1 y OME_x a 900K.

Como se observa en la Fig. 25, para el OME₁ el tiempo de retraso es mucho mayor, como es lógico, debido a que el OME₁ es mucho menos reactivo que el OME_x y por eso le cuesta más quemar. Esto es consistente con el hecho de que el OME₁ tiene un número de cetano menor que el OME_x (Tabla 3).

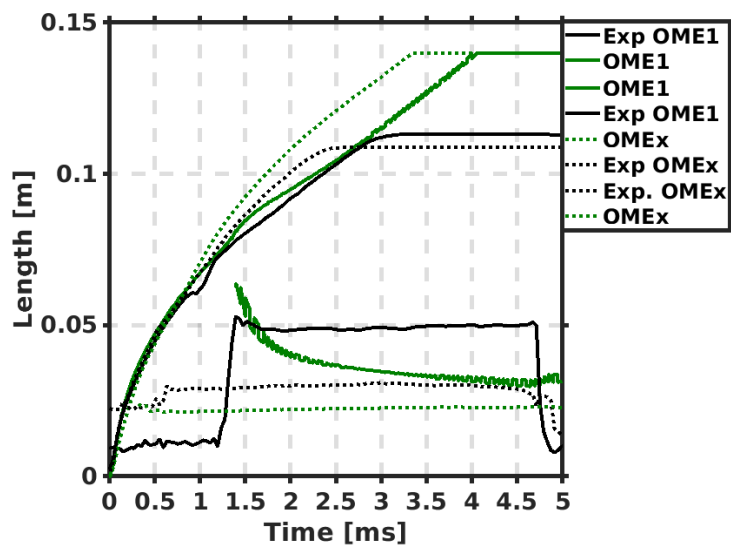


Fig. 26. Comparación del LOL y tip penetration entre el OME1 y OME_x a 900K.

En la *Fig. 26*, se observa que para la penetración del spray están todas las curvas superpuestas hasta un punto, que es cuando enciende el combustible, en ese punto se separan, teniendo una mayor penetración para el OME_1 que para el OME_x . En segundo lugar, la longitud de Lift-Off también es mayor para el OME_1 debido a que este es menos reactivo que el OME_x por lo tanto le cuesta más empezar la reacción de combustión.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha simulado mediante las técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD) la inyección de un chorro de combustible en condiciones de la cámara de combustión de un motor de encendido por compresión. Se ha evaluado el comportamiento de dos diferentes combustibles sintéticos del tipo polioximetilen-dimetiléteres (OMEn), que han sido OME_1 y OME_x , siendo este último una mezcla de OME_3 y OME_4 . Se ha estudiado para tres diferentes temperaturas, 800K, 900K y 1000K, y para dos diferentes toberas, una más grande (SD) y una más pequeña (SA). Los parámetros estudiados han sido el tiempo de retraso (ID), la longitud de Lift-Off (LOL), la penetración del spray (tip penetration) y los campos de formaldehído (CH_2O) y del radical hidroxilo (OH).

En cuanto al modelado CFD se puede concluir que reproduce bastante bien los experimentos calculados, también se observa que a la temperatura a la que mejor se adapta es a 1000K y el combustible es el OME_x , aunque se debe comentar que para la longitud de Lift-Off hay una decaída mientras que el experimental se mantiene en un valor constante, la penetración del spray se reproduce de una manera casi perfecta y el tiempo de retraso depende de cada caso, algunos va idéntico y en otros sí difiere más el valor del modelado del experimental

La comparación entre ambos combustibles nos ha dado la información de que el OME_x es mucho más reactivo que el OME_1 , por lo tanto, al estudiar los parámetros característicos, se observa que para el OME_x tiene tanto un menor tiempo de retraso (ID) y una menor longitud de Lift-Off (LOL). Estos efectos se mantienen para todas las temperaturas del aire estudiadas, aun cuando la temperatura influye también en la reactividad de la mezcla aire-combustible, de manera que a más temperatura hay menor tiempo de retraso y longitud de lift-off.

Además, de los resultados se puede concluir que, para el efecto de la tobera, se ha deducido que un tamaño más grande de la tobera aumenta la longitud de Lift-Off (LOL), mientras que para la penetración del spray (tip penetration) un tamaño más grande implica una penetración más rápida.

Pasando a los campos de formaldehído (CH_2O), se ha observado que las concentraciones más altas de esta sustancia aparecen en el interior de la llama, esto se debe a que es un indicador de bajas temperaturas de la propia llama, en segundo lugar, de los campos del radical hidroxilo (OH) se ve que aparecen sobre la superficie estequiométrica y esto se debe a que esta sustancia es un indicador de altas temperaturas de llama.

Puesto que estas técnicas se adaptan bastante bien a los resultados y viendo el potencial de estos combustibles oxigenados como sustitutos de los combustibles fósiles, urge la necesidad de tener más información sobre los mismos, por lo tanto, se deben seguir haciendo experimentos con los mismos para ir conociendo más aun su comportamiento.

6. BIBLIOGRAFÍA

[1] Foster, S., Elzinga, D.: “El papel de los combustibles fósiles en un sistema energético sostenible”, *ONU*. Disponible en: <https://www.un.org/es/chronicle/article/el-papel-de-los-combustibles-fosiles-en-un-sistema-energetico-sostenible> [Consulta 25 de enero de 2022].

[2] Portillo, G.: “Combustibles fósiles”, *RenovablesVerdes*. Disponible en: <https://www.renovablesverdes.com/combustibles-fosiles/#:~:text=Proporciona%20gran%20cantidad%20de%20energ%C3%ADa,los%20combustibles%20f%C3%B3siles%20es%20f%C3%A1cil>. [Consulta: 25 de enero de 2022].

[3] de Aragón, E. (2018): “Principales problemas del uso de combustibles fósiles”, *Ambientum*, 7 de marzo. Disponible en: <https://www.ambientum.com/ambientum/energia/principales-problemas-del-uso-de-combustibles-fosiles.asp> [Consulta: 26 de enero de 2022].

[4] Primagas (2020): “Combustibles alternativos para el transporte”, *Primagas*, 28 de julio. Disponible en: <https://blog.primagas.es/combustibles-alternativos-para-el-transporte> [Consulta: 27 de enero de 2022].

[5] Murias, D. (2021): “Carburantes sintéticos: qué son y cuáles son los pros y contras de esta ‘gasolina verde’”. *Motorpasion*, 5 de diciembre. Disponible en: <https://www.motorpasion.com/industria/carburantes-sinteticos-que-cuales-pros-contras-esta-gasolina-verde> [Consulta 28 de enero de 2022].

[6] Niu, B., Jia, M., Chang, Y., Duan, H., Dong, X., Wang, P. (2021) “Construction of reduced oxidation mechanisms of polyoxymethylene dimethyl ethers (PODE 1–6) with consistent structure using decoupling methodology and reaction rate rule”. *Combustion and Flame*, 28 de mayo.

[7] Turns, S.R. (1996): *An Introduction to Combustion. Concepts and Applications*, 2ª edición. Mc Graw Hill.

[8] Areatecnología. “Motor de combustión partes”. *Areatecnología*. Disponible en: https://www.areatecnologia.com/tecnologia/motor-combustion.html#Partes_de_un_Motor_Diesel [Consulta: 2 de febrero de 2022].

[9] Zapata Pemberthy, L. D. (2010): *Caracterización de los procesos de inyección-combustión Diesel mediante visualización y procesamiento digital de imágenes*, tesis doctoral, Universitat Politècnica de València, Departamento de máquinas y motores térmicos. Disponible en: <https://riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/8192/tesisUPV3256.pdf?sequence=1&isAllowed=y> [Consulta 4 de febrero 2022].

[10] Pathak, A. (2021): “Los 10 mejores software de análisis de CFD para el desarrollo avanzado de productos”, *Geekflare*, 14 de septiembre. Disponible en: <https://geekflare.com/es/best-cfd-analysis-software/> [Consulta 8 de febrero 2022].

[11] Pachano Prieto, L. M. (2020): *CFD modeling of combustion and soot production in diesel sprays*, tesis doctoral, Universitat Politècnica de València, Departamento de máquinas y motores térmicos.

[12] Recubenis, A. (2021): *Análisis de la evolución de chorros de combustibles renovables en motores de encendido por compresión mediante la aplicación del modelado CFD*, trabajo final de master, Universitat Politècnica de València, Departamento de máquinas y motores térmicos [Consulta: 15 de febrero de 2022].

DOCUMENTO II. PRESUPUESTO.

1. INTRODUCCIÓN

En el presente apartado se va a realizar el presupuesto para el conjunto del trabajo final de máster realizado. Este presupuesto se ha dividido en tres principales partes, en la primera se van a definir los precios unitarios desglosados, a continuación, se mostrarán los precios descompuestos en función de unidades de obra definidas y, finalmente, se mostrarán las mediciones y el coste final del presupuesto realizado.

2. PRECIOS UNITARIOS

Tabla 4. Precios unitarios de la mano de obra.

MANO DE OBRA				
Código	Unidades	Descripción	Precio (€)	Coste unitario (€/h)
M.01	h	Servicio de ingeniería y tutoría realizados por los tutores del proyecto. Se obtienen de acuerdo con la categoría profesional 1 según el régimen general de la Seguridad Social.	4.139,4	25,8712
M.02	h	Servicios de ingeniería ofrecidos por el estudiante de máster. Se obtienen de acuerdo con la categoría profesional 1 según el régimen general de la Seguridad Social, aplicando la base mínima.	1.572,3	9,8269

Los precios anteriores se han seleccionado del Régimen General de la Seguridad Social en las Bases de Cotización para el grupo de cotización 1, donde se incluyen ingenieros y licenciados, para el caso de los tutores del trabajo se ha elegido el precio máximo debido a su experiencia como ingenieros, mientras que, para el estudiante, al no poseer experiencia se ha seleccionado el precio mínimo.

Tabla 5. Precios unitarios de materiales, equipos informáticos y licencias.

MATERIAL, EQUIPOS INFORMÁTICOS Y LICENCIAS					
Código	Unidades	Descripción	Amortización (años)	Precio (€)	Coste unitario (€/h)
MEL.01	h	Ordenador	5	10.000	0,2282
MEL.02	h	Estación de trabajo	5	60.000	1,3689
MEL.03	h	Licencia CONVERGE	1	60.000	6,8446
MEL.04	h	Licencia MATLAB	1	800	0,0913

Para los cálculos de los precios unitarios del consumo eléctrico se va a coger el precio de la electricidad para el mes de diciembre, que es de 239,17€/MWh.

Tabla 6. Precios unitarios del consumo de electricidad.

CONSUMO DE ELECTRICIDAD				
Código	Unidades	Descripción	Potencia (W)	Coste unitario (€/h)
E.01	h	Potencia consumida por el ordenador del CMT	400	0,0957
E.02	h	Potencia consumida por la estación de trabajo asumiendo 130 procesadores a 60W	7.800	1,8655

3. PRECIOS DESCOMPUESTOS

Tabla 7. Precios descompuestos para la búsqueda de información inicial.

Búsqueda de información inicial					
Código	Unidades	Descripción	Cantidad	Coste unitario (€/h)	Importe (€)
1.01	Ud	Búsqueda inicial de la información y enfoque del trabajo a realizar			
M.01	h	Ingeniero avanzado	15	25,8712	388,07
M.02	h	Ingeniero junior	100	9,8269	1.965,38
MEL.01	h	Ordenador	100	0,2282	982,69
E.01	h	Potencia consumida por el ordenador	100	0,0957	9,57
TOTAL					1403,15

Tabla 8. Precios descompuestos para la preparación y lanzamiento de casos.

Preparación y lanzamiento de casos					
Código	Unidades	Descripción	Cantidad	Coste unitario (€/h)	Importe (€)
2.01	Ud	Preparación de los casos que se van a lanzar, con todos los ficheros necesarios, más el lanzamiento de estos y el tiempo consumido por los cálculos			
M.01	h	Ingeniero avanzado	50	25,8712	1.293,56
M.02	h	Ingeniero junior	240	9,8269	2.358,46
MEL.01	h	Ordenador	240	0,2282	54,77
MEL.02	h	Estación de trabajo	96	1,3689	131,41
MEL.03	h	Licencia CONVERGE	96	6,8446	657,08
E.01	h	Potencia consumida por el ordenador	240	0,0957	22,97
E.02	h	Potencia consumida por la estación de trabajo	96	1,8655	179,09
TOTAL					4.697,34

Tabla 9. Precios descompuestos para el postprocesado de los casos.

Postprocesado de los casos					
Código	Unidades	Descripción	Cantidad	Coste unitario (€/h)	Importe (€)
3.01	Ud	Postprocesado de los casos para poder analizar los resultados obtenidos y sacar las gráficas pertinentes para poder compararlos			
M.01	h	Ingeniero avanzado	20	25,8712	517,42
M.02	h	Ingeniero junior	150	9,8269	1.474,04
MEL.01	h	Ordenador CMT	150	0,2282	34,23
MEL.03	h	Licencia MATLAB	150	0,0913	13,70
E.01	h	Potencia consumida por el ordenador CMT	150	0,0957	14,36
TOTAL					2.053,75

Tabla 10. Precios descompuestos para la redacción de la memoria.

Redacción de la memoria					
Código	Unidades	Descripción	Cantidad	Coste unitario (€/h)	Importe (€)
4.01	Ud	Redacción de la presente memoria del trabajo realizado			
M.01	h	Ingeniero avanzado	15	25,8712	388,07
M.02	h	Ingeniero junior	150	9,8269	1.474,04
MEL.01	h	Ordenador	150	0,2282	34,23
E.01	h	Potencia consumida por el ordenador	150	0,0957	14,36
TOTAL					1.910,70

4. PRESUPUESTO

Tabla 11. Presupuesto de la realización de la memoria.

Código	Concepto	Importe
1.01	Búsqueda de información inicial	1.403,15
2.01	Preparación y lanzamiento de casos	4.697,34
3.01	Postprocesado de los casos	2.053,75
4.01	Redacción de la memoria	1.910,70
PEM	Presupuesto de ejecución material	10.064,94
Gastos generales	13% del PEM	1.308,44
PEC	Presupuesto de ejecución por contrata	11.372,32
IVA	21% del PEC	2.388,19
	Presupuesto de inversión	13.760,51

El presupuesto de realización del trabajo final de máster asciende a la cantidad de TRECE MIL SETECIENTOS SESEINTA EUROS CON CINCUENTA Y UN CÉNTIMOS DE EURO.

ANEXO A. CÁLCULO DE LA ZST Y FST PARA AMBOS COMBUSTIBLES.

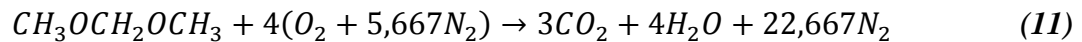
Para los casos estudiados la fracción molar de oxígeno es del 15%, que se tiene que transformar a fracción másica a partir de la ecuación (3). Luego se tiene que calcular la Zst y Fst.

$$\begin{aligned} \%m_{O_2} &= \frac{m_{O_2}}{m_{aire}} = \frac{m_{O_2}}{m_{N_2} + m_{O_2}} = \frac{n_{O_2} * 2M_O}{m_{N_2} * 2M_N + m_{O_2} * 2M_O} = \\ &= \frac{15\% * 16 * 2}{85\% * 2 * 14 + 15\% * 2 * 16} = 16,78\% O_2 \end{aligned} \quad (8)$$

$$Z_{st} = \frac{m_{combustible}}{m_{total}} = \frac{m_{combustible}}{m_{combustible} + m_{aire}} \quad (9)$$

$$F_{st} = \frac{m_{combustible}}{m_{aire}} \quad (10)$$

Para el caso del OME₁ se parte de la reacción de combustión del combustible, para el cálculo de la Zst.



Ahora se necesitan las masas tanto de combustible como de aire, que se calculan a partir de los coeficientes estequiométricos y la ecuación de la reacción (11).

$$m_{combustible} = n_{combustible} * M_{combustible} = 1 * (3 * 12 + 8 * 1 + 2 * 16) = 76kg \quad (12)$$

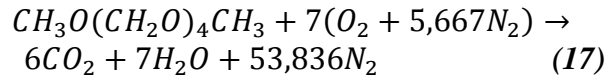
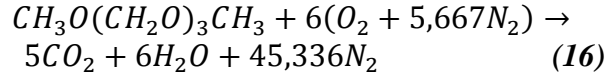
$$m_{aire} = n_{aire} * M_{aire} = 4 * (1 * 16 * 2 + 5,667 * 14 * 2) = 762,70 kg \quad (13)$$

Y sustituyendo en las ecuaciones (9) y (10):

$$Z_{st} = \frac{m_{combustible}}{m_{total}} = \frac{m_{combustible}}{m_{combustible} + m_{aire}} = \frac{76}{76 + 762,70} = 0,0906 \quad (14)$$

$$F_{st} = \frac{m_{combustible}}{m_{aire}} = \frac{76}{762,70} = 0,0996 \quad (15)$$

Para el caso del OME_x se parte de las ecuaciones de la reacción de combustión del OME₃ y del OME₄, ya que este es una mezcla de ambos:



Ahora se van a calcular las masas de ambos combustibles y la cantidad de aire para cada uno de ellos.

$$m_{OME3} = n_{OME3} * M_{OME3} = 1 * (5 * 12 + 12 * 1 + 4 * 16) = 136 \text{ kg} \quad (18)$$

$$m_{aire_OME3} = n_{aire} * M_{aire} = 6 * (1 * 16 * 2 + 5,667 * 14 * 2) = 1144,1 \text{ kg} \quad (19)$$

$$m_{OME4} = n_{OME4} * M_{OME4} = 1 * (6 * 12 + 14 * 1 + 5 * 16) = 166 \text{ kg} \quad (20)$$

$$m_{aire_OME4} = n_{aire} * M_{aire} = 7 * (1 * 16 * 2 + 5,667 * 14 * 2) = 1334,7 \text{ kg} \quad (21)$$

$$Z_{st_OME3} = \frac{m_{combustible}}{m_{total}} = \frac{m_{combustible}}{m_{combustible} + m_{aire}} = \frac{136}{136 + 1144,1} = 0,1062 \quad (22)$$

$$F_{st_OME3} = \frac{m_{combustible}}{m_{aire}} = \frac{136}{1144,1} = 0,1189 \quad (23)$$

$$Z_{st_OME4} = \frac{m_{combustible}}{m_{total}} = \frac{m_{combustible}}{m_{combustible} + m_{aire}} = \frac{166}{166 + 1334,7} = 0,1106 \quad (24)$$

$$F_{st_OME4} = \frac{m_{combustible}}{m_{aire}} = \frac{166}{1334,7} = 0,1244 \quad (25)$$

$$\frac{1}{F_{st_OMEx}} = \frac{x_{OME3}}{F_{st_OME3}} + \frac{x_{OME4}}{F_{st_OME4}} \quad (26)$$

$$F_{st_{OME_x}} = \frac{1}{\frac{x_{OME3}}{F_{st_{OME3}}} + \frac{x_{OME4}}{F_{st_{OME4}}}} = \frac{1}{\frac{0,591}{0,1189} + \frac{0,4086}{0,1244}} = 0,1211 \quad (27)$$

$$Z_{st_{OME_x}} = \frac{F_{st_{OME_x}}}{1 - F_{st_{OME_x}}} = \frac{0,1211}{1 - 0,1211} = 0,1378 \quad (28)$$