



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



MODELADO 1D DE CHORROS CON DIFERENTES COMBUSTIBLES EN CONDICIONES DE MOTOR DIESEL

Autor

Rafael Colomina Salazar

Tutor

Dr. D. José María García Oliver

**Grado en Ingeniería Aeroespacial
Universitat Politècnica de València
Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño**

Curso 2017-18
Valencia - Junio de 2018

**MODELADO 1D DE CHORROS
CON DIFERENTES COMBUSTIBLES
EN CONDICIONES DE MOTOR DIESEL**

Rafael Colomina Salazar

Grado en Ingeniería Aeroespacial
Universitat Politècnica de València
Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Curso 2017-18
Valencia - Junio de 2018

Resumen

El objetivo global de este Trabajo Fin de Grado es calcular un modelo reactivo de un chorro de combustible Diesel que permita obtener la penetración y la distancia entre el orificio de inyección y la base de la llama dónde se sitúa el frente de reacción premezclado, el *Lift-off length*. El trabajo parte del estudio de la influencia de las características del flujo interno de la tobera sobre el desarrollo del spray evaporativo para dos geometrías de tobera y tres combustibles diferentes.

La primera parte del trabajo pretende comparar el comportamiento del chorro cuando se modifica el tipo de combustible de manera inerte. Los combustibles utilizados son, por un lado, un combustible de sustitución para representar mejor las propiedades físicas y químicas del combustible Diesel, el *surrogate*, formado por n-Tetradecano, n-Decano y α -Methylnaphthalene y por otro lado, dos mono-componentes como son el n-Heptano y el n-Dodecano. Para poder realizar la comparación, se han calculado parámetros globales de la combustión en chorros tales como la penetración y liberación de calor. El combustible n-Heptano muestra las longitudes de líquido más cortas, seguidas por el n-Dodecano y finalmente el combustible de sustitución.

A continuación, una vez obtenida la información detallada de la evolución de los chorros de combustible Diesel, se desarrolla un profundo estudio del chorro basado en simulaciones numéricas y en razonamientos teóricos que permitirá predecir el modelo efectivamente. Mediante herramientas matemáticas se procede a calcular el modelo inerte de manera estacionaria y transitoria utilizando dos métodos: el método implícito y el método explícito. A partir de una rigurosa calibración, se encuentra que el modelo explícito necesita un paso temporal menor que el implícito. Por tiempo de cálculo, ya que los resultados son iguales, el método utilizado será el implícito. Se observa que el modelo es capaz de predecir de manera razonable el tiempo de retraso y el *Lift-off length*.

Finalmente, se introducen los datos obtenidos por el modelo DICOM inerte en el código desarrollado para el modelo transitorio y se calibra a partir de los valores de cada caso. Una vez calibrado se calculan el tiempo de retraso, la longitud de *Lift-off* y la fracción de mezcla para cada uno de los casos. Se valida el modelo cuando se comparan los resultados del éste con los experimentales ya que los modelados arrojan resultados razonablemente buenos a pesar de las simplificaciones que tiene el modelo.

Resum

L'objectiu global d'aquest Treball Fi de Grau és calcular un model reactiu d'un doll de combustible Dièsel que permeta obtenir la penetració i la distància entre l'orifici d'injecció i la base de la flama on se situa el front de reacció premesclat, el *Lift-off length*. El treball part de l'estudi de la influència de les característiques del flux intern de la tovera sobre el desenvolupament de l'esprai evaporatiu per a dos geometries de tovera i tres combustibles diferents.

La primera part del treball pretén comparar el comportament del doll quan es modifica el tipus de combustible de manera inerta. Els combustibles utilitzats són, d'una banda, un combustible de substitució per a representar millor les propietats físiques i químiques del combustible Dièsel, el *surrogate*, format per n-Tetradecan, n-Decan i α -Methylnaphthalen i d'altra banda, dos mona-components com són el n-Heptan i el n-Dodecan. Per a poder realitzar la comparació, s'han calculat paràmetres globals de la combustió en dolls com són la penetració i l'alliberament de calor. El combustible n-Heptan mostra les longituds de líquid més curtes, seguides pel n-Dodecano i finalment el substitut.

A continuació, una vegada obtinguda la informació detallada de l'evolució dels dolls de combustible Dièsel, es realitza un profund estudi del doll basat en simulacions numèriques i en raonaments teòrics que permetrà predir el model efectivament. Per mitjà de ferramentes matemàtiques es procedix a calcular el model inert de manera estacionària i transitòria utilitzant dos mètodes: el mètode implícit i el mètode explícit. A partir d'un rigorós calibratge, es troba que el model explícit necessita un pas temporal menor que l'implícit. Per temps de càlcul, ja que els resultats són iguals, el mètode utilitzat serà l'implícit. S'observa que el model és capaç de predir de manera raonable el temps de retard i el *Lift-off length*.

Finalment, s'introdueixen les dades obtinguts pel model DICOM inert en el codi creat per al model transitori i es calibra a partir dels valors de cada cas. Una vegada calibrat es calculen el temps de retard, la longitud de *Lift-off* i la fracció de mescla per a cada un dels casos. Es valida el model quan es comparen els resultats d'aquest amb els experimentals ja que els modelats presenten resultats raonablement bons a pesar de les simplificacions que té el model.

Abstract

The overall objective of this Final Degree Project is to calculate a reactive model of a Diesel fuel jet that allows calculating the penetration and the distance between the injection hole and the base of the flame where the premixed reaction front is located, the Lift-off length. This work is based on the study of the influence of the characteristics of the nozzle internal flow for two geometries of nozzle and three different fuels.

The first part of the work aims to compare the behavior of the jet when the type of fuel is modified in an inert way. The fuels used are, on the one hand, a substitute fuel that better represents the physical and chemical properties of Diesel fuel, the surrogate, formed by n-Tetradecane, n-Decano and α -Methylnaphthalene and on the other hand, two mono-components such as n-Heptane and n-Dodecane. In order to make the comparison, global parameters of jet combustion such as penetration and release of heat have been calculated. The n-Heptane fuel shows the shortest liquid lengths, followed by the n-Dodecane and finally the substitute.

Then, after obtaining the detailed information on the evolution of the Diesel fuel jets, a deep study of the jet is developed based on numerical simulations and theoretical reasoning that will allow to predict the model effectively. Using mathematical tools, the inert model is calculated in a stationary and transitory way using two methods: the implicit method and the explicit method. From a rigorous calibration, it is found that the explicit model needs a temporary step smaller than the implicit one. Since the implicit method is faster and the results obtained are the same, the implicit method will be used. It is observed that the model is able to reasonably predict the delay time and the Lift-off length.

Finally, the data obtained from the inert DICOM model are introduced in the code developed for the transient model and calibrated based on the values of each case. Once calibrated, the delay time, Lift-off length and dosing for each one of the cases are calculated. The model is validated when comparing the results with the experimental ones good results are obtained despite of the simplifications done.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecer a José María, mi tutor del Trabajo Fin de Grado, por darme la primera y más útil oportunidad de desarrollar un proyecto, por estar disponible en cualquier momento para responder a mis preguntas, por haberme ayudado a ampliar mi conocimiento en el ámbito de la combustión y por hacerme sacar lo mejor de mí para poder rendir al máximo todos y cada uno de los días que hemos dedicado al proyecto.

Quiero dar las gracias a los doctorandos Andrés Morales, Alba García, Felipe Lewiski y Leonardo Pachano con los que compartí despacho por su hospitalidad, su amabilidad y la ayuda que me han dado durante todo el tiempo que estuve en el CMT.

Me gustaría agradecer tanto a la Universidad Politécnica de Valencia como a la Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño por haberme dado la oportunidad de cursar el Grado de Ingeniería Aeroespacial.

Por último, quiero dar las gracias a mi familia por el apoyo recibido durante todos estos años y en especial a mis padres, ya que gracias a ellos me he convertido en la persona que soy hoy.

Índice General

DOCUMENTO I: MEMORIA

Índice de Figuras	11
Índice de Tablas	14
Tabla de Símbolos	15
1. Introducción y objetivos	19
1.1. Contexto del trabajo	19
1.2. Objetivos y metodología	22
1.3. Estructura del documento	22
Bibliografía	23
2. Conceptos previos: proceso de combustión en un motor Diesel	25
2.1. Introducción	25
2.2. Conceptos básicos	26
2.3. Fases del proceso de combustión de un motor Diesel de combustión directa	27
2.4. Atomización	29
2.5. Evaporación	30
2.6. Mezcla aire-combustible	31
2.6.1. Parámetros macroscópicos del chorro Diesel	32
2.6.1.1. Penetración del spray	32
2.6.1.2. Ángulo del chorro	33
2.6.2. Parámetros microscópicos del chorro Diesel	33
2.6.2.1. Distribución del tamaño y velocidad de la gota	33
2.6.3. Longitudes características de mezcla y evaporación	34
2.6.4. Tiempos característicos de mezcla y evaporación	35
2.7. Retraso del encendido	35
2.8. Fase de combustión premezclada	36
2.9. Fase de combustión por difusión	36
2.9.1. <i>Lift-off</i>	38
2.10. Conclusiones	39
Bibliografía	40

3. Modelo DICOM: herramientas de análisis	41
3.1. Introducción	41
3.2. Descripción matemática del modelo 1-D	42
3.2.1. Datos de entrada y salida. Caso inerte	45
3.2.2. Datos de entrada. Caso reactivo	47
3.3. Resolución de una ecuación para la variable de progreso	47
3.3.1. Modelo transitorio	49
3.3.2. Modelo estacionario	56
3.4. Planteamiento de un caso reactivo con la metodología propuesta	57
3.5. Conclusiones	59
Bibliografía	60
4. Resultados y validación del modelo	61
4.1. Introducción	61
4.2. Configuración experimental	62
4.3. Resultados del modelo inerte	63
4.4. Puesta a punto del script para la resolución de la variable de progreso	75
4.4.1. Cálculos del tiempo de retraso y $xLOL$ a partir de la ecuación de transporte de la variable de progreso	83
4.4.2. Cálculo del modelo completo reactivo	86
4.4. Conclusiones	90
Bibliografía	91
5. Conclusiones finales y futuros trabajos	93
5.1. Conclusiones	93
5.2. Trabajos futuros	95
ANEXO I: Script de Matlab	97
1. Introducción	97
2. <i>Script</i> de Matlab	97
 DOCUMENTO II: PRESUPUESTO	
 Presupuesto total del trabajo	109

Índice de Figuras

Figura 2.1:	Fases de la combustión. Comparación entre la tasa de inyección (curva superior) y la energía liberada (curva inferior)[14]	30
Figura 2.2:	Variación esquemática de la variación de masa, diámetro, temperatura, tasa de evaporación, tasa de transferencia de calor del aire y tasa de transferencia de calor al núcleo de la gota líquida en función del tiempo durante el proceso de evaporación en el entorno diesel en el momento de inyección [1]	33
Figura 2.3:	Estructura de la llama Diesel durante la parte cuasi-estacionaria de la fase de combustión por difusión [12]	39
Figura 3.1:	Flujo general de información en DICOM	45
Figura 3.2 :	Esquema general del modelo 1-D [10]	47
Figura 3.3:	Esquema del modelo [4]	48
Figura 3.4:	Discretización celda a celda del chorro de combustible Diesel	51
Figura 3.5:	Soluciones dentro de los límites	56
Figura 3.6:	Zoom sobre el punto de corte en el eje C	56
Figura 3.7:	Soluciones fuera de los límites	57
Figura 3.8:	Zoom sobre la solución fuera del límite por la derecha	58
Figura 3.9:	Zoom sobre la solución fuera del límite por la izquierda	58
Figura 3.10:	Valor estable del x_{LOL}	61
Figura 3.11:	Datos de entrada del Caso Reactivo	61
Figura 4.1:	Diseño experimental para mediciones de referencia [9]	67
Figura 4.2:	Calibración del modelo DICOM	70
Figura 4.3:	Efecto de la temperatura ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es $k0$, el combustible presentado es n-Dodecano, la densidad ambiente es $22.8kg/m^3$ y la presión de rail es $150Mpa$	71
Figura 4.4:	Efecto de la temperatura ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es $k0$, se representan los tres combustibles estudiados, la densidad ambiente es $22.8kg/m^3$, la presión de rail es $150Mpa$ y la temperatura ambiente es $900k$	71
Figura 4.5:	Efecto de la densidad ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es $k0$, el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es $900k$, la presión de rail es $150Mpa$	73

Figura 4.6:	Efecto de la densidad ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es $k0$, se representan los tres combustibles estudiados, la presión de rail es $150Mpa$, la temperatura ambiente es $900k$ y la densidad $30.4kg/m^3$	73
Figura 4.7:	Efecto de la tobera en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es $22.8kg/m^3$, el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es $900k$, la presión de rail es $150Mpa$	74
Figura 4.8:	Efecto de la tobera en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es $22.8kg/m^3$, la temperatura ambiente es $900k$, la presión de rail es $150Mpa$ y la tobera es $k15$	75
Figura 4.9:	Efecto de la presión en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es $22.8kg/m^3$, el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es $900k$, la tobera es $k0$	76
Figura 4.10:	Efecto de la presión en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es $22.8kg/m^3$, el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es $900k$, la tobera es $k0$ y la presión de rail es $150Mpa$	76
Figura 4.11:	Penetración líquida: regresión no-lineal	78
Figura 4.12:	Error de medida experimental para los tres combustibles y con la tobera $k0$...	78
Figura 4.13:	Error de medida experimental para los tres combustibles y con la tobera $k15$..	79
Figura 4.14:	Calibración del paso temporal	81
Figura 4.15:	Calibración del strain rate	81
Figura 4.16:	Inicio de la inyección, $t = 10e - 06s$	82
Figura 4.17:	Instante previo al encendido $t = 475e - 06s$	83
Figura 4.18:	Instante posterior al encendido $t = 500e - 06s$	83
Figura 4.19:	Avance temporal del chorro, $t = 1500e - 06s$	84
Figura 4.20:	Avance temporal del chorro, $t = 3000e - 06s$	84
Figura 4.21:	Chorro completamente quemado, $t = 4800e - 06s$	85
Figura 4.22:	Chorro estacionario completamente quemado	85
Figura 4.23:	Situación del tiempo de retraso	86
Figura 4.24:	Caso 2 para diferentes <i>strain rates</i>	88
Figura 4.25:	Caso 4 para diferentes <i>strain rates</i>	88
Figura 4.26:	Caso 6 para diferentes <i>strain rates</i>	89
Figura 4.27:	Caso 8 para diferentes <i>strain rates</i>	89

Figura 4.28: Longitud de <i>Lift-off</i> de los Casos 2 y 6 con <i>strain rate</i> 100 y de los Caso 4 y 8 con <i>strain rate</i> 50, penetración experimental	90
Figura 4.29: Caso 2: comparativa resultados experimentales y modelados	91
Figura 4.30: Caso 4: comparativa resultados experimentales y modelados	92
Figura 4.31: Caso 6: comparativa resultados experimentales y modelados	92
Figura 4.32: Caso 8: comparativa resultados experimentales y modelados	93

Índice de Tablas

DOCUMENTO I: MEMORIA

Tabla 4.1:	Combustibles utilizados y sus propiedades a $298k$ y $101kPa$. Excepto por el combustible sustituto, todas las propiedades fueron extraídas del NIST Chemistry WebBook [2], para el combustible sustituto, la densidad, la viscosidad y la tensión superficial se midieron según ASTM D1298, ASTM D445 y UNE EN 14370, respectivamente	68
Tabla 4.2:	Componentes del combustible sustitutivo y sus propiedades a $298k$ y $101kPa$. Todas las propiedades fueron extraídas del NIST Chemistry WebBook	68
Tabla 4.3:	Hardware del inyector utilizado y geometrías nominales de las toberas	69
Tabla 4.4:	Plan de prueba	69
Tabla 4.5:	Resultados	69
Tabla 4.6:	Casos para la calibración	70
Tabla 4.7:	Calibración de los parámetros numéricos	80
Tabla 4.8:	Calibración de los parámetros físicos	80
Tabla 4.9:	Resumen de resultados	86
Tabla 4.10:	Casos calculados	87
Tabla 4.11:	Resultado definitivo del $xLOL$, t_{soc} y $f_{cl}LOL$	90
Tabla 4.12:	Resultados experimentales del $xLOL$ y t_{soc}	91

DOCUMENTO II: PRESUPUESTO

Tabla 1.1:	Salario bruto mensual de un ingeniero aeronáutico titulado	113
Tabla 1.2:	Coste diario de un ingeniero aeronáutico	114
Tabla 1.3:	Salario alumno desarrollador	114
Tabla 1.4:	Coste diario por trabajador	114
Tabla 1.5:	Coste unitario de ordenadores	114
Tabla 1.6:	Coste consumo de electricidad	115
Tabla 1.7:	Coste de licencias de software	115
Tabla 1.8:	Total presupuestado	115

Tabla de Símbolos

Latinos

A_c, B_c, C_c	Constantes de ajuste experimental
A_n	Área mínima de la tobera
C	Variable de progreso normalizada
C_D	Coefficiente de descarga
$C_{p,liq}$	Capacidad calorífica específica de la presión constante de la fase líquida
d_0	Diámetro de tobera
f	Fracción de mezcla
f_{cl}	Fracción de masa del combustible
$f_{cl}LOL$	Fracción de masa del combustible en el eje
fY_c	Residuo de la ecuación
h	Medio ángulo del cono de pulverización
h_{cl}	Diferencia de entalpía en el eje de pulverización
H_0	Entalpía
h_{vap}	Entalpía específica de vaporización
$\int Y_c$	Integral al volumen en el instante anterior
I_0	Momento
k_0	Tobera cilíndrica
k_{15}	Tobera cónica
LL_{exp}	Longitud líquida experimental
L_{mix}	Longitud característica de la mezcla
LL_{mod}	Longitud líquida del modelo
M_0	Masa de combustible
\dot{m}_f	Flujo de fuel
\dot{M}_f	Flujo de cantidad de movimiento del fuel
mY_c	Integral radial a Y_c
P_r	Número de Prandtl
p_r	Presión de rail
r	Constante universal de los gases

r_k	Radio del chorro
S	Penetración
S_c	Número de Schmidt
SR	<i>Strain rate</i>
t	Tiempo
T_a	Temperatura ambiente
t_{SOI}	Instante de inicio de inyección
u	Velocidad de salida de la tobera
u_{cl}	Componente axial del vector velocidad
u_{ef}	Velocidad de inyección efectiva
\dot{w}_c	Término fuente
Y_c	Variable de progreso
$Y_{f,eje}$	Fracción másica en el eje
$Y_{f,est}$	Fracción másica estequiométrica

Griegos

α	Coefficiente de campana de la distribución gaussiana
θ	Ángulo del chorro
$\theta/2$	Ángulo del cono de pulverización
$\phi_{eq_{ef}}$	Diámetro equivalente efectivo
ϕ_{ef}	Diámetro efectivo
ρ_a	Densidad gas ambiente
ρ_f	Densidad del fuel
Δ_p	Cada de presión en la tobera
Δ_r	Incremento de radio
Δ_x	Incremento de longitud
τ_{soc}	Tiempo de retraso

Subíndices y superíndices

<i>0,1</i>	Extremos del eje <i>x</i>
<i>a</i>	Gas ambiente
<i>eq</i>	Equivalente
<i>est</i>	Estequiométrico
<i>exp</i>	Experimental
<i>D</i>	Descarga
<i>f</i>	Fuel
<i>liq</i>	Líquido
<i>mix</i>	Mezcla
<i>mod</i>	Modelo
<i>n</i>	Tobera
<i>O₂</i>	Referido a la especie oxígeno
<i>soc</i>	Comienzo de combustión (start of combustion)
<i>SOI</i>	Comienzo de inyección (start of injection)
<i>steady</i>	Estacionario

Acrónimos

CFD	Computational fluid dynamics
DI	Inyección directa (Direct Injection)
IDI	Inyección indirecta (Indirect Injection)
LOL	Lift-off length
MCIA	Motor de combustión interna alternativo

Combustibles

n-C ₁₂ H ₂₆	n-Dodecano
N-C ₇ H ₁₆	n-Heptano
<i>Surrogate</i>	Combustible de sustitución

DOCUMENTO I: MEMORIA

Capítulo 1

Introducción y objetivos

Contenido

1.1. Contexto del trabajo	19
1.2. Objetivos y metodología	22
1.3. Estructura del documento	22
Bibliografía	24

1.1. Contexto del trabajo

Los últimos años se han caracterizado por un desarrollo importantísimo en el sector de la automoción, centrandose sus principales avances en el motor de combustión interna alternativo (MCIA). La realidad es que hoy en día, la utilización de estos motores nos permite obtener energía mecánica a partir de la combustión de un combustible fósil, el petróleo, de manera eficiente.

Hasta no hace muchos años, los motores Diesel de inyección directa se centraban en el transporte pesado, el transporte marítimo o la producción de energía eléctrica, eran motores de gran cilindrada. Sin embargo, los turismos actuales de motor Diesel requieren cilindradas pequeñas con regímenes de giro muy elevados. Estas características repercuten en todo el proceso de la combustión: inyección, atomización, evaporación...

Podemos situar la eficiencia del motor Diesel como el resultado de las mejoras sufridas a lo largo de los años, la estricta normativa actual que obliga a los fabricantes a construir y diseñar motores con menores consumos específicos, mayor eficiencia, un mayor control de las emisiones contaminantes y en definitiva, una mayor fiabilidad y mejores prestaciones.

La suma de estos parámetros ha centrado el desarrollo de los nuevos motores en la mejora del rendimiento y el control de las emisiones. Sin embargo, todavía hay interés en un mayor desarrollo que justifique una evaluación crítica y detallada del proceso de combustión.

Para poder hacer frente a esta normativa, innumerables avances tecnológicos se han ido desarrollando a lo largo de los años. Uno de ellos es la tecnología y la capacidad del sistema de inyección de combustible los cuales desempeñan un papel clave en los procesos de formación de la mezcla de aire y combustible.

El resultado del desarrollo tecnológico ha sido obtener unos motores con unas menores emisiones contaminantes, con una mayor eficiencia térmica y un menor consumo comparados con MCIA de los años 1980-90.

Para poder ir más lejos en el desarrollo de estos motores y poder profundizar en este tema, se han desarrollado varias técnicas clave:

- Los modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD). Estos modelos ofrecen ventajas inigualables sobre los enfoques experimentales debido a la gran cantidad de información temporal y espacial que son capaces de proporcionar. La capacidad predictiva de los modelos de CFD validados puede reducir drásticamente los costos del producto final. Sin embargo, los actuales modelos de vanguardia no son completamente predictivos y, por lo tanto, aún se necesitan datos experimentales de alta fidelidad para validar estos modelos y proporcionar condiciones iniciales y de frontera precisas para las simulaciones.
- El desarrollo de las técnicas ópticas aplicadas en éste ámbito [1]. Técnicas como Raman, Rayleigh [2]. El desarrollo de la metodología experimental [3] que permite comparar los resultados teóricos con los experimentales, permite obtener relaciones causa-efecto para abrir nuevas vías de estudio.
- Herramientas de cálculo matemático como Matlab que permiten hacer modelados teóricos con las mismas características que el modelo experimental.

Aunque las técnicas desarrolladas previamente permiten que comprendamos mejor la combustión dentro de un motor Diesel, aun se necesitan mejores modelos numéricos y teóricos que nos permitan reproducir y entender fielmente que es lo que ocurre dentro de la cámara de combustión.

Este Trabajo Fin de Grado se centra por una parte en *la validación de modelos 1D en condiciones de motor Diesel*. Todos los cálculos se realizaron para dos geometrías de tobera diferentes y tres combustibles. Se va a comparar con la parte experimental obtenida por Payri et al. [4]. Ésta consistente en la medida de las tasa de inyección y el flujo de cantidad de movimiento en la tobera.

Con estos resultados y posterior comparación con la parte experimental, se persiguen los primeros dos objetivos principales:

1. Evaluar la influencia de los diferentes parámetros sobre las características del diámetro de la tobera
2. Crear un gran base de datos útil para validaciones de modelos con diferentes combustibles

Para poder comprender mejor como varían estos parámetros se debe recurrir a una revisión bibliográfica. La mayoría de los modelos de pulverización actuales emplean condiciones iniciales y de contorno en la salida de la tobera como un acoplamiento indirecto al flujo dentro de la tobera [5]. Dichos métodos a menudo amortiguan o conducen a la pérdida de características de flujo de la tobera a menor escala. Por lo tanto, el desarrollo computarizado de pulverización que usa el acoplamiento indirecto está dictado principalmente por el momento, la aerodinámica y la mezcla.

En apoyo de tales métodos, Badock et al. [6] y más tarde Ganippa et al. [7] presentaron resultados que afirman que las características del flujo de la tobera tienen una influencia insignificante sobre la formación de la atomización y que el impulso es la única variable de control para la mezcla.

Contrastando estos estudios, varios autores muestran que el flujo dentro de la tobera influye en la región de tobera cercana de la pulverización en términos de ruptura de fase líquida, longitud del líquido y ángulo de pulverización [8]. Muchos otros estudios también evidencian los efectos de las características del flujo de la tobera sobre el aerosol macroscópico [9]. Este contraste, junto con la incertidumbre restante sobre el efecto de la geometría de la tobera sobre el arrastre, la combustión y la formación de contaminantes, deja espacio para preguntas fundamentales sobre el tema.

Durante algunos años, el combustible de sustitución de elección para el combustible Diesel ha sido una especie de componente único n-heptano. Se han realizado más de un centenar de estudios sobre la combustión de Diesel que han utilizado el n-heptano como un combustible de sustitución conveniente. Ha habido dos razones importantes para esta elección. Primero, el n-heptano tiene un índice de Cetano de 56 que es razonablemente cercano al número de Cetano del combustible Diesel común, por lo que su ignición es similar a la del combustible Diesel que es conveniente para estudios de ignición o liberación de calor [10]. Además, un mecanismo detallado de reacción cinética para n-heptano fue publicado por Curran et al. [11] en 1998 con todos los detalles requeridos para llevar a cabo estudios exhaustivos de combustión.

Recientemente, se ha hecho evidente que el n-heptano no es suficiente como un combustible de sustitución del Diesel, por ejemplo, Idicheria y Pickett [12] demostraron que la llama de n-heptano produce considerablemente menos hollín que una llama de Diesel en condiciones similares, y la distribución del hollín dentro de la llama también fue bastante diferente.

Por lo tanto, los combustible de sustitución más ricos que contienen aromáticos y otras especies que son componentes importantes en los combustibles Diesel también deben estar representados en el combustible de sustitución seleccionado para este estudio. Aunque el rendimiento de la combustión está fuera del alcance de este trabajo, los diferentes combustibles presentarán comportamientos diferentes con respecto a las características del flujo de la tobera.

1.2. Objetivos y metodología

Una vez se ha descrito el entorno en el cual se ha desarrollado el presente Trabajo Fin de Grado, se procede a enunciar los objetivos que se buscan con este proyecto. Con este proyecto se pretende desarrollar y mejorar un modelo 1D de chorros para predecir el comportamiento del chorro en condiciones de motor Diesel. A partir de este objetivo general han sido definidos tres objetivos parciales:

- Realizar un análisis del comportamiento del chorro Diesel en condiciones de mezcla inerte. Este análisis debe permitir obtener información sobre la evolución del chorro de combustible y debe servir de referente para el estudio del proceso de combustión. Con los resultados se pretende sentar las bases del comportamiento del mismo en condiciones reactivas.
- Calibrar un modelo *script* matemático inerte que permita resolver las ecuaciones de conservación de nuestro chorro de combustible en función de la longitud y el radio de penetración y que avance según un paso temporal hasta un instante final.
- Calcular los valores de la longitud de *Lift-off*, el tiempo de retraso y la fracción de mezcla en el eje para una temperatura, una presión y un tamaño de tobera dados. Calibrar un modelo reactivo que tome los valores obtenidos previamente de la parte inerte y que genere los resultados de la penetración y de la longitud de *Lift-off* del modelo reactivo.

El método establecido ha sido marcado por los objetivos. Estos se verán desarrollados gracias a cálculos tétricos y experimentales. En cuanto a los experimentales, se tomarán los datos obtenidos por Payri et al [4]. Además, se incluirán cálculos matemáticos de Matlab, de análisis como Excel y del programa DICOM para comprobar y predecir que los resultados son coherentes.

El fenómeno físico que se estudiará vendrá desarrollado de manera teórica, y así servirá para completar el objetivo general de este trabajo. Las relaciones teóricas que se establecerán darán una visión bastante completa del fenómeno de la combustión.

1.3. Estructura del documento

La memoria se estructura en cinco capítulos y estos, a su vez en secciones y subsecciones con el fin de detallar claramente el justificar el trabajo que aquí se expone.

El desarrollo del trabajo empieza con el Capítulo 2 en el cual se hace una breve introducción de los términos que se deben saber a priori para entender la exposición del mismo. Se definen conceptos y se establece la nomenclatura que se seguirá durante todo el desarrollo. Se hará una descripción de los fenómenos importantes que imperan en el proceso de combustión y que más nos interesan para este trabajo.

En el Capítulo 3, se explica detalladamente el modelo DICOM. Este capítulo presenta las herramientas de análisis que van a ser empleadas en el trabajo para complementar y validar los desarrollos teóricos. Se trata de cálculos numéricos para el estudio del modelo inerte para la obtención de información de chorros Diesel.

Se profundiza sobre el modelo inerte ya que gran parte del análisis previamente presentado explica el comportamiento del chorro Diesel. Se parte de un caso sencillo hasta que se llega a establecer una base de datos que permita extraer conclusiones sobre como evolucionan los chorros inertes cuando se varían los parámetros de los que dependen. Por otra parte, se utilizará herramientas de cálculo matemático para poder obtener la información suficiente que permita validar el desarrollo teórico previamente realizado sobre un chorro Diesel.

Si revisamos los objetivos planteados, en el Capítulo 4 se presentan los resultados obtenidos. En un primer lugar se realiza un análisis del chorro estacionario y transitorio en condiciones inertes basado en un análisis analítico y numérico por el modelo 1-D DICOM. Una vez calibrado el modelo se muestran los resultados del *script* de Matlab que predice la longitud de *Lift-off* y el tiempo de retraso. A continuación se calibra el modelo nuevamente tomando los datos del DICOM inerte para el combustible n-Dodecano y se introducen en el modelo transitorio de forma que los resultados mostrados sean razonablemente buenos. Finalmente, se realizan los cálculos del DICOM reactivo y se comparan con los experimentales para poder validarlos.

Para finalizar, en el Capítulo 5 se sintetiza las conclusiones y se analizan las directrices para desarrollar futuros trabajos.

Bibliografía

- [1] Pastor J.V. *Fundamentos Técnicas Ópticas*. Apuntes, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 2013.
- [2] Pastor J.V. *Fundamentos de Espectroscopía*. Apuntes, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 2013.
- [3] Broatch A. *Metodología experimental*. Apuntes, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 2013.
- [4] Payri, Raul and Viera, Juan P and Gopalakrishnan, Venkatesh and Szymkowitz, Patrick G. (2017) *The effect of nozzle geometry over the evaporative spray formation for three different fuels.*, Elsevier vol. 188, pp. 645-660.
- [5] Suh HK, Lee CS. *Effect of cavitation in nozzle orifice on the diesel fuel atomization characteristics*. Int J Heat Fluid Flow 2008;29(4):1001–9.
- [6] Badock C, Wirth R, Tropea C. *The influence of hydro grinding on cavitation inside a diesel injection nozzle and primary break-up under unsteady pressure conditions*. In: Proc 15th ILASS-Europe 99, Toulouse, July 5–7, Toulouse (France); 1999.
- [7] Ganippa LC, Andersson S, Chomiak J, Matsson A. *Combustion characteristics of diesel sprays from equivalent nozzles with sharp and rounded inlet geometries*. Combust Sci Technol 2003;175(6):1015–32.
- [8] Koo JY, Hong ST, Shakal JS, Goto S. *Influence of fuel injector nozzle geometry on internal and external flow characteristics*. SAE technical paper 970354.
- [9] Ning W, Reitz RD, Diwakar R, Lippert AM. *A numerical investigation of nozzle geometry and injection condition effects on diesel fuel injector flow physics*. SAE technical paper 2008-01-0936
- [10] Som S, Ramirez AI, Longman DE, Aggarwal SK. *Effect of nozzle orifice geometry on spray, combustion, and emission characteristics under diesel engine conditions*. Fuel 2011;90(3):1267–76.
- [11] Curran H, Gaffuri P, Pitz W, Westbrook C. *A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation*. Combust Flame 1998;114(12):149–77
- [12] Idicheria CA, Pickett LM. *Soot formation in diesel combustion under high-EGR conditions*. SAE 2005-01-3834

Capítulo 2

Conceptos previos: proceso de combustión en un motor Diesel

Contenido

2.1. Introducción	25
2.2. Conceptos básicos	26
2.3. Fases del proceso de combustión de un motor Diesel de combustión directa	27
2.4. Atomización	29
2.5. Evaporación	30
2.6. Mezcla aire-combustible	31
2.6.1. Parámetros macroscópicos del chorro Diesel	32
2.6.1.1. Penetración del spray	32
2.6.1.2. Ángulo del chorro	33
2.6.2. Parámetros microscópicos del chorro Diesel	33
2.6.2.1. Distribución del tamaño y velocidad de la gota	33
2.6.3. Longitudes características de mezcla y evaporación	34
2.6.4. Tiempos característicos de mezcla y evaporación	35
2.7. Retraso del encendido	35
2.8. Fase de combustión premezclada	36
2.9. Fase de combustión por difusión	36
2.9.1. <i>Lift-off</i>	38
2.10. Conclusiones	39
Bibliografía	40

2.1. Introducción

Para entender completamente el contenido expuesto en este proyecto, se tiene que hacer una completa introducción a la temática de los procesos físicos que tienen lugar dentro de la cámara de combustión de un motor Diesel.

El objetivo de este apartado es introducir los conceptos previos para poder desarrollar los objetivos presentados en el Capítulo 1.

Al principio se insistirá de un manera conceptual a la hora de presentar los fenómenos físicos pues toda la temática de los chorros tiene implícitamente una terminología y ésta se expondrá y así se podrá hacer una introducción a sus características y principales variables.

Estos conceptos servirán como un primer paso para el posterior análisis de los datos obtenidos. Aunque muchos proyectos se basen en obtener un buen sistema de modelado para predecir el proceso calculado, se considera tener un buen modelo conceptual, teórico que permita cuantificar los resultados. Se puede decir que: modelar de manera precisa, nos guía hacia unas pautas que permiten interpretar medidas obtenidas de manera experimental.

El capítulo se divide de la siguiente manera: en primer lugar se muestran unos conceptos básicos sobre el proceso de combustión que se utilizarán durante todo el proyecto. Seguidamente, se expone de manera más detallada las fases de los fenómenos que ocurren durante la inyección dentro de la cámara de combustión. Por último se explicará el caso al cual se quiere llegar para modelar en el proyecto. Y a continuación se hará una aproximación completa del proceso de inyección-combustión.

2.2. Conceptos básicos

Los motores de combustión interna alternativos (MCIA) actuales llevan presentes en nuestro día a día más de un siglo. La fecha que marca el nacimiento de estos motores tal como los conocemos sería el año 1876 cuando el alemán Nicolaus Otto estableció las directivas para desarrollar los futuros MCIA.

La combustión interna alternativa es un tipo de combustión que permite al motor obtener la energía mecánica a partir de la energía química del combustible si el proceso de combustión se sitúa en el propio fluido de trabajo (mezcla aire y combustible). Los motores que tienen este tipo de combustión se dividen en 2 tiempos y 4 tiempos tanto para Gasolina como para Diesel. Respecto a los motores de 4T, podemos destacar el de Beas de Rochas y el de Otto.

El motor Diesel es un motor térmico con combustión interna y toma su nombre a partir del ingeniero que lo inventó, Rudolf Diesel. Dicha combustión, en la actualidad, se produce por la auto-ignición de la mezcla heterogénea de combustible debido a las altas temperaturas obtenidas en la cámara de combustión provocado por la relación de compresión y en las zonas donde la fracción de mezcla sea cercana a la estequiométrica. Sin embargo, en los inicios del motor Diesel el combustible se inyectaba utilizando aire comprimido, éste atomizaba el combustible y finalmente lo introducía en el motor por medio de una tobera.

Controlar el instante de encendido supone un desafío ya que depende espacial y temporalmente del proceso de inyección. Para establecer el momento idóneo, los ingenieros han establecido que se debe inyectar únicamente aire durante el proceso de admisión y combustible al final de la carrera de compresión ya que aquí el aire tienen una temperatura suficientemente alta como para auto encender el combustible.

El ciclo del motor Diesel ideal omite la renovación de la carga y asume que el fluido termodinámico que evoluciona es un gas perfecto. Todos los procesos son reales e irreversibles y se realizan sobre el mismo fluido.

Una vez definido básicamente el concepto de un ciclo Diesel ideal, se debe profundizar un poco más sobre el tema que concierne en el trabajo. La Real Academia de la lengua Española define el chorro de combustible como: *“Porción de líquido o de gas que, con más o menos violencia, sale por una parte estrecha, como un orificio, un tubo, un grifo, etc.”*

En este trabajo el chorro es líquido y se hará pasar por una tobera gracias a un salto de presiones, pasándose a llamar chorro de inyección. Para el estudio que aquí se plantea, se clasificará los chorros según las características de la especie inyectada y de la del ambiente.

Las especies son:

- Especie inyectada: líquida o gaseosa. Normalmente la de mayor densidad.
- Especie del ambiente: normalmente el aire, y tendrá densidad inferior a la inyectada

Para este estudio en concreto, se clasifica el chorro según las características de ambas especies y de los procesos que se derivan de ellas es decir, las leyes de mezcla. Por tanto la clasificación de los chorros quedaría así:

- Chorro gaseoso inerte isoterma: si no produce ninguna reacción entre las especies y produzca nuevas especies. Aquí las temperaturas de las especies serán iguales.
- Chorro gaseoso inerte no isoterma: si no produce ninguna reacción entre las especies y produzca nuevas especies. Aquí las temperaturas de las especies serán diferentes.
- Chorro gaseoso reactivo: si produce reacción entre las especies durante la combustión y produzca nuevas especies.
- Spray inerte: cuando la especie inyectada sea líquida y no produce ninguna reacción entre las especies y produzca nuevas especies. Aquí las temperaturas de las especies serán diferentes.
- Spray reactivo: cuando la especie inyectada sea líquida y si produzca reacción entre las especies produciendo nuevas especies.

2.3. Fases del proceso de combustión de un motor Diesel de combustión directa

En este apartado se hace una breve descripción de las características de un chorro Diesel. El proceso de combustión de un motor de inyección directa es la suma de un conjunto de fenómenos físico-químicos que dan como resultado la liberación de energía por parte del combustible.

La mejor manera de estudiar este proceso es detallar la evolución temporal de la masa de combustible inyectada por unidad de tiempo y la cantidad de energía liberada en el proceso de combustión también por unidad de tiempo, de esta manera se puede comparar sencillamente cuanto combustible es necesaria para producir una cierta cantidad de energía.

En la Fig. 2.1 se ha establecido una comparación entre las dos variables más importantes para detallar el proceso de combustión. A partir de la Fig. 2.1 se puede observar que hay tres fases principales [1]:

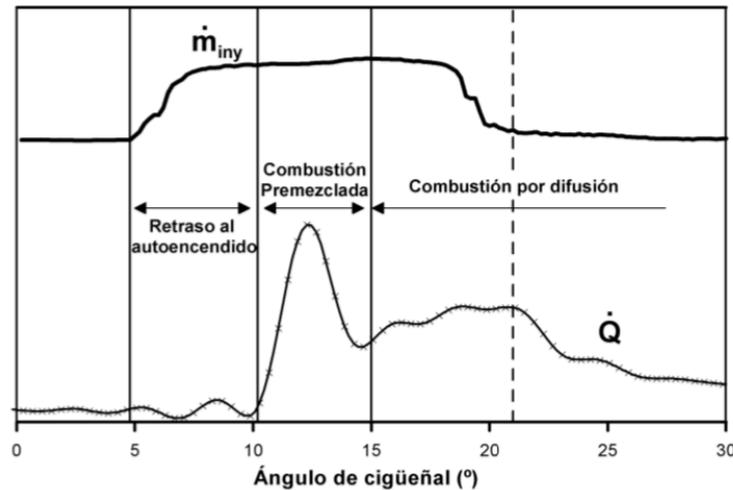


Figura 2.1: Fases de la combustión. Comparación entre la tasa de inyección (curva superior) y la energía liberada (curva inferior) [14].

- Fase de retraso: Cuando se inicia el proceso de inyección; tasa mayor que cero en la Fig. 2.1, no hay una liberación de calor importante. Al entrar el combustible en la cámara, se produce la mezcla del aire-combustible favoreciendo los procesos de formación de la mezcla; atomización, engrosamiento de aire y evaporación. La mezcla es inestable ya que la atmósfera de la cámara de combustión tiene oxígeno. Además, empiezan a producirse prereacciones químicas sobre la superficie de la mezcla de baja intensidad que culminan en el autoencendido de espontáneo de la mezcla produciendo una zona de reacción altamente exotérmica en el chorro definiendo el inicio de la combustión. Si se observa la gráfica, se puede apreciar este fenómeno al observar un crecimiento repentino de la ley de liberación de calor.
- Fase de combustión premezclada: a partir de este momento se observan dos fases más. En la primera se quema todo el combustible dentro de los límites de inflamabilidad, condicionada por la mezcla. Ésta aun no había podido reaccionar porque la química no había permitido el autoencendido. Esta fase se puede observar al apreciar el primera máximo de la curva de la energía liberada. La acumulación de la mezcla ha permitido liberar tanta energía como para observar este máximo. Esta fase dura desde el inicio de la combustión hasta el primer mínimo de la curva de energía liberada.
- Fase de combustión por difusión: Se libera calor a una tasa más baja como se puede observar en ella Fig. 2.2 debido a que se quema toda la masa mezclada en el apartado anterior. El combustible y el oxígeno no están previamente mezclados, sino que los procesos de mezcla y combustión ocurren al mismo tiempo. El chorro tiene un comportamiento cuasi-estacionario.

El proceso de mezcla está condicionado por la cantidad de movimiento al introducir el chorro de combustible en la cámara de combustión. Este proceso se observa cuando remonta la energía liberada después de la combustión premezclada. Al final del proceso de inyección existe una caída en la energía liberada ya que no hay energía cinética que haya sido generada por el movimiento de entrada del chorro en la cámara de combustión.

2.4. Atomización

El primer proceso que tiene lugar al descargar el chorro Diesel sobre la tobera es el proceso de atomización. Se define como la separación de un chorro líquido en gotas de menor tamaño. Al disgregarse en gotas, aumenta su superficie de contacto con el aire y favorece el englobamiento de aire y la evaporación.

En el caso de un motor Diesel de inyección directa, la atomización del líquido produce unas gotas de un tamaño minúsculo. Por tanto, en un punto de la cámara de combustión donde haya una gota, se puede asumir que la densidad será una mezcla de las dos especies, aire-combustible. Esta afirmación permite situar el chorro Diesel de inyección directa dentro de los chorros líquidos de régimen turbulento.

El proceso de atomización se completa cuando el combustible llega a una cierta distancia axial respecto al orificio de salida del combustible. A partir de ese momento, el combustible se ha convertido en minúsculas gotas rodeadas de una película de gas englobado. La mayoría de estudios concluyen que el chorro va a estar formado por una mezcla en la cual hay una fase líquida totalmente disgregada casi desde la salida del orificio. Y por tanto, esta distancia viene a ser desde unos pocos diámetros de tobera hasta ser nula, llamando nula a la distancia si el chorro se atomiza desde el principio [5]. Es más, hay estudios que afirman que el cálculo total de la atomización es demasiado costoso si queremos una atomización completa y sería más barato calcularla a partir de la distancia intacta.

Todo lo anterior lleva a concluir que un líquido atomizado está formado por infinidad de gotas, y su comportamiento es mucho más complicado que el de un chorro gaseoso, en el que el proceso de transferencia de masa y cantidad de movimiento es a nivel molecular.

A pesar de la diferencia sustancial entre ambos tipos de chorro, se puede afirmar que, debido a la rápida frenada de las gotas, la cantidad de movimiento del combustible líquido se transfiere rápidamente al aire, con lo cual, a partir de una cierta distancia de la tobera, el chorro se comporta como un gaseoso que posee la misma cantidad de movimiento total que el combustible de la salida de la tobera. Debido al tamaño minúsculo de las gotas, se alcanza un equilibrio dinámico, es decir, un equilibrio térmico y de velocidad.

2.5. Evaporación

El combustible líquido inyectado, atomizado en pequeñas gotas cerca de la salida de la tobera para formar un spray, debe evaporarse antes de que se mezcle con el aire y se quemé. La región de vapor de propagación de la pulverización, transportada en la cámara por el flujo de aire arremolinado, aparece salpicada en motas debido a la concentración local de vapor turbulento y las fluctuaciones de la temperatura.

El fenómeno de evaporación disminuye el tamaño de la gota hasta hacerla desaparecer ya que aumenta la temperatura de la gota al separarse estas del núcleo y ponerse en contacto con el gas que la rodea. Intercambian energía y se aumenta la cantidad de combustible que pasa de la fase líquida a la gaseosa.

En la fase de atomización se hablaba de una distancia, pues a partir de ésta, las gotas pasan a ser totalmente vapor y desaparece el combustible en forma de líquido. Se ha estudiado a través de ensayos experimentales que el calor necesario para la evaporación no es más que la energía del aire caliente que el chorro engloba [6].

Si se revisa la bibliografía, hay una serie de parámetros que influyen sobre la distancia máxima. Estos parámetros son el diámetro de la tobera [7], la temperatura y la densidad en la cámara [7] y las características del combustible empleado [7].

Examinando el proceso de evaporación en más detalle y considerando una gota del líquido con una temperatura cercana a la temperatura ambiente inyectada en el aire en condiciones típicas del motor de final de compresión, se puede encontrar tres fenómenos que determinan las gotas en la fase de evaporación:

1. Desaceleración de la gota debido a la resistencia aerodinámica
2. Intercambio de calor entre la gota y el aire
3. Transferencia de masa del combustible vaporizado lejos de la gota

A medida que la temperatura de la gota aumenta debido a la transferencia de calor, la presión del vapor de combustible aumenta y la tasa de evaporación aumenta. A medida que aumenta la velocidad de transferencia de masa lejos de la gota, aumenta la fracción del calor transferido a la superficie de la gota que está disponible para aumentar aún más la temperatura de la gota. A medida que la velocidad de la gota disminuye, el coeficiente de transferencia de calor convectivo entre el aire y la gota disminuye.

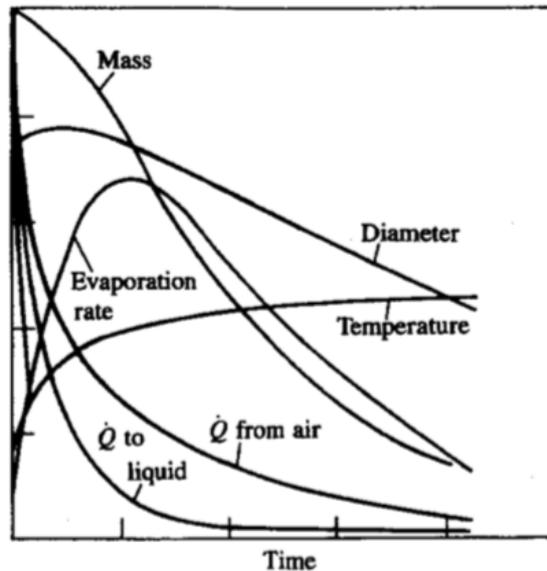


Figura 2.2: Variación esquemática de la variación de masa, diámetro, temperatura, tasa de evaporación, tasa de transferencia de calor del aire y tasa de transferencia de calor al núcleo de la gota líquida en función del tiempo durante el proceso de evaporación en el entorno Diesel en el momento de inyección [1].

Todo lo anterior lleva a concluir que el proceso de evaporación está controlado por la mezcla y no tanto por el proceso de difusión de masa, cantidad de movimiento y energía entre la fase líquida y el ambiente que rodea a las gotas.

2.6. Mezcla aire-combustible

Si se observa la primera parte de la fase de retraso del autoencendido, es ahí donde se mezclará el chorro de combustible líquido con el aire presente. Es un punto perfectamente definido y con una ley definida (tasa de inyección o ley de entrega) que permitirá que se desarrolle el proceso de combustión con las menores tasas de contaminación y el mejor rendimiento posible.

Se necesita utilizar un método de control que regule cualitativamente la carga ya que la fracción de mezcla se ve afectada aunque no la cantidad de aire con la que trabaja el motor. La mezcla se realiza en cuestión de milisegundos y por tanto el tiempo disponible impone limitaciones al motor como puede ser el régimen de giro.

Para facilitar el estudio de chorros, se separan los procesos físicos de los químicos y así el proceso de mezcla se estudia en atmósfera no reactiva. El estudio del chorro se basará en las siguientes características: combustible líquido, isoterma, en ambiente no reactivo. Para poder demostrar que se puede analizar el chorro de esta manera, se analizarán una serie de fenómenos.

Estos procesos serán los fenómenos de atomización, englobamiento de aire y evaporación. El primero es cómo se separa el chorro líquido en gotas de combustible de diferente tamaño. La evaporación permite diferenciar entre chorro líquido y chorro gaseoso.

Antes de proceder a describir los fenómenos, es necesario establecer cómo se calcula la cantidad de combustible que se inyecta. La ecuación que gobierna es Ec. 2.1 [1]:

$$\dot{m}_f = C_D \cdot A_n \cdot \sqrt{2 \cdot \rho_f \cdot \Delta_p} \quad (2.1)$$

dónde A_n es el área mínima de la tobera, C_D es el coeficiente de descarga, ρ_f es la densidad del fuel, y Δ_p es la caída de presión en la tobera.

2.6.1. Parámetros macroscópicos del chorro Diesel

2.6.1.1. Penetración del spray

Es la distancia que recorre el frente del chorro en el seno del gas ambiente tomando como origen el orificio de salida de la tobera. La velocidad y la distancia que penetra el spray de combustible a través de la cámara de combustión tiene una influencia importante en la utilización del aire y en las velocidades de mezcla del combustible y aire.

En los sistemas de combustión Diesel de inyección directa, la sobrepenetración produce un choque de combustible líquido sobre las superficies frías que, especialmente como tienen pocos o ningún remolino de aire, reduce las tasas de mezcla y aumenta las emisiones de especies no quemadas y parcialmente quemadas. Sin embargo, la subpenetración da como resultado una mala utilización del aire, ya que el aire en la periferia de la cámara no entra en contacto con el combustible. Por lo tanto, la penetración del spray de combustible líquido en condiciones típicas de motores Diesel ha sido ampliamente estudiada.

Se han propuesto numerosas correlaciones basadas en datos experimentales y en la teoría del chorro Diesel para la penetración de combustible pulverizado. Éstas predicen la penetración S [m] de la punta a través del tiempo transcurrido desde el inicio de la inyección, el diámetro del orificio, la diferencia de presiones a la que se somete el orificio, de la densidad del gas ambiente y la tangente del semiángulo del chorro.

La fórmula desarrollada por Desantes et al. [2] basada en un modelo de mezcla de chorro de Diesel en spray considera la conservación del flujo de cantidad de movimiento M_f en la dirección axial del chorro Diesel lo que permite llegar a una ley de escalado para la penetración de un chorro Diesel no evaporativo:

$$S(t) \propto M_f^{0.25} \cdot \rho_a^{-0.25} \cdot \tan^{-0.5}(\theta/2) \cdot t^{0.5} \quad (2.2)$$

Siendo el flujo de cantidad de movimiento:

$$\dot{M}_f = \dot{m}_f \cdot u_{ef} = \rho_f \cdot \frac{\pi}{4} \cdot \phi_{ef}^2 \cdot u_{ef}^2 = \rho_f \cdot \frac{\pi}{4} \cdot \phi_{ef}^2 \cdot C_v^2 \cdot u_{teo}^2 \quad (2.3)$$

Y considerando la expresión de la velocidad teórica, el flujo de cantidad de movimiento quedaría:

$$\dot{M} = \frac{\pi}{4} \cdot \phi_{ef}^2 \cdot C_c^2 \cdot \Delta p \quad (2.4)$$

Que sustituyendo en la ley de penetración:

$$S(t) \propto \rho_a^{-0.25} \cdot \Delta p^{0.25} \cdot \tan^{-0.5}(\theta/2) \cdot t^{0.5} \quad (2.5)$$

dónde Δp [Pa] es la diferencia de presiones en el orificio, t [s] es el tiempo después de la inyección, ρ_a [kg/m³] es la densidad del gas ambiente, θ es el ángulo del chorro. Todos los parámetros de la fórmula están expresados en el Sistema Internacional.

2.6.1.2. Ángulo del chorro

Este ángulo influye en la mezcla entre el aire y el combustible ya que varía en función de la geometría de la tobera del inyector y las condiciones de inyección, así como de las propiedades del combustible y de las condiciones ambientales donde se inyecta por lo que se puede concluir que está relacionado con el proceso de atomización [3].

Se ha podido confirmar que para una elevada presión de inyección y si se considera un único combustible, el ángulo de chorro depende de los parámetros geométricos de la tobera y de la relación de densidades entre el gas ambiente y el combustible [4]. De acuerdo con estas afirmaciones, se expone una relación como muestra la siguiente Ec. 2.6:

$$\tan(\theta/2) \propto (\rho_a/\rho_f)^{0.19} \quad (2.6)$$

2.6.2. Parámetros microscópicos del chorro Diesel

2.6.2.1. Distribución del tamaño y velocidad de la gota

Aunque la distribución de combustible a través de la trayectoria del spray a través de la cámara de combustión es importante, también es necesaria la atomización del combustible líquido en un gran número de pequeñas gotas para crear una gran área superficial a través de la cual se puede evaporar el combustible líquido. Por lo que se revisa cómo la distribución del tamaño de gota en el spray de combustible depende de los parámetros de inyección y de las propiedades de aire y combustible.

Durante el período de inyección, las condiciones de la inyección pueden variar. Estas pueden ser la presión de inyección, el área del orificio de la tobera y la velocidad de inyección. Por consiguiente, la distribución del tamaño de gota en una ubicación dada en la pulverización también puede cambiar con el tiempo durante el período de inyección.

Además, dado que los detalles del proceso de atomización son diferentes en el núcleo de pulverización y en el borde de pulverización, y la trayectoria de las gotas individuales depende de su tamaño, velocidad inicial y ubicación dentro de la pulverización, la distribución del tamaño de gota variará con la posición dentro el spray.

Para caracterizar la pulverización, son deseables las expresiones para la distribución del tamaño de la gota y el diámetro. Un diámetro medio apropiado comúnmente utilizado es el diámetro medio de Sauter (SMD). Está relacionado con la ley de frenado de las gotas de combustible y con la tasa de evaporación en condiciones evaporativas.

Las ecuaciones que rigen que está ocurriendo en la región del chorro desarrollado para las variables de velocidad y fracción másica son Ec. 2.7 y Ec. 2.8:

$$u(x, r) = u_{eje} \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (2.7)$$

$$Y(x, r) = Y_{f,eje} \exp \left[-\alpha Sc \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (2.8)$$

Donde se demuestra que esta zona el chorro Diesel se ajusta a un perfil exponencial [2]. Y siendo Sc el número de Schmidt, α el coeficiente de campana de la distribución gaussiana y R el radio de semejanza con el chorro.

2.6.3. Longitudes características de mezcla y evaporación

La longitud característica de mezcla indica la posición en el eje del chorro medida desde el orificio de la tobera para que la fracción másica sea igual a la estequiométrica $Y_{f,est}$. Por lo tanto si se considera la Ec. 2.9 y se utiliza en la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento y de la masa de combustible se obtiene la Ec. 2.10 para la longitud característica de la mezcla, L_{mix} :

$$Y_{f,eje} \propto \frac{\phi_{eqef}}{x \tan(\theta/2)} = \frac{\phi_{ef}}{x \tan(\theta/2)} \left(\frac{\rho_f}{\rho_a} \right)^{0.5} \quad (2.9)$$

$$L_{mix} \propto \frac{\phi_{ef}}{\tan(\theta/2) Y_{f,est}} \left(\frac{\rho_f}{\rho_a} \right)^{0.5} \quad (2.10)$$

Se puede apreciar a partir de la Ec. 2.10 como la densidad del gas influye en la longitud característica de mezclas como el diámetro efectivo ϕ_{ef} y la tangente del semiángulo de apertura del chorro.

2.6.4. Tiempos característicos de mezcla y evaporación

A partir de la longitud característica de mezcla de un chorro inerte, se puede establecer la Ec. 2.11 que permite determinar el tiempo característico de mezcla, t_{mix} . Esta variable representa el tiempo que necesitaría una partícula de combustible para recorrer la longitud existente entre la salida del orificio de la tobera y la posición axial donde la fracción másica alcanza el valor estequiométrico.

$$t_{mix} \propto \frac{\phi_{ef}}{\tan(\theta/2) \cdot u_{ef} \cdot Y_{f,est}^2} \left(\frac{\rho_f}{\rho_a} \right)^{0.5} = \frac{\phi_{eqef}}{\tan(\theta/2) \cdot u_{ef} \cdot Y_{f,est}^2} \quad (2.11)$$

Se evidencia la escasa influencia de la temperatura del gas ambiente sobre el proceso de mezcla en condiciones inertes, y se refleja la influencia de la densidad del gas.

2.7. Retraso del encendido

La mezcla aire-combustible que se forma no es estable, y se autoinflama cuando ha transcurrido un cierto tiempo desde el inicio del proceso de inyección. Este tiempo es el retraso del encendido en un motor Diesel y se define como el intervalo de tiempo entre el inicio de la inyección y el inicio de la combustión.

Dado que las características de ignición del combustible afectan al retardo del encendido, esta propiedad de un combustible es muy importante para determinar las características de funcionamiento del motor Diesel, tales como la eficiencia de conversión de combustible, suavidad de funcionamiento, fallos de encendido, emisiones de humo, ruido y facilidad de arranque.

Los estudios con inyección de combustible en entornos de temperatura y presión constantes han demostrado que la temperatura y la presión del aire son las variables más importantes para una determinada composición de combustible. Como resultado de estos trabajos experimentales [1] de los investigadores, se ha obtenido un parámetro: el tiempo de retraso τ_{soc} . Dicho parámetro es función de las variables descritas previamente. Esta relación se establece mediante expresiones sencillas como la Ec. 2.12 [8]:

$$\tau_{soc} = A \cdot P^{-n} \cdot \exp \left[\frac{E}{rT} \right] \quad (2.12)$$

dónde A y n son cortantes que dependen del combustible, r es la constante universal de los gases y E es la energía de activación. Esta ecuación es mejor para tiempos de retraso muy cortos, con poca variación de presión y temperatura. Sin embargo, para poder estudiar tiempos de retraso más largos, se debe utilizar la siguiente Ec. 2.13 [9]:

$$\int_{t_{SOI}}^{t_{SOI}+\tau_{soc}} \frac{1}{\tau(t)} \cdot dt = 1 \quad (2.13)$$

dónde t_{SOI} es el instante de inicio de inyección y $\tau(t)$ es el tiempo de retraso si durante toda la primera fase de la combustión se dieran condiciones constantes en cámara e iguales a las que hay en el instante t .

2.8. Fase de combustión premezclada

Al concluir la fase de retraso del encendido comienza la fase de combustión premezclada donde se produce una liberación de calor. Aquí reacciona todo el combustible que se ha mezclado y que está dentro de los límites de inflamabilidad pero no ha podido ser quemado. Este fenómeno origina una liberación de calor elevada en poco tiempo.

La cantidad de masa que se quema durante esta fase, se utiliza para caracterizar este proceso. Sin embargo, calcular esta masa es difícil porque no se puede llegar a saber cual viene de la fase de retraso del encendido y cual de la mezclada a cada instante.

Si se revisa la bibliografía dedicada a este apartado [10], investigadores han llegado a la conclusión de que en un motor Diesel de inyección directa los factores intrínsecos que controlan la combustión premezclada son la tasa de inyección, la tasa de mezcla y el tiempo de retraso. No obstante, la gran mayoría de estudios dedican su tiempo a revisar los experimentos escritos por otros autores y corroborar que esto es verdad por lo que no hay muchas publicaciones sobre esta fase.

Para poder mostrar el carácter transitorio de esta etapa y ya puestos de la anterior, se ha observado quimioluminiscencia e incremento de la presión en la fase de retardo y aparición de hollín y máximo local de la tasa de liberación de calor en la fase de combustión premezclada. La traducción de estas líneas es que aparece un frente de llama de difusión estable. Esta llama marcará el inicio de la combustión por difusión que se comentará en el siguiente apartado.

2.9. Fase de combustión por difusión

Una vez terminadas las dos fases anteriores, la combustión entra en la fase de combustión por difusión donde se observa como todo el combustible inyectado se consume. En esta fase se observa como la llama que se empezaba a formar durante la fase premezclada se desarrolla y llega a un periodo cuasi-estacionario que se mantiene hasta que no acabe el proceso de inyección [11].

Para poder analizar los procesos que ocurren durante esta fase es necesario utilizar la ley de liberación de calor además de conocer que parámetros controlan esta fase. Después de varios estudios [10], la conclusión es que la tasa de mezcla quien controla esta proceso y no la cinética química de la combustión.

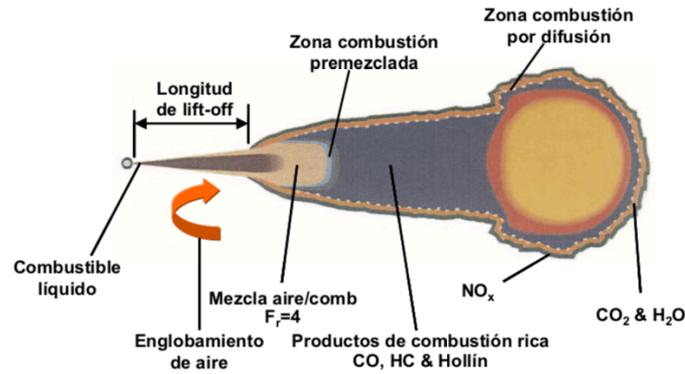


Figura 2.3: Estructura de la llama Diesel durante la parte cuasi-estacionaria de la fase de combustión por difusión [12].

Una parte importante de este trabajo son los parámetros que influyen durante los procesos de combustión. Estos parámetros marcarán los resultados obtenidos por las herramientas de análisis. así que utilizando la Fig. 2.3 se va a proceder diferenciar las partes esenciales de una llama Diesel durante la fase de combustión pro difusión.

1. La zona inicial es el *Lift-off* . Es la zona en contacto con la tobera donde el chorro es no reactivo. En esta zona, como se observa en la Fig. 2.3, se producen los fenómenos de atomización, englobamiento de aire y evaporación. La longitud de esta zona, y que se utilizará en los cálculos para DICOM, se llama LOL (*Lift-off Lentgh*).
2. A partir de la distancia del *Lift-off*, la llama adquiere una estructura típica de llama por difusión es decir, tiene una zona interna formada por hollín y combustible sin quemar donde como hay oxígeno, se oxidan y producen CO_2 y H_2O .
3. Siguiendo con la Fig. 2.3, se observa entre el *Lift-off* y la zona de combustión por difusión una zona de combustión premezclada, donde se consumiría todo el oxígeno englobado por el chorro en la primera zona que se ha llamado no reactiva. Los productos formados a partir de esta reacción propician la formación de hollín.

A partir de la descripción anterior de la estructura de una llama Diesel se puede establecer el proceso que recorre de manera espacial y temporalmente una cantidad de combustible a través de estas etapas. Esta breve descripción nos servirá de gran ayuda ya que los resultados que obtendremos estarán descritos de manera teórica aquí.

El combustible comienza a atomizarse a y mezclarse con el aire lo que provoca una rotura de gotas y un englobamiento que supondrá un aumento de la temperatura y una evaporación de todo el combustible líquido a cierta distancia de la tobera. La fase vapor del combustible continúa mezclándose con el aire hasta llegar a la primera zona, Fig. 2.3, zona de combustión premezclada. La temperatura alcanzada aquí es de unos 700 K y la fracción de mezcla relativa de 4.

A medida que atraviesa esta zona, la temperatura aumenta hasta los 1600 K. Se quemará todo el oxígeno acumulado ya que la fracción de mezcla que se obtiene es rica. Este proceso puede llegar a liberar en torno a un 10-15% de la energía química del combustible.

La siguiente etapa en la que entra el combustible es la zona de combustión por difusión. El combustible evaporado continúa mezclándose y englobando gases sin embargo, no hay aporte de oxígeno libre. Al no haber aporte de oxígeno, no hay liberación de calor en esta zona. El acercamiento al frente de llama de difusión supone la creación de productos de combustión. Aunque estos productos se quemarán ya que se aportará oxígeno por difusión por parte de la zona exterior del frente de la llama de difusión.

2.9.1. *Lift-off*

Desde el punto de vista del trabajo, la obtención de esta zona es esencial para comprender los resultados obtenidos. El *Lift-off* es una longitud relevante para el estudio de la llama de difusión en un motor Diesel. Esta longitud se define como la distancia entre el orificio de inyección y la base de la llama dónde se sitúa el frente de reacción premezclado previamente descrito.

A partir de una serie de simplificaciones realizadas por Siebers et al. [13] se puede llegar a obtener una ley de escalado empírica obtenida para chorros Diesel. Establece una serie de dependencias con la densidad, la temperatura y la concentración de oxígeno del aire así como la velocidad de inyección y el diámetro del orificio. La ley propuesta para un chorro Diesel quedaría de la siguiente manera Ec. 2.14:

$$LOL \propto T_a^{-3,74} \cdot \rho_a^{-0,85} \cdot \phi_{ef}^{0,34} \cdot u_{ef} \cdot Y_{f,est}^{-1} \quad (2.14)$$

dónde u_{ef} representa la velocidad de inyección efectiva, $Y_{f,est}$ es la fracción másica estequiométrica, T_a es la temperatura del aire y ρ_a es la densidad del aire y ϕ_{ef} es el diámetro del orificio.

Si se profundiza sobre las dependencias que adquiere el *Lift-off*, la velocidad de inyección efectiva influye de forma lineal sobre la longitud del *Lift-off*. Esto implica que un aumento de esta velocidad cambiaría el punto donde se estabiliza la llama aguas abajo. Por otro lado, la temperatura del aire no afecta de forma directa sino que lo hace a través de la difusividad térmica, el ángulo del chorro y la velocidad de combustión laminar.

La concentración de oxígeno influye de manera inversamente proporcional sobre la distancia de *Lift-off* ya que la relación se obtiene de manera implícita a través de la fracción de mezcla estequiométrica y la velocidad de combustión.

Establecer de manera clara y concisa la distancia de *Lift-off* supone detectar la formación de hollín ya que ambos parámetros están directamente relacionados. Esta relación se observa cuando al aumentar dicha longitud se favorece el englobamiento de aire en el chorro antes de llegar a la llama de difusión y por tanto disminuye la fracción de mezcla y se forma menos hollín. Siendo la fracción de mezcla media menor de 2, la llama no produce hollín.

2.8. Conclusiones

A través de las diferentes secciones de este capítulo se ha podido describir de manera detallada los fenómenos que tienen lugar en el proceso de combustión de un chorro Diesel. Se ha comenzado por identificar los conceptos básicos que incumben a motor Diesel para poder profundizar en las tres fases principales:

- **Retraso al autoencendido**, proceso que tiene lugar desde el inicio de la inyección hasta que comienza la liberación de calor. En esta fase se incluye tres fenómenos muy importantes: la inyección, la mezcla y la evaporación del chorro.
- **Combustión premezclada**, fase transitoria donde comienza la liberación de calor. La mezcla preparada comienza a quemar y se produce un pico de liberación de calor que culmina con la transición entre el chorro inerte y la llama de difusión.
- **Combustión por difusión**, fase donde la llama está totalmente establecida y la combustión se desarrolla a medida que lo hace la mezcla entre el aire y el combustible.

Como es normal en un proceso de combustión, se producen contaminantes: óxidos de nitrógeno y partículas. Siendo el momento en el que las temperaturas son altas y las fracciones de mezcla pobres cuando se produce una mayor producción de contaminantes.

Para poder entender la descripción detallada del proceso, se ha establecido las dependencias microscópicas y microscópicas de las que depende un chorro Diesel. Esto ha permitido llegar a establecer una ley de escalado para el parámetro más importante que gobierna en este trabajo: la longitud de *Lift-off* y así poder continuar con el mismo en los siguientes capítulos.

Bibliografía

- [1] Heywood J.B. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering 1988.
- [2] Desantes J.M., Payri R., Salvador F.J., Gil A. *Development and validation of a theoretical model for Diesel spray penetration*. Fuel 85(7-8), pp. 910-917, 2006.
- [3] Lefèbvre A. *Atomization and Sprays*. CRC, 1988
- [4] Naber J.D., Siebers D.L. *Effects of gas density and vaporization on penetration and dispersion of Diesel sprays*. SAE Paper 960034, 1996.
- [5] Smallwood G. J. y Gülder Ö L. *Views on the Structure of Transient Diesel Sprays*. Atomization and Sprays, Vol. 10, pp. 355–386, 2000.
- [6] Espey Ch. y Dec J. E. “The effect of TDC temperature and density on the liquid-phase fuel penetration in a DI Diesel engine”. Transactions of the SAE, Vol. 104 n^o 4, pp. 1400–1414, 1995.
- [7] Browne K. R., Partridge I. M. y Greeves G. *Fuel property effects on fuel/air mixing in an experimental Diesel engine*. SAE Paper 860223, 1986.
- [8] Aggarwal S.K. *A Review of Spray Ignition Phenomena: Present Status and Future Research*. Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 24, pp. 565–600, 1998.
- [9] Livengood J. C. y Wu P. C. *Correlation of Autoignition Phenomenon in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines*. In Proceedings of the Fifth International Symposium on Combustion, p ag. 347, 1955.
- [10] Plee S. L. y Ahmad T. *Relative Roles of Premixed and Diffusion Burning in Diesel Combustion*. SAE Paper 831733, 1983.
- [11] Glassman I. *Combustion*. Academic Press, Inc., second edition, 1987.
- [12] Dec J. E. *A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser- Sheet Imaging*. Transactions of the SAE, Vol. 106, pp. 1319–1348, 1997. SAE Paper 970873.
- [13] Siebers D. L., Higgins B. S. y Pickett L. *Flame Lift-Off on Direct-Injection Diesel Jets: Oxygen Concentration Effects*. SAE Paper 2002- 01-0890, 2002.
- [14] Sanchis A. *Desenvolupament i aplicació d'un model unidimensional per a la predicció de dolls dièsel d'injecció directa en condicions inertes i reactives*. 2006

Capítulo 3

Modelo DICOM: herramientas de análisis

Contenido

3.1. Introducción	41
3.2. Descripción matemática del modelo 1-D	42
3.2.1. Datos de entrada y salida. Caso inerte	45
3.2.2. Datos de entrada. Caso reactivo	47
3.3. Resolución de una ecuación para la variable de progreso	47
3.3.1. Modelo transitorio	49
3.3.2. Modelo estacionario	56
3.4. Planteamiento de un caso reactivo con la metodología propuesta	57
3.5. Conclusiones	59
Bibliografía	60

3.1. Introducción

Dadas las nociones iniciales para un chorro de combustible Diesel, es necesario profundizar sobre las herramientas de análisis que van a ser utilizadas para llegar a los objetivos fijados. Estas herramientas son la base del proyecto sin las cuales no se podría describir el modelo.

Se utilizan dos herramientas: el modelo de spray unidimensional DICOM y la herramienta de cálculo matemático Matlab. Primero se utiliza DICOM para calibrar un caso inerte estacionario que permita calcular múltiples propiedades de los chorros Diesel. Para el caso inerte, se le introduce al programa unos ficheros de entrada tales como los flujos de momento y de masa. Una vez hechos los cálculos, el programa generará una serie de ficheros de salida de los cuales se toman dos: *Temp2.dat* y *xdata.dat*. Estos ficheros contienen información sobre la penetración del chorro que se utilizará más adelante.

El siguiente paso será desarrollar un *script* en Matlab que resuelva la ecuación para la variable de progreso que permite pasar de un estado inerte a uno reactivo. Para calibrarlo, se le introducirán datos como el tiempo final de cálculo, la discretización del chorro en número de trayectorias y el paso temporal. Generará unos valores tales como la longitud de *Lif-off* y tiempo de retraso que deberán ser validados por los datos experimentales.

Una vez calibrado, se introducirá en el *script* los ficheros previamente generados por DICOM inerte y se resolverá la ecuación de la variable de progreso. Se volverán a generar unos valores de la longitud de *Lif-off* y tiempo de retraso que serán los datos de entrada al DICOM reactivo junto con los ficheros de flujo de momento y masa. La herramienta DICOM generará unos ficheros de salida de los cuales se extraerá la penetración de un chorro y la longitud de *Lif-off* de un caso reactivo.

3.2. Descripción del modelo 1-D

DICOM es un modelo de spray unidimensional (1-D) que predice la evolución de un chorro turbulento bajo algunas hipótesis simplificadoras [4]. La base científica para el modelo se puede encontrar en la bibliografía descrita por [1-3]. La información entre los datos de entrada y salida se describen en la figura Fig. 3.1. La interfaz de usuario permite la introducción de los datos de entrada necesarios para el modelo, y también la ubicación de los datos de salida. Después del cálculo, la información de salida se escribe en archivos de texto, que luego pueden procesarse y analizarse.

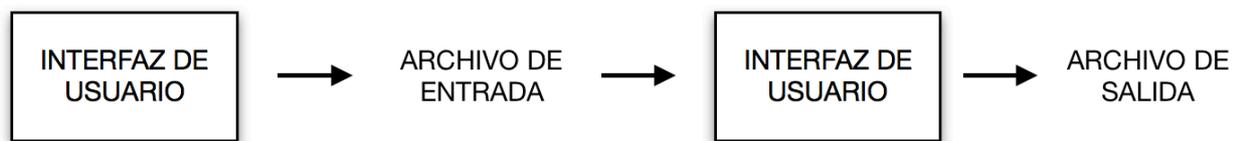


Figura 3.1: Flujo general de información en DICOM.

Los spray de combustible se inyectan a través de un orificio de la tobera en la cámara de combustión de un motor Diesel, donde se mezclan con el aire. El volumen ambiente es lo suficientemente grande para que la evolución de la pulverización no modifique las condiciones del aire lejos de la tobera.

La Fig. 3.3 muestra un boceto de la configuración básica de este tipo de problema. Se supone que el flujo de combustible tiene un perfil de velocidad espacialmente uniforme en la salida de la tobera. Este flujo intercambia impulso con el aire ambiente y lo pone en movimiento, de modo que aumenta en anchura con la distancia axial. El ángulo de expansión del cono h define este crecimiento radial y será una entrada para el modelo. Junto con el diámetro de la tobera d_0 , el ángulo del chorro define el origen virtual del spray, de modo que en la tobera salga $x = x_0 = d_0/2/\tan(\theta/2)$.

Debido a la naturaleza transitoria del problema general, el dominio de pulverización se ha dividido axialmente en un número de celdas con un cierto grosor Δx que abarca toda la sección transversal de pulverización. Cada celda está limitada por las secciones de entrada y salida (i e $i + 1$, respectivamente) de modo que $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ (Fig. 3.1). En todo momento, el tamaño de pulverización se define en términos de la penetración de punta, que es la celda más alejada de la tobera, donde la velocidad de entrada es diferente de cero y la velocidad de salida es cero.

Las ecuaciones de conservación están formuladas para cada celda. En el tipo más, las incógnitas por resolver son aquellas relacionadas con las ecuaciones de conservación, la velocidad axial u , la fracción de masa de combustible f y la entalpía h . Las siguientes hipótesis se suponen para cualquier instante instantáneo t :

- Simetría en el eje de rociado, es decir, sin remolino de aire
- Se asume un flujo turbulento completamente desarrollado Ec. 3.1:

$$\frac{u(x, r)}{u_{cl}(x)} = \left[\frac{f(x, r)}{f_{cl}(x)} \right]^{1/S_c} = \left[\frac{h(x, r) - h_{a,\infty}}{h_{cl}(x) - h_{a,\infty}} \right]^{1/P_r} = \exp \left[-k \left(\frac{r}{x} \right)^2 \right] \quad (3.1)$$

dónde u_{cl} , f_{cl} y $h_{cl} - h_{a,\infty}$ son la componente axial del vector de velocidad, la fracción de masa de combustible y la diferencia de entalpía en el eje del chorro, k es una constante y S_c y P_r son los números turbulentos de Schmidt y Prandtl, respectivamente.

- El ángulo del chorro se define como la ubicación donde el perfil de velocidad axial auto-similar es igual a $\zeta = 0.01$. De acuerdo con esto, existe una relación entre el ángulo del cono de pulverización y la constante k en los perfiles gaussianos auto-similares Ec. 3.2:

$$K = \frac{\ln(1/\zeta)}{\tan^2(\theta/2)} \quad (3.2)$$

- Se supone un flujo localmente homogéneo, es decir, existe un equilibrio local tanto en condiciones térmicas como de velocidad.
- Se supone que la presión es constante en todo el chorro y, por lo tanto, se descuidan los efectos de la compresibilidad.
- La densidad local se calcula bajo el supuesto de una mezcla ideal Ec. 3.3:

$$\rho(x, r) = \frac{1}{\sum_i \frac{Y_i(x, r)}{\rho_i(x, r)}} \quad (3.3)$$

dónde Y_i es la fracción másica de la componente i de la mezcla, y ρ_i es la densidad para el componente puro i a la temperatura local de la mezcla $T(x, r)$ y la presión P .

Por otro lado, las ecuaciones de conservación para el momento I_0 , la masa de combustible M_0 y la entalpía H_0 son las siguientes Ec. 3.4, 3.5 y 3.6:

$$I(x_i, t) - I(x_{i+1}, t) = \frac{d}{dt} \left[\int r h o(x, r, t) \cdot u(x, r, t) \cdot dV \right] \quad (3.4)$$

$$M_f(x_i, t) - M_f(x_{i+1}, t) = \frac{d}{dt} \left[\int r h o(x, r, t) \cdot f(x, r, t) \cdot dV \right] \quad (3.5)$$

$$H(x_i, t) - H(x_{i+1}, t) = \frac{d}{dt} \left[\int \rho h_o(x, r, t) \cdot (h(x, r, t) - h_{a,\infty}) \cdot dV \right] \quad (3.6)$$

Además las condiciones de contorno que se imponen en este modelo se pueden resumir de la siguiente manera:

- El momento I_0 , la masa de combustible M_0 y la entalpía H_0 fluyen en la salida de la tobera ($i = 0$). Se pueden considerarse constantes en una función del tiempo.
- El ángulo del cono de pulverización $\theta/2$ se asumirá constante con el tiempo.
- La relación entre la densidad local y las otras incógnitas debe hacerse explícita para poder resolver las ecuaciones de conservación. Esto se expresa como una función del tipo $\rho = \rho(f)$.

La Fig. 3.2 resume el procedimiento que sigue el modelo para resolver las ecuaciones. El modelo resuelve las ecuaciones de conservación para el momento axial y la masa de combustible en términos de las variables en el eje u_{cl} y f_{cl} . Para ello, la integral radial F debe calcularse de antemano. Esta función depende de f_{cl} , el número de Schmidt, el ángulo de chorro, la función de los perfiles radiales y de la densidad local. Esta última variable forma parte de las relaciones de estado, que calculan el equilibrio local a partir de las condiciones límite del problema, es decir, la composición y el estado térmico del combustible puro y el aire. Las condiciones de contorno adicionales son el momento de salida de la tobera y los flujos de masa de combustible. Si se conoce f en una posición determinada, los valores correspondientes de las propiedades termodinámicas en esa posición se pueden calcular a partir de las relaciones de estado.

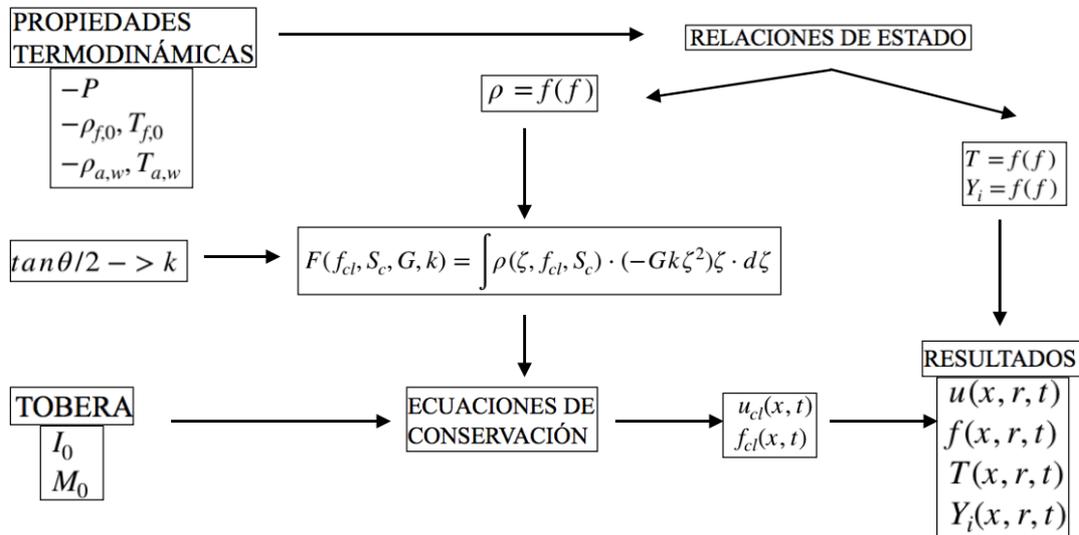


Figura 3.2 : Esquema general del modelo 1-D [10]

3.2.1. Datos de entrada y salida. Caso inerte

I. Datos de entrada

Existen diferentes pestañas que permiten la configuración de un caso por parte del usuario pero la primera distinción que utiliza el modelo para los datos de entrada es entre estas dos opciones:

1. ESTACIONARIO: En este caso, las condiciones de contorno para el desarrollo del spray son constantes con el tiempo. Esto significa parámetros de inyección de tobera de constante de tiempo y variables y composición termodinámicas de constante de tiempo, combustible y temperatura ambiente. Todos los parámetros de entrada son por lo tanto valores escalares.
2. TRANSITORIO: en este caso, todas o algunas de las condiciones de frontera mencionadas anteriormente pueden cambiar con el tiempo. En consecuencia, los datos de entrada se componen de archivos de texto que contienen la evolución temporal de estas variables.

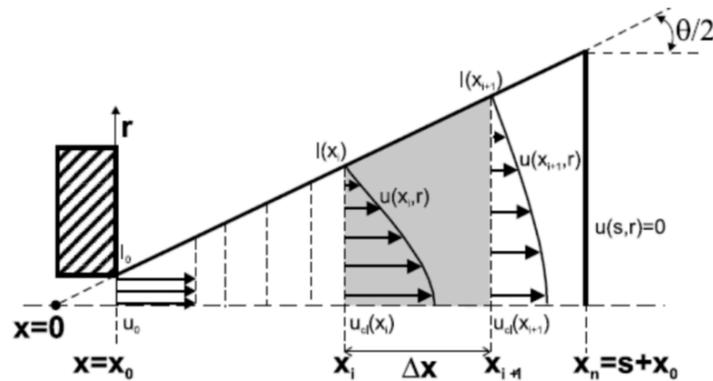


Figura 3.3: Esquema del modelo [4]

Para ambos casos, los datos de entrada van a ser los mismos. En el supuesto de un modelo estacionario los datos se obtendrán a partir de simples valores numéricos ya que son datos que no dependen con el tiempo y en el transitorio a través de ficheros de datos con las variables en función del tiempo.

Específicamente, la interfaz permitirá incluir los siguientes datos de entrada y para explicarlos se tomará la Fig. 3.3 como base:

1. *Numerics*: introducir el tamaño máximo del dominio de cálculo en términos de distancia axial de pulverización. Aumentar la discretización espacial en la dirección axial Δx , la cual define el tamaño de la celda y la resolución espacial correspondiente. Aumentar la fracción másica para las relaciones estatales. Aumentar la fracción másica para tablas integrales. Limitar la convergencia para la iteración de los cálculos.

2. *Morphology*: aquí se introducen algunos parámetros que definen la morfología del spray; el valor numérico que define el límite radial del spray en términos de una fracción de la velocidad en el eje, el número de Schmidt está en la proporción de la difusividad del momento y la masa, la apertura del chorro (singular o doble) y el perfil radial (exponencial, Spalding, Hinze o Schlichting).
3. *Injection rate*: Introducción de la información de inyección, se pueden considerar dos enfoques, "entrada directa" donde el usuario proporciona flujos de momento y de masa, y "entrada derivada", donde el usuario da el flujo másico, y el flujo de momento se calcula a partir del flujo másico y una velocidad efectiva derivada de las entradas del usuario del coeficiente de velocidad y la caída de presión de inyección. Respecto a los archivos o datos que se introducen en la entrada directa son: el flujo de momento del orificio de inyección $[N]$, el flujo de masa del orificio de inyección $[kg/s]$ y el diámetro nominal del orificio de inyección $[m]$.
4. *Mixing law*: Definición de la densidad local y el tipo de flujo de chorro/spray que se calcula para ello se consideran tres casos: chorro isoterma: la densidad local es el resultado de la mezcla isotérmica de combustible puro y aire puro. Chorro gaseoso inerte/reactivo: la densidad local se calcula mediante una ley de gas ideal incompresible y spray inerte/reactivo: la densidad local se calcula mediante una mezcla de fase líquida y gaseosa, mediante ecuación de estado de gas real. En este apartado se fijan también las propiedades y la temperatura del combustible, el comienzo del tiempo de combustión.

II. Datos de salida

Todos los archivos de salida se escriben en la dirección introducida en la interfaz. DICOM calcula cinco tipos de archivos:

1. *Relst.dat*: Este archivo contiene el cálculo de las relaciones de estado para el modelo de spray. La primera columna incluye la fracción de mezcla, y las otras incluyen variables termodinámicas como la densidad y la temperatura junto con la composición local en términos de fracción de masa. Este archivo se escribe una vez para el cálculo constante, mientras que se puede calcular en diferentes instantes de tiempo en el caso transitorio.
2. *Integ.dat*: Este archivo incluye los resultados del cálculo de integrales radiales en función de la fracción de mezcla en la línea central de la pulverización f_{cl} . Se guardan dos tipos de integrales: las de densidad y las de las especies, que están relacionadas con la acumulación radial de cierta especie i . Las integrales de densidad siempre se registran, mientras que las integrales de especies dependen de la ley de mezcla.
3. *Temp1.dat*: DICOM calcula con un pequeño paso de tiempo dependiendo de las consideraciones de discretización discutidas previamente. Este archivo registra la evolución temporal de las condiciones de contorno para el problema del spray. Algunas de las variables que incluye son: el tiempo $t[s]$, el flujo de momento $M0[kg/s]$, el flujo de masa $I0[N]$ y la velocidad efectiva de inyección $u0[m/s]$ en la salida de la tobera, la densidad del aire ambiente dentro de la cámara donde se inyecta el aerosol $\rho_a[kg/m^3]$.

4. Temp2.dat: Este archivo registra la evolución temporal de los principales resultados del modelo en términos de parámetros globales. El formato del archivo es exactamente el mismo para las formulaciones modelo estables y transitorias. El archivo tiene exactamente la misma estructura que temp1.dat, es decir, una columna de tiempo seguida de varias columnas con diferentes variables, de entre las cuales destacan las siguientes: la penetración máxima de la punta del chorro $S[m]$, el *Lift-off* basado en la entrada f_{LOL} , LOL , la integral de la masa de combustible m_{fsq} , la de la masa de combustible quemado m_{fq} , la de las especies características (O_2 , H_2O y CO_2) en todo el spray m_{O_2} , m_{H_2O} y m_{CO_2} .
5. xdata.dat: Este archivo incluye, durante un cierto instante de tiempo, la evolución a lo largo del eje de pulverización de las siguientes variables: la componente axial del vector de velocidad en el eje $u_{cl}[m/s]$, el flujo de momento integrado de manera directa $Mf[kg/s]$, el flujo de masa de combustible integrado principalmente $M[kg/s]$.

3.2.2. Datos de entrada. Caso reactivo

El caso reactivo se ejecuta de la misma manera que un caso inerte pero además necesita la fracción de mezcla en el eje $f_{cl_{LOL}}$ y el tiempo de retraso t_{soc} :

1. t_{soc} : el primer instante de tiempo dónde la máxima temperatura sea mayor que la temperatura de ignición.
2. $f_{cl_{LOL}}$: fracción de mezcla en ese instante a la distancia más pequeña y extrapolado a la línea que define el eje x

Para poder generar estos valores de entrada se tiene que incluir los ficheros generados por el modelo 1-D DICOM inerte $xdata.dat$ y $Temp2.dat$ en el *script* transitorio de Matlab de modo que cada valor del tiempo de retraso y de la fracción de mezcla en el eje se corresponda con el caso que se quiera calcular.

3.3. Resolución de una ecuación para la variable de progreso

El objetivo de este apartado es describir el planteamiento que se ha hecho para resolver la ecuación de transporte de la variable de progreso en el chorro. Dicha variable permite pasas de un estado inerte a un estado reactivo, con lo que gracias a ella se va a poder obtener un tiempo de retraso y una longitud de *Lift-off* de forma totalmente predictiva. Anteriormente ambas variables eran un dato de entrada de los cálculos en reactivo que se introducían en base a la comparación con los datos experimentales. Con el planteamiento aquí introducido, se resuelve a priori la ecuación de transporte de la variable de progreso que permite obtener ambos parámetros.

El primer paso para entender como se modela un chorro es representarlo dividido por trayectorias rectilíneas que transcurren a una distancia relativa del radio del chorro constante. Para ello, se divide la sección del chorro en un número de intervalos desde el eje hasta el radio exterior $R(x)$, y se asume que una trayectoria transcurre a una distancia radial $r/R(x)$ constante. La Fig. 3.6 muestra un ejemplo de esta discretización.

El segundo paso es establecer un sistema de cálculo celda a celda, esto es: cada punto de la trayectoria se define con las coordenadas axiales x y radiales r . Si se establece que en la celda el primer punto que se corresponde con el eje x es $i - 1$ y el segundo es i y el primer punto que se corresponde con el eje r es $k - 1$ y el segundo es k , ya se tiene los cuatro puntos que representan una celda. Estos cuatro puntos forman un volumen de control. Puesto que se realiza un cálculo en dirección x y r crecientes, dado un punto (x_i, r_k) se conocen ya los valores de la variable de progreso en los puntos $(i - 1, k - 1)$, $(i, k - 1)$ y $(i - 1, k)$.

Por lo tanto el único punto desconocido es el (i, k) , y en toda la celda se resolverán las ecuaciones de conservación. Este será el problema a resolver por el método para así poder calcular la temperatura, las especies, la fracción másica....

Los términos de $Y_{C_{inert}}$ e $Y_{C_{steady}}$ representan la variable de progreso en el chorro en ambos extremos del eje C , siendo el valor de $Y_{C_{inert}}$ el valor máximo y $Y_{C_{steady}}$ el valor mínimo y se corresponden con unos valores que vienen de la interpolación de la fracción de mezcla, de las propias $Y_{C_{inert}}$ e $Y_{C_{steady}}$ y de z que es un escalar que depende de la difusión y la convección.

Se puede apreciar en la siguiente figura Fig. 3.4 el planteamiento previamente explicado de como se discretiza un chorro de combustible Diesel:

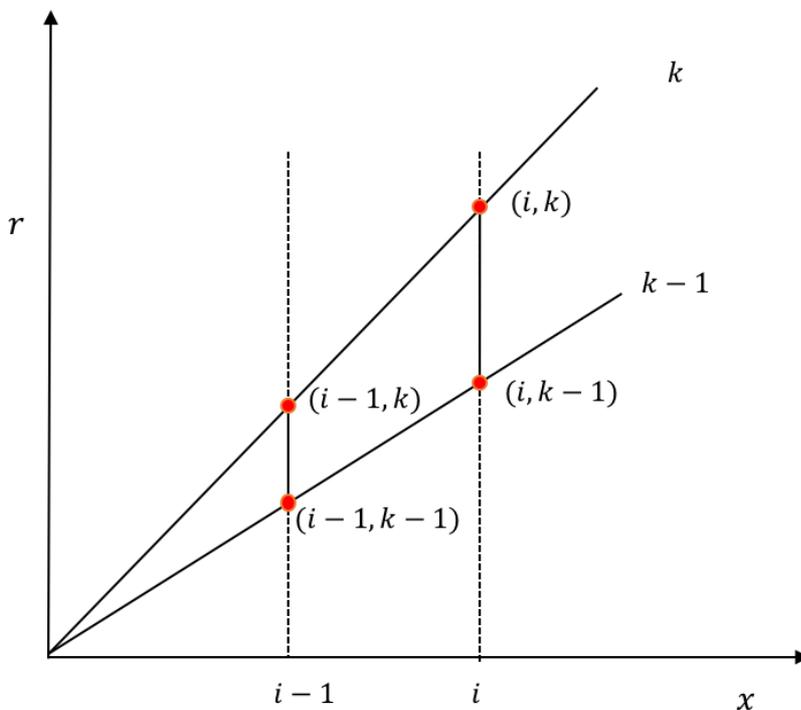


Figura 3.4: Discretización celda a celda del chorro de combustible Diesel

Las líneas continuas que se aprecian en la Fig. 3.4 son líneas de corriente (trayectorias del modelo). Éstas permiten la transmisión de la difusión de las especies, de la temperatura, del término fuente, del término de conservación ... en la misma línea, sin embargo, esta difusión no se realiza de una a otra línea de corriente.

El estudio del chorro Diesel comienza planteando la ecuación de conservación variable de progreso (Y_c) Ec. 3.7:

$$\frac{\Delta}{\Delta t} \int (\rho \cdot Y_c) dV + \int (\rho \cdot u \cdot Y_c) dA - \int w_c dV = 0 \quad (3.7)$$

dónde ρ es la densidad, Y_c es la variable de progreso, u es la velocidad de salida de la tobera y w_c es el término fuente.

El primer término de la ecuación representa el término transitorio y es una integral de volumen, el segundo término representa el transporte conectivo y es una integral de área que implica que hay un flujo de cantidad masa saliente y uno entrante y el tercero representa el término fuente de la variable de progreso.

Para resolver las tres integrales de la ecuación se establece el siguiente procedimiento:

- Se resuelve el problema de izquierda a derecha y de abajo a arriba por celdas
- El primer punto de cálculo en el eje x es $i - 1$ y el último i
- El primer punto de cálculo en el eje r es $k - 1$ y el último k
- Se establece una división por celdas en el que el único punto que no se conoce es (i, k)
- Se conocen los valores en $(i - 1, k - 1)$, $(i - 1, k)$ e $(i, k - 1)$
- Se utiliza el método del trapecio para aproximar las integrales

3.3.1. Modelo transitorio

El término que se corresponde con la dependencia respecto al tiempo de la ecuación Ec. 3.7 $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)$ es diferente de 0 ($\neq 0$) y por tanto para este caso si lo tendremos en cuenta, quedando la ecuación final a resolver tal como la Ec. 3.7. El primer y segundo término de la ecuación del modelo estacionario pasarán a ser el segundo y el tercero respectivamente y el primero será ahora una integral de volumen.

I. Término de derivada temporal:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \cdot \pi \cdot \left[\frac{\Delta r}{2} \cdot (\rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}) + 0.5 \cdot \Delta r \cdot (\rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}) \right] - \frac{Int Y_{cant}}{\Delta t}$$

dónde:

$$mY_c(i, k) = 0.5 \cdot \Delta r \cdot (\rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1})$$

$$IntY_{cant} = \pi \cdot \Delta x (mY_c(i, k) + mY_c(i - 1, k))$$

Por lo que utilizando estas simplificaciones el término queda de la siguiente manera:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \cdot \pi \left[\frac{\Delta r}{2} \cdot (\rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}) + mY_c(i - 1, k) \right] - \frac{IntY_{cant}}{\Delta t}$$

II. Término de flujo de entrada / salida:

$$\dot{m}_{y_{c_i}} = \frac{\partial}{\partial x} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left[\int_{r_{i-1}S}^{r_k} \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot \Delta A - \int_{r_{k-1}E}^{r_i} \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot \Delta A \right] \quad (3.8)$$

desarrollándolo, Ec. 3.9:

$$\int_{r_{k-1}}^{r_k} \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot 2\pi \cdot r_k \cdot dr \approx 2\pi\Delta r \left(\frac{\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}}{2} \right) \quad (3.9)$$

Estableciendo el salida menos el de entrada:

$$2\pi\Delta r \left(\frac{\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}}{2} \right) - 2\pi\Delta r \left(\frac{\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i-1,k} + \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i-1,k-1}}{2} \right)$$

Operando en ambos lados de la ecuación Ec. 3.10:

$$\dot{m}_{y_{c_i}} = 0.5\pi\Delta r (\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}) - \pi\Delta r (\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i-1,k} + \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i-1,k-1}) \quad (3.10)$$

dónde el término $\Delta r (\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k} + \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r_k |_{i,k-1}) = m\dot{Y}_c |_{i,k}$

III. Término fuente:

$$SOURCE = \iiint \dot{w} \cdot \Delta V \quad (3.11)$$

sabiendo que: $\Delta A = 2 \cdot \pi \cdot r_k \cdot dr$ y $\Delta V = 2 \cdot \pi \cdot r_k \cdot dr \cdot dx$

desarrollando la ecuación, Ec. 3.12:

$$\dot{w}_c \Delta V = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{r_{k-1}}^{r_k} \dot{w}_c \cdot 2\pi \cdot r \cdot dx \cdot dr = 2\pi \Delta x \left(\frac{\int_{r_{k-1}}^{r_k} \dot{w}_c \cdot r \cdot dr |_i + \int_{r_{k-1}}^{r_k} \dot{w}_c \cdot r \cdot dr |_{i-1}}{2} \right) \quad (3.12)$$

dónde $m_{w_c}(i, k) = 0.5\Delta r(w_c \cdot r |_{i,k} + w_c \cdot r |_{i,k-1})$ por lo que el término SOURCE (término fuente) quedaría de la siguiente manera Ec. 3.15:

$$SOURCE = \pi \Delta x (m_{w_c} |_{i,k} + m_{w_c} |_{i-1,k}) \quad (3.15)$$

Reagrupando los términos, la ecuación de conservación a resolver por el modelo transitorio es la siguiente Ec. 3.16:

$$\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k} + \pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k-1} - 2\pi \cdot m \dot{Y}_c |_{i,k} - SOURCE = 0 \quad (3.16)$$

Reagrupando los términos en función de la fórmula $fY_c = A_c \cdot Y_c \cdot u(i, k) + B_c \cdot Y_c + C_c$, donde fY_c será el error de la ecuación $Y_c + \frac{B \cdot Y_c + C_c}{A_c \cdot u} = 0$ se obtiene la siguiente información:

1. El término A_c se corresponde con los valores que hayan en la celda (i, k) , por tanto:

$$A_c = \pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot rk |_{i,k}$$

2. El término B_c se corresponde con los valores que únicamente multipliquen al término Y_c sin el término de la velocidad como en el caso de A_c :

$$B_c = \frac{\Delta x}{2 \cdot \Delta t} (\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot rk |_{i,k})$$

3. El término C_c se corresponde con el resto valores en el resto de la celda y en el caso del transitorio es la suma del término estacionario $C_{c_{steady}}$ más las variables restantes:

$$C_c = C_{c_{steady}} + \frac{\Delta x}{2 \cdot \Delta t} (\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k-1}) + \frac{\Delta x}{\Delta t} \cdot \pi \cdot m Y_c(i-1, k) - \frac{intVY_{cant}(i, k)}{\Delta t}$$

siendo $C_{c_{steady}}$:

$$C_{c_{steady}} = \pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k-1} - 2 \cdot \pi \cdot m \dot{Y}_c \cdot Y_c |_{i-1,k} - SOURCE$$

Para poder resolver la ecuación, en primer lugar se tiene que evaluar las celdas de izquierda a derecha es decir, en todo el eje x , y en segundo lugar de abajo hacia arriba en el eje r . Se ha mostrado en capítulos anteriores, los dos métodos de resolución matemática para nuestros modelos: el método matemático explícito y el implícito.

Los métodos explícitos calculan el estado de un sistema de un momento posterior a partir del estado del sistema del momento actual, mientras que los métodos implícitos encuentran una solución al resolver una ecuación que involucra tanto el estado actual del sistema como el posterior.

Matemáticamente, si $Y(t)$ es el estado actual del sistema y $Y(t + \Delta t)$ es el estado en el momento posterior (Δt es un pequeño paso de tiempo), el método explícito sería Ec. 3.16:

$$Y(t + \Delta t) = F(Y(t)) \quad (3.16)$$

mientras que para el implícito sería Ec. 3.17:

$$G(Y(t), Y(t\Delta t)) = 0 \quad (3.17)$$

Está claro que los métodos implícitos requieren un cálculo adicional (como supone resolver la ecuación anterior Ec. 3.17) y pueden ser mucho más difíciles de implementar. Los métodos implícitos se usan porque muchos de los problemas que surgen en la práctica son rígidos, para lo cual el uso de un método explícito requiere pasos de tiempo Δt poco prácticos para mantener el error en el resultado limitado (Δt muy pequeños).

En estos problemas, para lograr la precisión dada, se necesitaría mucho menos tiempo de computación si se usara un método implícito ya que utiliza pasos de tiempo más grandes, incluso teniendo en cuenta que uno necesita resolver una ecuación de la forma Ec. 3.17 en cada paso de tiempo. Dicho esto, si uno debe usar un método explícito o implícito depende del problema que se va a resolver.

Detallando los pasos del método implícito:

1. Establecer un rango en el eje x : el mínimo será ($C_0 = 0$) y el máximo ($C_1 = 1$) que se corresponden con $C_0 \gg Y_{c_0}$ y $C_1 \gg Y_{c_1}$
2. Resolución de la ecuación: $fY_c = Y_c + \frac{Cc}{A_c \cdot u(i, k) + B_c}$ en ambos extremos
3. Obtención de los residuos fY_{c_0} y fY_{c_1}
4. Se traza una recta que una ambos valores donde corte en el eje C será el nuevo punto de estudio
5. Sí no corta dentro de los límites establecidos en el eje C , los valores no están dentro de las tablas
6. Volver a evaluar los puntos 2, 3 y 4 sucesivamente hasta que el valor de la función residuo baje de un determinado valor

Profundizando en el método de resolución descrito, se obtiene un caso dónde la solución si está dentro de los límites y uno en el que no:

1^{er} caso:

Si $fY_{C_0} \cdot fY_{C_1} < 0$ hay solución aparente, el valor de corte en el eje x está dentro de la tabla que tiene los valores de Y_c y C . Por lo que se busca una solución.

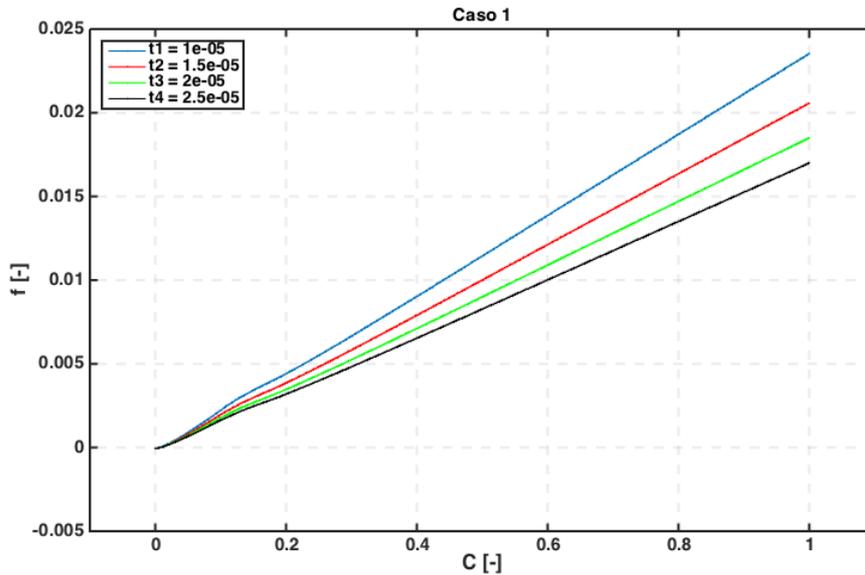


Figura 3.5: Soluciones dentro de los límites

Haciendo zoom sobre la zona donde fY_c se hace 0, Fig. 3.6 se observa donde corta este valor en el eje C . El punto de corte se sitúa en $(7e - 03,0)$.

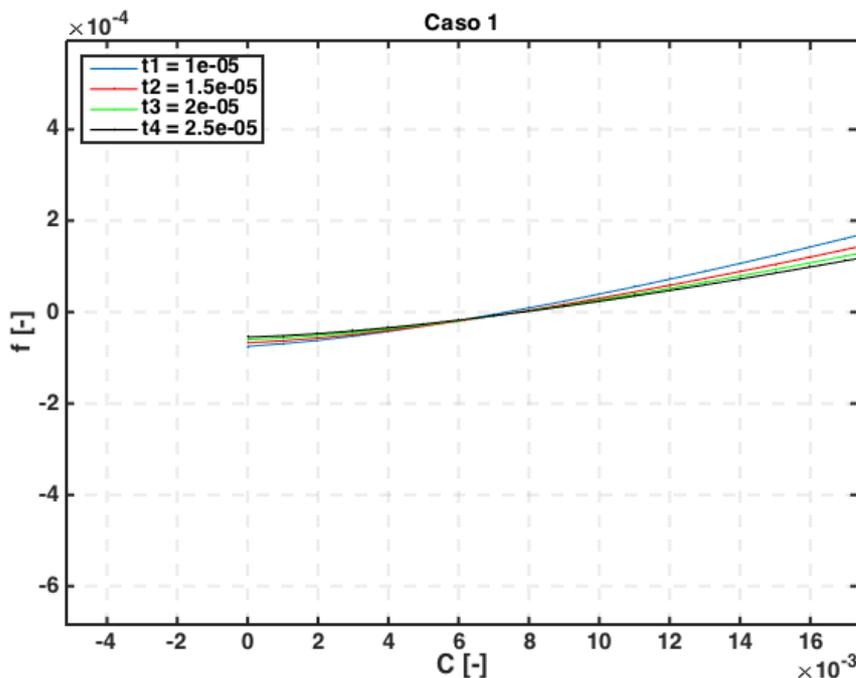


Figura 3.6: Zoom sobre el punto de corte en el eje C

2º caso:

Si $fY_{c_0} \cdot fY_{c_1} > 0$ no hay solución aparente, el valor de corte en el eje está fuera de la tabla que tiene los valores de Y_c y C . Es importante conocer por que extremo del eje sobresale el valor. Si lo hace por la parte izquierda $C = 0$ y $Y_{c_{steady}}$ y si lo hace por la parte derecha $C = 1$ y $Y_{c_{inert}}$.

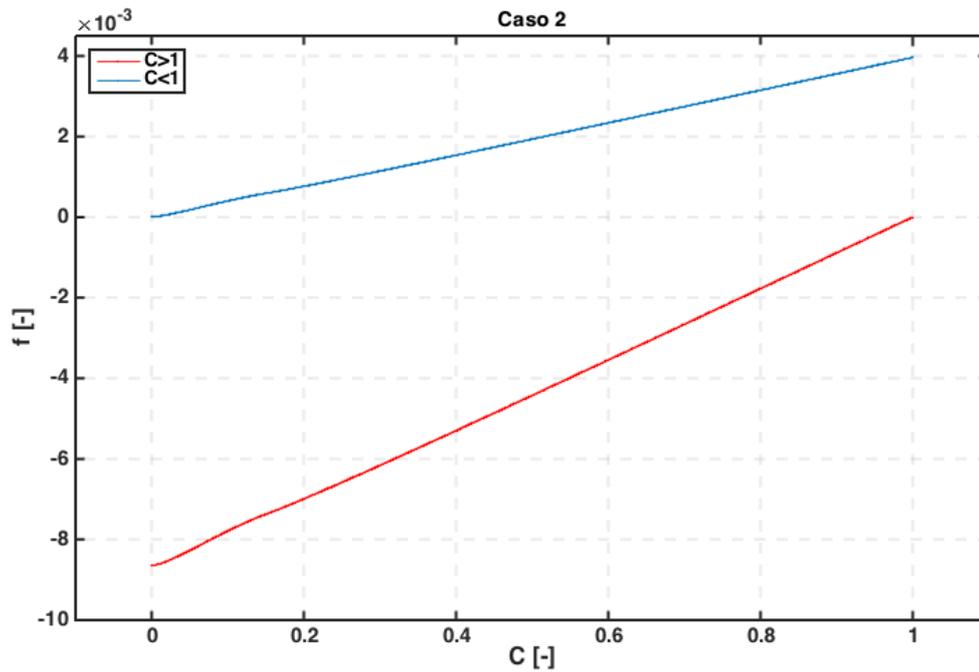


Figura 3.7: Soluciones fuera de los límites

En este caso se observan dos resultados: el primero corresponde cuando la solución está fuera de los límites del eje por la derecha es decir, $C > 1$ Fig. 3.8 y el segundo resultado se asocia a la solución fuera de los límites por el lado izquierdo, es decir, $C < 0$ Fig. 3.9.

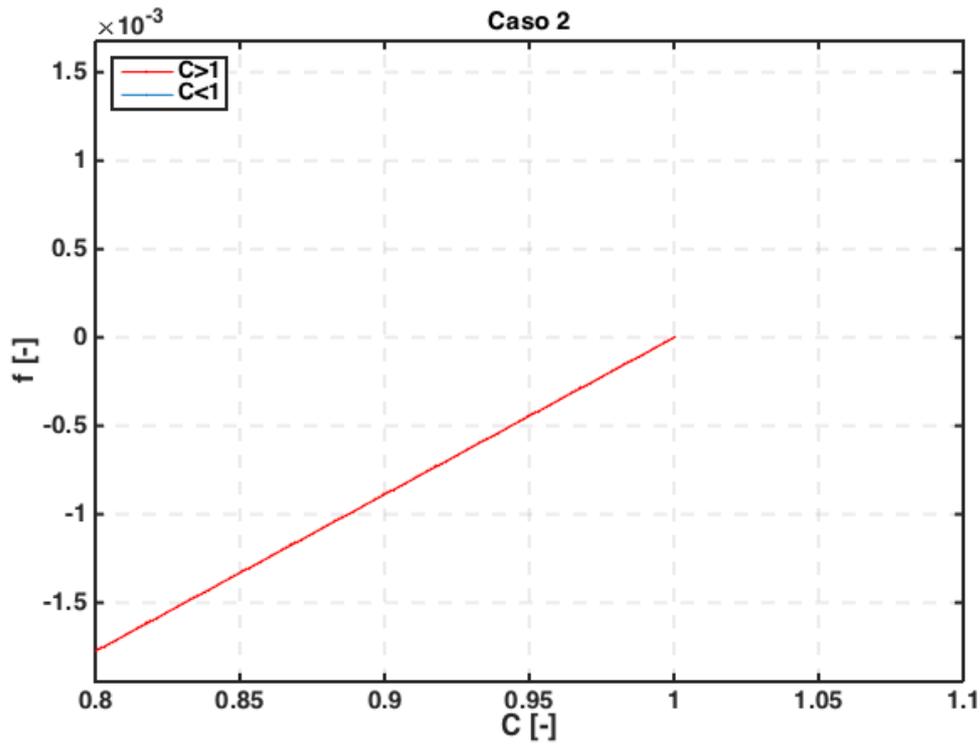


Figura 3.8: Zoom sobre la solución fuera del límite por la derecha

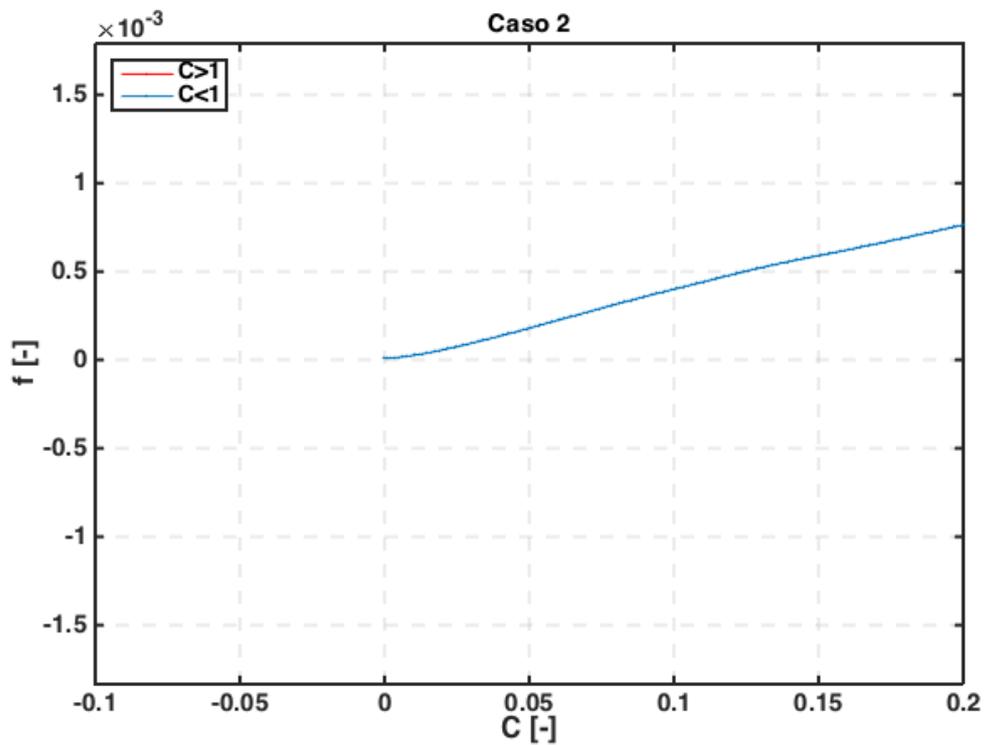


Figura 3.9: Zoom sobre la solución fuera del límite por la izquierda

En cuanto al método matemático explícito, los cálculos son más sencillos:

1. Cálculo de Y_c en cada punto (i, k) de las celdas
2. Si $Y_c(i, k) > Y_{c_{steady}}(i, k)$ entonces $Y_c(i, k) = Y_{c_{steady}}(i, k)$
3. Si $Y_c(i, k) > Y_{c_{inert}}(i, k)$ entonces $Y_c(i, k) = Y_{c_{inert}}(i, k)$
4. Con la nueva $Y_c(i, k)$ obtenida se calcula C : $C(i, k) = \frac{Y_c(i, k) - Y_{c_{inert}}(i, k)}{Y_{c_{steady}}(i, k) - Y_{c_{inert}}(i, k)}$

3.3.2. Modelo estacionario

Como se ha visto, el primer término de la Ec. 3.7; el término dependiente del tiempo, desaparece $\left(\frac{\partial}{\partial t} = 0\right)$ para este modelo por lo que la ecuación para el modelo estacionario quedaría de la siguiente manera Ec. 3.18:

$$\frac{\partial(\rho \cdot u \cdot Y_c)}{\partial x} = \dot{w}_c \quad (3.18)$$

Ambos términos son los mismos que en el modelo transitorio por lo que no hace falta detallarlos. De esta manera, el modelo estacionario sin el término dependiente del tiempo quedaría así:

$$\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k} + \pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k-1} - 2\pi \cdot m\dot{Y}_c |_{i,k} - SOURCE = 0 \quad (3.19)$$

Reagrupando los términos en función de la fórmula $fY_c = A_c \cdot Y_c \cdot u(i, k) + C_{c_{steady}}$, donde fY_c será el error de la ecuación $Y_c + \frac{B \cdot Y_c + C_c}{A_c \cdot u} = 0$ se obtiene la siguiente información:

1. El término A_c se corresponde con los valores que hayan en la celda (i, k) , por tanto:

$$A_c = \pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot rk |_{i,k}$$

2. El término C_c se corresponde con el resto valores en el resto de la celda y en el caso del estacionario se le llamará $C_{c_{steady}}$:

$$C_{c_{steady}} = \pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot rk |_{i,k-1} - 2 \cdot \pi \cdot m\dot{Y}_c \cdot Y_c |_{i-1,k} - SOURCE$$

La fórmula en ambos extremos del método es así:

$$fY_{c_1} = Y_{c_1} + \frac{C_{c_{steady}}}{A_c \cdot u(i, k)}$$
$$fY_{c_0} = Y_{c_0} + \frac{C_{c_{steady}}}{A_c \cdot u(i, k)}$$

3.4. Planteamiento de un caso reactivo con la metodología propuesta

El caso reactivo se ejecuta de la misma manera que un caso inerte pero además necesita la fracción de mezcla en el eje $fc_{l_{LOL}}$ y el tiempo de retraso t_{soc} . Para poder generar estos valores de entrada se tiene que incluir los ficheros generados por el modelo 1-D DICOM inerte $xdata.dat$ y $Temp2.dat$ en el *script* transitorio de modo que los ficheros que lea este código sean datos válidos. Según la temperatura, densidad, presión y combustible se tomaran unos ficheros u otros.

Este *script* calculará los valores necesarios para generar un modelo 1-D reactivo: la longitud de *Lift-off* y la fracción de mezcla en el eje $fc_{l_{LOL}}$. El programa DICOM solicitará estos valores en una de sus pestañas y se introducirán manualmente. Para poder calcular estos valores primero hay que Saer como se calculan y describir que son.

Se define una temperatura de ignición que es la temperatura ambiente más $400K$. En el caso de que se esté en una llama cuya temperatura ambiente sea $800K$ la $t_{ignicion} = 1200K$. Sí la llama tiene una temperatura ambiente de $900K$ la $t_{ignicion} = 1300K$.

A partir de esta temperatura de ignición se define el tiempo de inicio de combustión t_{soc} como el primer instante de tiempo dónde la máxima temperatura sea mayor que la temperatura de ignición.

A partir de este instante de tiempo se empieza a calcular el $xLOL$ (*Lift-off length*) y se tomará el valor de la longitud cuando esta esté estable avanzado un cierto tiempo y sea la más pequeña y la más cercana a la tobera en el eje x . En ese mismo instante también se calcula la fracción de mezcla en el mismo eje, $fc_{l_{LOL}}$, que es la fracción de mezcla en ese instante a la distancia más pequeña y extrapolado a la línea que define el eje x . En la Fig. 3.10 los círculos redondos rojos marcan el lugar en el que se estabiliza la longitud.

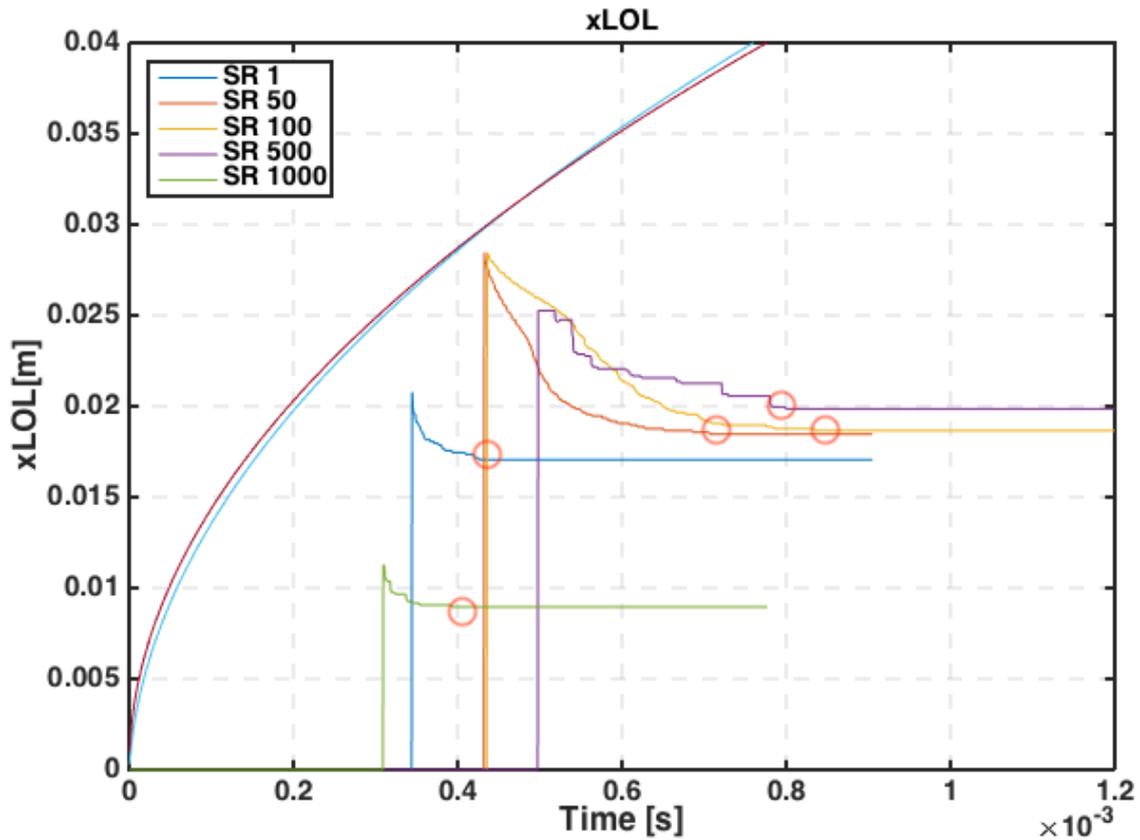


Figura 3.10: Valor estable del xLOL

El caso reactivo genera unos ficheros de los cuales se extrae el valor de la penetración S y de la longitud de *Lift-off* en función del tiempo. Estos valores se comparan con los datos experimentales para poder validarlos. La Fig. 3.11 muestra el proceso que se sigue para obtener un caso reactivo.

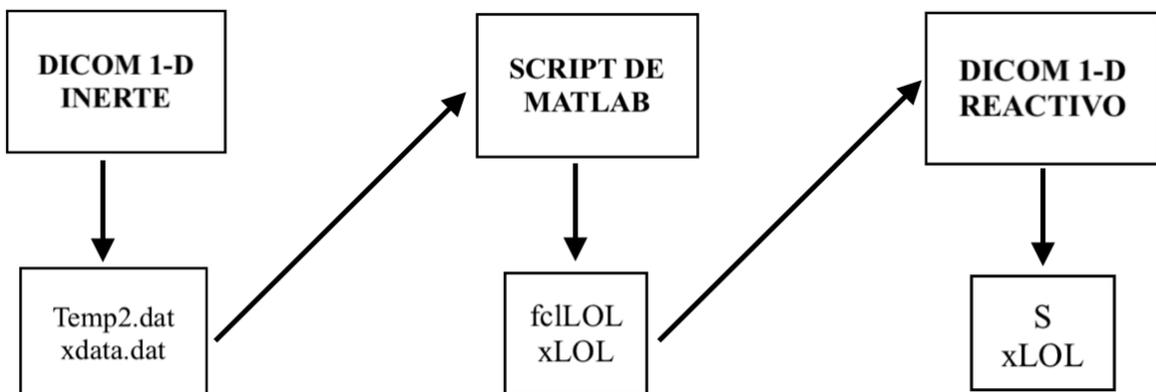


Figura 3.11: Datos de entrada del Caso Reactivo

3.5. Conclusiones

En este Capítulo se han desarrollado dos modelos, uno estacionario y uno transitorio, capaces de predecir la longitud de *Lift-off* y el tiempo de retraso. Se han presentado las ecuaciones que gobiernan cada modelo y la metodología que se utiliza para conseguir los resultados.

Para ello se ha introducido el modelo DICOM para chorros en 1-D. Este modelo permite calcular bastantes propiedades de un chorro Diesel como son la velocidad, la temperatura, la densidad, el momento, la fracción másica.... Asimismo, se han explicado las ecuaciones de conservación planteadas para cada celda, de donde las incógnitas a resolver son la velocidad axial u , la fracción másica del combustible f y la entalpía h , las hipótesis asumidas para cada instante de tiempo t . Por último, se ha explicado la interfaz de usuario de DICOM, qué entradas necesita y qué salidas genera.

Por otro lado, se ha desarrollado las ecuaciones que gobiernan los modelos estacionario y transitorio. Se ha expuesto la metodología que utiliza para conseguir sus cálculos y se han resumido los aspectos prácticos más relevantes que se han encontrado en el desarrollo de ambos modelos.

Finalmente, con todos los datos ya calculados se procede a implementar el modelo DICOM reactivo. Una vez realizado el proceso como se ha explicado en el apartado anterior, se comparan los resultados con los experimentales.

Se puede concluir que se ha conseguido un modelo transitorio que reproduce aceptablemente el comportamiento de un chorro Diesel no estacionario. Los tiempos de cálculo conseguidos dependen de las variables numéricas, no obstante, se ha conseguido reducirlo gracias a los métodos previamente expuestos. Utilizar este modelo supone reducir el coste computacional en tiempo respecto al modelo del CFD por lo que uno de los objetivos ya está resuelto, aunque se han asumido algunas simplificaciones. Esto supone un gran avance y una ventaja enorme.

En el siguiente Capítulo se muestran los resultados y las validaciones obtenidas por el código y se podrá comprobar lo expuesto anteriormente.

Bibliografía

- [1] Pastor J.V., López J.J., García-Oliver J.M., Pastor J.M., *A 1D model for the description of mixing- controlled inert diesel sprays*. Fuel 87 (2008) 2871-2885
- [2] Desantes J.M., Pastor J.V., García-Oliver J.M., Pastor J.M., *A 1D model for the description of mixing-controlled reacting diesel sprays*. Combustion and Flame 156 (2009) 234–249
- [3] Pastor, J., Payri, R., García-Oliver, J., and Nerva, J., *Schlieren Measurements of the ECN-Spray A Penetration under Inert and Reacting Conditions*. SAE Technical Paper 2012-01-0456, 2012
- [4] García-Oliver J.M, Vera-Tudela W., *Dicom V6.3 user manual*. 2015
- [5] Payri, Raul and Viera, Juan P and Gopalakrishnan, Venkatesh and Szymkowicz, Patrick G. (2017) *The effect of nozzle geometry over the evaporative spray formation for three different fuels*. Elsevier vol. 188, pp. 645-660
- [6] Meijer M, Somers B, Johnson J, Naber J, Lee S-Y, Malbec LM, et al. *Engine combustion network (ECN): characterization and comparison of boundary conditions for different combustion vessels*. Atom Sprays 2012;22 (9):777–806
- [7] Payri R, Salvador FJ, Gimeno J, Bracho G. *A new methodology for correcting the signal cumulative phenomenon on injection rate measurements*. Exp Tech 2008;32(1):46–9
- [8] Payri R, Gimeno J, Viera JP, Plazas AH. *Needle lift profile influence on the vapor phase penetration for a prototype diesel direct acting piezoelectric injector*. Fuel 2013;113(0):257–65
- [9] J.M. Desantes, J.M. García-Oliver , T. Xuan , W. Vera-Tudela. *A study on tip penetration velocity and radial expansion of reacting diesel sprays with different fuels*. Fuel Volume 207, 1 November 2017, Pages 323-335
- [10] Pastor J.V., López J.J., García-Oliver J.M., Pastor J.M. *A 1D model for the description of mixing-controlled inert diesel sprays*. Fuel 87 (2008) 2871–2885

Capítulo 4

Resultados y validación del modelo

Contenido

4.1. Introducción	61
4.2. Configuración experimental	62
4.3. Resultados del modelo inerte	63
4.4. Puesta a punto del script para la resolución de la variable de progreso	75
4.4.1. Cálculos del tiempo de retraso y $xLOL$ a partir de la ecuación de transporte de la variable de progreso	83
4.4.2. Cálculo del modelo completo reactivo	86
4.4. Conclusiones	90
Bibliografía	91

4.1. Introducción

Una vez detallados los diferentes modelos en el Capítulo anterior, en este se muestran los resultados obtenidos para cada uno de los casos que se van a exponer.

El Capítulo se estructura de la siguiente manera:

En primer lugar se presenta la instalación experimental en la que se han realizado los experimentos de validación del modelo. Esta base de datos estaba disponible al inicio del presente trabajo. De hecho, el primer trabajo presentado por el modelo consiste en una validación de modelo en condiciones inertes [9].

Seguidamente se presenta los resultados de la penetración del chorro de combustible Diésel obtenidos con el modelo 1-D DICOM. Cada curva en las figuras presentadas presentará tanto la penetración líquida como la de vapor. Se mostrarán las diferencias halladas con los resultados experimentales tanto en el caso de un modelo estacionario como en el de uno transitorio.

A continuación se analizarán los resultados del caso reactivo. Primero se presenta un análisis de la resolución de la ecuación de transporte de la variable de progreso por medio de los scripts de Matlab.

El algoritmo ha sido explicado en detalle en el Capítulo 3, y aquí el análisis se centra en presentar la evolución espacial de temperatura y especies. Se prestará especial atención a los valores de tiempo de retraso y longitud de *Lift-off* obtenidos según la variable física del modelo, la *strain rate*.

Finalmente, para algunos casos de n-Dodecano en ambiente reactivo, se ha realizado una simulación completa, esto es, se ha lanzado el *script* para predecir $xLOL$ y t_{soc} , y posteriormente se ha lanzado una simulación para dichos casos, presentes en la base de datos experimental, para validar los resultados obtenidos. No se ha analizado otros combustibles por no disponer de tablas tipo *flamelet* para los mismos.

Finalmente, se expondrán las conclusiones obtenidas para cada uno de los modelos.

4.2. Configuración experimental

Para poder dar por válidos los resultados obtenidos usando este método es necesario compararlos con los valores obtenidos experimentalmente y por ello esta sección se utilizará para comentar básicamente cual es la configuración experimental y con que medios han obtenido sendos resultados [5].

Todos los experimentos de visualización se realizaron en una cámara de prueba de flujo de presión constante, capaz de imitar las condiciones termodinámicas en el cilindro de un motor Diesel en el momento de la inyección. Este equipo de prueba presenta la capacidad única de obtener casi inactivo y, en comparación con otras instalaciones, como cámaras de volumen constantes [6], condiciones termodinámicas constantes dentro de la cámara.

Se utiliza un sistema de inyección de riel común que consiste en una bomba de alta presión y un riel convencional con un regulador de presión electrónico. Este sistema puede generar presiones ferroviarias relativamente altas de hasta 220 Mpa y mantenerlo en el valor establecido al inyectar combustible.

La temperatura del cuerpo del inyector se mantiene cerca de 343 K utilizando un soporte especial para inyector diseñado para que el refrigerante fluya a una temperatura controlada en contacto directo con el cuerpo del inyector, como se muestra en la Fig. 4.1.

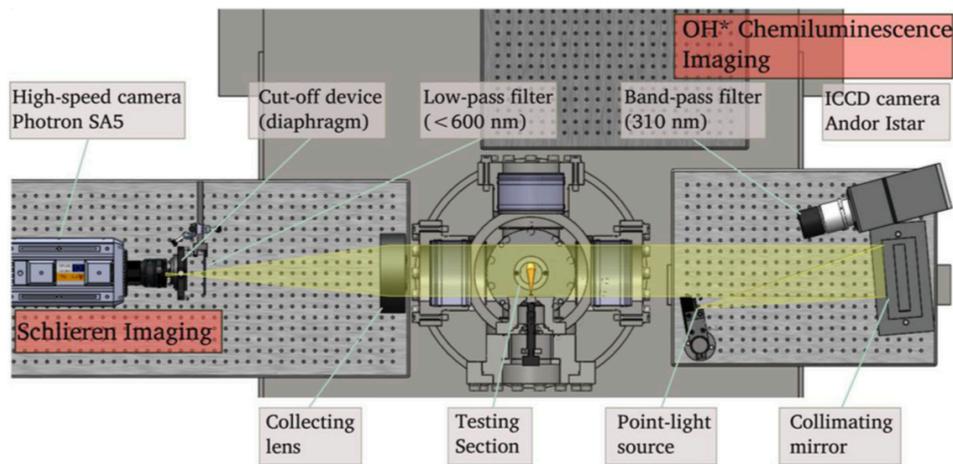


Figura 4.1: Diseño experimental para mediciones de referencia [9]

Las mediciones de la tasa de inyección se llevaron a cabo en un indicador de curva de descarga de velocidad de inyección estándar [7]. Para obtener una buena estimación del comportamiento promedio, se realizaron cincuenta inyecciones consecutivas en cada condición de prueba. La dispersión máxima se minimizó a aproximadamente 0.3% después de la calibración adecuada del equipo.

Cada imagen se procesa utilizando un algoritmo que detecta el límite de pulverización y calcula sus propiedades asociadas. El fondo se calcula como un promedio de todas las imágenes adquiridas antes del inicio de la inyección (SOI). Después del inicio de la inyección, este fondo se resta de cada fotograma y el resultado se invierte para que el spray aparezca como un objeto brillante sobre un fondo oscuro. Finalmente, los contornos de pulverización se detectan al binarizar la imagen con un umbral preseleccionado [8].

A partir de las imágenes obtenidas se post procesan de la misma manera que se realiza en este proyecto así que no será necesario explicarlo puesto que se comentará en el capítulo de resultados.

4.3. Resultados del modelo inerte

Inerte significa que no hay reacción química y por tanto las especies durante el proceso termodinámico no se transforman.

El objetivo de este apartado consiste en la validación de los resultados del modelo en condiciones inertes. ello pasa por una calibración en unas condiciones de referencia, para posteriormente realizar cálculos en otras condiciones de operación. la comparación con una base de datos experimental previamente medidas nos indicará el grado de predictividad del modelo. En particular, se va a poner énfasis en analizar las prestaciones del modelo cuando se cambian las propiedades del combustible. Este apartado se va a dividir en dos grandes bloques.

Plan de prueba

Todos los experimentos se realizaron para tres combustibles diferentes. El primer combustible seleccionado es n-Heptano. El n-Heptano se ha utilizado durante mucho tiempo como combustible de sustitución del Diesel para imitarlos en estudios de ignición y / o liberación de calor [1]. El segundo combustible seleccionado es el n-Dodecano, que presenta un contenido de carbono y unas características de ebullición similares a los del combustible Diesel, por lo que se espera que imite mejor el comportamiento de mezcla de los combustibles Diesel. Esta es una de las razones por las que n-Dodecano también se seleccionó como el principal combustible de estudio para la obtención de los datos del modelo reactivo. Sin embargo, no se espera que el n-Dodecano sea un combustible de sustitución adecuado para el comportamiento relacionado con la ignición, debido a su número de cetano (aproximadamente 88). Por último, se utiliza un combustible de sustitución del combustible Diesel que consiste en 3 componentes únicamente: n-tetradecano (50 % en masa), n-decano (25 % en masa) y α -metilnaftaleno (25 % en masa).

Las propiedades del combustible relevantes para este estudio se resumen en la Tabla 4.1.

Propiedades	Unidades	n-Dodecano (n-C12H26)	n-Heptano (n-C7H16)	Surrogate
Densidad	kg/m^3	745,8	679,7	802,1
Viscosidad	$Pa s$	$1,36e - 03$	$5,58e - 04$	$1,61e - 03$
Tensión superficial	N/m	0,025	0,02	0,026
Punto de ebullición	K	489	372	450 – 520
$C_{p.liq}$	$J/kg/K$	2212	2234	Tabla 2
h_{vap}	kJ/kg	358	359	Tabla 2
Color de referencia		Azul	Rojo	Negro

Tabla 4.1: Combustibles utilizados y sus propiedades a 298 K y 101 kPa. Excepto por el combustible combustible de sustitución, todas las propiedades fueron extraídas del NIST Chemistry WebBook [2], para el combustible combustible de sustitución, la densidad, la viscosidad y la tensión superficial se midieron según ASTM D1298, ASTM D445 y UNE EN 14370, respectivamente.

Propiedades	Unidades	n-Tetradecano (n-C14H30)	n-Decano (n-C10H22)	α -metilnaftaleno (C10-H8)
Punto de ebullición	K	523	447	515
$C_{p.liq}$	$J/kg/K$	2208	2192	1578
h_{vap}	kJ/kg	361	361	415

Tabla 4.2: Componentes del combustible sustitutivo y sus propiedades a 298 K y 101 kPa. Todas las propiedades fueron extraídas del NIST Chemistry WebBook

Todos los cálculos se realizaron para dos toberas diferentes, montadas en dos cuerpos inyectoros independientes. La Tabla 4.3 resume los inyectores utilizados y sus geometrías nominales de tobera.

Referencia	D_0 [μm]	K-factor
k_0	150	0
k_{15}	138	1.5

Tabla 4.3: Hardware del inyector utilizado y geometrías nominales de las boquillas

El plan de prueba seguido se presenta en la Tabla 4.4, se centra en las condiciones de contorno de ECN Spray A [3], con variaciones paramétricas alrededor de estas. Se realizaron todos los puntos que aparecen en la Tabla 4.4 para las dos boquillas y los tres combustibles. Esto comprende un total de 146 puntos o casos de prueba en el programa de cálculo 1-D DICOM.

Parámetros	Valores	Unidades
Densidad ambiente	15.2, 22.8, 30.4	kg/m^3
Temperatura ambiente	800, 900	K
Presión de rail	150, 200	Mpa
Número de puntos	12 por tobera y combustible	

Tabla 4.4: Plan de prueba

Combustible	Modelado	Experimental
n-Tetradecano		
n-Dodecano		
Surrogate		

Tabla 4.5: Resultados

El paso previo a validar los resultados fue calibrar el modelo DICOM. Para ello utilizando los Caso 2, el 18 y el 50 para el n-dodecano el 10, el 26 y el 58 para el n-heptano y el 34, el 42 y el 66 para el combustible de sustitución respectivamente, se variaron los ángulos de penetración del chorro hasta que los resultados del modelo y del experimental coincidieran. De esta forma, se comenzó a obtener todos los resultados de los Casos estacionario y transitorio.

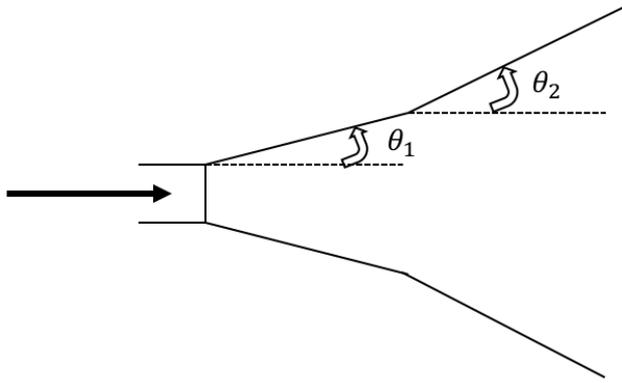


Figura 4.2: Calibración del modelo DICOM

Casos	Temperatura (°k)	Presión (Mpa)	Densidad (kg/m ³)	Tobera	θ ₁ (°)	θ ₂ (°)
50, 58, 66	900	150	15.2	k0	14.8	23.1
2, 10, 34	900	150	22.8	k0	15.75	24.5
18, 26, 42	900	150	30.4	k0	16.7	25.9

Tabla 4.6: Casos para la calibración

El ángulo de dispersión no se ve afectado significativamente por la presión de rail, como se observó previamente por los autores [5] y también se encontró en la literatura [6]. Por otro lado, el aumento de la densidad ambiental aumenta el ángulo de dispersión. También se encontró que el efecto de la geometría de la tobera era tan significativo como el efecto de la densidad ambiental, con la tobera cilíndrica *k0* se muestran ángulos de dispersión mayores a lo largo de la matriz de prueba completa. Este resultado está de acuerdo con los hallazgos previos de los autores para sprays isotérmicos no evaporativos [5].

Además, se observa cómo los combustibles no parecen mostrar tendencias claras que afecten el ángulo de dispersión. Esto está de acuerdo con la teoría del chorro de gas, pero contradice el comportamiento encontrado por los autores con las mismas boquillas y combustibles para sprays isotérmicos no evaporativos [7], donde el n-heptano mostró mayores ángulos de extensión a través de la matriz de prueba debido a su menor densidad, viscosidad y tensión superficial.

Resultados

Esta sección presenta los resultados de la penetración del chorro para el caso transitorio dentro del modelo inerte de DICOM. Cada curva en las figuras presentadas en esta sección representa la penetración del rociado como una función del tiempo. Las curva de la parte superior representan en todo momento la penetración de vapor mientras que las curvas o rectas de la parte inferior representan la penetración líquida.

En esta sección, las curvas continuas y discontinuas representan las modelada y experimental de la pulverización, respectivamente, a menos que se especifique lo contrario:

- Efecto de la temperatura ambiente (T_a):

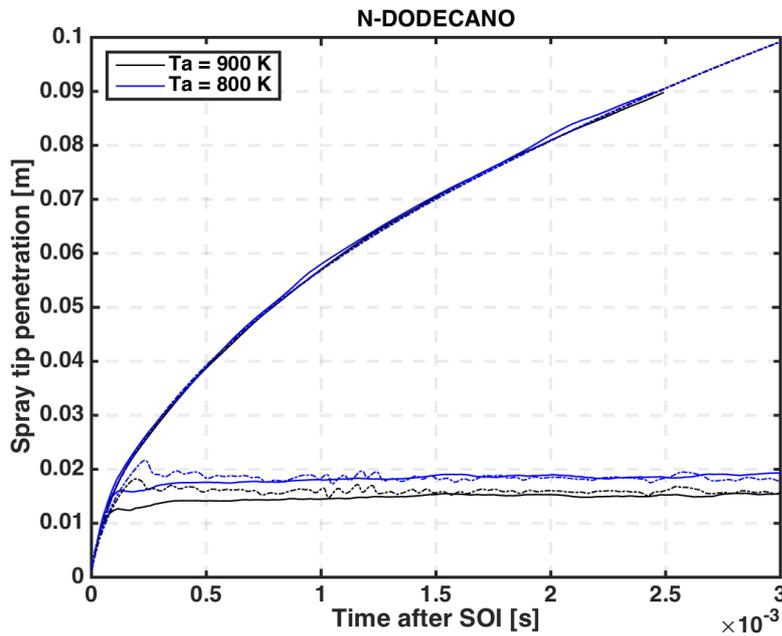


Figura 4.3: Efecto de la temperatura ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es k_0 , el combustible presentado es *n*-Dodecano, la densidad ambiente es 22.8 kg/m^3 y la presión de rail es 150 Mpa

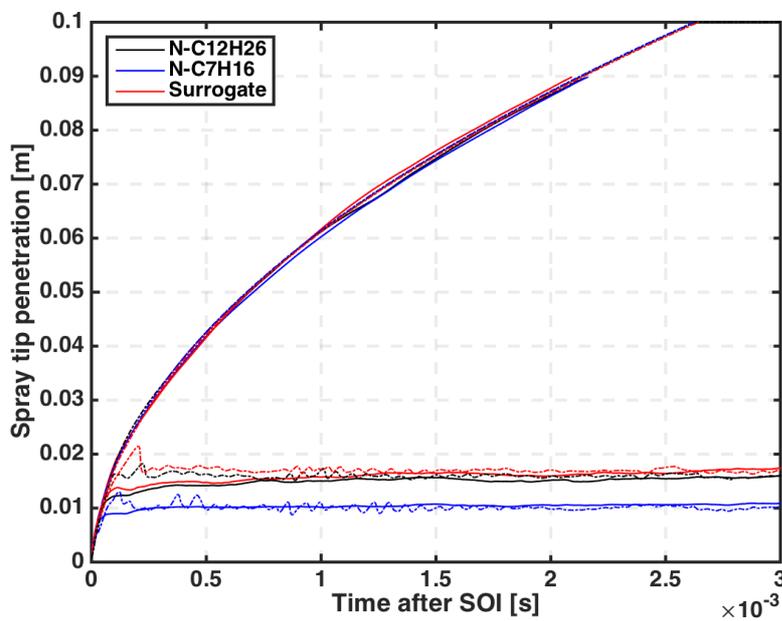


Figura 4.4: Efecto del combustible en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es k_0 , se representan los tres combustible estudiados, la densidad ambiente es 22.8 kg/m^3 , la presión de rail es 150 Mpa y la temperatura ambiente es 900k

La penetración del líquido se controla mediante la temperatura ambiente (fuente de energía evaporativa para vaporizar el combustible), mientras que la penetración del vapor se controla mediante la presión de inyección (fuente de momento). La longitud de penetración del líquido no está influenciada por la presión del rail (que se mantiene constante para los tres casos). Esto es típico cuando hay abundancia de energía de evaporación disponible, es decir, la velocidad de vaporización está influenciada por la velocidad de arrastre / mezcla. A medida que la tasa de inyección de combustible aumenta con la presión de inyección, el arrastre de aire aumenta proporcionalmente, manteniendo así el equilibrio de energía y la longitud del líquido. Dado que la pulverización de vapor está impulsada por el momento, no se espera que los cambios en la temperatura ambiente, a una densidad ambiental constante, afecten la penetración del vapor de pulverización.

Respecto a la penetración del líquido, esta aumenta a la vez que lo hace el tiempo a medida que disminuye la T_a , esto se debe a que la llama tarda más en encenderse y estabilizarse.

Comparando los tres combustibles partir de la Fig. 4.4 se puede comprobar como no existe variaciones entre ellos en la penetración de vapor por lo que se ha comentado y si que existe una diferencia en la líquida. El combustible de sustitución y el n-Dodecano presentan una mayor longitud de penetración líquida son más pesados y cuestan más en evaporar y el n-heptano es más volátil (molécula más pequeña) [4].

Por otro lado, ambas penetraciones modeladas presentan unos resultados buenos cuando se les compara con los datos experimentales como bien se puede ver en las figuras por lo que el modelo predice correctamente las variaciones de estos parámetros.

- Efecto de la densidad ρ :

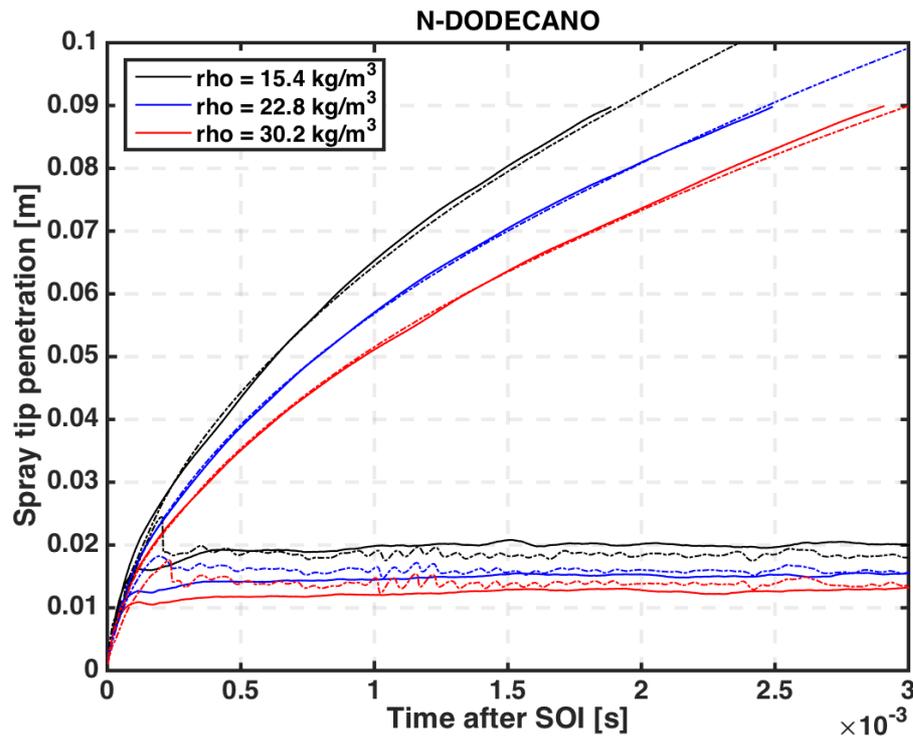


Figura 4.5: Efecto de la densidad ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es k0, el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es 900k, la presión de rail es 150 Mpa

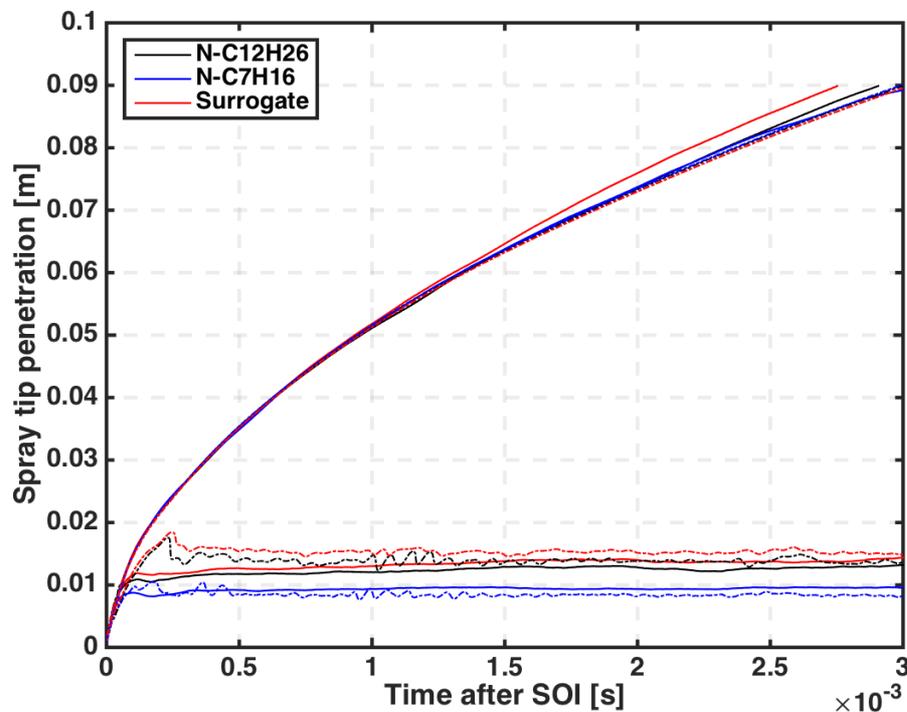


Figura 4.6: Efecto del combustible ambiente en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la tobera es k0, se representan los tres combustible estudiados, la presión de rail es 150 Mpa, la temperatura ambiente es 900k y la densidad 30.4 kg/m3

La penetración del líquido que se observa de la variación de la densidad no se ve tan influida esta vez para todos los combustibles. Es verdad que en el n-Dodecano si se distingue más que en el resto cuando se varía la densidad. Esto se debe a que la longitud de penetración del líquido no está influenciada por la presión del rail. Sin embargo, como la penetración de vapor está impulsada por el momento, está si se ve muy influenciada cuando se varía la densidad. A menor densidad existe una mayor penetración de vapor para el mismo combustible. A medida que aumenta esta, la penetración disminuye de manera muy clara como muestra la Fig. 4.5.

Comparando los tres combustibles partir de la Fig. 4.6 se puede comprobar como no existe variaciones entre ellos en la penetración de vapor por lo que se ha comentado y si que existe una diferencia en la líquida. El combustible de sustitución y el n-Dodecano presentan una mayor longitud de penetración líquida son más pesados y cuestan más en evaporar y el n-heptano es más volátil (molécula más pequeña) [4].

Por otro lado, ambas penetraciones modeladas presentan unos resultados buenos cuando se les compara con los datos experimentales como bien se puede ver en las figuras por lo que el modelo predice correctamente las variaciones de estos parámetros.

- Influencia de la tobera:

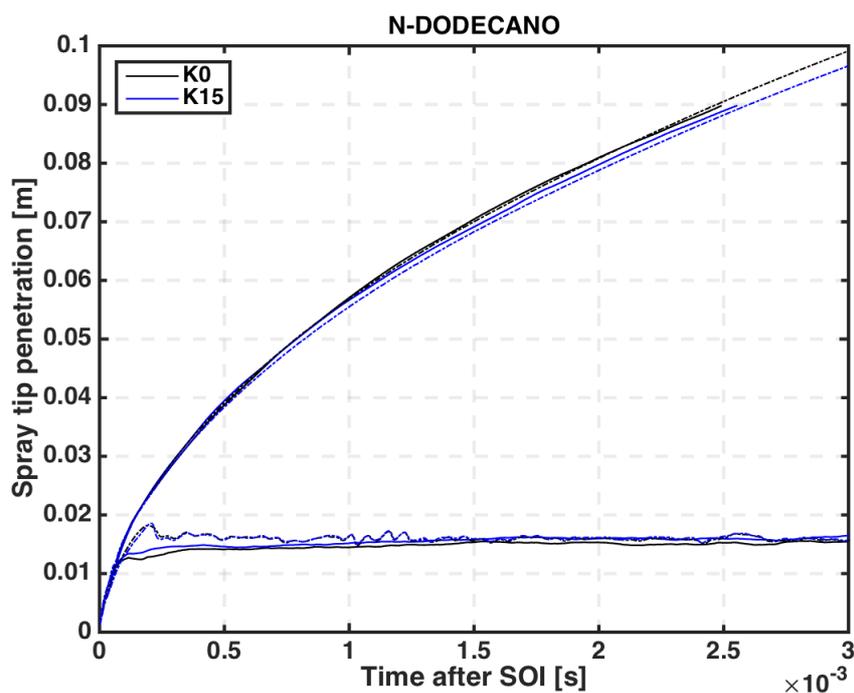


Figura 4.7: Efecto de la tobera en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es 22.8 kg/m^3 , el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es 900k , la presión de rail es 150 Mpa

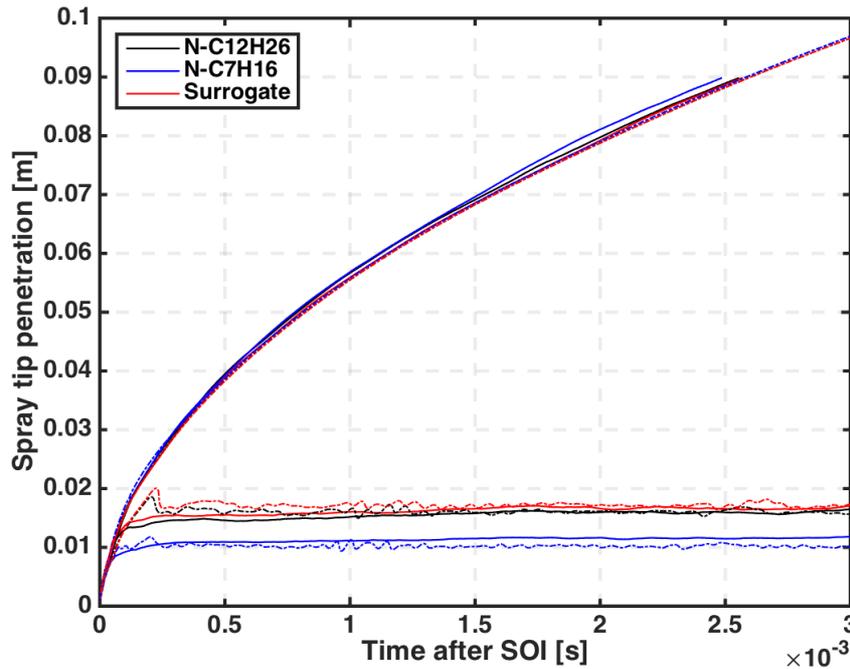


Figura 4.8: Efecto del combustible en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es 22.8 kg/m^3 , la temperatura ambiente es 900k , la presión de rail es 150 Mpa y la tobera es $k15$

En este caso, el parámetro k está relacionado con la conicidad, pero aquí da la casualidad que son dos toberas a la vez de diferente tamaño y conicidad, Tabla 3. Se puede comprobar a través de la Fig. 4.7 que para los tres combustibles no supone un gran efecto a la hora de obtener una mayor o menor penetración tanto en la líquida como en la de vapor.

Sin embargo, si procedemos a visualizar los resultados en detalle, a pesar del menor caudal másico y el flujo de momento, la tobera cónica $k15$ muestra tasas de penetración más rápidas en las etapas posteriores del desarrollo de la pulverización (*tiempo* $> 0,5\text{ms}$) en comparación con la tobera cilíndrica $k0$. Esto ocurre ya que la penetración depende del flujo de cantidad de movimiento, y este suele ser mayor a mayor diámetro. En lo que respecta a la comparación entre los resultados modelados y los experimentales, ambas penetraciones modeladas presentan unos resultados buenos cuando se les compara con los datos experimentales como bien se puede ver en las figuras por lo que el modelo predice correctamente las variaciones de estos parámetros.

- Influencia de la presión:

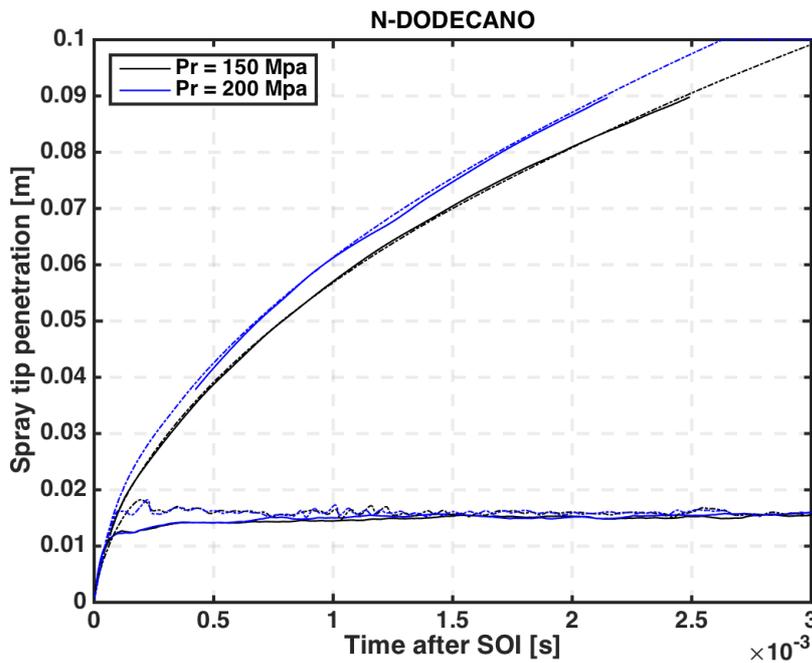


Figura 4.9: Efecto de la presión en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es 22.8 kg/m³, el combustible presentado es el n-Dodecano, la temperatura ambiente es 900k, la tobera es k0

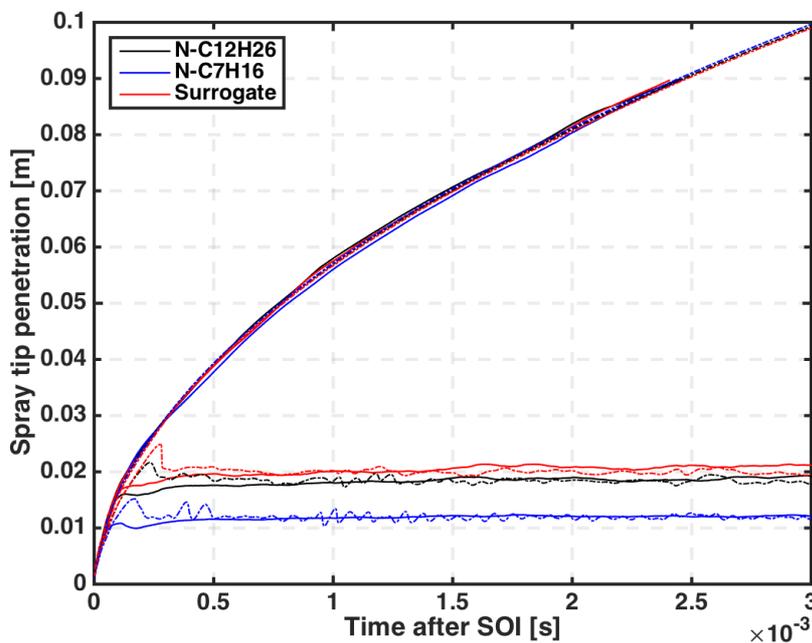


Figura 4.10: Efecto del combustible en el desarrollo de la penetración de vapor y líquida. En este caso, la densidad es 22.8 kg/m³, la temperatura ambiente es 900k, la tobera es k0 y la presión de rail es 150 Mpa

La longitud de penetración del líquido no está influenciada por la presión del rail en ninguno de los combustibles, si bien se puede apreciar que existe una longitud de penetración mayor para el combustible n-Dodecano y para el surrogate a un tiempo mayor después del inicio de la inyección. El combustible de sustitución y el n-Dodecano presentan una mayor longitud de penetración líquida son más pesados y cuestan más en evaporar y el n-heptano es más volátil (molécula más pequeña) [4].

Esto es típico cuando hay abundancia de energía de evaporación disponible, es decir, la velocidad de vaporización está influenciada por la velocidad de arrastre / mezcla. A medida que la velocidad de inyección de combustible aumenta con la presión de inyección, el arrastre de aire aumenta proporcionalmente, manteniendo así el equilibrio de energía y la longitud del líquido como se observó previamente en la Fig. 4.9.

Hay un efecto debido al aumento en P_r para mantener constante la ρ , el flujo de impulso del pulverizador disminuye y, por lo tanto, la penetración de vapor disminuye con menor P_r .

Si se observa los resultados modelados y los experimentales, ambas penetraciones modeladas presentan unos resultados buenos cuando se les compara con los datos experimentales como bien se puede ver en las figuras por lo que el modelo predice correctamente las variaciones de estos parámetros.

Todos los resultados anteriores han sido calculados con dos planteamientos diferentes en DICOM, uno totalmente transitorio y otro estacionario (o cuasi-estacionario) en el que las condiciones de contorno en las que evoluciona el chorro son constantes con el tiempo. Sin embargo, como la tasa de inyección es casi constante, los resultados de ambos planteamientos son prácticamente iguales, por lo que se ha optado por mostrar solamente los resultados del transitorio. No obstante, a continuación se realizará una serie de puntualizaciones comparando los resultados de ambos planteamientos.

En primer lugar, la Fig. 4.11 muestra una comparativa de la longitud líquida experimental comparada con la modelada con ambos planteamientos, transitorio y estacionario. Se demuestra que, aunque el efecto de la geometría de la tobera es parcialmente capturado por el modelo, todavía hay un desplazamiento desde la diagonal principal cuando se comparan boquillas en condiciones iguales.

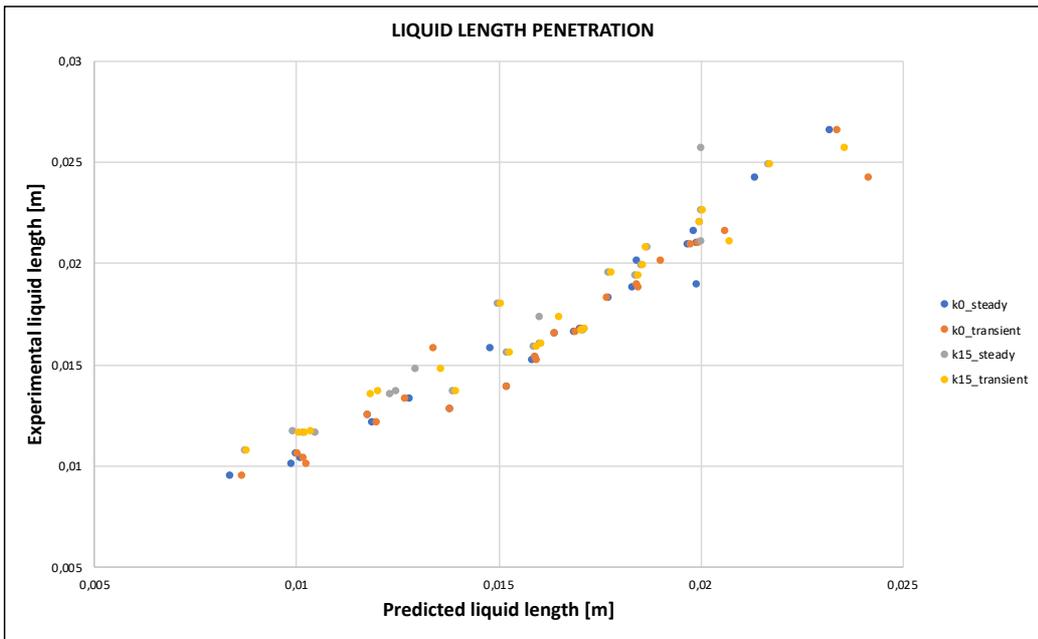


Figura 4.11: Penetración líquida: regresión no-lineal

Si se comparan detalladamente los resultados obtenidos para la penetración líquida del modelo con los experimentales, se puede observar en las Fig. 4.12 y 4.13 como el error, $\varepsilon = \frac{LL_{exp} - LL_{dicom}}{LL_{exp}}$, se sitúa entre $[-0.1, 0.1]$ esto quiere decir que los resultados obtenidos por el modelo predicen con un margen de error muy pequeño los datos experimentales.

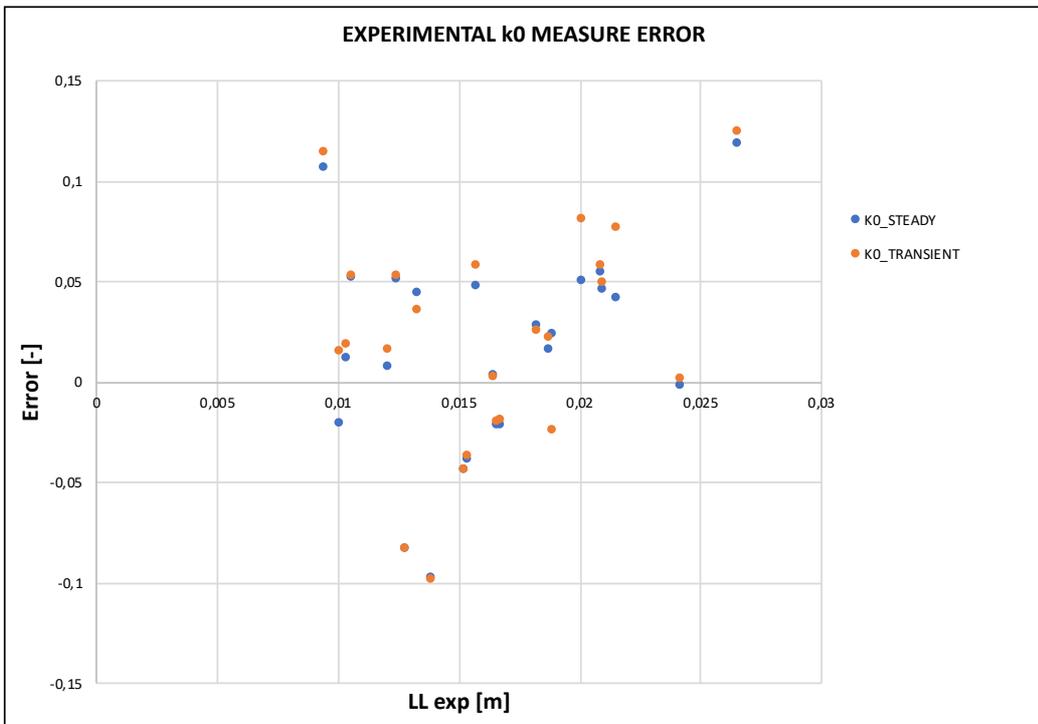


Figura 4.12: Error de medida experimental para los tres combustibles y con la tobera k0

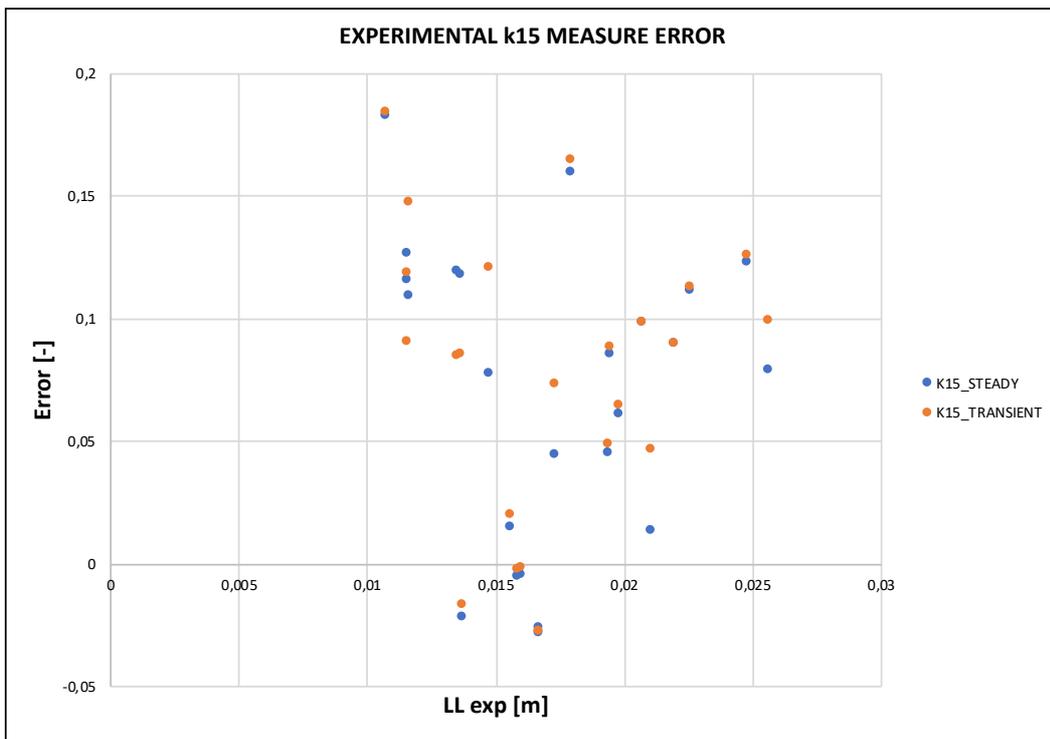


Figura 4.13: Error de medida experimental para los tres combustibles y con la tobera k15

4.4. Puesta a punto del script para la resolución de la variable de progreso

Una vez calibrados los parámetros y obtenidos los resultados del modelo DICOM, se pasa al siguiente apartado: obtener los resultados de un modelo transitorio capaz de predecir la longitud de *Lift-off* y el tiempo de retraso. Para ello se ha calibrado este modelo a partir de los parámetros numéricos y físicos que lo componen. Una vez calibrado, se han obtenido los resultados con el mínimo error posible.

El estudio llevado a cabo para calibrar el modelo se hizo para el método implícito puesto que se calibran del mismo modo ambos métodos. Sólo el paso temporal del método explícito cambia. Por otra parte, el modelo estacionario también se calibró y el resultado se mostrará al final del desarrollo transitorio ya que éste tiende al estacionario. Todos los datos que necesita el *script* de Matlab están sacados de una tabla obtenida para una temperatura ambiente de 900k.

I. Parámetros numéricos del modelo

Parámetros	Símbolo	Unidades	Valores	Valor final
Número de trayectorias	rR	-	50,100,150,200	100
Criterio de convergencia	$conv$	-	1e-04,1e-05,1e-06 1e-07,1e-8,1e-16	$1e - 04$
Paso temporal	dt	s	0.1,0.5,1,5,10e-06	$0.5e - 06$
Tiempo final	t_{final}	s	1000,1500,2000, 3000,4800e-06	$4800e - 06$

Tabla 4.7: Calibración de los parámetros numéricos

II. Parámetros físicos del modelo

Parámetros	Símbolo	Unidades	Valores	Valor final
<i>Strain rate</i>	SR	-	1,50,100,500, 1000	100

Tabla 4.8: Calibración del parámetro físico

Se realizaron cálculos para todos los valores presentes para poder encontrar cual era el valor final y proceder a realizar los cálculos. Respecto al método explícito, éste necesita un paso temporal menor ya que al hacer los cálculos si el paso era muy grande la química del modelo quemaba demasiado rápido y no mostraba bien los resultados. El $dt = 0.1e - 06$ s fue el escogido para el explícito.

El método de calibración fue el siguiente: primero se hacían variar las trayectorias. Se pretendía buscar una mejor resolución a la hora de aumentarlas. Después se varió el criterio de convergencia y se observó que apenas influía y como el elegido era con el que se obtenían los resultados más rápidos se optó por ese. Una vez se conocían estos dos parámetros se pasó a variar el paso temporal y se observó que el que mejor predecía los resultados era $0.5e - 06$ s. Finalmente con todos estos parámetros calibrados se pasó a variar el *strain rate*. Con cada *strain rate* y con los mismos parámetros todos, se obtuvieron todos los resultados y fue el $SR = 100$ el que mejor mostraba los resultados en este caso.

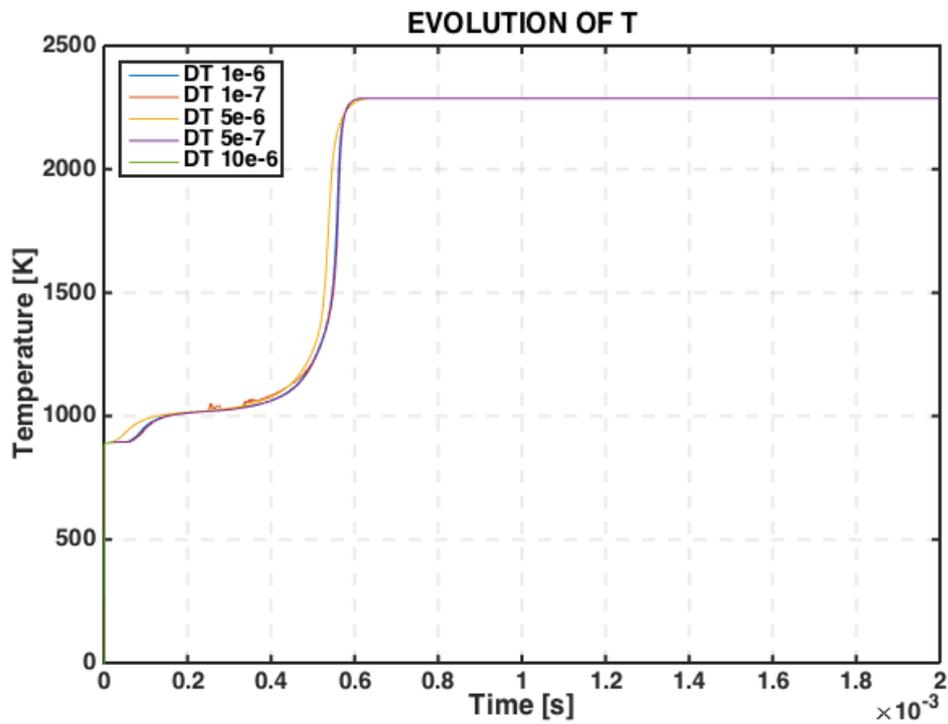


Figura 4.14: Calibración del paso temporal

Como se puede observar en la Fig. 4.14, para diferentes pasos temporales son $dt = 0.1e - 6 s$ y $dt = 0.5e - 6 s$ los que mejor muestran la curva de la evolución de la temperatura y puesto que el segundo es más rápido se escoge ese. A parte del estudio de la evolución de la temperatura para diferentes pasos temporales se hicieron estudios para el término fuente, la variable de progreso normalizada...

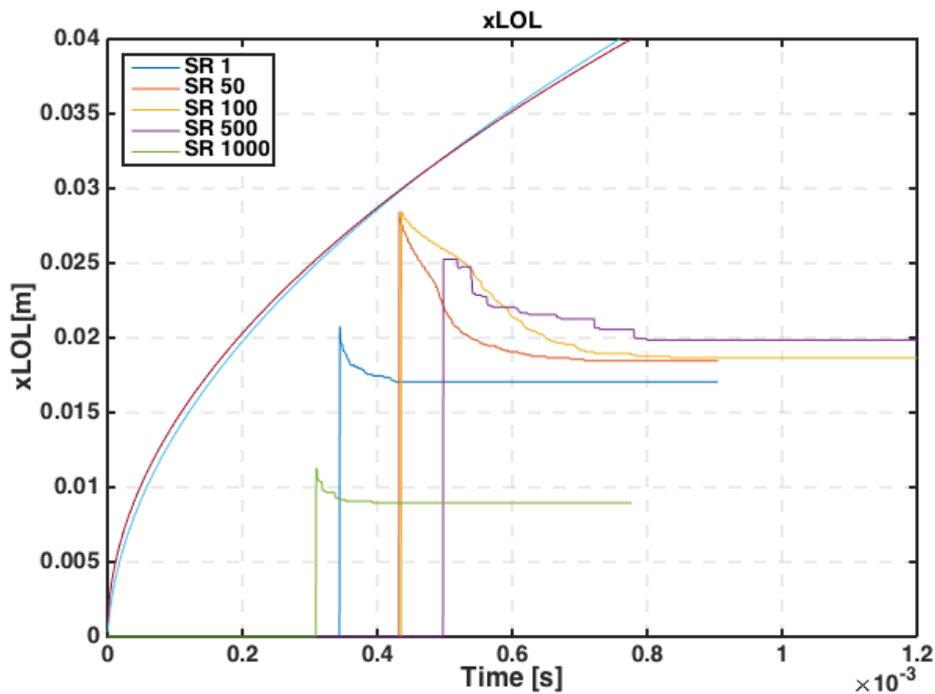


Figura 4.15: Calibración del strain rate

En la Fig. 4.14 se muestran los resultados de la penetración modelada (color azul) y la experimental (color rojo) y los resultados de la longitud de *Lift-off* para diferentes pasos temporales son *strain rates*. Como se puede observar, el $SR = 50$ y el $SR = 100$ son los que más se acercan a la curva de la penetración, por tanto, se elige entre uno de estos dos. Se acabó eligiendo el $SR = 100$ para este caso. Sin embargo, como se verá más adelante la elección de este parámetro en el modelo reactivo dependerá de la temperatura, la presión y la tobera en la que se sitúe el cálculo. A parte del estudio de la evolución del *Lift-off* para diferentes *strain rates*, se hicieron estudios para la fracción de mezcla en el eje y el tiempo de retraso.

A partir de las siguientes figuras, se puede comprobar la evolución de la temperatura a mediada que avanza el tiempo. Se han guardado imágenes por cada $25ms$ pero únicamente se va a mostrar el inicio (inyección de combustible), el momento antes de encender, después de encender y el instante final con todo el chorro ya quemado. Justo después de la ultima imagen se mostrará el resultado obtenido por le modelo estacionario, ya que el transitorio tiene a éste debido a que la fracción de mezcla y la velocidad de entrada del modelo transitorio son tomadas del estacionario y si se dejara correr el tiempo hasta completar todo el chorro éste tendería al modelo estacionario.

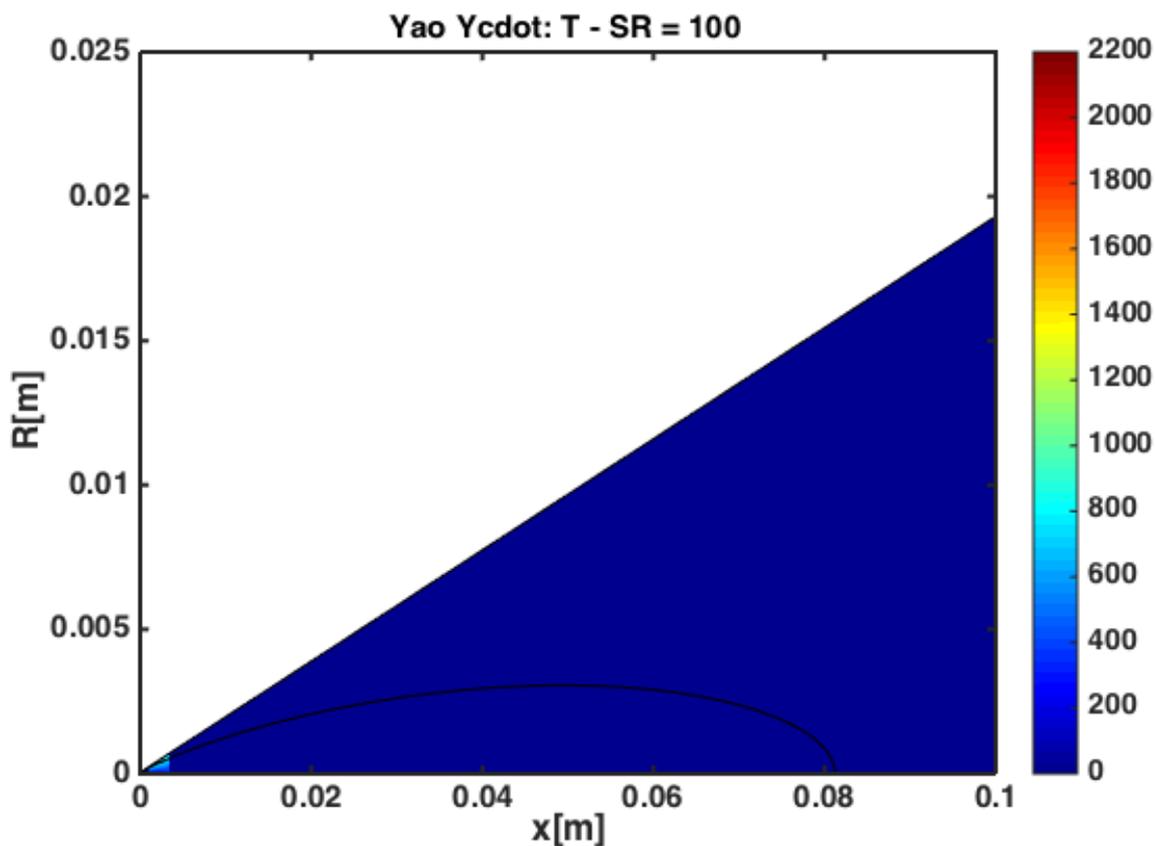


Figura 4.16: Inicio de la inyección, $t = 10e-06$ s

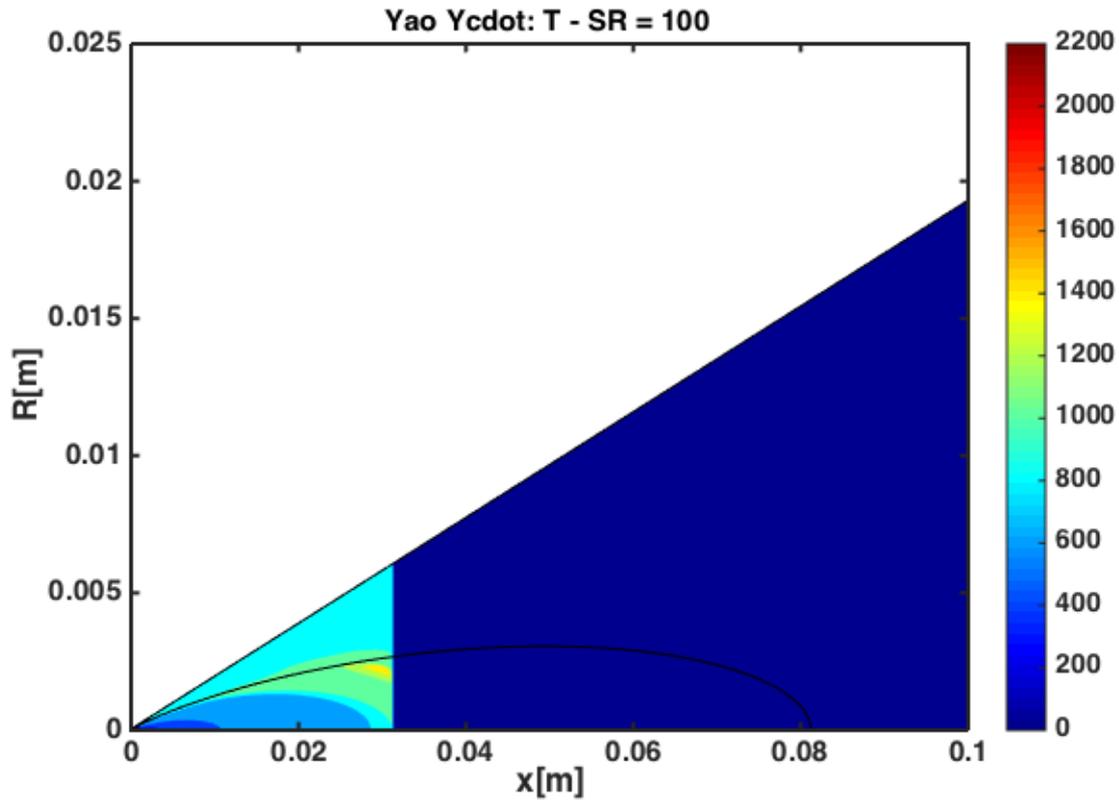


Figura 4.17: Instante previo al encendido $t = 475e-06$ s

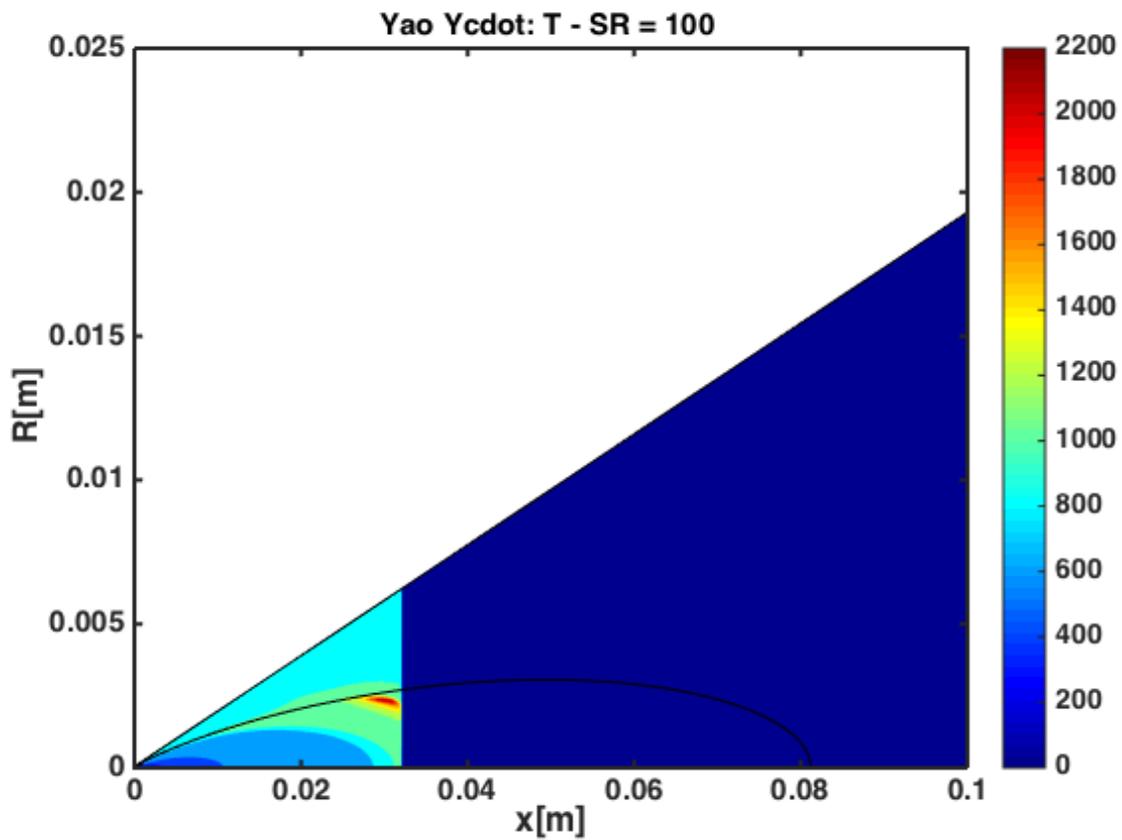


Figura 4.18: Instante posterior al encendido $t = 500e-06$ s

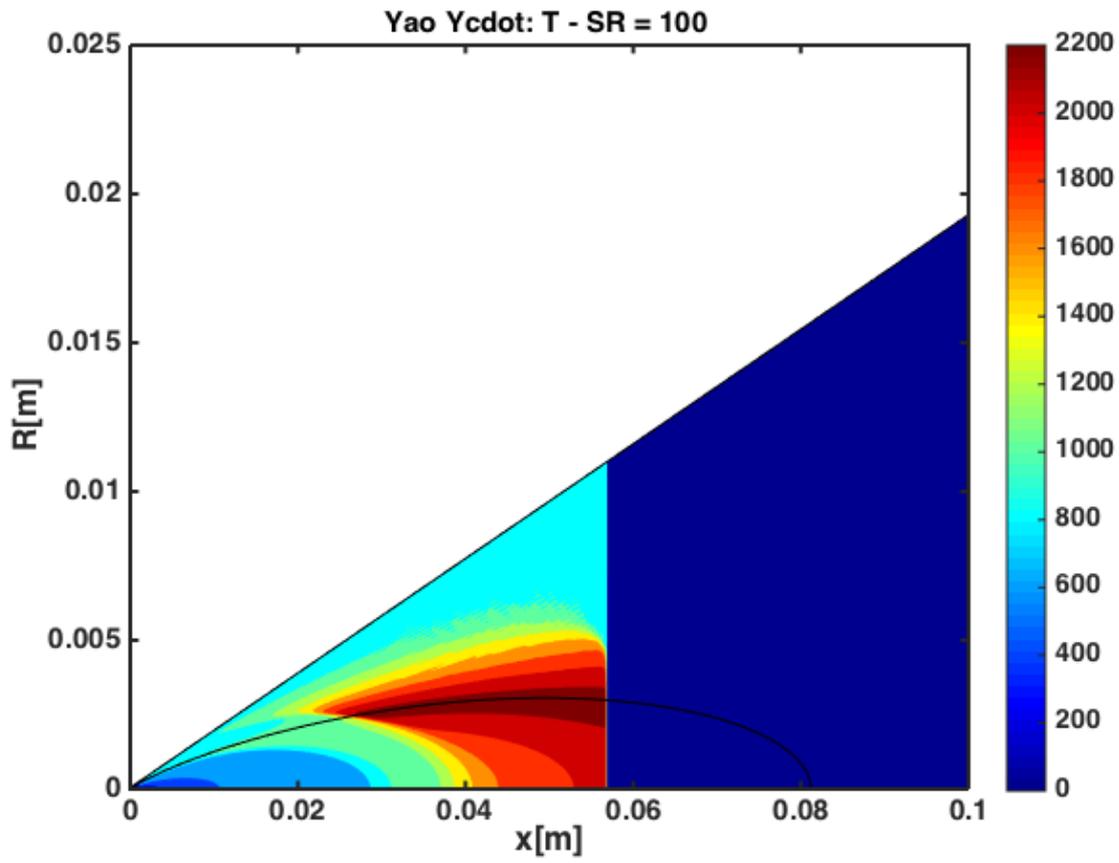


Figura 4.18: Avance temporal del chorro, $t = 1500e-06$ s

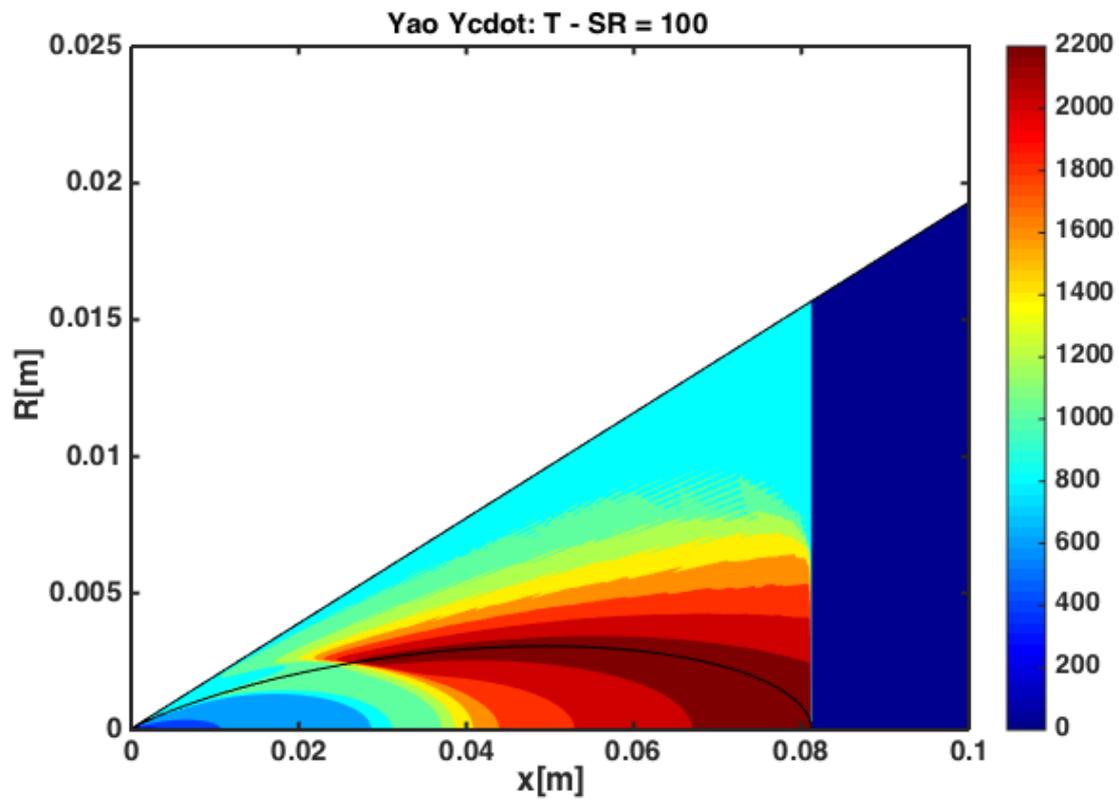


Figura 4.19: Avance temporal del chorro, $t = 3000e-06$ s

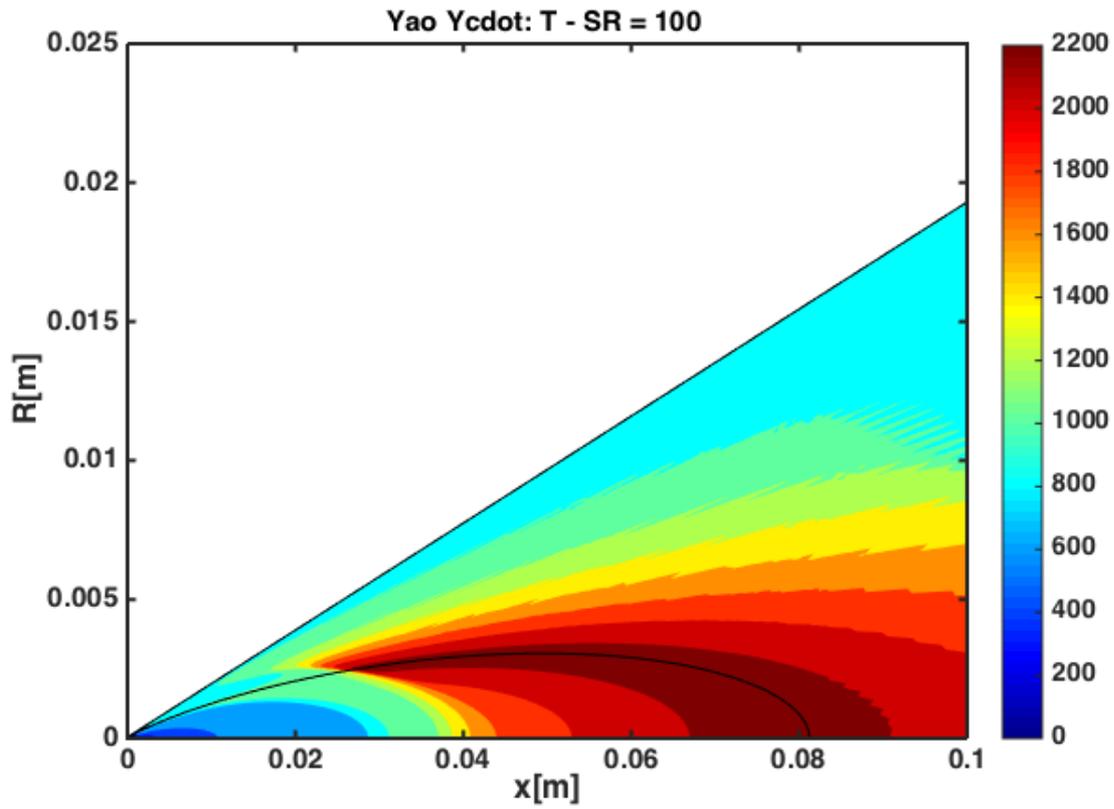


Figura 4.20: Chorro completamente quemado, $t = 4800e-06$ s

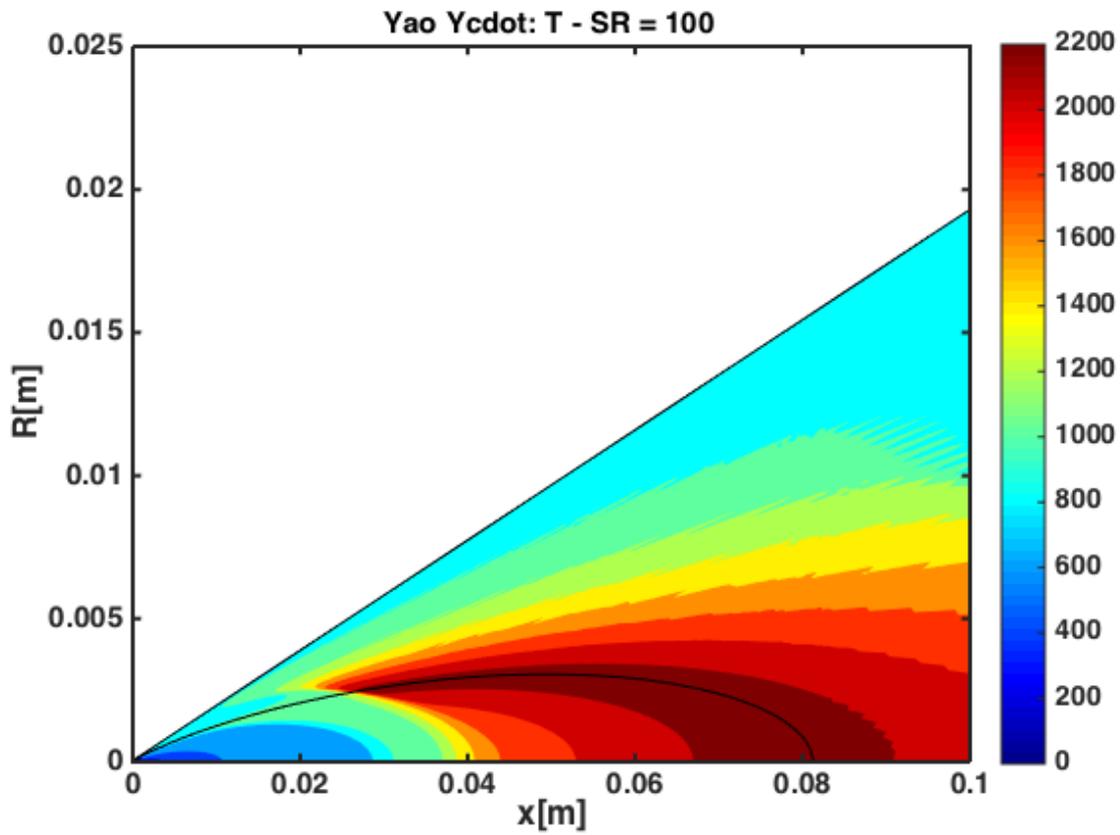


Figura 4.21: Chorro estacionario completamente quemado

Como se puede observar en todas las figuras, Fig. 16,17,18,19,20 y 21, el chorro se enciende aguas abajo. La temperatura más alta se encuentra alrededor de la curva negra. Esta curva marca el lugar donde se encuentra la fracción de mezcla estequiométrica (4%) y alrededor suyo se encuentran las fracciones de mezcla más ricas. Es ahí, con las fracciones de mezcla más ricas donde las temperaturas son mayores. Cuanto más hacia el exterior del chorro habrá una menor temperatura.

A partir de la siguiente figura, se puede observar claramente para los parámetros establecidos previamente donde se sitúa el tiempo de retraso t_{soc} *. La Fig. 22 muestra la evolución de las máximas temperaturas para cada uno de los instantes. Se obtiene el t_{soc} en el momento en el que temperatura pasa de 1300k.

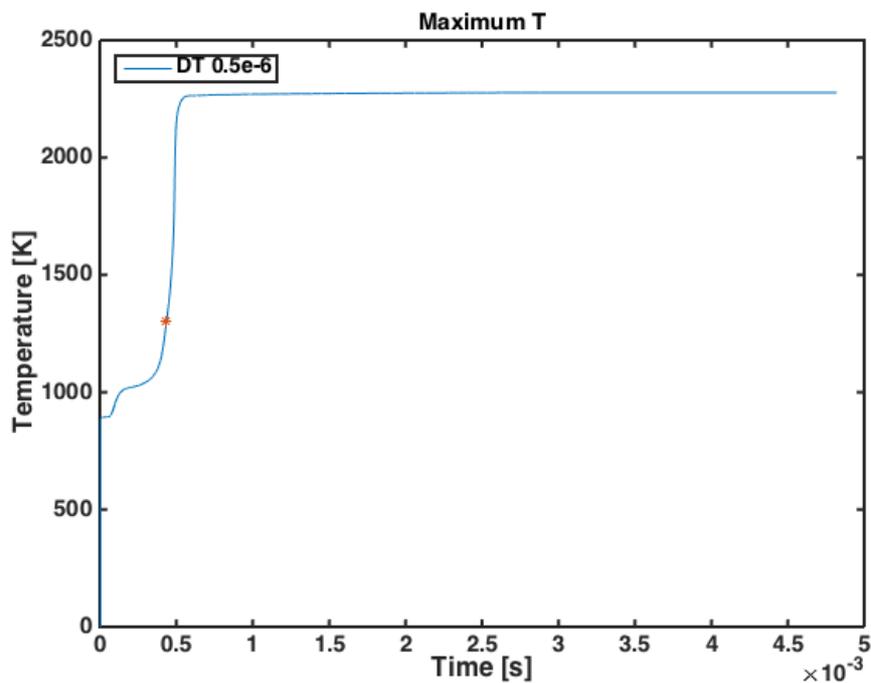


Figura 4.22: Situación del tiempo de retraso

Parámetros	Símbolo	Valor	Unidades
Tiempo de retaso	t_{soc}	0.000436	<i>ms</i>
Longitud de <i>Lift-off</i>	x_{LOL}	0.018763	<i>m</i>
Fracción de mezcla en el eje	$f_{cl}LOL$	0.177075	-

Tabla 4.9: Resumen de resultados

Una vez obtenidos estos resultados se calcula el último paso, el modelo reactivo. Estos resultados han servido para calibrar todo el modelo y establecer los valores de los parámetros tanto físicos como numéricos en los que se mueve el modelo.

4.4.1. Cálculos del tiempo de retraso y $xLOL$ a partir de la ecuación de transporte de la variable de progreso

En este apartado se van a detallar los resultados obtenidos por el modelo reactivo así como el camino seguido para obtenerlos.

En primer lugar, se inserta en el *script* de Matlab los ficheros *xdata.dat* y *Temp2.dat* de los casos que se quieren calcular. Como los resultados experimentales [7] han sido calculados únicamente para n-dodecano, los resultados modelados por el script serán los mismos. De la base de datos creada para todos los combustibles se calcularán los Casos 2, 4, 6 y 8. En la siguiente Tabla 4.9 se detallan los valores de los parámetros:

Caso	Combustible	Temperatura (<i>k</i>)	Presión (<i>Mpa</i>)	Densidad (<i>kg/m³</i>)	Tobera	Concentración de <i>O₂</i>
2	n-C ₁₂ H ₂₆	900	150	22.8	<i>k0</i>	15 %
4	n-C ₁₂ H ₂₆	800	150	22.8	<i>k0</i>	15 %
6	n-C ₁₂ H ₂₆	900	150	22.8	<i>k15</i>	15 %
8	n-C ₁₂ H ₂₆	800	150	22.8	<i>k15</i>	15 %

Tabla 4.10: Casos calculados

Una vez establecidos los casos a calcular, se lanza el *script* de Matlab con los parámetros validados del apartado anterior y se calculan todos los casos para diferentes *strain rates* ya que el éste está influenciado por la temperatura y por tanto necesita obtener los datos de una flamelet de 900*k* y de una de 800*k*.

Los casos se dividen en dos: los que tienen 900*K* y los de 800*K* estos son los casos 2 y 6 y los casos 4 y 8. El número 6 se utiliza de caso base ya que es el más parecido a los datos del modelo experimental [7].

Para poder establecer con que *strain rate* el modelo predice mejor los resultados se hace una comparación entre los valores del experimental y los valores del modelo calculado para el tiempo de retraso y la longitud de *Lift-off* para $SR = 1,50,100,500,1000$. Las siguientes figuras, Fig. 4.23, 4.24, 4.25 y 4.26 muestran los resultados:

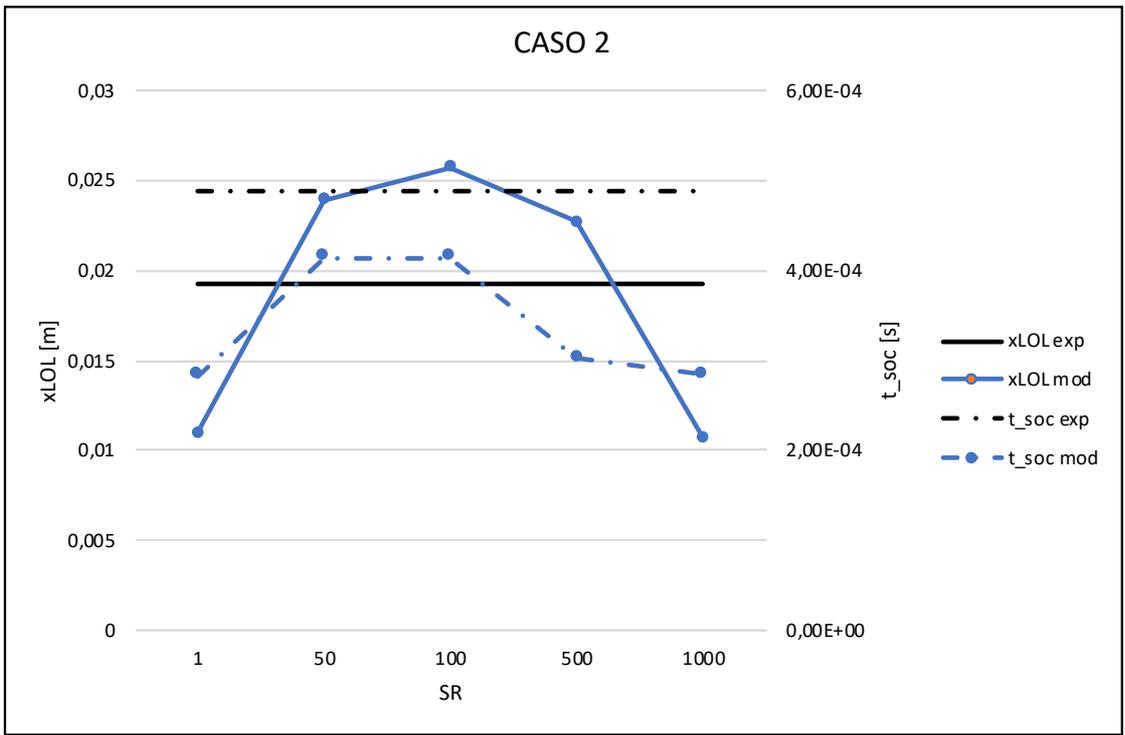


Figura 4.23: Caso 2 para diferentes strain rates

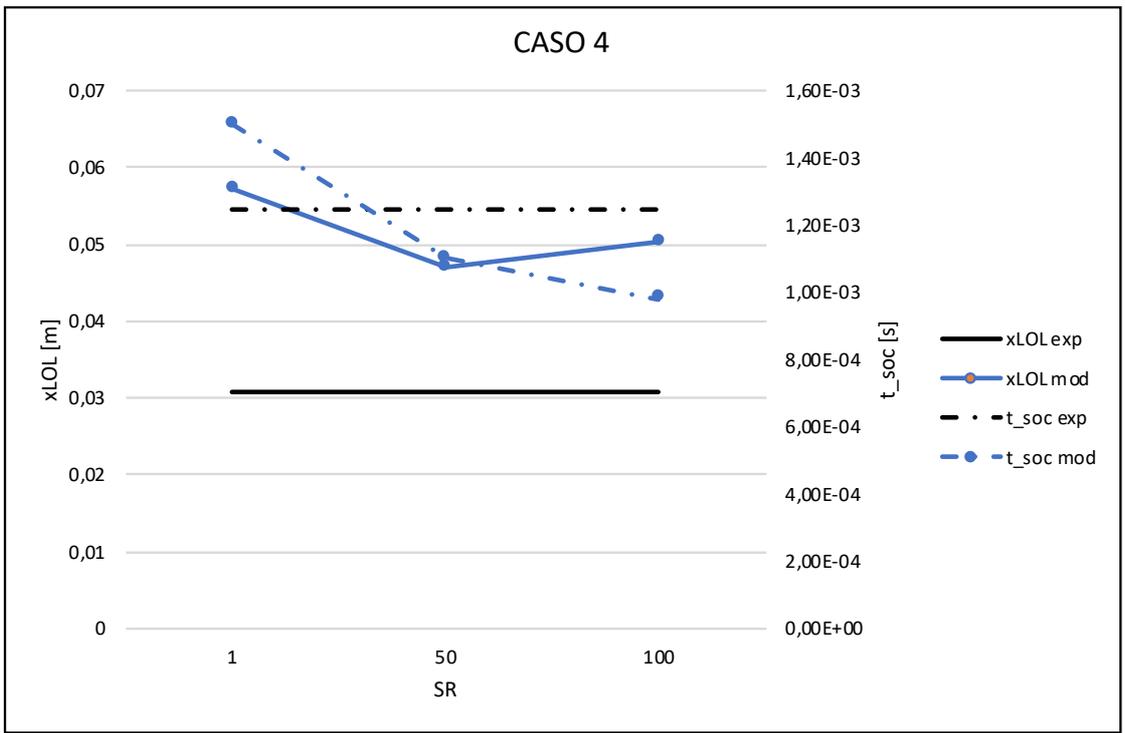


Figura 4.24: Caso 4 para diferentes strain rates

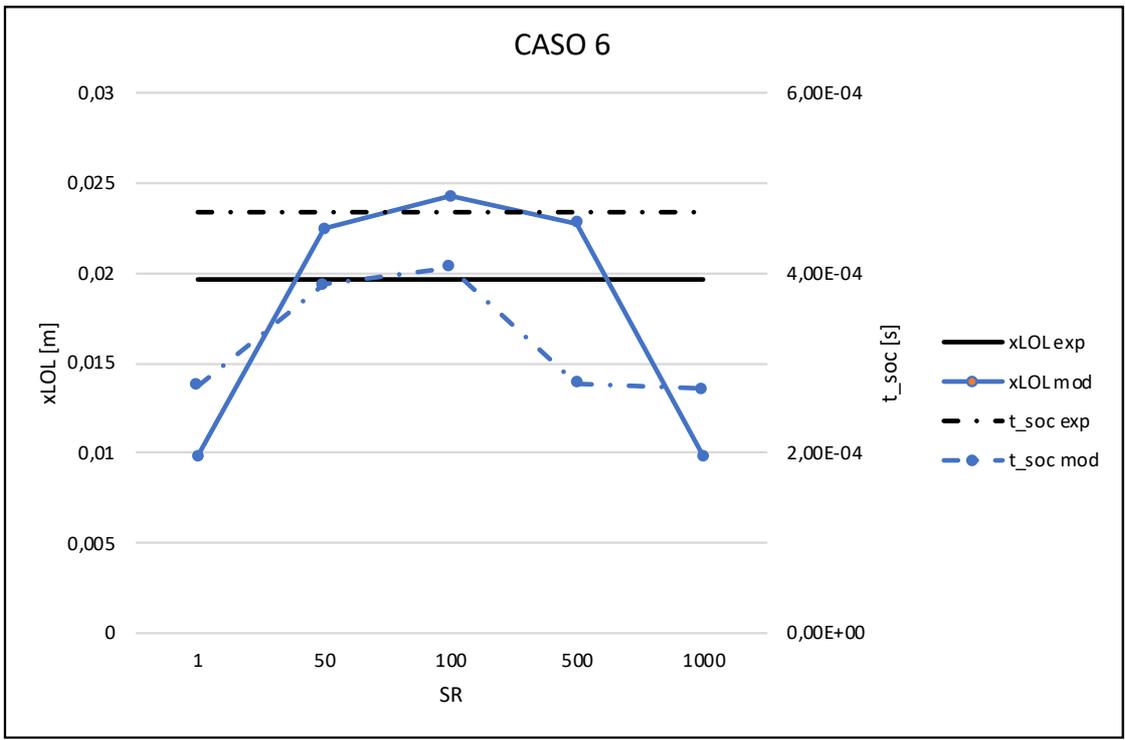


Figura 4.25: Caso 6 para diferentes strain rates

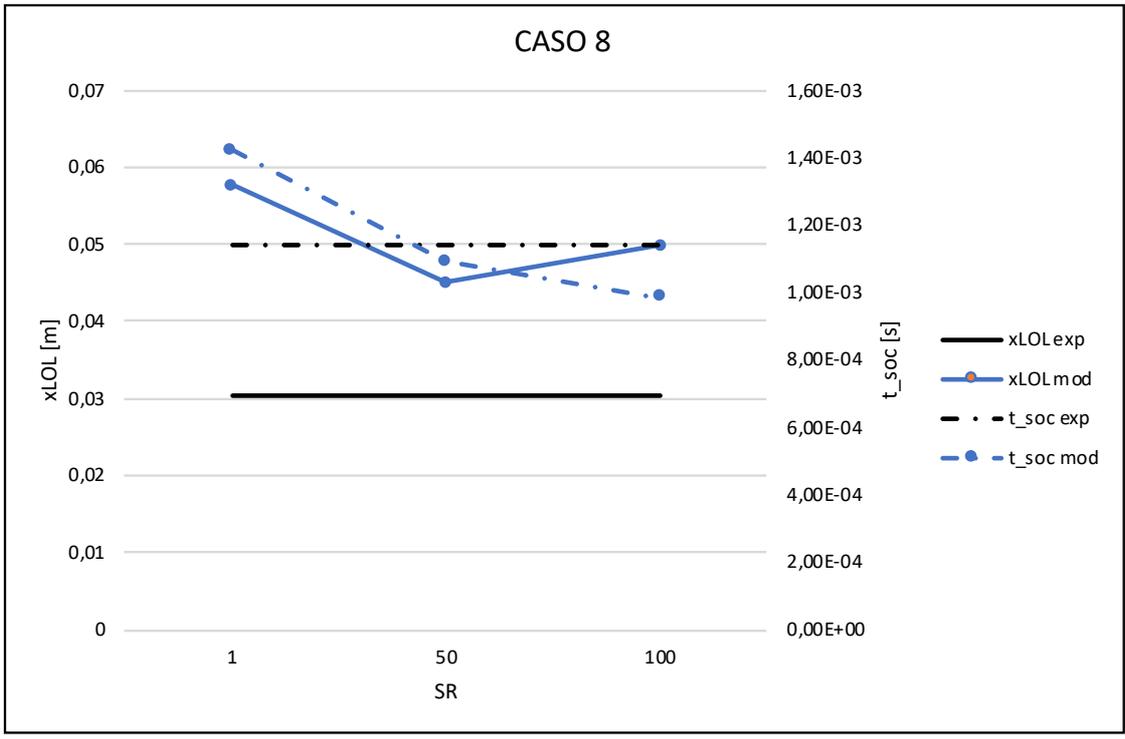


Figura 4.26: Caso 8 para diferentes strain rates

El *strain rate* que se utilice será aquel en el que los resultados del tiempo de retraso del modelo sean más cercanos a los del experimental. Puede ser que no coincidan los *strain rates* si se comparan los resultados del tiempo de retraso con los del *Lift-off length*. Para los casos 2 y 6 donde la temperatura es 900K el será $SR = 100$ y para los casos 4 y 8 donde la temperatura es 800K el será $SR = 50$.

En la siguiente figura, Fig. 4.27 se puede observar los resultados de la longitud de *Lift-off* para todos los casos con su *strain rate* correspondiente y el valor de la penetración experimental.

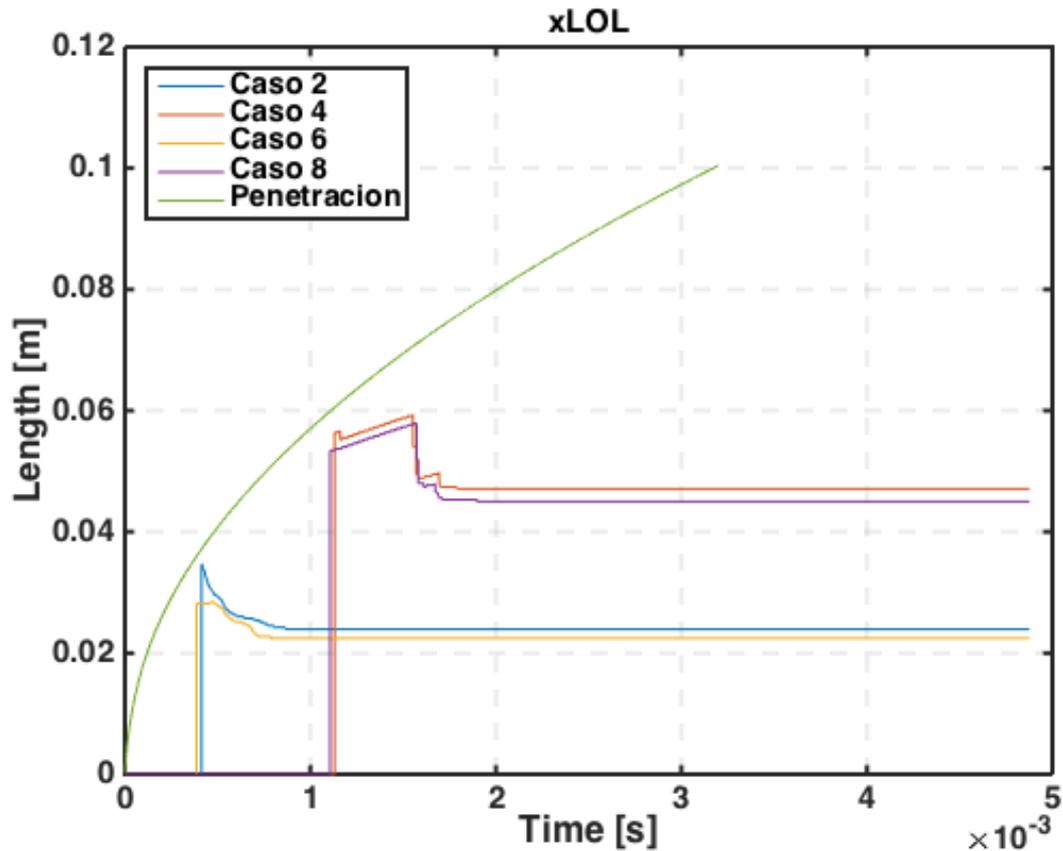


Figura 4.26: Longitud de *Lift-off* de los Casos 2 y 6 con *strain rate* 100 y de los Caso 4 y 8 con *strain rate* 50, penetración experimental

4.4.2. Cálculo del modelo completo reactivo

Para que el programa DICOM reactivo calcule, éste necesita el valor del t_{soc} y $f_{cl}LOL$ de cada caso. En la siguiente tabla, Tabla 4.10, se detallan los valores de cada parámetro y para cada caso.

Caso	$xLOL$ (m)	$f_{cl}LOL$ (-)	t_{soc} (s)
2	0,025718	0,217827	0,000414
4	0,047095	0,116536	0,0011
6	0,024243	0,233381	0,000407
8	0,04502	0,123237	0,0010905

Tabla 4.11: Resultado definitivo del $xLOL$, t_{soc} y $f_{cl}LOL$

Los resultados experimentales, Tabla 4.11 [7], se obtuvieron con los mismo datos que el Caso 6 pero utilizando una tobera de $90\mu m$, es decir, los resultados del caso base 6 del modelo se pueden extrapolar a los experimentales prestando atención a este dato ya que no serán iguales pero sí parecidos.

Caso	$xLOL (m)$	$t_{soc} (s)$
Experimental	0,017	0,0004347

Tabla 4.12: Resultados experimentales del $xLOL$ y t_{soc}

DICOM calcula cada caso con los parámetros correspondientes y genera un fichero, como se comentó en el Capítulo 3, *Temp2.dat* del cual se leerán los datos de la penetración y de la longitud de *Lift-off* del modelo. Estos datos se comparan con los experimentales [7] en las siguiente figuras, Fig. 4.28, 4.29, 4.30 y 4.31:

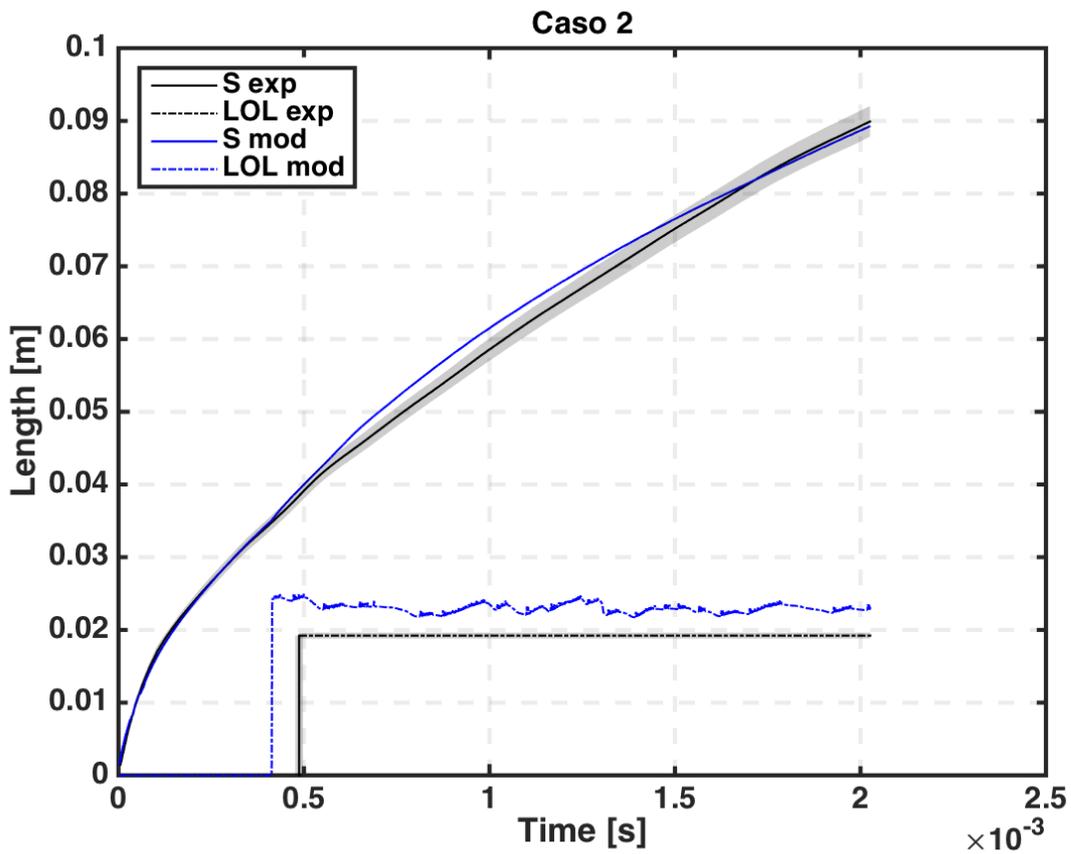


Figura 4.28: Caso 2: comparativa resultados experimentales y modelados

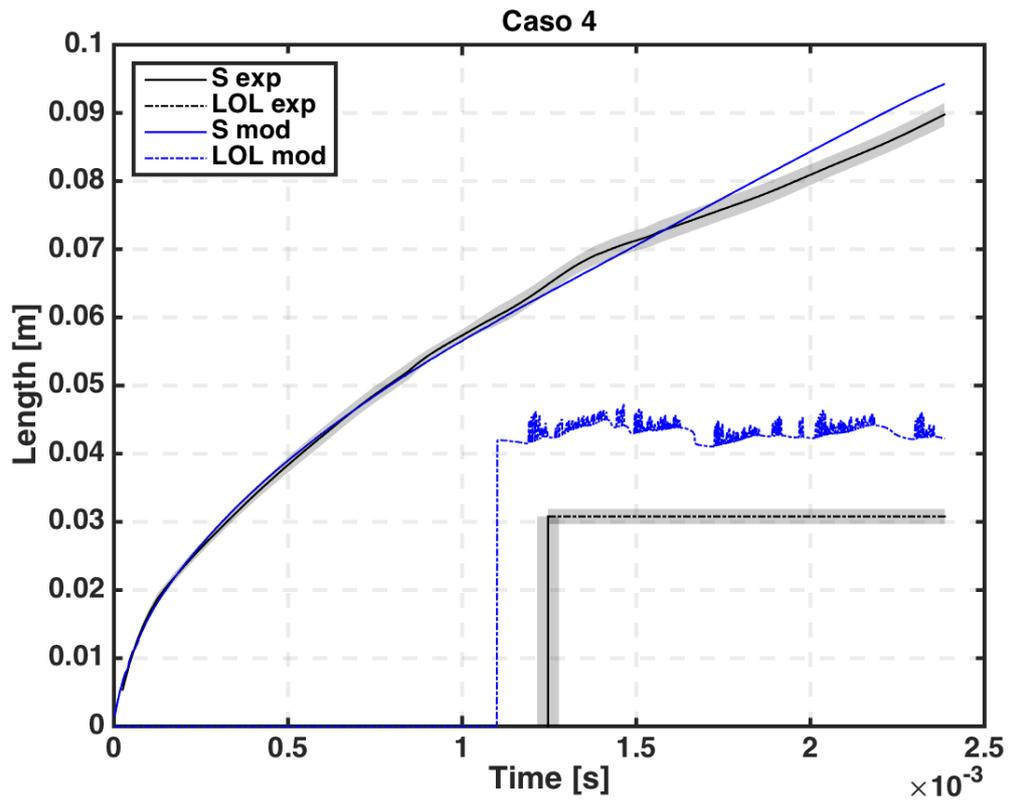


Figura 4.29: Caso 4: comparativa resultados experimentales y modelados

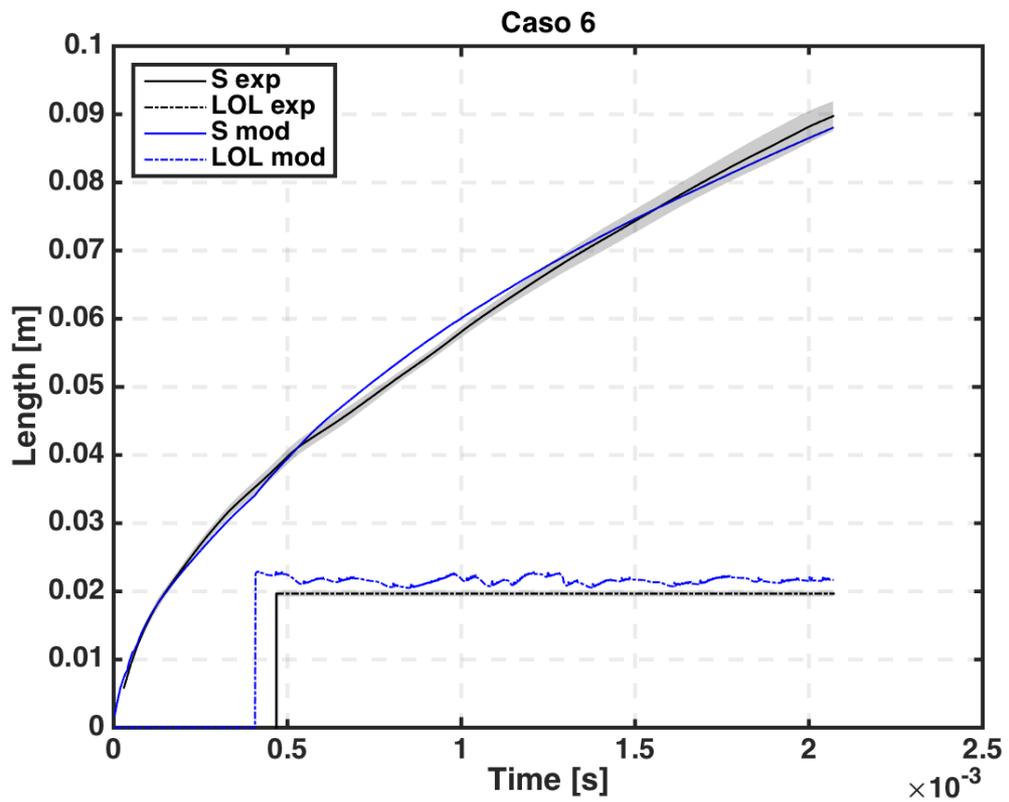


Figura 4.30: Caso 6: comparativa resultados experimentales y modelados

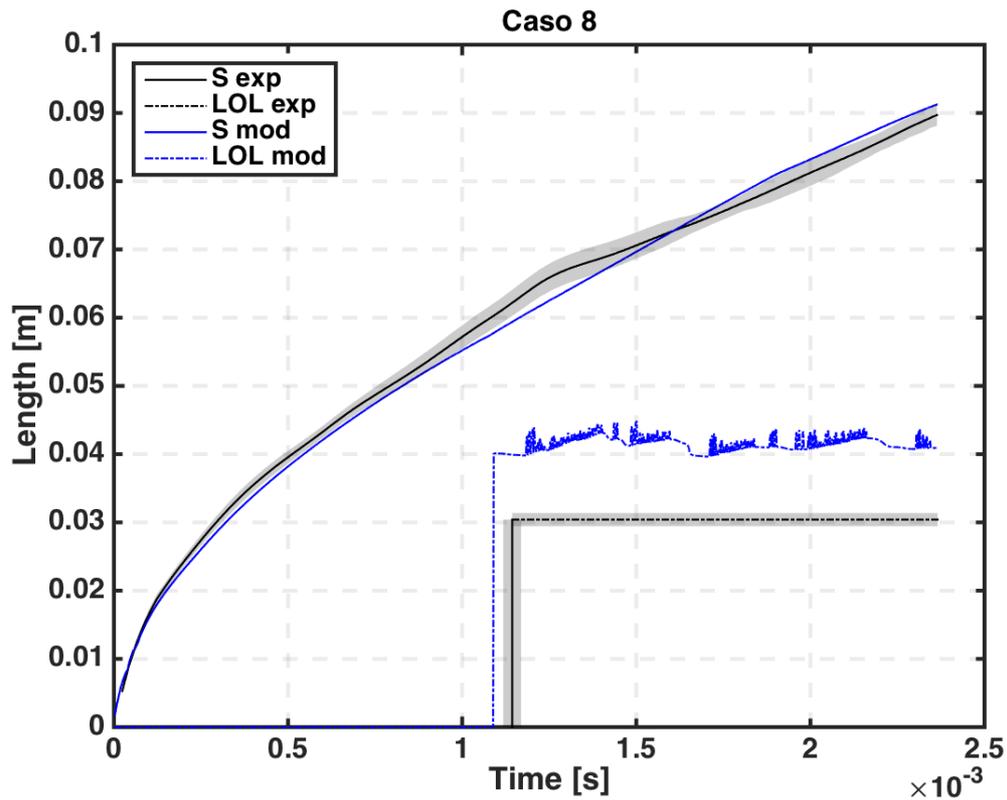


Figura 4.31: Caso 8: comparativa resultados experimentales y modelados

En las figuras se puede observar una zona gris sombreada: el margen de error de los cálculos experimentales. Como se puede observar, a pesar de que es un modelo predictivo simplificado este predice unos resultados buenos para los casos ya comentados.

Si observamos los resultados en detalle, a pesar del menor caudal másico y el flujo de momento, la tobera cónica $k15$, Casos 6 y 8, muestra tasas de penetración de punta más rápidas en las etapas posteriores. Esto ocurre debido a los perfiles de velocidad turbulenta producidos por la tobera cilíndrica, que mejoran la mezcla de pulverización y el intercambio de momento, lo que a su vez conduce a una penetración de punta más lenta.

Por otro lado, se observa como para los casos donde el $SR = 50$, Casos 4 y 8, hay un gradiente menor en la zona de encendido y por tanto encienden a un t_{soc} más grande es decir, encienden más tarde.

4.4. Conclusiones

El camino recorrido a lo largo de este Capítulo ha servido para afirmar que el modelo calculado da soluciones razonablemente buenas en todas las vertientes de los cálculos.

Desde el inicio de los cálculos con el modelo inerte, se han buscado siempre unos datos experimentales fiables que permitieran compararlos con los resultados obtenidos del modelo. La comparación ha servido para ajustar y calibrar el modelo a la perfección dentro de las simplificaciones realizadas. Aunque para todos los combustibles y para todos los casos donde la temperatura era de $800K$ y $900K$ y la densidad era de 15.2 kg/m^3 no había datos experimentales y por tanto en estos casos no se pudo ajustar el modelo. Respecto a los resultados obtenidos para los tres combustibles se obtiene que para una densidad ambiente fijada, la penetración líquida es controlada por la energía de vaporización disponible (sobretudo temperatura ambiente y densidad ambiente) mientras que la penetración del vapor es controlada por el momento (sobretudo presión de rail y densidad ambiente). La tobera $k0$ (cilíndrica), que tiene un diámetro de orificio externo mayor, tiene una penetración de vapor más lenta si se compara con la tobera $k15$ (cónica). Además la tobera cilíndrica produce longitudes líquidas de penetración más cortas. El ángulo de dispersión de la pulverización de vapor es inversamente proporcional a la penetración de la punta de pulverización, influenciado en gran medida por la geometría de la tobera y la densidad ambiental. El spray n-Heptano muestra las longitudes líquidas más cortas, seguidas por n-Dodecano y finalmente por el combustible de sustitución. Sin embargo, no se encontraron diferencias significativas en las tasas de penetración de vapor entre los combustibles, lo que confirma que la pulverización de vapor está controlada por el momento, que es independiente del combustible.

En el apartado del código transitorio del script de Matlab se ha realizado un largo y tedioso trabajo. El resultado es un script sencillo que permite calcular el modelo a través de las mínimas entradas posibles de datos externos con un método implícito o explícito según se elija. Éste culmina con la obtención de unos muy buenos resultados en los cuales se han ido eliminando los errores que muestran la variación de la temperatura, la variable de progreso normalizada... en función del radio y la longitud de penetración. Además se ha obtenido por primera vez un tiempo de retraso y una longitud de *Lift-off* razonables.

El código estacionario ha seguido los mismo pasos que el transitorio. Y la conclusión es la misma, los datos arrojados por el código permiten sentar las bases de un modelo 1-D estacionario.

El paso previo dado para calibrar el modelo reactivo mediante el ajuste de los parámetros físicos y numéricos del modelo supuso afinar los cálculos. De modo que sólo quedaba lanzar el script de Matlab con los datos del modelo inerte junto con los del reactivo y lanzar DICOM con los valores de la fracción de mezcla en el eje y del tiempo de retraso que se obtenían para cada caso.

Finalmente, los resultados obtenidos por el modelo reactivo muestran una clara tendencia, el modelo es capaz de predecir la longitud del *Lift-off* y la penetración para el combustible n-Dodecano y diferentes temperaturas, presiones y tamaños de tobera.

Bibliografía

- [1] Luo J, Yao M, Liu H, Yang B. *Experimental and numerical study on suitable diesel fuel surrogates in low temperature combustion conditions*. Fuel 2012;97:621–9
- [2] Lemmon EW, McLinden MO, Friend DG. *Thermophysical properties of fluid systems*. In: Linstrom PJ, Mallard WG, editors. NIST chemistry webbook. NIST standard reference database number, vol. 69, 2011
- [3] Bardi M, Payri R, Malbec LM, Bruneaux G, Pickett LM, Manin J, et al. *Engine combustion network: comparison of spray development, vaporization, and combustion in different combustion vessels*. Atom Sprays 2012;22 (10):807–42.
- [4] J.M. Desantes , J.M. García-Oliver , T. Xuan , W. Vera-Tudela. *A study on tip penetration velocity and radial expansion of reacting diesel sprays with different fuels*. Fuel 207 (2017) 323–335
- [5] Payri R, Salvador FJ, Gimeno J, Viera JP. *Experimental analysis on the influence of nozzle geometry over the dispersion of liquid n-dodecane sprays*. Front Mech Eng 2015;1:1–10.
- [6] Delacourt E, Desmet B, Besson B. *Characterisation of very high pressure diesel sprays using digital imaging techniques*. Fuel 2005;84(7–8):859–67.
- [7] Payri R, Viera JP, Gopalakrishnan V, Szymkowicz PG. *The effect of nozzle geometry over internal flow and spray formation for three different fuels*. Fuel 2016;183:20–33.

Capítulo 5

Conclusiones finales y futuros trabajos

Contenido

5.1. Conclusiones	93
5.2. Trabajos futuros	95

5.1. Conclusiones

Las conclusiones más relevantes del proyecto recogidas en este trabajo fin de grado hacen referencia a los objetivos expuestos en el capítulo introductorio. En este apartado se pretende comprobar si las metas inicialmente planteadas se han conseguido a partir de la metodología utilizada.

El objetivo global enunciado en el Capítulo 1 buscaba mejorar la combustión de un motor Diesel mediante la creación de un modelo predictivo-reactivo que permitiera predecir la longitud de *Lift-off* y el tiempo de retraso. Hay que recordar que el proyecto partía del trabajo realizado por los investigadores J.M. García Oliver y W. Vera-Tudela a la hora de crear un modelo de spray unidimensional 1D-DICOM que predecía la evolución de un chorro turbulento bajo algunas hipótesis simplificadoras. Además, los resultados arrojados por los investigadores Raul Payri et al. en su trabajo sobre el efecto de la geometría de la tobera en un spray evaporativo para tres combustibles diferentes, han servido como base para la comparación y posterior validación de los resultados del modelo calculado en este proyecto.

Los objetivos secundarios planteados fueron:

1. Calibración del modelo en un punto de una matriz de ensayos en condiciones inertes
2. Desarrollo de un programa que añada la funcionalidad productiva del modelo
3. Validación del modelo con resultados experimentales

Para alcanzarlos se utilizó una metodología diferente a la utilizada normalmente para estos trabajos; dividir el trabajo en tres grandes bloques de los cuales se han extraído las siguientes conclusiones:

- La primera parte del trabajo consistió en realizar un análisis del comportamiento del chorro Diesel en condiciones de mezcla inerte para tres combustibles diferentes, dos eran componentes puros n-Heptano y n-Dodecano- mientras que el tercero era un combustible de sustitución. Éste estaba formado por tres componentes lo que permitía representar mejor las propiedades químicas y físicas del Diesel. Para una densidad ambiente fijada, la penetración líquida es controlada por la energía de vaporización disponible (sobretudo temperatura ambiente y densidad ambiente) mientras que la penetración del vapor es controlada por el momento (sobretudo presión de rail y densidad ambiente). La tobera $k0$ (cilíndrica), a pesar de tener un mayor ratio de flujo de masa y flujo de momento, tiene una penetración de vapor más lenta si se compara con la tobera $k15$ (cónica). Además la tobera cilíndrica produce longitudes líquidas de penetración más cortas. El ángulo de dispersión de la pulverización de vapor es inversamente proporcional a la penetración de la punta de pulverización, influenciado en gran medida por la geometría de la tobera y la densidad ambiental. El spray n-Heptano muestra las longitudes líquidas más cortas, seguidas por n-Dodecano y finalmente por el combustible de sustitución. Sin embargo, no se encontraron diferencias significativas en las tasas de penetración de vapor entre los combustibles, lo que confirma que la pulverización de vapor está controlada por el momento, que es independiente del combustible. Se puede concluir en esta parte que la calibración del modelo inerte ha sido exitosa ya que reproduce las tendencias experimentales al variar el combustible, la densidad, la presión, la temperatura y la geometría de la tobera.
- La segunda parte del trabajo consistió en desarrollar un script de Matlab que permitiera resolver la ecuación de transporte de la variable de progreso en función de la longitud y el radio de penetración y que avanzara en el tiempo según un paso temporal. Utilizando el mapa de temperaturas del chorro, las matrices que se obtenían de las variables y los datos del flujo de calor, se podía intuir donde estaban los errores del código. Se realizó un estudio de calibración para obtener el tiempo de retraso, la longitud de *Lift-off* y la fracción de mezcla en el eje. Se observó que para el método de resolución de ecuaciones implícito el paso temporal debía ser $dt = 0.5e - 6 s$ y el *strain rate* $SR = 100$ y para el explícito $dt = 0.1e - 6 s$ y $SR = 100$. Finalmente se amplió la funcionalidad productiva de DICOM sobre parámetros básicos de la combustión.
- La última parte del proyecto buscaba predecir la penetración y la longitud de *Lift-off* de un modelo reactivo de DICOM. Para ello se tomaron los datos obtenidos del modelo inerte de DICOM para n-Dodecano, 800K y 900K de temperatura, $22.8 kg/m^3$ de densidad, tamaños de tobera $k0$ y $k15$ y una concentración de O_2 al 0% y se introdujeron en el script. Ya que el calibrado anterior del script fue para una flamelet de 900K se tuvo que volver a calibrar y se observó que para una tobera de tamaño $k0$ y $k15$ y con 900K el *strain rate* correcto era $SR = 100$ pero para 800K era $SR = 50$ ya que hay menos gradiente en la zona de encendido y por tanto enciende más tarde (mayor tiempo de retraso). Los valores de la fracción de mezcla en el eje y el tiempo de retraso obtenidos por el script se introdujeron en el DICOM reactivo. Éste generó los valores de la penetración y de la longitud de *Lift-off* del modelo reactivo y se observó que el modelo captura las tendencias que ocurren al variar las condiciones de contorno. Al comparar los resultados modelados con los experimentales para validar el modelo, se muestra un mejor ajuste en casos de alta actividad los resultados del modelo eran capaces de predecir razonablemente estos dos parámetros.

5.2. Trabajos futuros

Con este proyecto se ha creado un modelo predictivo reactivo que funciona ejecutando por separado dos programas: DICOM y Matlab.

Para seguir mejorándolo, se debe resolver la ecuación de transporte de la variable de progreso acoplada con la del flujo de cantidad de movimiento y la del gasto másico de combustible simultáneamente sin necesidad de resolver secuencialmente como se tiene ahora.

DICOM está programado en C++ y para poder integrar el script de Matlab primero se tendría que pasar a este lenguaje de programación y después darle las pautas necesarias para que vaya calculando todos los pasos ya acoplados.

En definitiva, el marco de trabajo está creado y los pasos necesarios suficientemente desarrollados, de manera que profundizando en los aspectos anteriores se puede conseguir un modelo reactivo que integrara todas las partes de forma que solo hiciera falta ejecutar un único programa.

ANEXO I : SCRIPT DE MATLAB

Contenido

1. Introducción	97
2. <i>Script</i> de Matlab	97

1. Introducción

En este anexo se presenta el código desarrollado para el *script* transitorio de Matlab. Lo primero que nos pide es introducir los valores de los parámetros físicos y numéricos. A continuación lee la tabla de datos y el fichero de DICOM para poder generar los campos 2D. Se crean las variables en formato de matriz y se resuelve la ecuación de la variable de progreso del combustible hasta que se complete el tiempo de cálculo. Al final del proceso se guardan en formato *.mat* los valores que necesita DICOM como datos de entrada.

2. Script de Matlab

```
clear all;
bool_implicito = true; %%if implicito == true -> implicito
bool_rholocal = false; %%if rho local == true -> interpolation
bool_Ycdot = true; %%if bool_Ycdot == true -> Ycdot

t_final = 1500.e-6;
dt = 5e-6;
T_ignicion = 1300;
insts_temps = int64(t_final/dt);

conv=1e-4; %-4

t_guardar = [10 50:25:4876]*1.0e-06;

%%%%%% READ FLAMELET AND DICOM FILE

load('DFunsteady_C12H26_yao_59.6_900_185_0.15_v4.mat');%load('.
\DFunsteady_C12H26_yao_59.6_900_185_0.15_v4.mat');
case_name = 'Yao Ycdot';
flamelet = flameletDF;
```

```

clear flameletDF;
index_SR = 37;

% Steady DICOM file
file = 'C12-900-228-15-150i_xdata.dat';
file_dicom = 'C12-900-228-15-150i_Temp2.dat';
Sc = 1;
fst = 0.04605;
rho = 22.8;

xdata = dlmread(file, ',', 1, 0);
xdata_dicom = dlmread(file_dicom, ',', 1, 0);
x = xdata(:, 1);
ucl = xdata(:, 2);
fcl = xdata(:, 3);
R = xdata(:, 11);
mdot = xdata(:, 6);
T_dicom = xdata_dicom(:, 1);
S_dicom = xdata_dicom(:, 2);
Rst = R.*sqrt(1/log(100)*log(fcl./fst));

length_x = length(x);
m0 = mdot(1);

aux = find(fcl < 1);
IL_index = aux(1);
IL = x(IL_index);

temp2_file = './temp2.dat';

%% Generation of 2D fields

rR = [0 1e-4 0.01:0.01:1.0];
length_Rr = length(rR);

rk = zeros(length_x, length_Rr);
xi = zeros(length_x, length_Rr);
for i = 1:length_x
    rk(i,:) = R(i)*rR(:);
    xi(i,:) = x(i);
end

u_profile = exp(-log(100)*rR.^2);
f_profile = u_profile.^Sc;

u = zeros(length_x, length_Rr);
f = zeros(length_x, length_Rr);
rho = rho*ones(length_x, length_Rr);

```

```

%% Read table from flamelet .mat and create needed variants

% Read short vectors
Yc_inert_table = flamelet.Yc_inert(:);
Yc_steady_table = flamelet.Yc_steady(:,index_SR);
Zv_table = flamelet.Z(:);
Cv_table = flamelet.C(:);
rho_table_m = flamelet.rho(:, :, index_SR);

if bool_Ycdot
wc_table_m = flamelet.Ycdot(:, :, index_SR).*flamelet.rho(:, :, index_SR);
else
    wc_table_m = flamelet.wc(:, :, index_SR).*flamelet.rho(:, :, index_SR);
end

T_table_m = flamelet.T(:, :, index_SR);
CO2_table_m = flamelet.species(:, :, index_SR, 4);
CH2O_table_m = flamelet.species(:, :, index_SR, 12);
OH_table_m = flamelet.species(:, :, index_SR, 13);
C2H2_table_m = flamelet.species(:, :, index_SR, 14);

ExpC = flamelet.E_YC(index_SR);
ExpZ = flamelet.E_MF(index_SR);

% Create tables in matrix format
[Cm_table, Zm_table] = meshgrid(Cv_table, Zv_table);

Yc_table_m = zeros(size(Cm_table));
for index_Yc = 1:flamelet.N_YC(index_SR)
    for index_Z = 1:flamelet.N_MF(index_SR)

        Yc_table_m(index_Z, index_Yc) = Yc_inert_table(index_Z) + (Yc_steady_table(index_Z)-
Yc_inert_table(index_Z))*Cm_table(index_Z, index_Yc);

    end
end

%% Allocate memory for auxiliary variables
%2D

C = zeros(length_x, length_Rr);
Yc = zeros(length_x, length_Rr);
Yc_inert = zeros(length_x, length_Rr);
Yc_steady = zeros(length_x, length_Rr);
wc = zeros(length_x, length_Rr);
T = zeros(length_x, length_Rr);
CO2 = zeros(length_x, length_Rr);

```

```

CH2O = zeros(length_x,length_Rr);
OH = zeros(length_x,length_Rr);
C2H2 = zeros(length_x,length_Rr);

mdot_Yc = zeros(length_x,length_Rr);
m_wc = zeros(length_x,length_Rr);
m_Yc = zeros(length_x,length_Rr);
intV_Yc_ant = zeros(length_x,length_Rr);

intV_Yc = zeros(length_x,length_Rr);
BALANCE_UNSTEADY = zeros(length_x,length_Rr);
BALANCE_FLOW = zeros(length_x,length_Rr);
BALANCE_SOURCE = zeros(length_x,length_Rr);
BALANCE_NET = zeros(length_x,length_Rr);
t_residence = zeros(length_x,length_Rr);

num_iter = zeros(length_x,length_Rr);
SOLVEQ = zeros(length_x,length_Rr);

%1D
indexLOL = 1;
xLOL = zeros(insts_temps,1);
rLOL = zeros(insts_temps,1);
fclLOL = zeros(insts_temps,1);
t_soc = zeros(insts_temps,1);
xindex = zeros(size(xi,2),1);

%% Initialize first cross section
u(IL_index-1,:) = ucl(1)*u_profile;
f(IL_index-1,:) = fcl(1)*f_profile;

C(IL_index-1,:) = 0;

for auxindex = 1:length_Rr
    Yc(IL_index-1,auxindex) = interp1_Z(Zv_table, Yc_inert_table,ExpZ,
    f(IL_index-1,auxindex));
    wc(IL_index-1,auxindex) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,wc_table_m,
    0,f(IL_index-1,auxindex));
    if(bool_rhocal)
        rho(IL_index-1,auxindex) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,rho_table_m,
        0,f(IL_index-1,auxindex));
    end
end

mdot_Yc(IL_index-1,1) = 0;
m_wc(IL_index-1,1) = 0;

```

```

m_Yc(IL_index-1,1) = 0;
intV_Yc_ant(IL_index-1,1) = 0;
intV_Yc(IL_index-1,1) = 0;

dx = x(IL_index-1)-x(IL_index-2);

for k = 2:length_Rr
    dr = rk(IL_index-1,k)-rk(IL_index-1,k-1);
    mdot_Yc(IL_index-1,k) = dr *0.5*(rho(IL_index-1,k)*u(IL_index-1,k)* Yc(IL_index-1,k)*
    rk(IL_index-1,k)+rho(IL_index-1,k-1)*u(IL_index-1,k-1)* Yc(IL_index-1,k-1)*
    rk(IL_index-1,k-1));
    m_wc(IL_index-1,k) = dr *0.5*(wc(IL_index-1,k)*rk(IL_index-1,k)+wc(IL_index-1,k-1)
    *rk(IL_index-1,k-1));
    m_Yc(IL_index-1,k) = dr *0.5*(rho(IL_index-1,k)*Yc(IL_index-1,k)*rk(IL_index-1,k)
    +rho(IL_index-1,k-1)*Yc(IL_index-1,k-1)*rk(IL_index-1,k-1));
    intV_Yc_ant(IL_index-1,k) = 0.5*(m_Yc(IL_index-1,k)+m_Yc(IL_index-1,k))*2*pi*dx;
end
%% Main loop over axial coordinates
filetemp2 = fopen(temp2_file,'w');
fprintf(filetemp2,'t[s], S[m], maxC [-], maxwc[kg/s/m3], maxT[K], S_UNSTEADY[kg/s],
S_FLOW[kg/s], S_SOURCE[kg/s], xLOL[m], rLOL[m], fclLOL[-], t_soc\n');
index_t_guardar = 1;
fprintf('Main loop over %d trajectories: \n',length_Rr);

t = dt;

while t<t_final
    %S = sqrt(2*1.030431289 * t);%% s[m] t[s] penetracion analitica
    % S = interp1(T_dicom,S_dicom,t); %penetracion dicom
    index_S = find(S>x,1,'last');
    fprintf('t[s] = %d --- ',t);

    CPUtime = zeros(length_x,length_Rr);
    SOLVEQ = zeros(length_x,length_Rr);

    t_residence = zeros(length_x,length_Rr);
    num_iter = zeros(length_x,length_Rr);

    for i=IL_index:index_S

        dx = x(i)-x(i-1);

        u(i,1) = ucl(i);
        f(i,1) = fcl(i);

        % Loop over radial coordinates
        % On-axis positions have to be skipped
        num_iter(i,:) = 1;

```

```

for k = 2:length_Rr
    tic;

    u(i,k) = ucl(i)*u_profile(k);
    f(i,k) = fcl(i)*f_profile(k);

    dr = rk(i,k)-rk(i,k-1);

    t_residence(i,k) = t_residence(i,k-1) + dx*0.5*(1/u(i,k)+1/u(i,k-1));

    Yc_inert(i,k) = interp1_Z(Zv_table,Yc_inert_table,ExpZ,f(i,k));
    Yc_steady(i,k) = interp1_Z(Zv_table,Yc_steady_table,ExpZ,f(i,k));

    if bool_implicito
        metodo = 'implicito';
        %Try to solve Conserv Equation
        C1 = 1;
        C0 = 0;

        % Evaluation in C1
        Yc1 = Yc_inert(i,k)+C1*(Yc_steady(i,k)-Yc_inert(i,k));
        wc(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,wc_table_m,C1,f(i,k));

        if(bool_rholocal)
            rho(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,rho_table_m,C1,f(i,k));
        end
        m_wc(i,k) = 0.5*dr*(wc(i,k)*rk(i,k)+wc(i,k-1)*rk(i,k-1));
        SOURCE = (m_wc(i,k)+m_wc(i-1,k))*pi*dx;

        %%%%%%%%%%%
        Ac = pi*dr*rho(i,k)*rk(i,k);
        Bc = dx/2*pi*dr*rho(i,k)*rk(i,k)/dt;
        Cc_steady = pi*dr*rho(i,k-1)*u(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1)-2*pi*mdot_Yc(i-1,k)-
        SOURCE;
        Cc = Cc_steady + dx/2*pi*dr*rho(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1)/dt+dx*pi*m_Yc(i-1,k)/dt-
        intV_Yc_ant(i,k)/dt;

        fYc1 = Yc1+Cc/(Ac*u(i,k)+Bc);

        % Evaluation in C0
        Yc0 = Yc_inert(i,k)+C0*(Yc_steady(i,k)-Yc_inert(i,k));
        wc(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,wc_table_m,C0,f(i,k));

        if(bool_rholocal)
            rho(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,rho_table_m,C0,f(i,k));
        end

```

```

m_wc(i,k) = 0.5*dr*(wc(i,k)*rk(i,k)+wc(i,k-1)*rk(i,k-1));
SOURCE = (m_wc(i,k)+m_wc(i-1,k))*pi*dx;

Ac = pi*dr*rho(i,k)*rk(i,k);
Bc = dx/2*pi*dr*rho(i,k)*rk(i,k)/dt;
Cc_steady = pi*dr*rho(i,k-1)*u(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1)-2*pi*mdot_Yc(i-1,k)-
SOURCE;
Cc = Cc_steady + dx/2*pi*dr*rho(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1)/dt+dx*pi*m_Yc(i-1,k)/dt-
intV_Yc_ant(i,k)/dt;

fYc0 = Yc0+Cc/(Ac*u(i,k)+Bc);

    if(fYc0*fYc1>0)
    % No apparent solution -> out of the table
    SOLVEQ(i,k) = 1;
    Ycaux = Yc0 - fYc0 * (Yc1 - Yc0) / (fYc1 - fYc0);
    Caux = (Ycaux-Yc_inert(i,k))/(Yc_steady(i,k)-Yc_inert(i,k));
    if Caux>1
        Caux = 1;
        fYcaux = 0;
        Ycaux = Yc_steady(i,k);
    elseif Caux <0
        Caux = 0;
        fYcaux = 0;
        Ycaux = Yc_inert(i,k);
    end

else
    % Search for a solution
    SOLVEQ(i,k) = 0;
    fYcaux = 1;
    Ycaux = 1;

    while (abs(fYcaux/Ycaux)>conv)
        Ycaux = Yc0 - fYc0 * (Yc1 - Yc0) / (fYc1 - fYc0);
        Caux = (Ycaux-Yc_inert(i,k))/(Yc_steady(i,k)-Yc_inert(i,k));

        wc(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,wc_table_m,Caux,f(i,k));
            if(bool_rholocal)
                rho(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,rho_table_m,Caux,f(i,k));
            end

            m_wc(i,k) = 0.5*dr*(wc(i,k)*rk(i,k)+wc(i,k-1)*rk(i,k-1));
            SOURCE = (m_wc(i,k)+m_wc(i-1,k))*pi*dx;

Ac = pi*dr*rho(i,k)*rk(i,k);
Bc = dx/2*pi*dr*rho(i,k)*rk(i,k)/dt;

```

```

Cc_steady = pi*dr*rho(i,k-1)*u(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1)-2*pi*mdot_Yc(i-1,k)-
SOURCE;
Cc = Cc_steady + dx/2*pi*dr*rho(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1)/dt+dx*pi*m_Yc(i-1,k)/dt-
intV_Yc_ant(i,k)/dt;

fYcaux = Ycaux+Cc/(Ac*u(i,k)+Bc);

if (fYcaux*fYc0 > 0)

    Yc0 = Ycaux;
    fYc0 = fYcaux;
else

    Yc1 = Ycaux;
    fYc1 = fYcaux;
end
num_iter(i,k) = num_iter(i,k) + 1;

end

end

Yc(i,k) = Ycaux;
C(i,k) = Caux;

else
metodo = 'explicito';
intV_Yc(i,k) = intV_Yc_ant(i,k) + BALANCE_UNSTEADY(i,k)*dt;
m_Yc(i,k) = intV_Yc(i,k)/pi/dx - m_Yc(i-1,k);
Yc(i,k) = (m_Yc(i,k)/0.5/dr-rho(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1))/rho(i,k)/rk(i,k);
if(Yc(i,k)>Yc_steady(i,k))
    Yc(i,k)= Yc_steady(i,k);
end
if(Yc(i,k)<Yc_inert(i,k))
    Yc(i,k) = Yc_inert(i,k);
end

C(i,k) = (Yc(i,k)-Yc_inert(i,k))/(Yc_steady(i,k)-Yc_inert(i,k));

end

wc(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,wc_table_m,C(i,k),f(i,k));
if(bool_rholocal)
rho(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,rho_table_m,C(i,k),f(i,k));
end

```

```

T(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,T_table_m,C(i,k),f(i,k));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Species
CO2(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,CO2_table_m,C(i,k),f(i,k));
CH2O(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,CH2O_table_m,C(i,k),f(i,k));
OH(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,OH_table_m,C(i,k),f(i,k));
C2H2(i,k) = interp2_CZ(Cv_table,Zv_table,ExpC,ExpZ,C2H2_table_m,C(i,k),f(i,k));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

m_wc(i,k) = 0.5*dr*(wc(i,k)*rk(i,k)+wc(i,k-1)*rk(i,k-1));
m_Yc(i,k) = 0.5*dr*(rho(i,k)*Yc(i,k)*rk(i,k)+rho(i,k-1)*Yc(i,k-1)*rk(i,k-1));
mdot_Yc(i,k) = 0.5*dr*(rho(i,k)*u(i,k)*Yc(i,k)*rk(i,k)+rho(i,k-1)*u(i,k-1)*Yc(i,k-1)*
rk(i,k-1));

BALANCE_SOURCE(i,k) = (m_wc(i,k)+m_wc(i-1,k))*pi*dx;
BALANCE_FLOW(i,k) = 2*pi*(mdot_Yc(i,k)-mdot_Yc(i-1,k));
if bool_implicito
    BALANCE_UNSTEADY(i,k) = ((m_Yc(i,k)+m_Yc(i-1,k))*pi*dx-intV_Yc_ant(i,k))/dt;
    BALANCE_NET(i,k) = BALANCE_UNSTEADY(i,k) + BALANCE_FLOW(i,k)-
    BALANCE_SOURCE(i,k);
else
    BALANCE_UNSTEADY(i,k) = BALANCE_SOURCE(i,k) - BALANCE_FLOW(i,k);
end

intV_Yc_ant(i,k) = (m_Yc(i,k)+m_Yc(i-1,k))*pi*dx;

CPUtime(i,k) = toc;
end

end
maxC = max(max(C)); %%%(i,k)
maxwc = max(max(wc));
maxT = max(max(T));

%% Calculation of ID & LOL
if maxT > T_ignicion
    t_soc(indexLOL) = t;

    % Find threshold in T, and corresponding location closest to nozzle
    indexTsup = find(T>=T_ignicion);
    [rowLOL,colLOL] = ind2sub([length_x length_Rr],indexTsup);
    [rowLOL,posLOL] = min(rowLOL);
    colLOL = colLOL(posLOL);

    % Record LOL
    xLOL(indexLOL) = xi(rowLOL,colLOL);
    rLOL(indexLOL) = rk(rowLOL,colLOL);

```

```
fclLOL(indexLOL) = fcl(rowLOL);
```

```
end
```

```
fprintf('maxC = %f - maxwc = %f - maxT = %f\n',maxC,maxwc,maxT);  
fprintf(filetemp2,'%g, %f, %f, %f, %f, %f, %f, %f, %f, %f, %f\n', t, S, maxC, maxwc, maxT,  
sum(BALANCE_UNSTEADY(:)), sum(BALANCE_FLOW(:)), sum(BALANCE_SOURCE(:)),  
xLOL(indexLOL), rLOL(indexLOL), fclLOL(indexLOL), t_soc(indexLOL));
```

```
if index_t_guardar<=length(t_guardar)
```

```
if t>=t_guardar(index_t_guardar)
```

```
    fprintf('Saving xrdata file\n');
```

```
    xrdat_DICOM.t = t;
```

```
    xrdat_DICOM.xi = xi;
```

```
    xrdat_DICOM.rk = rk;
```

```
    xrdat_DICOM.f = f;
```

```
    xrdat_DICOM.u = u;
```

```
    xrdat_DICOM.x = x;
```

```
    xrdat_DICOM.rR = rR;
```

```
    xrdat_DICOM.R = R;
```

```
    xrdat_DICOM.Rst = Rst;
```

```
    xrdat_DICOM.wc = wc;
```

```
    xrdat_DICOM.Yc = Yc;
```

```
    xrdat_DICOM.rho = rho;
```

```
    xrdat_DICOM.C = C;
```

```
    xrdat_DICOM.T = T;
```

```
    xrdat_DICOM.CO2 = CO2;
```

```
    xrdat_DICOM.CH2O = CH2O;
```

```
    xrdat_DICOM.OH = OH;
```

```
    xrdat_DICOM.C2H2 = C2H2;
```

```
    xrdat_DICOM.maxC = maxC;
```

```
    xrdat_DICOM.maxwc = maxwc;
```

```
    xrdat_DICOM.maxT = maxT;
```

```
    xrdat_DICOM.m_wc = m_wc;
```

```
    xrdat_DICOM.m_Yc = m_Yc;
```

```
    xrdat_DICOM.mdot_Yc = mdot_Yc;
```

```
    xrdat_DICOM.intV_Yc_ant = intV_Yc_ant;
```

```
    xrdat_DICOM.num_iter = num_iter;
```

```
    xrdat_DICOM.SOLVEQ = SOLVEQ;
```

```

xrdat_DICOM.BALANCE_NET = BALANCE_NET;
xrdat_DICOM.BALANCE_FLOW = BALANCE_FLOW;
xrdat_DICOM.BALANCE_SOURCE = BALANCE_SOURCE;
xrdat_DICOM.BALANCE_UNSTEADY = BALANCE_UNSTEADY;

xrdat_DICOM.xLOL = xLOL(indexLOL);
xrdat_DICOM.rLOL = rLOL(indexLOL);
xrdat_DICOM.fcLOL = fcLOL(indexLOL);

save(char(['xrdat_DICOM_',case_name,'_SR',num2str(flamelet.SR(index_SR)),'_t_',num2str(t*1e6,
'%05.0f'),'us_',metodo,'.mat']),'xrdat_DICOM');
clear xrdat_DICOM;

index_t_guardar = index_t_guardar+1;

end

end

t = t+dt;
indexLOL = indexLOL+1;
end

fclose(filetemp2);

```


DOCUMENTO II: PRESUPUESTO

Presupuesto total del trabajo

El objetivo del presente documento es estimar el coste de la inversión necesaria para llevar a cabo el presente proyecto. Se ha tenido en cuenta la naturaleza investigadora de este proyecto, por lo tanto, se ha decidido dividir el presupuesto en dos partes diferentes:

- Mano de obra
- Amortización de los equipos utilizados

Al dividir el coste en dos partes se podrá calcular toda la inversión necesaria. Los precios se han aplicado según las tarifas legales vigentes y la unidad monetaria es el euro €.

I. Cálculo de rendimientos

En este proyecto el coste de la mano de obra se atribuye a tres personas diferentes: el ingeniero tutor, el ingeniero asistente y el alumno desarrollador. Sin embargo, para poder conocer el coste del ingeniero asistente y el del alumno desarrollador primero se tiene que detallar el coste de mano de obra de un ingeniero aeronáutico titulado, Tabla 1.1:

SALARIO BRUTO MENSUAL	2600,00 €
Salario (12 pagas)	31200,00 €
Salario (2 pagas extra)	5200,00 €
Seguridad social (23,6 %)	7363,20 €
Desempleo (7,6 %)	2371,20 €
Formación profesional (0,9 %)	280,8 €
Fondo de garantía social (0,2 %)	62,40 €
Coste total para la empresa	46477,60 €

Tabla 1.1: Salario bruto mensual de un ingeniero aeronáutico titulado

El proyecto se ha desarrollado durante 8 meses, de los cuales se ha trabajado durante 22 días al mes y 6 horas diarias. El porcentaje del coste de mano de obra que se le asigna al ingeniero tutor es el 50%, media jornada, al ingeniero asistente es el 40% y al alumno desarrollador del trabajo es el 100%.

Concepto	Coste (€/día)
Salario diario	176,05

Tabla 1.2: Coste diario de un ingeniero aeronáutico

El salario mensual de un alumno desarrollador es el que recibe por un contrato prácticas:

Concepto	Coste (€/mes)	Coste (€/día)
Salario en prácticas	860,45	39,11

Tabla 1.3: Salario alumno desarrollador

	Coste diario (€/día)	Porcentaje (%)	Coste final por día (€/día)
Ingeniero tutor	176,05	50	88,02
Ingeniero asistente	176,05	40	70,42
Alumno desarrollador	39,11	100	39,11

Tabla 1.4: Coste diario por trabajador

II. Cálculo de la amortización de los equipos

En este proyecto el equipamiento utilizado era reducido. Se trataba de los ordenadores disponibles en los despachos del ingeniero tutor y del ingeniero asistente y el ordenador personal del alumno desarrollador. Por otro lado se calculará el coste de la climatización e iluminación asociado por persona.

Concepto	Precio unidad (€)
Ordenador ingeniero tutor	1500
Ordenador ingeniero desarrollador	1500
Ordenador alumno tutor: MacBook Pro Apple	2970,85

Tabla 1.5: Coste unitario de ordenadores

Para calcular la amortización de los equipos se utiliza la siguiente expresión:

$$A = \frac{P \cdot t \cdot a}{T}$$

dónde p es el coste total de los equipos en euros, t es el tiempo total trabajado, a es el porcentaje de utilización por unidad y T es la vida útil de los equipos. $A = 435 \text{ €}$

El coste total de la amortización de los equipos será: **435 €**

III. Cálculo de los equipos de climatización e iluminación por trabajador y mes

Concepto	Consumo	Coste (€)
Potencia facturada	5,75 kW x 22 días x 0,135035 €/kW día	17,0819275
Energía facturada	216 kWh x 0,143153 €/kWh	30,92
Impuesto sobre electricidad	5,11269632% s/50,33€	2,57
Alquiler equipos medida	22 días x 0,02663 €/día	0,59
Seguro protección de pagos	1 mes x 1€/mes	1
Coste total		52,16

Tabla 1.6: Coste consumo de electricidad

El coste total de los tres trabajadores durante todo el proyecto será de: **417,28 €**

IV. Licencias de software

Concepto	Coste (€/año)
Licencia Matlab R2014b	500
Licencia DICOM	Libre
Microsoft Office 2017	49

Tabla 1.7: Coste de licencias de software

El coste de las licencias para los tres ordenadores durante todo el proyecto será de: **1647 €**

V. Presupuesto total

Concepto	Coste (€)
Salarios brutos	52148,16
Amortización de los equipos	435
Consumo energético asociado	417,28
Licencias de software	1647
Base imponible	54647,34
IVA (21%)	11475,94
Coste total	66123,28

Tabla 1.8: Total presupuestado

El presupuesto total del trabajo asciende a la cantidad de **SESENTA Y SEIS MIL CIENTO VEINTITRÉS EUROS CON VEINTIOCHO CÉNTIMOS.**

