



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA

**TRABAJO FIN DE GRADO EN INGENIERÍA EN TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES**

# **APLICACIÓN DE UN MODELO 1D DE CHORROS A LA PREDICCIÓN DEL AUTOENCENDIDO EN CONDICIONES DE MOTORES DIESEL**

AUTOR: Joaquín Mora Morató

TUTOR: Dr. D. José M<sup>a</sup> García Oliver

Curso Académico: 2018-19



Aplicación de un modelo 1D de  
chorros a la predicción del  
autoencendido en condiciones de  
motores Diesel

Joaquín Mora Morató

Grado en Ingeniería en Tecnologías Industriales  
Universidad Politécnica de Valencia  
Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales

Curso 2018-2019

Valencia – Julio de 2019



# Agradecimientos

En primer lugar, quería mostrar mi agradecimiento a José María, mi tutor del trabajo, por concederme una oportunidad que no muchos alumnos pueden disfrutar, desarrollar el Trabajo de Final de Grado y al mismo tiempo completar las prácticas en una empresa. También, por permitirme ampliar mis conocimientos informáticos, pero sobretodo mis conocimientos en una de las aplicaciones de la ingeniería que más me gusta, la automoción, en concreto, en el ámbito de los motores de combustión. Por último, y no por ello menos importante, por haber estado siempre disponible para resolverme dudas y ayudarme a conseguir una visión global del ámbito en el que se aplica el proyecto.

En segundo lugar, agradecer también la buena disposición para ayudarme en todo lo que pudiera necesitar de los doctorandos Leonardo Pachano y Alba García, durante mi paso por el CMT.

Me gustaría agradecer también a la Universidad Politécnica de Valencia la formación que he recibido, no sólo académica sino también personal.

Para finalizar, agradecer a mi familia por haber estado siempre dispuestos a ayudarme y apoyarme en todo el camino que he recorrido durante estos cuatro años, pues gracias a ellos he llegado a ser la persona que soy.

# Índice general

RESUMEN .....	9
ÍNDICE DE FIGURAS .....	12
ÍNDICE DE TABLAS .....	15
TABLA DE SÍMBOLOS .....	16
<b>1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS:.....</b>	<b>23</b>
1.1. MARCO DEL TRABAJO.....	23
1.2. ANTECEDENTES.....	24
1.3. OBJETIVOS Y MÉTODO DE TRABAJO .....	25
1.4. ESTRUCTURA DEL DOCUMENTO .....	25
<b>2. CONCEPTOS PREVIOS: LA COMBUSTIÓN DE UN MOTOR DIESEL.....</b>	<b>29</b>
2.1. INTRODUCCIÓN.....	29
2.2. CONOCIMIENTOS PREVIOS.....	29
2.3. EL PROCESO DE COMBUSTIÓN: FASES .....	31
2.4. EL PROCESO DE ATOMIZACIÓN .....	32
2.5. EL PROCESO DE EVAPORACIÓN .....	33
2.6. EL PROCESO DE MEZCLA DE AIRE Y COMBUSTIBLE .....	36
2.6.1. <i>Variables macroscópicas</i> .....	36
2.6.1.1. Penetración del chorro.....	36
2.6.1.2. Ángulo del chorro.....	38
2.6.2. <i>Variables microscópicas</i> .....	38
2.6.2.1. Disposición y estructuración del tamaño y velocidad de la gota .....	38
2.6.3. <i>Longitud característica de mezcla</i> .....	39
2.6.4. <i>Tiempo característico de mezcla</i> .....	39
2.7. TIEMPO DE RETRASO DE ENCENDIDO .....	40
2.8. LA COMBUSTIÓN PREMEZCLADA .....	41
2.9. LA COMBUSTIÓN POR DIFUSIÓN.....	41
2.9.1. <i>Longitud intacta - "Lift – off Length" / LoL</i> .....	43
2.10. CONCLUSIONES.....	44
<b>3. LA HERRAMIENTA PARA EL ANÁLISIS: DICOM .....</b>	<b>47</b>
3.1. INTRODUCCIÓN.....	47
3.2. DEFINICIÓN DEL MODELO UNIDIMENSIONAL.....	47
3.2.1. <i>Caso estacionario: datos de entrada y ficheros de salida</i> .....	51
3.2.2. <i>Caso transitorio: datos de entrada y ficheros de salida</i> .....	54
3.2.3. <i>Antecedentes del caso reactivo en DICOM</i> .....	54
3.3. ECUACIÓN DE LA VARIABLE DE PROGRESO: PLANTEAMIENTO Y RESOLUCIÓN.....	55
3.3.1. <i>Definición de la variable de progreso</i> .....	55
3.3.2. <i>Concepto de trayectorias</i> .....	56
3.3.3. <i>Ecuación de balance de <math>Yc</math></i> .....	57
3.3.3.1. Método de resolución de la ecuación de transporte de la variable de progreso.....	59
3.3.3.2. Balance de $Yc$ en el caso transitorio .....	63
3.3.3.3. Balance de $Yc$ en el caso estacionario .....	65
3.3.4. <i>La ecuación de transporte de la variable de progreso y su acoplamiento en DICOM</i> .....	66
3.3.5. <i>Fichero de química tabulada: "flamelet"</i> .....	68
3.4. CONCLUSIONES.....	70
<b>4. RESULTADOS: CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN DEL MODELO .....</b>	<b>73</b>

4.1. INTRODUCCIÓN .....	73
4.2. CALIBRACIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES .....	74
4.3. ENSAYOS EXPERIMENTALES DE VALIDACIÓN .....	75
4.4. ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DEL <i>STRAIN RATE (SR)</i> .....	79
4.5. ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DEL MECANISMO QUÍMICO .....	84
4.6. ESTUDIO SOBRE LA INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA DEL AIRE DE LA CÁMARA DE COMBUSTIÓN .....	86
4.7. ESTUDIO SOBRE EL DESARROLLO DE INYECCIONES PARTIDAS .....	90
<b>5. CONCLUSIONES GLOBALES .....</b>	<b>97</b>
5.1. INTRODUCCIÓN .....	97
5.2. CONCLUSIONES .....	97
<b>BIBLIOGRAFÍA.....</b>	<b>101</b>
CAPÍTULO 1 .....	101
CAPÍTULO 2 .....	101
CAPÍTULO 3 .....	103
CAPÍTULO 4 .....	103
<b>ANEXO I: MANUAL DEL USUARIO .....</b>	<b>105</b>
<b>DOCUMENTO II: PRESUPUESTO .....</b>	<b>119</b>
PRESUPUESTO FINAL DEL PROYECTO .....	119



## Resumen

El modelado de chorros permite describir el comportamiento del combustible al ser inyectado en la cámara de combustión de los motores de encendido por compresión, con implicaciones importantes sobre las prestaciones y los contaminantes. Frente a las herramientas de cálculo tridimensional (3D) de la dinámica de fluidos computacional (CFD), de gran exactitud pero también de un coste computacional notable, el modelado unidimensional (1D) combina un coste computacional reducido, junto con un grado de predicción razonable. Ello los hace muy prácticos para cálculos sencillos de ingeniería en los que se busque la influencia de una variable paramétrica sobre el comportamiento del chorro.

El presente proyecto pretende desarrollar una herramienta 1D ya existente, denominada DICOM, que predice el desarrollo del chorro de combustible en cuanto a los procesos de evaporación, mezcla y combustión. Dicha herramienta no era predictiva en cuanto al proceso de combustión, habiendo de introducir el usuario las variables que indicaban cuándo y dónde se iniciaba la combustión, esto es, el tiempo de autoencendido y la distancia de despegue de llama. El trabajo ha consistido en la implementación de una ecuación de transporte para la denominada variable de progreso que permite predecir ambos parámetros mediante una tabulación química. El documento describe la implementación realizada en el modelo.

Una vez actualizado el modelo, se procede a realizar algunas simulaciones con el fin de poder calibrarlo, y validar que los cambios introducidos son los adecuados. Para ello se comparan los resultados de las simulaciones con otros obtenidos con datos experimentales.

# Abstract

Jets modeling allows describing the behaviour of the fuel when this one is injected into the combustion chamber of compression ignition engines, with important implications on performance and pollutants. Compared to computational fluid dynamics (CFD) three-dimensional (3D) calculation tools, which are highly accurate but also have a significant computational cost, one-dimensional (1D) modeling combines reduced computational cost with a reasonable level of prediction. This makes them very practical for simple engineering calculations in which the influence of a parametric variable on the behaviour of the jet is sought.

This project aims to develop an existing 1D tool, called DICOM, which predicts the development of the fuel stream in terms of evaporation, mixing and combustion processes. This tool was not predictive in terms of the combustion process, having to introduce the user the variables that indicated when and where combustion began, that is, the time of start of the combustion and the *“lift-off length”*. The work has consisted in the implementation of a transport equation for the progress variable that allows predicting both parameters by means of a chemical tabulation. The document describes the implementation carried out in the model.

Once the model has been updated, some simulations are carried out in order to calibrate it and validate that the changes introduced are the correct ones. To do this, the results of the simulations are compared with others obtained with experimental data.

## Resum

El modelatge de dolls permet descriure el comportament del combustible quan s'injecta en la càmera de combustió dels motors d'encesa per compressió, amb implicacions importants sobre les prestacions i els contaminants. Front a les ferramentes de càlcul tridimensional (3D) de la dinàmica de fluids computacional (CFD), de gran exactitud però també d'un cost computacional notable, el modelatge unidimensional (1D) combina un cost computacional reduït, junt amb un grau de predicció raonable. Això els fa molt pràctics per càlculs senzills d'enginyeria en què es busque la influència d'una variable paramètrica sobre el comportament del doll.

El present projecte pretén desenvolupar una ferramenta 1D ja existent, denominada DICOM, que prediu el desenvolupament del doll de combustible pel que fa als processos d'evaporació, mescla i combustió. Aquella ferramenta no era predictiva en quant al procés de combustió, introduint l'usuari les variables que indicaven quan i on s'iniciava la combustió, això és, el temps de autoencesa i la distància d'enlairament de la flama. El treball ha consistit en la implementació d'una equació de transport per a la denominada variable de progrés que permet predir ambdós paràmetres mitjançant una tabulació química. El document descriu la implementació realitzada en el model.

Una vegada actualitzat el model, es realitzen algunes simulacions amb el fi de poder calibrar-lo, i validar que els canvis introduïts són els adequats. Per fer això es comparen els resultats de les simulacions amb altres obtinguts amb dades experimentals.

# Índice de figuras

<b>Figura 2.1:</b> Tasa de inyección (curva superior) vs energía liberada (curva inferior) durante las fases de la combustión [2.15].....	31
<b>Figura 2.2:</b> Evolución del combustible durante la inyección, atomización seguida de la evaporación del combustible [2.2] .....	34
<b>Figura 2.3:</b> Variación en función del tiempo de la variación de masa, diámetro, temperatura, tasa de transferencia de calor aire-combustible, tasa de transferencia de calor al núcleo y tasa de evaporación de la gota de combustible durante la evaporación [2.8] .....	35
<b>Figura 2.4:</b> Fases de la combustión en un motor Diesel una vez se alcanza la fase cuasi-estacionaria de combustión por difusión [2.4].....	42
<b>Figura 3.1:</b> Esquema de cómo se organiza el flujo de información de DICOM [3.3] .....	48
<b>Figura 3.2:</b> Representación esquemática del modelo del chorro [3.3] .....	48
<b>Figura 3.3:</b> Representación esquemática general del modelo unidimensional [3.5] .....	51
<b>Figura 3.4:</b> Esquema de la definición de las trayectorias del chorro en DICOM .....	56
<b>Figura 3.5:</b> Discretización espacial de la primera versión del modelo [3.2] .....	57
<b>Figura 3.6:</b> Esquema de apoyo para entender la corrección en el volumen de control.....	58
<b>Figura 3.7:</b> Existe una solución dentro de los límites .....	61
<b>Figura 3.8:</b> Solución fuera de los límites del eje por la derecha, $C > 1$ para el cambio de signo. 62	
<b>Figura 3.9:</b> Solución fuera de los límites del eje por la izquierda, $C < 0$ para el cambio de signo .....	62
<b>Figura 3.10:</b> Esquema representativo del acoplamiento de la variable de progreso en DICOM 68	
<b>Figura 3.11:</b> Representación de la temperatura y el término fuente dentro de la flamelet en función de $f$ y $C$ .....	69
<b>Figura 4.1:</b> Sistema para la visualización de resultados de los ensayos experimentales [4.2] ...	74
<b>Figura 4.2:</b> Evolución de la temperatura en el chorro en el caso nominal de cálculo.....	76
<b>Figura 4.3:</b> Comparación de las penetraciones entre el modelo DICOM y resultados experimentales.....	77

<b>Figura 4.4:</b> Comparativa entre un caso de cálculo inerte y otro reactivo con el modelo DICOM .....	79
<b>Figura 4.5:</b> Mapa de la evolución temporal y espacial de la temperatura en el chorro para los casos: SR = 10 [1/s], SR = 50 [1/s], SR = 100 [1/s].....	80
<b>Figura 4.6:</b> Mapa de la evolución temporal y espacial de la temperatura en el chorro para los casos SR = 300 [1/s], SR = 500 [1/s], SR = 800 [1/s].....	82
<b>Figura 4.7:</b> Comparativa de LoL entre los SR simulados.....	83
<b>Figura 4.8:</b> Mapas de la evolución temporal y espacial de la temperatura para el mecanismo químico “Yao” (izquierda) y para el mecanismo químico “Nara” (derecha) .....	85
<b>Figura 4.9:</b> Mapa temporal y espacial de temperaturas para los casos de alta y baja temperatura del aire de la cámara con SR = 10 [1/s] .....	87
<b>Figura 4.10:</b> Mapas temporales de temperaturas y especies para los casos de alta y baja temperatura del aire de la cámara con SR = 300 [1/s].....	89
<b>Figura 4.11:</b> Mapa de temperaturas, formaldehído (CH <sub>2</sub> O) y del radical OH en una inyección corta de 500 microsegundos .....	91
<b>Figura 4.12:</b> Representación de la penetración y del formaldehído en el experimento de Sandía [4.6] .....	92
<b>Figura 4.13:</b> Mapa de temperaturas, formaldehído y del radical OH en una inyección partida, con 500 microsegundos de inyección, 500 microsegundos de parada y unos últimos 500 microsegundos de reinyección.....	93
<b>Figura 6.1:</b> Lista de ficheros que se requieren para poder usar el programa.....	105
<b>Figura 6.2:</b> Primera página de campos a rellenar dentro del ejecutable “DICOMing.exe” .....	106
<b>Figura 6.3:</b> Segunda ventana de campos a rellenar de entradas que definen el chorro.....	106
<b>Figura 6.4:</b> Tercera ventana de datos a rellenar relativa al tipo de discretización.....	107
<b>Figura 6.5:</b> Ventana de discretización libre .....	108
<b>Figura 6.6:</b> Cuarta ventana de datos de entrada relativos a la morfología del chorro.....	108
<b>Figura 6.7:</b> Quinta ventana de datos de entrada relativos a la tasa de inyección.....	109
<b>Figura 6.8:</b> Datos de entrada para una tasa de inyección derivada .....	110

<b>Figura 6.9:</b> Sexta ventana de datos de entrada del modelo relativos a la ley de mezcla .....	110
<b>Figura 6.10:</b> Ventana de datos para una ley de mezcla de spray o chorro gaseoso.....	111
<b>Figura 6.11:</b> Ventana de selección del caso estacionario.....	112
<b>Figura 6.12:</b> Segunda ventana de datos de entrada para el modelo estacionario.....	112
<b>Figura 6.13:</b> Ventana de datos relacionados con la morfología del chorro.....	113
<b>Figura 6.14:</b> Ventana de datos relacionados con la tasa de inyección .....	113
<b>Figura 6.15:</b> Datos de entrada para una tasa de inyección con entrada derivada .....	114
<b>Figura 6.16:</b> Ventana de datos relativos a la ley de mezclas. Opción de spray isoterma.....	114
<b>Figura 6.17:</b> Datos relativos a la ley de mezclas. Caso de spray o chorro gaseoso .....	115
<b>Figura 6.18:</b> Fichero de entrada que genera el ejecutable de la interfaz del usuario .....	116
<b>Figura 6.19:</b> Fichero “runDICOM.bat” para editar .....	116

# Índice de tablas

<b>Tabla 1:</b> Condiciones de los ensayos experimentales y los resultados de LOL y $\tau_{SOC}$ .....	75
<b>Tabla 2:</b> Salario bruto mensual de un ingeniero industrial titulado.....	119
<b>Tabla 3:</b> Salario diario que recibe un ingeniero industrial titulado .....	120
<b>Tabla 4:</b> Desglose del salario de un ingeniero desarrollador .....	120
<b>Tabla 5:</b> Coste diario por trabajador .....	120
<b>Tabla 6:</b> Coste unitario de los ordenadores .....	120
<b>Tabla 7:</b> Coste de las instalaciones.....	121
<b>Tabla 8:</b> Coste de las licencias informáticas .....	122
<b>Tabla 9:</b> Resumen total del presupuesto.....	122

# Tabla de símbolos

## Latinos

$A$	Área
$A_c, B_c, C_c, C_{c,steady}$	Constantes de ajuste experimental
$A_n$	Área mínima de la tobera
$C$	Variable de progreso normalizada
$C_{ik}$	Distribución en el chorro de la variable de progreso
$C_D$	Coefficiente de descarga
$C_v$	Coefficiente corrector de la velocidad
$d$	Diferencial perteneciente a una integral
$d_0$	Diámetro de la tobera
$E$	Energía de activación
$f$	Fracción de mezcla
$f_{aux}$	Variable auxiliar para el cálculo de la fracción de mezcla
$f_{ik}$	Distribución de la fracción de mezcla en el chorro
$f_{cl}$	Fracción de mezcla en el eje

$f(Y_c)$	Residuo de la función de la variable de progreso
$h$	Entalpía
$h_{cl}$	Entalpía en el eje
$H$	Distribución de entalpías en el chorro
$i$	Variable de discretización axial
$INT_{Y_c}$	Integral al volumen de la variable de progreso
$I_0$	Momento
$L_{mix}$	Longitud característica de mezcla
$LT$	Baja temperatura
$M_0$	Masa de combustible
$\dot{m}_f$	Gasto másico de combustible
$\dot{M}$	Flujo de cantidad de momento
$\dot{m}_{Y_c}$	Integral radial del flujo variable de progreso
$m_{Y_c}$	Integral radial de la variable de progreso
$MAX C$	Máximo valor de la variable de progreso en el chorro
$MAX T$	Máximo valor de temperatura en el chorro

$Pr$	Número de Prandtl
$r$	Constante universal de los gases
$r_k$	Radio del chorro
$\rho_{ik}$	Distribución de densidades en el chorro
$r_{LoL}$	Radio para el cual se establece el $LoL$
$r_{maxC}$	Radio para el cual se da el máximo de la variable de progreso
$S$	Penetración
$S_c$	Número de Schmidt
$SR$	Strain Rate
$t$	Tiempo
$t_{final}$	Tiempo final de cálculo
$t_{mix}$	Tiempo característico de mezcla
$t_{SOI}$	Tiempo de inicio de la inyección (Start Of Injection)
$T_{ik}$	Distribución de temperaturas en el chorro
$u$	Velocidad
$u_{cl}, u_{eje}$	Velocidad en el eje

$u_{ef}$	Velocidad eficaz
$u_{ik}$	Distribución de velocidades en el chorro
$ucl_{nou}$	Variable auxiliar para el cálculo de $ucl$
$V$	Volumen
$\dot{w}_c$	Término fuente
$xLoL$	Distancia axial para la que se establece el $LoL$
$x\ maxC$	Distancia axial para el máximo valor de $C$
$Y_c$	Variable de progreso
$Y_{f,eje}$	Fracción másica en el eje
$Y_{f,est}$	Fracción másica estequiométrica
$Z$	Fracción de mezcla

### Griegos

$\alpha$	Coefficiente de campana de la distribución Gaussiana
$\theta$	Ángulo de apertura del chorro
$\theta_k$	Ángulo de apertura del chorro para cada trayectoria
$\phi_{eq,ef}$	Diámetro equivalente efectivo

$\phi_{ef}$	Diámetro efectivo
$\rho_a$	Densidad del aire
$\rho_f$	Densidad del combustible
$\Delta p$	Incremento de presión
$\Delta r$	Incremento radial
$\Delta x$	Incremento axial
$\Delta t$	Incremento temporal
$\tau_{soc}$	Tiempo de retraso (Start Of Combustion)

#### Subíndices

0, 1	Extremos del eje axial
$a$	Gas ambiente
$cl$	Variable referida al eje
$ef$	Eficaz
$eq$	Equivalente
$est$	Estequiométrica

<i>exp</i>	Experimental
<i>D</i>	Descarga
<i>f</i>	Combustible
<i>ik</i>	Que pertenece a las variables discretizadas axial-radialmente
<i>mix</i>	Mezcla
<i>SOC</i>	Inicio de la combustión
<i>SOI</i>	Inicio de la inyección
<b>Siglas</b>	
<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>LoL</i>	Lift-off length–Longitud donde se estabiliza el frente de llama
<i>MCIA</i>	Motor de Combustión Interna Alternativo
<i>MEC</i>	Motor de Encendido por Compresión
<b>Especies químicas</b>	
<i>CH<sub>2</sub>O</i>	Formaldehido
<i>CO<sub>2</sub></i>	Dióxido de carbono

<i>HC</i>	Hidrocarburos
<i>H<sub>2</sub>O</i>	Agua
<i>NO<sub>x</sub></i>	Óxidos de nitrógeno
<i>OH</i>	Radical hidroxilo
<i>SO<sub>2</sub></i>	Óxido de azufre

# DOCUMENTO I: MEMORIA

## Capítulo I

### 1. Introducción y objetivos:

#### 1.1. Marco del trabajo

Desde sus inicios los motores de combustión interna alternativos de Diesel de inyección directa estaban destinados al transporte de grandes vehículos, como el transporte marítimo y a la producción de electricidad en centrales térmicas.

Sin embargo, al reducir su cilindrada de modo que se puedan aplicar en automoción, hay que cambiar su morfología/estructura para poder adecuarse a regímenes de giro más elevados. Estos cambios influyen en procesos muy importantes como son la inyección, atomización y evaporación, entre otros.

A pesar del fuerte crecimiento que está experimentando el sector de la automoción híbrida y eléctrica este último año, la automoción impulsada por motores de combustión interna alternativos (MCIA) está en un proceso de renovación y desarrollo, promovido por dos objetivos muy claros: la reducción del consumo de combustible y la reducción en la cantidad de emisiones contaminantes. Este marco de desarrollo y progreso está fuertemente influenciado por la estricta normativa vigente en cuanto a emisiones y rendimiento de los MCIA.

Uno de los sistemas que juega un papel clave es el sistema de inyección, pues influye en gran medida en el proceso de mezcla de aire y combustible. Este proceso es muy importante ya que, si se lleva a cabo de una manera eficaz, permite alcanzar unos niveles de contaminación reducidos, una mayor eficiencia térmica y un menor consumo.

Para conseguir ahondar más en el estudio del proceso de inyección se han desarrollado varias técnicas que se van a explicar:

- Técnicas ópticas aplicadas [1.5]: permite lograr relaciones causa-efecto mediante la comparación de resultados teóricos y experimentales [1.1], tales como, la visualización Schlieren para la penetración y el tiempo de retraso, o Ando Istar, que mediante la radiación de la llama se consigue medir la concentración de las especies. En concreto, interesa la concentración de  $OH$ , con la cual se consigue calcular el “*Lift-off Length*” o distancia de despegue de la llama [6].

- Modelos de dinámica computacional de fluidos (CFD): este método ofrece grandes ventajas sobre enfoques experimentales gracias a la gran cantidad de información que son capaces de proporcionar tanto espacial como temporalmente. Además, una de sus principales ventajas es que permiten reducir el coste final del producto. Por el contrario, los modelos actuales no permiten una predicción completa, por tanto, necesitan de datos experimentales y de condiciones iniciales y de contorno.

A pesar de que todas estas técnicas permiten comprender de manera eficaz los procesos que tienen lugar durante la inyección-combustión dentro de un MCIA, es necesario conseguir un modelo que sea capaz de predecir lo que ocurre dentro de este tipo de motor, y así poder conocer qué sucede y cómo se desarrolla el chorro.

## 1.2. Antecedentes

Tras haber definido el contexto en el que se ha desarrollado el trabajo se van a explicar los objetivos marcados. El fin último de este trabajo es proporcionar a las empresas de automoción un programa de modelado capaz de simular qué ocurre dentro de la cámara de combustión de un motor durante la inyección y el quemado. Se debe considerar que existen ya programas complejos que realizan estos cálculos, como los CFD explicados anteriormente. Sin embargo, estos programas tienen un elevado coste computacional, lo que hace que un único cálculo dure días. Con códigos 1D como DICOM se simplifica mucho, consiguiendo un cálculo en un tiempo de apenas unas pocas horas, pero eso sí a costa de obtener menos información que con un CFD.

El modelo DICOM ha sido desarrollado en el Departamento de Máquinas y Motores Térmicos de la UPV atendiendo a los criterios de sencillez y bajo coste de cálculo antes comentados. Su evolución ha pasado por los siguientes hitos:

- El trabajo de Antonio Sanchis [1.4] y Maica Saiz [1.3]: donde se desarrolló el código de programación desde cero. En estos proyectos, DICOM era capaz de calcular un modelo estacionario y un transitorio, entre los que se podía elegir un caso inerte o reactivo, pero en los que el modelo reactivo no era predictivo, como se explicará en el capítulo 3.
- El trabajo de Rafael Colomina [1.2]: durante este proyecto se implementó la resolución de un caso reactivo predictivo, pero de manera desacoplada. DICOM no se vio modificado, pero se programó un *Script* de Matlab que permitía la resolución de la ecuación de conservación de la variable de progreso.

### 1.3. Objetivos y método de trabajo

El objetivo principal es la implementación de una funcionalidad adicional en DICOM, mediante la cual se pueda predecir el inicio de la reacción de combustión temporal y espacialmente. Ello implicará la resolución de una ecuación de transporte adicional de la llamada variable de progreso, que incluye la información de la cinética química. La resolución de esta variable ha de plantearse en 2D, puesto que no tiene perfiles autosimilares. Así pues, los pasos han sido:

- Lectura de la información de la cinética química: se han desarrollado una serie de funciones que permiten leer y trabajar con la información incluida en unos ficheros de química tabulada, llamados "*flamelets*".
- Implementación de la resolución de la variable de progreso, variable que define el paso de inerte a reactivo.
- Acoplamiento con las otras variables de resolución del problema lo cual permite resolver tanto el cálculo de la variable de progreso como el de la fracción de mezcla y la velocidad de forma simultánea, además de tener en cuenta cómo afecta la combustión al flujo local.

### 1.4. Estructura del documento

En este apartado se va a exponer la manera en queda distribuido el trabajo. Éste se compone de 5 capítulos, divididos en apartados y subapartados, con el propósito de justificar y detallar el trabajo que se describe.

El primer capítulo, el cual está finalizando con este apartado, sitúa el trabajo en la disciplina de la automoción, concretamente en los motores de combustión interna alternativos. Además, se exponen los objetivos y los pasos que se han seguido para alcanzarlos.

En el Capítulo 2, se explica de manera breve pero detallada muchos conceptos necesarios para entender la base del trabajo. También se establece la terminología que se va a utilizar y se describen los sucesos más importantes que tienen lugar durante el proceso de inyección-combustión.

La primera parte del capítulo siguiente define el modelo DICOM: cómo funciona la interfaz del usuario, qué ficheros o datos necesita el programa y qué resultados proporciona una vez acaban los cálculos.

Una vez concluye esta primera parte, se procede a explicar y desarrollar el algoritmo que se ha implementado en la nueva versión de DICOM, para poder resolver la ecuación de conservación de la variable de progreso. Durante esta segunda parte, se explica cómo funcionan los dos modelos reactivos que se han implementado: el estacionario y el transitorio.

Durante el desarrollo del Capítulo 4 se analizan los resultados obtenidos con el modelo reactivo de DICOM. Para ello se han realizado diversos cálculos con el modelo y se han comparado con datos experimentales, de tal forma que se pueda evaluar la precisión con la que DICOM predice el comportamiento reactivo de un chorro Diesel.

Por último, en el Capítulo 5, tras haber analizado toda la información disponible, se incluyen las conclusiones a las que se ha llegado una vez finalizado el trabajo.





## Capítulo 2:

### 2. Conceptos previos: la combustión de un motor Diesel

#### 2.1. Introducción

Para poder entender los fundamentos teóricos, tanto físicos como químicos, se debe hacer una pequeña introducción y una previa definición de algunos conceptos básicos que ayudarán a comprender mejor todos los procesos que tienen lugar durante la inyección y la combustión.

El comienzo de este apartado se tratará de una forma conceptual, pues los fenómenos físicos que tienen lugar dentro de la cámara de combustión tienen una terminología que habrá que explicar, en lo referente a características y variables principales.

Toda esta introducción teórica servirá de base a que se pueda interpretar de manera correcta y sencilla todos los datos que se obtienen de manera experimental y con cálculos realizados con DICOM, a fin de poder realizar un posterior análisis.

El capítulo queda estructurado de forma que, en primer lugar, se definirá unos conceptos previos relacionados con la combustión del chorro. Tras este apartado se detallan las distintas fases en las que se divide el proceso de inyección y, por último, se detallará de manera precisa el proceso de inyección combustión.

#### 2.2. Conocimientos previos

El año 1876 marca la fecha de inicio del desarrollo de los motores de combustión interna alternativos, cuando Nicolaus August Otto, ingeniero alemán, creó el primer motor gasolina de carga comprimida, el cual sirvió de base para el futuro desarrollo de los MCIAs.

Esta tecnología se basa en la transformación de la energía química contenida en el combustible en energía mecánica, mediante la combustión de la mezcla aire-combustible en unas determinadas condiciones. Se puede distinguir entre motores 4 tiempos (4T) y 2 tiempos (2T). Dentro de los 4T destacan los motores de Beas de Rochas y el de Otto.

El objeto de estudio son los motores Diesel 4T, estos motores reciben este nombre en honor a su inventor Rudolf Diesel. En estos motores la combustión se produce debido a la autoignición del combustible a causa de las altas temperaturas y presiones que se generan durante la carrera de compresión. De hecho, dentro de los MCI los motores Diesel se catalogan como MEC, motores de encendido por compresión. En sus inicios el Diesel se inyectaba con aire comprimido, el cual atomizaba el combustible y se introducía en el motor mediante una tobera.

El mayor reto a la hora de controlar la inyección-combustión es controlar el instante de encendido, pues no es una tarea sencilla ya que éste depende tanto del espacio como del tiempo. La manera correcta de hacerlo es, en un primer momento, introducir sólo aire durante la fase de admisión y, sólo cuando la carrera de compresión está llegando al final, inyectar el combustible, pues es en este momento cuando se encuentra en condiciones de presión y temperatura adecuadas para producir el autoencendido.

En el ciclo ideal del motor Diesel no se considera la renovación de la carga y se asume un fluido que evoluciona como un gas perfecto. Sin embargo, todos los procesos son reales e irreversibles.

En el desarrollo de este proyecto se considera un chorro líquido al que se le llama chorro de inyección, el cual pasará por una tobera debido a un salto de presiones. A continuación, se definirán las distintas posibilidades que existen, en función de las características de la especie química que se encuentra en el interior de la cámara y la especie inyectada.

Las diferentes situaciones son:

- Combustible / especie inyectada: gaseosa o líquida, normalmente suele tener mayor densidad.
- Especie presente en la cámara de combustión: normalmente aire y de menor densidad.

Para caracterizar el chorro hay que definir las condiciones de las especies y de las leyes de mezcla que dependen directamente de dichas especies. En función de estos parámetros se clasifican los diferentes tipos de chorros:

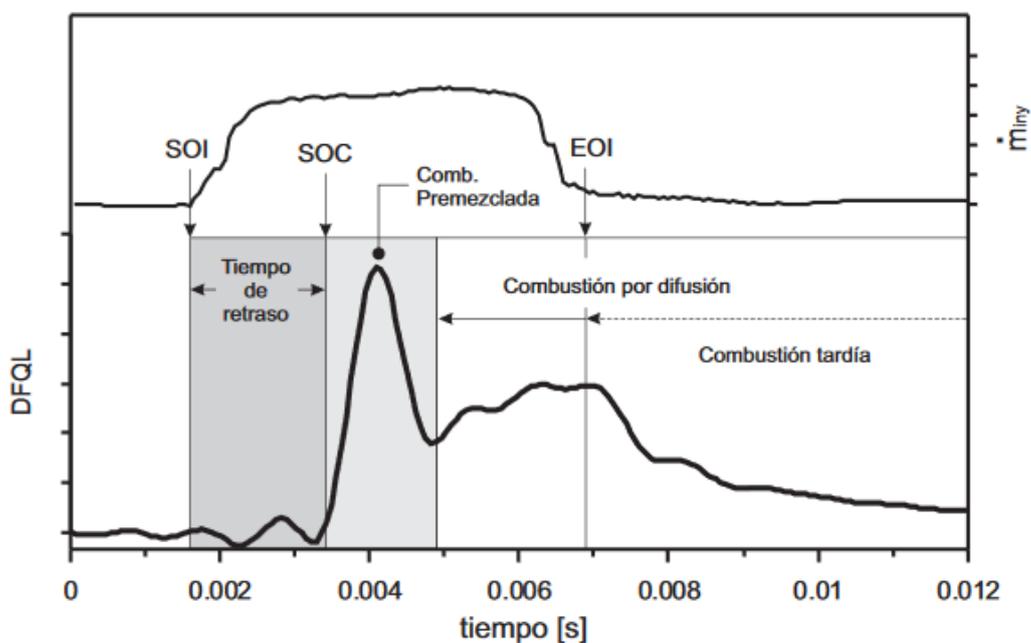
- Chorro gaseoso reactivo: se produce reacción entre las especies presentes durante la combustión y, por tanto, se producen nuevas especies.
- Chorro gaseoso inerte no isotermod: no existe reacción entre las especies, por lo que no se producen nuevas especies. Además, las temperaturas de las distintas especies son diferentes.

- Chorro gaseoso inerte isoterma: no existe reacción entre las especies, por lo que no se producen nuevas especies. En este caso, la temperatura de las especies es la misma.
- *Spray* reactivo: la especie inyectada se encuentra en estado líquido y se produce reacción entre ésta y el resto de especies presentes, generando nuevas especies.
- *Spray* inerte: la especie inyectada se encuentra en fase líquida, no se produce reacción entre ésta y el resto de especies presentes, por tanto, no se generan nuevas especies.

### 2.3. El proceso de combustión: Fases

Hay que recordar que el proyecto se desarrolla dentro del marco de los motores Diesel de inyección directa. La combustión es un proceso que engloba una serie de fenómenos físico-químicos que tienen como resultado la liberación de energía por parte del combustible.

La forma más eficaz de evaluar el proceso de combustión es estudiar de manera simultánea la evolución temporal - que en un motor puede ser bien por unidad de tiempo o bien por ángulo girado del cigüeñal - tanto de la cantidad de combustible inyectado (caudal másico) como de la cantidad de energía liberada por parte del combustible.



**Figura 2.1:** Tasa de inyección (curva superior) vs energía liberada (curva inferior) durante las fases de la combustión [2.15]

Como se puede observar, en la Fig. 2.1 se comparan dos variables importantes que permiten caracterizar el proceso de combustión, de donde se pueden destacar tres fases principales [2.8]:

- Fase de retraso: una vez comienza el proceso de inyección, no existe una liberación de calor importante. Durante esta fase se produce la mezcla del aire y el combustible, produciéndose la atomización y la evaporación del combustible. Debido a la presencia de oxígeno la mezcla es inestable. Comienzan las pre-reacciones químicas (de baja intensidad) que acaban por producir el autoencendido del chorro, dando lugar a la siguiente fase del proceso de combustión.
- Fase de combustión premezclada: al inicio de esta fase se produce una reacción exotérmica, en la cual se puede ver una gran liberación de energía durante la cual se alcanza el máximo valor de energía liberada debido a la acumulación de mezcla, donde se quema todo el combustible que se encuentra dentro de los límites de inflamabilidad (estos límites están condicionados por la mezcla). Tras este pico de energía se produce un mínimo local que da lugar al inicio de la siguiente fase.
- Fase de combustión por difusión: en esta fase, mientras se mezcla la masa inyectada de combustible, éste se va quemando. Esto provoca unas tasas de liberación de energía menores, comprendidos entre el máximo y el mínimo alcanzado en la fase anterior, pues durante dicha fase se ha quemado toda la masa que había sido inyectada. El chorro pasa a comportarse de forma cuasi-estacionaria.

La cantidad de movimiento generado al introducir el chorro de combustible por la tobera condiciona el proceso de mezcla aire-combustible. Cuando acaba la inyección se produce una caída en la energía liberada, debida a la falta de energía cinética provocada por dicho corte en la inyección.

## 2.4. El proceso de atomización

El proceso de atomización es el proceso en el que el combustible se divide en gotas de un tamaño muy pequeño, de esta forma se puede aumentar la superficie de contacto aire-combustible, favoreciendo el proceso de mezcla y de evaporación. Es el primer proceso que tiene lugar una vez el combustible se inyecta a través de la tobera.

La atomización que se produce en el motor Diesel de inyección directa genera unas gotas de tamaño minúsculo, gracias a esto se puede afirmar que, donde haya una gota de combustible,

la densidad será una correlación de las densidades del aire y del propio combustible lo que permite situar al chorro de este tipo de motores dentro de los chorros líquidos turbulentos.

Hasta que no se alcanza una cierta distancia axial desde la tobera, la atomización no se completa. Diferentes estudios afirman que esta distancia suele ser muy pequeña, a partir de la cual el chorro está formado por una fase líquida disgregada en su totalidad, englobada por la especie gaseosa, o sea, el aire de la cámara de combustión [2.14]. Dichos estudios formulan que el cálculo de la atomización es muy costoso, pero que se puede calcular de manera aproximada y más barata con la longitud intacta.

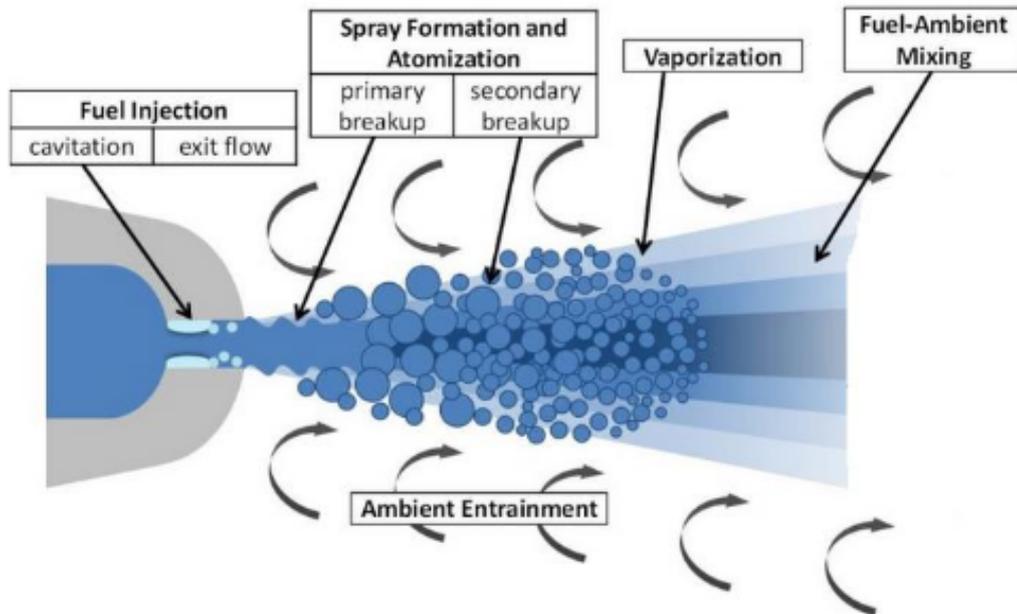
Todo esto lleva a concluir que, cuando un combustible es atomizado, está compuesto por infinidad de minúsculas gotas y que su comportamiento es más complejo que si se tratara de un *spray* (fase gaseosa), donde la transferencia de masa y cantidad de movimiento se produce a nivel molecular.

Aunque existen grandes diferencias entre un chorro líquido y uno gaseoso, la gran pérdida de velocidad que sufren las gotas atomizadas transfiere la cantidad de movimiento al aire de la cámara, provocando que el comportamiento de este chorro en fase líquida se comporte de la misma forma que un chorro en estado gaseoso. Gracias al pequeño tamaño en el que quedan disgregadas las partículas de combustible se alcanza un equilibrio dinámico (térmico y cinético).

## 2.5. El proceso de evaporación

Una vez el chorro se ha atomizado disgregándose en gotas, éstas empiezan a avanzar y los procesos de atomización se vuelven menos importantes, adquiriendo mayor importancia la mezcla con el aire. La interacción entre las gotas y el aire determinan la formación de la mezcla que influye de manera directa sobre el proceso de combustión.

El flujo de aire dentro del motor tiene un carácter turbulento, no estacionario y depende de diferentes parámetros relacionados con la geometría del motor y las condiciones de funcionamiento. Poder caracterizar el flujo de aire implica determinar los campos de velocidades para analizar posibles vórtices, turbulencias, etc.



**Figura 2.2:** Evolución del combustible durante la inyección, atomización seguida de la evaporación del combustible [2.2]

Se destacan dos procesos que tienen una importancia relevante en el proceso de mezcla y combustión, estos son, el análisis de velocidades de rotación de la carga (*swirl*) y de confinamiento de aire en el pistón (*squish*).

El aire dentro del motor se encuentra a alta temperatura, por lo que se produce un intercambio de energía donde las gotas de combustible ganan temperatura y van disminuyendo su tamaño hasta desaparecer. De esta forma el combustible va pasando de fase líquida a fase gaseosa [2.6].

Durante los primeros momentos de la inyección, la fase líquida llega hasta el frente del chorro (penetración máxima que alcanza el chorro), pero a partir de una cierta distancia denominada *longitud líquida máxima*, en inglés "*lift-of length*" (*LoL*), el combustible líquido ya no avanza con el frente, y la penetración de éste se produce ahora en forma gaseosa. La *longitud líquida máxima* se alcanza en el punto donde la masa de aire que engloba a una fracción de combustible sea suficiente para evaporarlo.

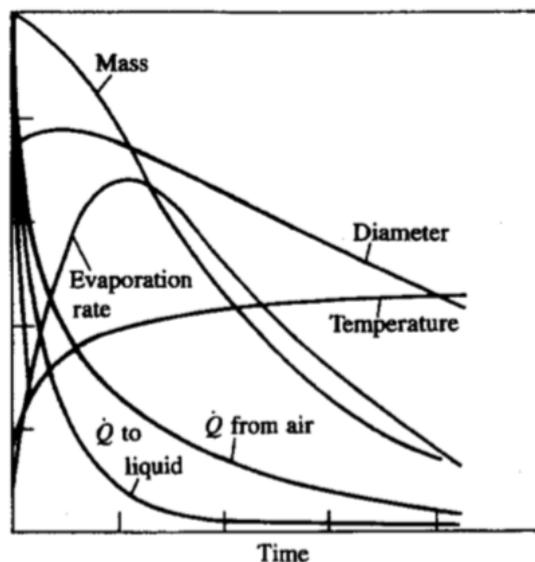
Esta *longitud líquida máxima* depende de una serie de parámetros, que según convenga permitirán acortarla o prolongarla. Entre ellos se encuentra el diámetro de la tobera [2.3], la temperatura y la densidad en la cámara [2.3], y las propiedades del combustible [2.3].

Analizando el proceso de evaporación en profundidad y considerando una gota de combustible a una temperatura próxima a la del ambiente, en condiciones de final de la carrera de compresión, se puede hablar de tres fenómenos que determinan la fase de evaporación:

1. La resistencia dinámica produce la desaceleración de gota de combustible.
2. Intercambio de energía entre la gota y el aire debido a la diferencia térmica.
3. Avance de la fracción de combustible evaporada con el frente.

Los dos factores que más influyen en la transferencia de energía entre aire y combustible son el gradiente de temperaturas y la velocidad a la que avanzan las gotas. Se producen dos efectos, en primer lugar, debido a la temperatura, la presión de vapor del combustible aumenta y por tanto la fracción de combustible evaporada, mientras que, a medida que la gota se va frenando, transfiriendo su energía cinética al ambiente, el coeficiente de transferencia de calor, debido a la convección entre aire y gota, disminuye.

Por tanto, se puede afirmar que el mayor intercambio de energía se produce al principio de la inyección y una vez se ha atomizado, pues es en este momento cuando la diferencia de temperaturas es mayor y cuando las gotas van a mayor velocidad.



**Figura 2.3:** Variación en función del tiempo de la variación de masa, diámetro, temperatura, tasa de transferencia de calor aire-combustible, tasa de transferencia de calor al núcleo y tasa de evaporación de la gota de combustible durante la evaporación [2.8]

## 2.6. El proceso de mezcla de aire y combustible

Si se vuelve a la Fig. 2.2 y se atiende a la fase de retraso del autoencendido, se puede observar que es aquí donde el aire y el combustible se mezclan. El proceso de mezcla tiene una ley perfectamente definida que permitirá que el chorro quemado de manera eficiente, esto es, con el mejor rendimiento y las menores tasas de contaminación posibles.

Es necesario regular de forma cualitativa la carga en el motor, ya que a pesar de que el motor siempre trabaja con la misma cantidad de aire, la fracción de mezcla se ve afectada. El proceso de mezcla se produce en un período de tiempo del orden de milisegundos. Este hecho afecta, por ejemplo, al régimen de giro, imponiendo unas limitaciones.

Se van a analizar una serie de fenómenos que ocurren durante la inyección para demostrar que en el estudio del chorro se pueden separar los procesos físicos de los químicos, facilitando así el análisis. De esta forma el chorro se encontrará en las siguientes condiciones: el combustible en fase líquida, isoterma, en ambiente inerte.

Los fenómenos en cuestión serán atomización, englobamiento de aire y evaporación. Como ya se ha definido anteriormente, el primero de todos es la disgregación del combustible en gotas de pequeño tamaño, las cuales se rodean del aire caliente de la cámara en el segundo fenómeno y, por último, la evaporación permite definir cuándo el chorro pasa de fase líquida a gaseosa. Esto permite averiguar un parámetro importante comentado en el apartado anterior, la *longitud líquida máxima*.

Lo primero, antes de definir estos fenómenos, es introducir la ecuación que establece la cantidad de masa de combustible que se inyecta, Ec. 2.1 [2.8]:

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

donde  $C_D$  es el coeficiente de descarga,  $A_n$  el área de la tobera para el mínimo diámetro,  $\rho_f$  la densidad del combustible y  $\Delta p$  el gradiente de presiones antes y después de la tobera.

### 2.6.1. Variables macroscópicas

#### 2.6.1.1. Penetración del chorro

La penetración del chorro es la distancia máxima que alcanza el frente, considerando como origen el orificio de salida de la tobera. Ésta depende fundamentalmente de la cantidad de movimiento del chorro a la salida de la tobera y del ángulo de apertura del chorro, como

deducen Naber y Siebers [2.10], donde evalúan la influencia de la densidad del ambiente de la cámara sobre la penetración.

En los motores Diesel de inyección directa tienden a ocurrir dos fenómenos que perjudican a la mezcla aire-combustible y, por tanto, empeoran el rendimiento de la combustión. Estos son la sobrepenetración y la subpenetración. El primero de ellos se produce cuando el combustible líquido choca con las superficies frías de la cámara, dando lugar a la reducción de las tasas de mezcla y aumentando la proporción de especies inquemadas o quemadas parcialmente. Por otro lado, el fenómeno de la subpenetración es el resultado de un mal aprovechamiento del aire, pues el aire presente en el contorno exterior de la cámara no entra en contacto con el combustible.

A fin de predecir la penetración del chorro se han desarrollado muchas correlaciones que parten de datos experimentales y de la teoría del chorro Diesel para el combustible atomizado.

Desantes et al. [2.5] desarrolla una fórmula que asume que existe una conservación del flujo de cantidad de movimiento  $\dot{M}$  axialmente. Esta afirmación permite obtener una ley para la penetración de un chorro Diesel que no cambia de fase líquida.

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

Con la cantidad de movimiento definida como:

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

Si se considera la expresión de la velocidad teórica, el flujo cantidad de movimiento vendría dado por:

$$\dot{M} = \frac{\pi}{4} \cdot \phi_{ef}^2 \cdot C_v^2 \cdot \Delta_p \quad (2.4)$$

Por último, introduciendo la fórmula (2.4) en la (2.2), la penetración quedaría:

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

Si se analiza término a término,  $\Delta_p$  en Pascales [Pa] es la diferencia de presión en la tobera de inyección,  $t$  en segundos [s] es el tiempo desde el inicio de la inyección,  $\rho_a$  en  $[kg / m^3]$  la densidad del aire de la cámara y  $\theta$  el ángulo del chorro. Todas las variables expresadas en el Sistema Internacional.

### 2.6.1.2. Ángulo del chorro

Este parámetro varía en función de la geometría de la tobera y de las condiciones en las que se inyecta, además de las condiciones del aire de la cámara y de las propiedades del combustible utilizado. Influye tanto en el proceso de mezcla como en el proceso de atomización [2.3].

En la siguiente ecuación se va a mostrar la dependencia del ángulo de inyección con las densidades del combustible y del aire de la cámara, junto con los parámetros geométricos de la tobera [10]. Hay que destacar que esta expresión es válida para una elevada presión de inyección y considerando un solo combustible, Ec. 2.6:

$$\tan(\theta/2) \propto (\rho_a/\rho_f) \quad (2.6)$$

## 2.6.2. Variables microscópicas

### 2.6.2.1. Disposición y estructuración del tamaño y velocidad de la gota

A pesar de que la distribución del Diesel a lo largo de la evolución del chorro es importante, también lo es una buena atomización del combustible que permita una gran superficie de contacto gota de combustible – aire para poder garantizar una evaporación completa. Se concluye que la distribución de las gotas depende tanto de parámetros de inyección, como de propiedades del aire y del combustible.

Existen algunos factores que pueden variar durante la inyección, entre ellos se encuentran, la presión de inyección, el área del orificio de inyección y por ende la velocidad de inyección, ya que ésta depende directamente del área. Estas posibles variaciones con el tiempo provocan que el proceso de pulverizado del chorro también pueda cambiar.

A parte de esta posible variación temporal, la atomización no se produce de igual forma en el seno del chorro y en los límites. Por tanto, al ser la distribución de las gotas dependiente de su tamaño, velocidad inicial y ubicación dentro de la zona de pulverización, se puede afirmar que el tamaño de la gota también dependerá de la posición dentro del chorro.

El diámetro medio de Sauter (SMD) es un promedio muy utilizado para el tamaño y distribución de partículas, que nos permite caracterizar la pulverización. El SMD se relaciona con dos parámetros del chorro: la tasa de evaporación y la ley de frenado de las gotas.

En la región desarrollada del chorro se pueden estimar los parámetros velocidad y fracción másica según dos ecuaciones, Ec. 2.7 y Ec. 2.8:

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

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

Estas ecuaciones demuestran que ambas variables, en el seno del chorro desarrollado, siguen un perfil exponencial [2.5], siendo  $Sc$  el número de Schmidt,  $\alpha$  el coeficiente de campana para la distribución Gaussiana y  $R$  el radio de semejanza del chorro.

### 2.6.3. Longitud característica de mezcla

La posición axial para la cual la fracción másica es igual a la estequiométrica  $Y_{f,est}$ , se denomina longitud característica de mezcla. Si se considera la ecuación 2.9 y se hace uso de las ecuaciones de conservación, tanto de cantidad de movimiento, como de masa de combustible, se llega a la siguiente ecuación, Ec. 2.10:

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

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

Atendiendo a la ecuación de cálculo de  $L_{mix}$ , se puede observar cómo los parámetros, diámetro efectivo  $\phi_{ef}$ , densidad del ambiente de la cámara  $\rho_a$  y el ángulo de apertura del chorro influyen directamente sobre esta variable.

### 2.6.4. Tiempo característico de mezcla

Tiempo que necesita el chorro para llegar a la longitud característica de mezcla, es decir, tiempo que tardará desde la inyección en alcanzar la fracción másica estequiométrica. Partiendo de la ecuación anteriormente definida Ec. 2.10, se puede determinar la expresión del tiempo característico de mezcla  $t_{mix}$ .

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

## 2.7. Tiempo de retraso de encendido

Durante la fase de retraso del encendido tiene lugar el proceso de mezcla de aire y combustible, por lo que el tiempo de retraso se define como el tiempo que tarda la mezcla aire-combustible en sufrir la auto-ignición, suponiendo que el instante inicial es el momento en el que se empieza a inyectar. Esto es debido a que la mezcla que se ha formado no es homogénea y, por tanto, es inestable.

Este parámetro es muy importante en el estudio sobre el funcionamiento del motor Diesel de inyección directa, pues va a condicionar muchos procesos que suceden a continuación. Esto condiciona la suavidad de funcionamiento del motor, su eficiencia, los posibles fallos durante el encendido, la facilidad de arranque y, algo muy importante hoy en día, las emisiones de contaminantes y de ruido.

Diversos estudios concluyen que, con presión y temperatura constantes, dos parámetros de importante influencia en el proceso de combustión son la presión y temperatura del aire en la cámara de combustión. Estos estudios experimentales [2.8] han permitido caracterizar la variable llamada: tiempo de retraso  $\tau_{soc}$  [s]. En este caso concreto con unas condiciones definidas y constantes, la expresión que permite su cálculo es sencilla, Ec. 2.12 [2.1]:

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

En esta expresión,  $A$  y  $n$  dependen del combustible, y para un combustible dado son constantes,  $E$  la energía de activación,  $P$  la presión de la cámara,  $T$  la temperatura y  $r$  la constante universal de los gases.

Hay que destacar, que esta fórmula es válida para tiempos de retraso pequeños, con escasa variación de  $P$  y  $T$ . Por el contrario, si se quiere evaluar procesos de combustión con tiempos de retraso superiores, habrá que recurrir a la siguiente expresión, Ec. 2.13 [2.10]:

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

En esta expresión  $t_{SOI}$  es el tiempo en el que comienza la inyección,  $\tau(t)$  la evolución temporal del tiempo de retraso a lo largo de la primera fase de la combustión, si hubiera condiciones de  $P$  y  $T$  constantes en el instante  $t$  y, por último,  $dt$  el incremento temporal.

## 2.8. La combustión premezclada

La fase de combustión premezclada sucede a la fase de retraso, donde reacciona el combustible que cumple los límites de inflamabilidad. Hay que recordar que estos límites varían en función de la especie inyectada. Durante la combustión premezclada tiene lugar la máxima liberación de energía que se produce durante la fase de combustión, como ya se describió en el capítulo 2 apartado 3.

El mejor método para caracterizar este proceso es evaluar la cantidad de combustible que se quema. El inconveniente es que hallar qué masa ha sido mezclada en la fase de retraso y qué masa se está mezclando a la vez que se quema es muy difícil.

Diversos investigadores han concluido que las variables que controlan el proceso de combustión premezclada son el tiempo de retraso y las tasas de inyección y mezcla. Estos estudios se pueden leer y estudiar si se revisa la bibliografía que se dedica a esta parte del capítulo [2.10]. Sin embargo, son más numerosos los estudios cuyo objetivo es corroborar esta afirmación que aquellos que se dedican a estudiar la fase de combustión premezclada.

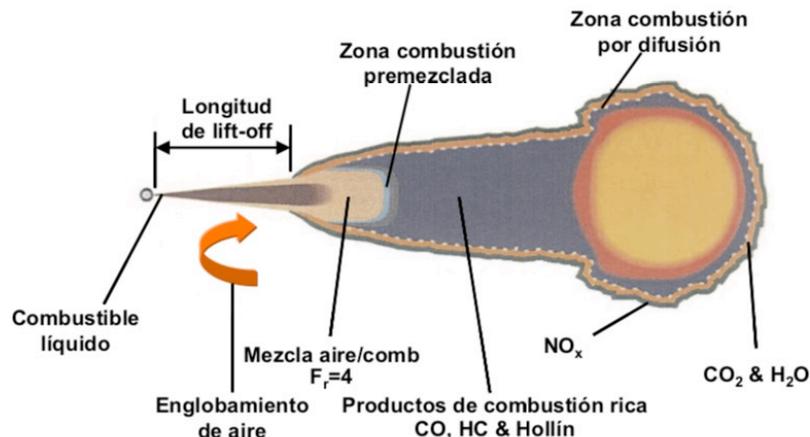
A lo largo de esta fase y de la anterior, se ha observado una serie de fenómenos que permiten afirmar que son dos procesos los que suceden de forma transitoria. Entre estos fenómenos destacan un aumento de la presión durante la fase de retraso, la aparición de hollín y del máximo de liberación de energía, de tal forma que, se produce de forma estable un frente de llama de difusión. Dicha llama marca el inicio de la siguiente fase, la combustión por difusión que se explica en el siguiente apartado.

## 2.9. La combustión por difusión

Esta fase es la última que tiene lugar a lo largo del proceso de inyección y combustión, y, tal como se acaba de describir, está precedida por las fases de retraso y combustión premezclada. Durante esta fase se va quemando todo el combustible inyectado y en ella los procesos de mezcla y combustión suceden simultáneamente, es decir, conforme el chorro se inyecta se va mezclando y quemándose de manera sucesiva, no existe un tiempo de retraso

como en la fase de combustión premezclada. La llama durante esta fase alcanza un estado cuasi-estacionario que se prolonga hasta el corte en la inyección [2.7].

A diferencia de la combustión premezclada, en la combustión por difusión sólo existe una variable que controla el proceso, ésta es la tasa de mezcla. Si se quiere estudiar esta fase [2.10], se debe recurrir a la ley de liberación de calor, además de conocer el hecho de que el factor controlante es tan sólo la tasa de mezcla y que la cinética ya no tiene influencia.



**Figura 2.4:** Fases de la combustión en un motor Diesel una vez se alcanza la fase cuasi-estacionaria de combustión por difusión [2.4]

Existen factores que influyen de manera significativa en el proceso de combustión. Con el apoyo de la Fig. 2.4 se van a analizar estos distintos factores, que permiten caracterizar las fases de combustión del motor Diesel.

1. Zona inicial o zona de "Lift-off length": es la parte del chorro que se encuentra cerca de la tobera, donde el combustible está en fase líquida y, por tanto, no existe reacción con el aire del ambiente. Aquí se produce la atomización del combustible en pequeñas gotas, éstas sufren el englobamiento del aire, aumentando su temperatura, lo que provoca que acaben sufriendo la evaporación, última fase antes de pasar a la siguiente zona. Este parámetro es importante en DICOM, donde se denomina *LoL* ("Lift-off length"), pues ayuda a conocer cuándo da comienzo el proceso de reacción del chorro.
2. Cuando se abandona la zona inicial da comienzo la zona de combustión premezclada, en la que se alcanzan temperaturas en torno a 700-800 K. Recibe este nombre porque, antes de empezar la combustión, el combustible se ha mezclado totalmente con el aire de la zona cercana a la tobera. Una vez se avanza a lo largo de esta zona, la temperatura alcanza unos 1500 K.

En esta fase se distingue una zona en la que se forma hollín debido a dosados ricos (con un dosado relativo aproximadamente de 4), lo que genera inquemados como el  $CO$  o el  $HC$  (hidrocarburos).

3. Por último, se alcanza la fase de combustión por difusión, donde se distinguen dos zonas características de esta fase. La primera corresponde a la zona interior del chorro donde se sigue formando hollín, debido a que ya no existe oxígeno suficiente para englobar todo el combustible existente, y una zona externa, en la que sí hay presencia de oxígeno, donde existen inquemados que reaccionan con el aire de la cámara, produciéndose su oxidación y generando  $CO_2$  y  $H_2O$ .

### 2.9.1. Longitud intacta - “Lift – off Length” / LoL

El  $LoL$  es una variable muy importante a la hora de estudiar el proceso de combustión de un motor Diesel, es la longitud que recorre el chorro desde que se inyecta hasta que se produce el frente de llama premezclado. Además, ayudará a comprender e interpretar los resultados que se consiguen con DICOM.

El investigador Dennis Siebers, propuso en uno de sus estudios Siebers et al. [2.13] una ley para obtener una aproximación, a partir de un escalado empírico del  $LoL$ . En esta ley queda visible la dependencia del  $LoL$  a diversos parámetros. Dichos parámetros son: la densidad, la temperatura, la fracción de oxígeno presente, el diámetro de la tobera y la velocidad de inyección. Por tanto, la ley queda expresada por Ec. 2.14:

$$LoL \propto T_a^{-3.74} \cdot \rho_a^{-0.85} \cdot \phi_{ef}^{0.34} \cdot u_{ef} \cdot Y_{f,est}^{-1} \quad (2.14)$$

En esta expresión  $T_a$  es la temperatura y  $\rho_a$  la densidad del aire de la cámara,  $\phi_{ef}$  el diámetro de la tobera,  $u_{ef}$  la velocidad de inyección efectiva e  $Y_{f,est}$  la fracción másica estequiométrica.

Yendo un poco más allá en estas dependencias, hay que destacar la dependencia lineal que tiene el  $LoL$  con la velocidad, esto quiere decir, que a mayor velocidad de inyección el  $LoL$  será mayor y, por tanto, la llama se estabilizará a una distancia mayor de la tobera. De forma contraria a cómo influye la velocidad, lo hacen la fracción másica estequiométrica, la temperatura y la densidad del aire.

Existe una relación inversamente proporcional entre la formación de hollín y el  $LoL$ , pues cuánto mayor es el  $LoL$ , más efectivo es el englobamiento de aire, produciéndose así una mejor mezcla de aire y combustible, reduciendo la formación de hollín. Cabe recordar que se deja de producir hollín en la llama si el dosado relativo es menor que 2.

## 2.10. Conclusiones

A lo largo de este capítulo se han ido explicando los conceptos necesarios para comprender el proceso de inyección y combustión en un motor Diesel. El capítulo finaliza con una descripción más detallada de qué sucede durante la combustión en los tres subprocesos más importantes:

- **Fase de retraso en el autoencendido:** desde el comienzo de la inyección hasta que el combustible se mezcla con el aire y comienza la reacción que permitirá pasar a la siguiente fase, la liberación de calor. Durante ésta tienen lugar tres fenómenos de vital importancia para el desarrollo de una buena combustión y, por tanto, para el correcto funcionamiento del motor: la atomización del combustible, el englobamiento de aire y mezcla, y por último la evaporación.
- **Combustión premezclada:** fase en la que existe un pico máximo de liberación de calor, debido a la combustión de todo el combustible que se ha ido inyectando y mezclando. Una vez alcanzado este pico, la tasa de liberación de energía cae ligeramente, dando lugar a la siguiente fase del proceso.
- **Combustión por difusión:** a lo largo de esta fase la tasa de liberación de energía se estabiliza a un valor menor que durante la combustión premezclada, debido a que en la fase anterior se produce la quema de todo el combustible que se ha acumulado y mezclado. Sin embargo, en esta fase los procesos de inyección, mezcla y combustión se producen simultáneamente. Este hecho acaba por establecerse de manera constante, acabando como un proceso cuasi-estacionario, donde el frente de llama queda estabilizado.

Como cualquier otro proceso de combustión, éste genera especies contaminantes como lo son: el  $NO_x$ , el  $SO_2$  y el  $HC$  (hidrocarburos sin quemar). Dichas especies aparecen en las zonas en las que se dan una serie de condiciones: altas temperaturas (que producen  $NO_x$ ), impurezas en el combustible ( $SO_2$ ) y dosados ricos que acaban generando inquemados por falta de aire para mezclarse ( $HC$ ).

Por último, conviene recordar que durante este capítulo también se ha hecho referencia a una serie de parámetros del chorro (macroscópicos y microscópicos), que han permitido establecer leyes y relaciones entre distintos parámetros. Entre éstas destaca la ley que permite el cálculo del "*Lift-off Length*", pues este parámetro servirá en los siguientes capítulos para evaluar y caracterizar los resultados.





## Capítulo 3

### 3. La herramienta para el análisis: DICOM

#### 3.1. Introducción

Tras haber sido expuestos y explicados los conceptos básicos que definen el marco en el que se desarrolla el proyecto, se debe describir las herramientas que permiten estudiar y modelar lo que sucede en el seno del chorro de un motor Diesel de inyección directa.

La herramienta principal que ha permitido el estudio del chorro es el modelo DICOM. Como se comentó en el primer capítulo, es un modelo ya desarrollado, en el cual se han introducido una serie de nuevas funciones que permiten calcular la reactividad del chorro, cosa que la anterior versión de DICOM no era capaz de hacer. La manera de funcionar del modelo es la siguiente: se introducen una serie de ficheros de entrada a DICOM tales como cantidad de movimiento, presión, densidad, etc. y, tras haber realizado los cálculos, DICOM genera una serie de ficheros de texto donde se guarda la evolución de una serie variables en función del tiempo, que interesará a posteriori conocer para evaluar la evolución del chorro.

La segunda herramienta que se ha utilizado ha sido el entorno matemático Matlab. A lo largo de este proyecto ha servido de apoyo para poder post procesar resultados, realizando mapas de contorno, gráficas y comparativas entre distintos casos, que han permitido la validación de los resultados que aporta la nueva versión de DICOM.

En este Capítulo se describe, en primer lugar (apartado 3.2), el funcionamiento general del modelo 1D para el caso inerte y reactivo. Posteriormente, se plantea la resolución de la variable de progreso (apartado 3.3) que permite cuantificar la evolución entre el estado inerte y reactivo. El capítulo termina con las conclusiones (apartado 3.4).

#### 3.2. Definición del modelo unidimensional

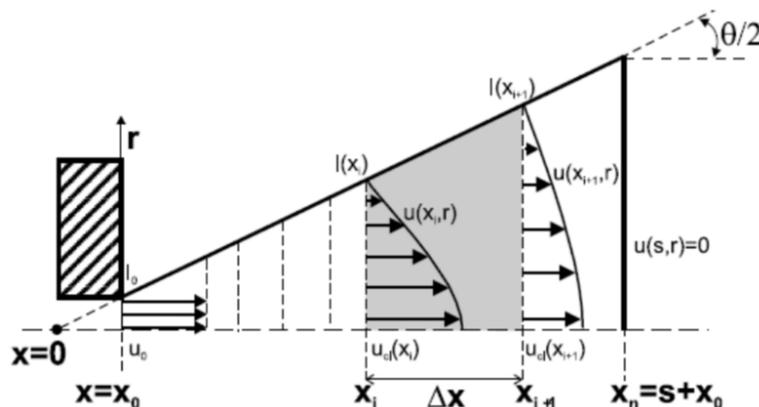
DICOM es un modelo que permite predecir la evolución de un chorro turbulento 1-D de combustible, realizando una serie de hipótesis que simplifican el problema [3.3]. Entre los apartados [3.1,3.5,3.6] de la bibliografía se encuentra la base teórica para el modelo.

En la siguiente figura, Fig. 3.1 se describe el flujo de información de datos de entrada y salida. Mediante la interfaz de usuario se puede seleccionar los datos de entrada para realizar el cálculo, y el lugar donde se desea que DICOM guarde los ficheros de salida con los resultados del ensayo. El Anexo I describe los pasos necesarios para configurar un caso.



**Figura 3.1:** Esquema de cómo se organiza el flujo de información de DICOM [3.3]

El combustible se inyecta en la cámara de combustión a través de la tobera de inyección y, una vez inyectado, se mezcla con el aire presente en la cámara. El volumen de la cámara es lo suficientemente grande para que, mientras tiene lugar la evolución del chorro, ésta no modifique en la cámara las condiciones del aire, de presión, temperatura, densidad etc., a una gran distancia de la tobera de inyección.



**Figura 3.2:** Representación esquemática del modelo del chorro [3.3]

En la Fig. 3.2 se describe la evolución del chorro desde la tobera. En un primer momento el combustible inyectado posee un perfil uniforme de velocidad, pero poco a poco va intercambiando momento con el aire, pasando éste del reposo al movimiento, factor que influye de manera directa en la distribución de velocidad. Además, debido a este intercambio de momento, el chorro aumenta su anchura de manera directamente proporcional con la distancia axial. Este ángulo  $\theta$  es una entrada para el modelo, junto con el diámetro de la tobera  $d_0$ .

El problema que se trata tiene una naturaleza transitoria lo que obliga a dividir de forma axial el dominio en incrementos de  $x$ , expresados como  $\Delta x$ . Cada división se denomina celda y está delimitada por su entrada ( $i$ ) y su salida ( $i + 1$ ), de tal forma que la posición axial en la que

se encuentra el chorro en cada instante se define como  $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ . La penetración de punta ayuda a definir el tamaño del chorro. Esta penetración es la celda que se encuentra a mayor distancia axial de la tobera, cuyas velocidades de entrada y de salida en  $(i)$  e  $(i + 1)$  poseen un valor no nulo.

Las variables que se necesitan resolver son aquellas que están directamente relacionadas con las ecuaciones de conservación, de éstas destacar que se formulan para cada celda. Estas incógnitas son: la fracción de mezcla  $f$  y la velocidad axial  $u$ . Se consideran una serie de hipótesis válidas para todo el dominio temporal:

- No hay movimiento lateral del aire, lo que genera simetría de revolución en el chorro.
- Se asume que el chorro es un flujo turbulento y que está completamente desarrollado. Ello implica que en cualquier punto del chorro hay una relación matemática entre las variables de velocidad axial y fracción másica, y su valor en el eje, Ec 3.1:

$$\frac{u(x,r)}{u_{cl}(x)} = \left[ \frac{f(x,r)}{f_{cl}(x)} \right]^{1/Sc} = \exp \left[ -k \cdot \left( \frac{r}{x} \right)^2 \right] \quad (3.1)$$

En esta ecuación  $u_{cl}$  es la velocidad axial,  $f_{cl}$  es la fracción másica de combustible y el subíndice "cl" referencia estas variables al eje del chorro. Por otro lado,  $k$  es un constante que depende del perfil utilizado,  $Sc$  es el número de Schmidt.

- Para definir el ángulo del chorro se elige, como límite, la zona en la que el perfil de la velocidad alcanza un valor del 1% de la velocidad del eje ( $\zeta = 0.01$ ). Esta afirmación permite desarrollar una relación entre la constante de los perfiles gaussianos  $k$  y el ángulo del chorro, Ec. 3.2:

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

- Se asume que la presión es uniforme en todo el chorro.
- Se asume localmente un equilibrio, tanto en condiciones de velocidad como de temperatura, es decir, se trata de un flujo homogéneo.
- Para el cálculo de la densidad se supone que la mezcla se forma de manera ideal, obteniendo la Ec. 3.3:

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

En esta ecuación  $Y_i$  como ya se ha indicado anteriormente, es la fracción másica de la especie  $i$  y  $\rho_i$  la densidad de la especie  $i$  para el combustible puro a temperatura y presión locales, por último,  $x$  es la discretización axial del chorro y  $r$  la radial.

Si se describen las ecuaciones de conservación de momento axial y la fracción de mezcla, quedan de la siguiente manera:

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

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

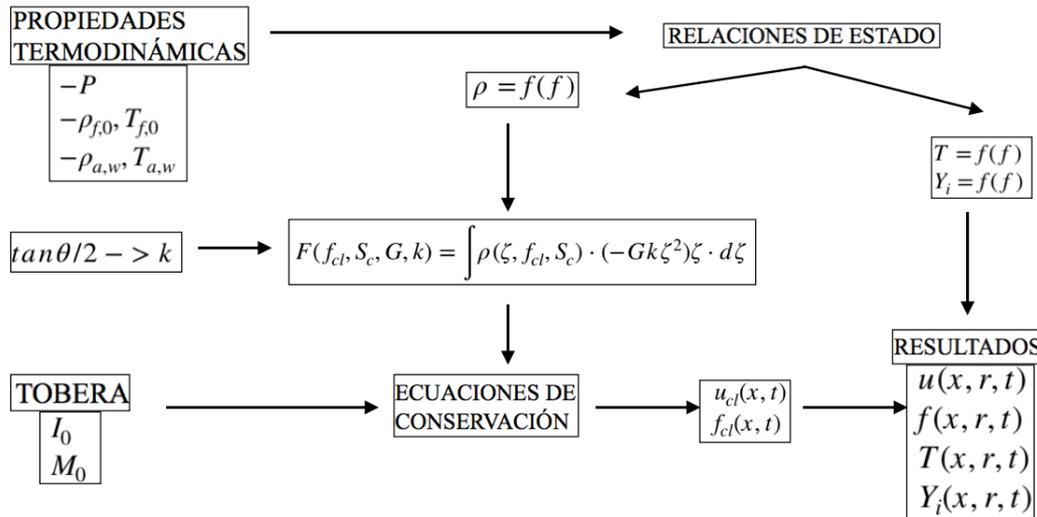
donde  $I$  y  $M_f$  son, respectivamente, los flujos de cantidad de momento y fracción de mezcla, a la entrada ( $i$ ) y a la salida ( $i + 1$ ) de las celdas. El término  $\frac{d}{dt}$  es el de acumulación de los flujos de cantidad de momento y fracción de mezcla.

Además de las hipótesis simplificadoras que se asumen en el modelo de DICOM, existen unas condiciones de contorno que son las siguientes:

- Se conoce el flujo de cantidad de momento y la fracción de mezcla en el orificio de inyección, a lo largo del tiempo.
- Se considera constante con el tiempo el ángulo de apertura del chorro  $\theta$ .
- Existe una relación entre la densidad local y el resto de las variables. Esta relación debe de ser explícita para poder realizar el cálculo de las ecuaciones de conservación, de tal forma que la densidad queda expresada por una función de tipo  $\rho = \rho(f)$ .

En la siguiente figura Fig. 3.3 se representa de manera esquemática la manera de proceder de DICOM a fin de resolver las ecuaciones. En primera instancia, DICOM resuelve las ecuaciones de conservación para el momento y la fracción de mezcla referidas al eje  $u_{cl}$  y  $f_{cl}$ . Se resuelven integrales radiales que permiten convertir el problema 2D ( $x, r$ ) a 1D.

Dicha integral depende entre otras variables de la densidad local. Ésta pertenece a las relaciones de estado, las cuales mediante las condiciones límite que se imponen (composición y temperatura del combustible puro y del aire de la cámara) permiten calcular el equilibrio local. Por lo que si se conoce  $f$  en un determinado punto del chorro, las propiedades termodinámicas en ese mismo punto se pueden calcular gracias a las relaciones de estado.



**Figura 3.3:** Representación esquemática general del modelo unidimensional [3.5]

Para la configuración del caso existen diversos parámetros de entrada que se pueden elegir por el usuario según sus intereses. El programa resuelve el comportamiento del chorro con dos posibles aproximaciones:

1. Modelado de forma estacionaria: como su nombre indica las condiciones son invariables con el tiempo. Para este caso todos los datos de entrada son escalares. Entre estos se pueden encontrar: composición del combustible, temperatura ambiente, parámetros de la inyección, las propiedades termodinámicas, etc.
2. Modelado de forma transitoria: en este tipo de modelado la mayoría de los parámetros dependen del tiempo, es decir, van a cambiar a lo largo del tiempo. Para que DICOM pueda realizar el cálculo no se le introducirán escalares como datos de entrada, sino que se le tendrá que introducir ficheros de texto con un formato determinado, con los valores que se desee simular. Estos ficheros se transforman en vectores de cada variable en función del tiempo.

Para estos dos supuestos la mayoría de los datos de entrada no varían. Con la finalidad de poder verlo de forma más detallada ir al anexo I, donde se explica minuciosamente todo el proceso de generación de ficheros de entrada.

### 3.2.1. Caso estacionario: datos de entrada y ficheros de salida

Se van a comentar de manera más detallada los datos de entrada que permite introducir DICOM, para ello se apoyará en la Fig 3.2:

Datos de entrada:

- A) *Numerics*: dentro de este apartado se introducen distintos parámetros, entre ellos se encuentran: tamaño máximo que alcanzara el chorro; la discretización en que se quiere dividir axialmente el chorro  $\Delta x$ . Cuanta más información se quiera, se usará un menor valor de  $\Delta x$ , que a su vez conlleva un mayor tiempo de cálculo; el incremento que tendrá la fracción másica de combustible para las relaciones de estado y para la interpolación en las tablas de las integrales; por último, el valor de convergencia para los cálculos que se realizan mediante iteraciones.
- B) *Morphology*: a este apartado pertenecen los datos relacionados con la morfología del chorro tales como: el límite radial del chorro, el número de Schmidt relacionado con la difusividad de la masa y el momento, el tipo de apertura que existe (simple o doble), con los valores respectivos de los ángulos, y el perfil que va a seguir la velocidad, densidad y fracción másica entre otros de manera radial (como se puede ver en la Fig. 3.2 para la velocidad). Estos perfiles podrán ser: exponencial, Hinze, Schlichting o Spalding.
- C) *Injection rate*: en esta sección se introduce información relativa a la inyección, existiendo dos posibles enfoques, el primero “entrada directa” en la que el usuario proporciona tanto el flujo másico como el de cantidad de movimiento; el segundo “entrada derivada”, donde a partir del flujo másico introducido por el usuario y la velocidad efectiva que deriva del coeficiente de velocidad y del salto de presión en la inyección, se calcula automáticamente el flujo de cantidad de movimiento. Los archivos/datos a introducir son el diámetro nominal de la tobera de inyección [m], el flujo másico [kg/s] y el flujo de cantidad de movimiento [N].
- D) *Mixing law*: aquí se introducen parámetros que se relacionan con el chorro. En primer lugar, el tipo de ley que va a seguir el chorro:
- Chorro isoterma: la densidad local se calcula mediante una relación entre el combustible y el aire puros que forman una mezcla isotérmica.
  - Chorro gaseoso inerte/reactivo: donde se asume una ley de gas ideal que determina la densidad local.
  - *Spray* inerte/reactivo: en este caso el chorro se considera una mezcla de fase líquida y gaseosa que sigue una ecuación de estado real, la cual determina la densidad local.

Además, también se introduce la presión y la densidad del aire de la cámara, la proporción de los componentes del aire ( $N_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ), la temperatura del combustible y qué combustible se va a usar.

Ficheros de salida:

La carpeta donde DICOM guardará todos los ficheros de salida tras los cálculos es introducida por el usuario en la interfaz. DICOM *steady* (estacionario) guarda cinco archivos:

- A) *Relst.dat*: en este archivo se escriben los resultados del cálculo de las relaciones de estado. La primera columna es donde se escribe la variable de la que dependen el resto de los parámetros calculados, ésta es la fracción de mezcla. El resto de variables que se escriben son: densidad, temperatura, fracción de  $N_2$ , fracción de  $O_2$  y fracción de combustible. Por último, si se encuentra en el caso estacionario sólo se escribirá una vez, mientras que en el caso transitorio se calculará en diversos instantes.
- B) *Integ.dat*: aquí se guardan los resultados de las diversas integrales, dependientes de la fracción de mezcla en el eje del chorro, que se realizan en cada cálculo. Existen dos modelos de integrales, las que calculan la densidad y las que calculan la cantidad que se acumula radialmente de una especie determinada, éstas últimas dependen de la ley de mezcla.
- C) *Temp1.dat*: en este archivo DICOM, considerando el paso temporal, guarda las variables de entrada y las condiciones de contorno que recibe el modelo. Es un fichero muy útil, pues permite comprobar si un fallo en el cálculo se debe a que la información de entrada no es correcta o no es la adecuada. Algunas variables que incluye son: tiempo [s], flujo de cantidad de movimiento [N] y másico [kg/s], diámetro nominal de inyección [m], densidad del aire [kg/m<sup>3</sup>], del combustible [kg/m<sup>3</sup>] y algunos parámetros más. De forma resumida, se podría decir que guarda la información de entrada que necesita el modelo.
- D) *Temp2.dat*: DICOM guarda en este archivo los resultados de los cálculos realizados. Posee el mismo formato tanto si se trata del caso estacionario como del transitorio. La primera columna indica el tiempo en el que se guardan el resto de variables que aparecen en el fichero. Algunas de estas variables son: la penetración  $S$ [m] para diferentes dosados, la masa inyectada de combustible acumulada [kg], la masa de aire total [kg] y la masa de diversas especies [kg] entre otras.
- E) *xdata.dat*: este fichero se guarda de manera diferente al resto. Para cada tiempo de guardado se escriben diferentes parámetros en función de la distancia axial a la tobera de inyección. Explicado de manera sencilla, sería como hacer una foto al chorro en un tiempo determinado y en ese instante, evaluarlo a lo largo de toda la distancia axial que ha

avanzado. Incluye variables como: fracción másica  $f [-]$ , cantidad de momento  $I [N]$ , radios de dosado  $R [m]$  y muchas otras que permiten evaluar la evolución del chorro en función del tiempo y del espacio.

### 3.2.2. Caso transitorio: datos de entrada y ficheros de salida

En cuanto a los ficheros de entrada en el caso transitorio, existen pequeñas diferencias respecto al caso estacionario. En primer lugar, como ya se ha comentado en el apartado anterior, las variables de entrada, que en el caso estacionario son escalares, en el caso transitorio serán ficheros de texto donde se vea su variación con el tiempo.

Otra de las diferencias se puede ver en el apartado “*Numerics*”, donde el caso transitorio necesita el valor del tiempo final de cálculo,  $t_{final} [s]$ . Además, necesita un apartado llamado “*Discretization*” en el cual se introduce qué tipo de discretización se quiere, si automática (DICOM la calcula en cada iteración) o impuesta (el usuario además introduce qué valor tiene “*deltax*”).

Por último, en el apartado de “*Mixing law*” se añade un campo necesario que pueda calcular la reactividad del chorro. Se trata del campo de la “*flamelet*” que aporta la información de la química tabulada. Este fichero se describirá con detalle más adelante.

Ficheros de salida:

Como es de esperar, al necesitar más información de entrada se obtendrá más información a la salida, esto significa que el caso transitorio proporcionará más ficheros de salida que el caso estacionario. Los ficheros que se han descrito en el caso estacionario también son obtenidos en las simulaciones transitorias; sin embargo, su contenido es más extenso.

### 3.2.3. Antecedentes del caso reactivo en DICOM

En las anteriores versiones de DICOM el cálculo de un modelo estacionario o transitorio pero reactivo, era posible. Sin embargo, hay que destacar que se hacía de forma diferente a como se ha logrado durante el desarrollo de este proyecto. Pues antes el modelo no era capaz de ser predictivo en cuanto a la reacción del chorro, sino que era el usuario quien indicaba en qué instante y a partir de qué dosado en el eje debía quemar el chorro, como se verá a continuación.

En primer lugar, el usuario debía de proporcionar dos parámetros de entrada con los que se define el punto del chorro y el instante donde tendrá lugar la reacción. Estos

parámetros son el tiempo de retraso,  $\tau_{soc}$ , y la fracción de mezcla hasta la cual llega el *LoL*,  $f_{LoL}$ .

Al contrario de como sucede en esta nueva versión, dónde la química tiene una velocidad finita, en la anterior el chorro reaccionaba de forma infinitamente rápida al alcanzar el tiempo y la fracción de mezcla los valores fijados por el usuario.

### 3.3. Ecuación de la variable de progreso: planteamiento y resolución

A lo largo de este apartado se va a desarrollar cómo se ha planteado y resuelto la ecuación de transporte de la variable de progreso, además de definir qué cambios han sido implementados para hacer posible el acoplamiento de esta ecuación a las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento y fracción de mezcla. También se va a hablar de cómo la ecuación de transporte de la variable de progreso se ha ido modificando hasta conseguir llegar a su versión actual. Todos estos cambios han permitido el cálculo del *LoL* y del  $\tau_{soc}$ .

#### 3.3.1. Definición de la variable de progreso

La variable de progreso se define, como ya se ha visto, mediante el símbolo  $Y_C$ , aunque también se representa mediante  $C$  cuando se está normalizada. Representa la reactividad del chorro, es decir, permite cuantificar cuándo el chorro es inerte y cuándo es reactivo. Si el chorro se encuentra en estado inerte  $Y_C = Y_{C,Inert}$ . Dadas unas condiciones locales, si la reacción química llega al final se dice que el chorro está en equilibrio, tomando esta variable de progreso un valor,  $Y_C = Y_{C,Steady}$ .

Existe una manera de calcular  $C$  a partir de  $Y_{C,Inert}$ ,  $Y_{C,Steady}$  e  $Y_C$ , de manera que de transcurre entre el estado inerte ( $C=0$ ) y el reactivo ( $C=1$ ). La expresión que permite el cálculo es la siguiente, Ec. 3.6:

$$Y_C = Y_{C,Inert} + C * (Y_{C,Steady} - Y_{C,Inert}) \quad (3.6)$$

Es una variable no conservativa, pues se necesita conocer un término fuente ( $\dot{w}_c$ ), que representa la velocidad de la reacción, para poder resolver la ecuación de transporte de la variable de progreso. Dicho término fuente proviene de una tabulación como resultado del *solver* de "flamelet", el cual se explicará en el apartado 3.3.5. Además, no posee un perfil autosimilar como sucede con las variables de velocidad axial y fracción de mezcla.

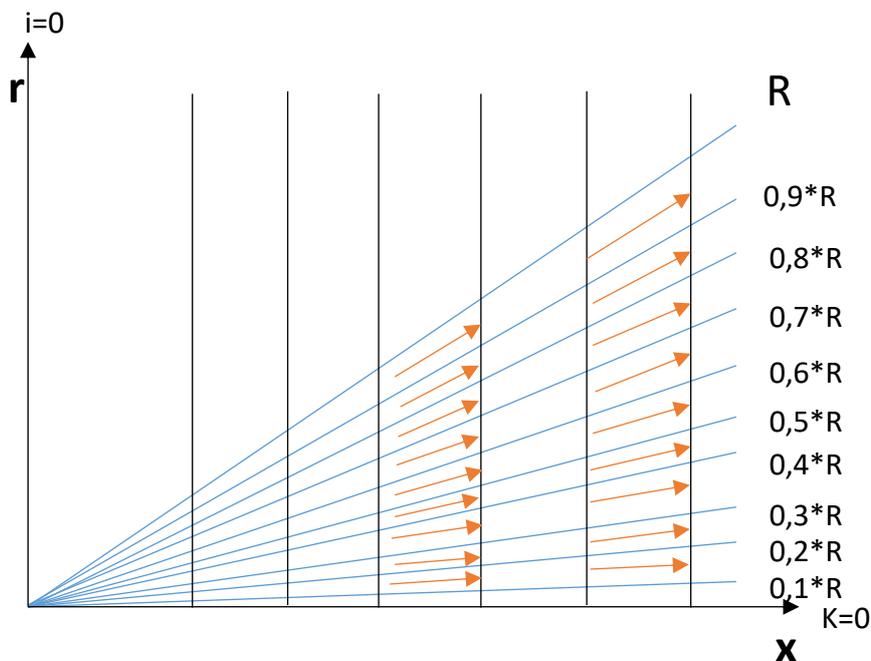
### 3.3.2. Concepto de trayectorias

Para definir el concepto de trayectoria en el modelo de DICOM se va a hacer uso de la Fig. 3.4. En el modelo es necesario definir las trayectorias en las que se va a discretizar el chorro, debido al carácter no conservativo de la variable de progreso. Como se acaba de explicar, no tiene perfil autosimilar, lo que conlleva a expresarla como  $Y_C(x, r, t)$  y a resolverla en 2D, hay que recordar que DICOM es una herramienta de modelado 1D.

Como consecuencia, para poder resolver este problema bidimensional en una herramienta unidimensional, es necesario definir las trayectorias del chorro. Dichas trayectorias son independientes unas de otras, lo que hace que el problema original 2D pase a ser un problema quasi-1D.

Tal y como se puede observar en la Fig. 3.4, las trayectorias radiales van desde el eje del chorro ( $r = 0, k = 0$ ), hasta el radio máximo que alcanza el chorro ( $r = R, k = n$ ), siendo “n” el número total de trayectorias radiales que existe en el chorro. Cada trayectoria discurre a una distancia constante  $r/R$ , donde  $R$  es el radio total del chorro.

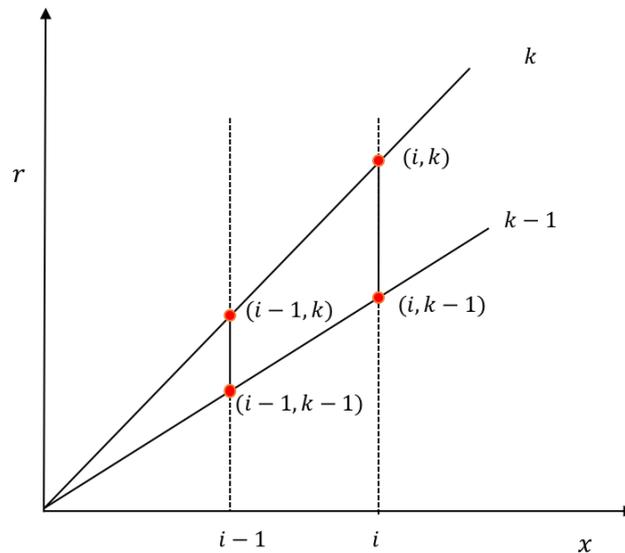
Las flechas de color naranja son las líneas de corriente del chorro, y cada celda que atraviesan es el volumen de control donde se hará el cálculo de los diferentes parámetros del chorro y donde se resolverán las integrales pertinentes.



**Figura 3.4:** Esquema de la definición de las trayectorias del chorro en DICOM

### 3.3.3. Ecuación de balance de $Y_c$

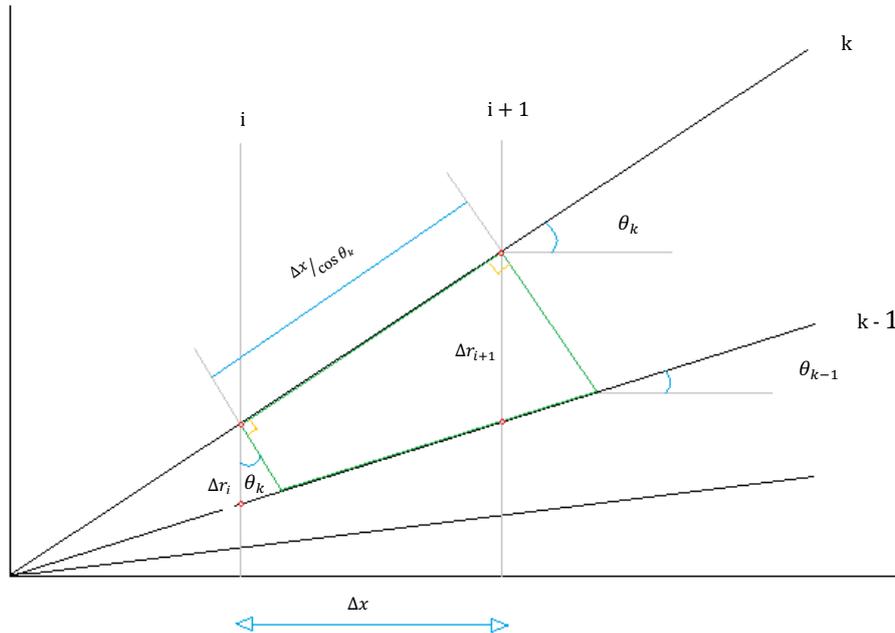
Lo primero que se va a hacer es definir cómo se discretiza el chorro para realizar este cálculo, y para ello se van a comparar las diferentes formas de discretizar el chorro en cada versión.



**Figura 3.5:** Discretización espacial de la primera versión del modelo [3.2]

En la Fig. 3.5 se puede ver claramente los cuatro puntos que definen cada celda. Estos puntos definen el volumen de control a partir del cual se harán las integrales. En este volumen de control las líneas de corriente que se estudian son perpendiculares a las líneas que unen los puntos  $(i-1, k)$  con  $(i-1, k-1)$  e  $(i, k)$  con  $(i, k-1)$ , puntos que se encuentran marcados en rojo. Esta suposición no era del todo correcta, pero ayudaba a la simplificación del problema.

Por el contrario, si se observa la Fig. 3.6 se puede ver el cambio que se ha implementado. Dicho cambio se basa en la modificación del volumen de control, que se define cuando se discretiza el chorro. Como se ha comentado antes, las líneas de corriente del chorro se asumían perpendiculares a las líneas discontinuas (verticales), sin embargo, ahora se asumen perpendiculares a las líneas que unen los puntos rojos. Este pequeño cambio permite un cálculo más exacto, implementándose al aplicar una pequeña corrección que se relaciona con el ángulo de inclinación de las líneas de corriente respecto al eje.



**Figura 3.6:** Esquema de apoyo para entender la corrección en el volumen de control

El cambio más evidente que se ha hecho es el volumen de control, pues si bien antes se calculaba como  $\Delta x \cdot \Delta r$ , ahora ya no se usará  $\Delta r$ , sino que se usa la línea verde que rota un ángulo  $\theta_k$ , respecto de  $\Delta r_i$  e  $\Delta r_{i+1}$ . Por lo tanto, lo que antes era  $\Delta r$  ahora se llamará  $\Delta l$ .

Para el cálculo de  $\Delta l$  se debe recurrir a la trigonometría, de modo que la ecuación que permite su cálculo es la siguiente, Ec. 3.7:

$$\Delta l = \Delta r \cdot \cos \theta_k + \Delta r \cdot \sin \theta_k \cdot \tan(\theta_k - \theta_{k-1}) \quad (3.7)$$

Si se realiza el cálculo de las integrales con el término  $\Delta l$  en vez de  $\Delta r$ , el resultado final es exactamente el mismo, pero las ecuaciones quedan multiplicadas por unos factores que se llamarán de corrección.

En caso de ser una integral en la que se encuentra el término de velocidad, la corrección será la siguiente, a la que se llamará *Factor1* y su expresión queda como:

$$Factor1 = [1 + \tan \theta_k \cdot \tan(\theta_k - \theta_{k-1})] \cdot \frac{1}{\cos \theta_k} \quad (3.8)$$

Pero, si la integral a desarrollar no incluye el término de la velocidad, la corrección será ligeramente distinta, y se llamará *Factor2* y su expresión queda como:

$$Factor2 = [1 + \tan \theta_k \cdot \tan(\theta_k - \theta_{k-1})] \quad (3.9)$$

En primer lugar, para poder realizar el estudio de la variable de progreso en el chorro Diesel, se va a plantear y explicar la ecuación que se está resolviendo, Ec. 3.10:

$$\frac{\Delta}{\Delta t} \int (\rho \cdot Y_c) \cdot dV + \int (\rho \cdot u \cdot Y_c) \cdot dA - \int \dot{w}_c \cdot dV = 0 \quad (3.10)$$

donde  $\rho$ ,  $u$  y  $t$  la densidad local la velocidad y el tiempo, parámetros que ya se han definido en ecuaciones anteriores. Los nuevos parámetros que aparecen son  $Y_c$  la variable de progreso y  $\dot{w}_c$  el término fuente.

Si se analiza esta ecuación término a término, se pueden distinguir tres: el primero de ellos es una integral al volumen, que es la representación de la parte transitoria de la ecuación; el segundo es una integral al área y se trata del transporte conectivo, es decir, al tratarse de un chorro se tendrá una masa entrante y otra saliente en nuestro volumen de control estudiado; por último, se tiene otra integral al volumen que representa el término fuente de la variable de progreso.

El procedimiento que se sigue para resolver dichas integrales es el siguiente:

- El problema se va a resolver en un orden tal que en el chorro se resuelve en  $x$  creciente y para un  $x$  determinado, en  $r$  creciente. Se supone la tobera de inyección como el punto inicial  $i$  de la coordenada axial  $x$ , y el eje como punto inicial  $k$  de la coordenada radial  $r$ .
- Cada celda está definida en  $x$  entre  $(i$  e  $i + 1)$  y en  $r$  entre  $(k - 1$  y  $k)$ . Tal y como se resuelve, la única incógnita es el nodo  $(i + 1, k)$ , todo lo demás es conocido.
- Para hacer el cálculo de las integrales se usa el método del trapecio.

### 3.3.3.1. Método de resolución de la ecuación de transporte de la variable de progreso

Para la resolución de este tipo de ecuaciones existen dos métodos, cada uno de ellos posee ventajas y desventajas respecto al otro. Estos métodos son el explícito y el implícito.

Una forma breve pero clara de definir ambos métodos para introducirlos sería: mientras que el método explícito resuelve el estado posterior de un sistema a partir del estado en el

instante actual, el método implícito lo resuelve con una ecuación que involucra tanto al instante actual como al instante posterior.

Explicado de manera matemática, si  $Y(t)$  es el estado actual del sistema e  $Y(t + \Delta t)$  es el estado en el instante posterior, siendo  $\Delta t$  un pequeño incremento temporal, el método explícito vendría determinado por la ecuación, Ec 3.11:

$$Y(t + \Delta t) = F(Y(t)) \quad (3.11)$$

Mientras que la ecuación para el método implícito quedaría:

$$G(Y(t), Y(t + \Delta t)) = 0 \quad (3.12)$$

Queda evidenciado que el método implícito conlleva un mayor coste de cálculo y, por tanto, una mayor dificultad, pues para resolver la ecuación, se necesita calcular tanto el instante actual como el posterior. En cambio, en el método explícito una vez calculado el instante actual, el siguiente instante se determina a partir del instante que le precede. Sin embargo, a pesar de que los métodos implícitos conlleven un mayor coste computacional, una mayor dificultad de implementación y de resolución, éstos se usan con la intención de resolver muchos problemas. Por el contrario, el método explícito necesita unos incrementos temporales tan pequeños, para lograr la resolución adecuada, que son poco prácticos.

En este tipo de problemas en los que se requiere una buena precisión, se acabaría necesitando mucho menos tiempo de cálculo computacional para resolverlo, si se usa un método implícito. Dicho esto, no existe un método mejor que otro, la solución es sencilla, depende del problema que se esté resolviendo, será más conveniente utilizar un método implícito o explícito.

Se van a detallar los pasos a seguir para resolver el problema mediante el método implícito:

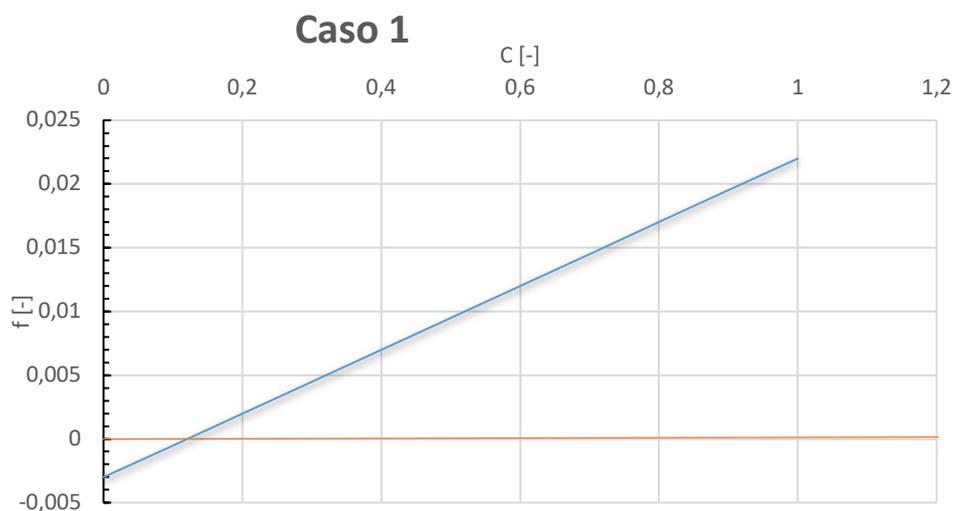
- A- Definir un rango de valores de la solución: el valor mínimo será  $C_0 = 0$  y el valor máximo  $C_1 = 1$  que, a su vez se corresponden con los valores de  $C_0 \rightarrow Y_{C,Inert}$  y  $C_1 \rightarrow Y_{C,Steady}$ .
- B- Resolver la ecuación:  $f(Y_c) = Y_c + \frac{B_c \cdot Y_c + C_c}{A_c \cdot u_{i,k}}$  en los extremos  $C_0$  y  $C_1$ .
- C- Obtener el valor de los residuos  $f(Y_{C,Inert})$  y  $f(Y_{C,Steady})$ .
- D- Trazar una recta definida por los puntos obtenidos en el apartado anterior, donde corte en el eje de C, será el nuevo punto a estudiar.

- E- Si la recta no corta entre los límites establecidos  $C_0$  y  $C_1$ , el resultado se encuentra fuera de las tablas y se deberá realizar el cálculo otra vez.
- F- Pasar por los puntos B, C y D de manera sucesiva hasta que el valor obtenido de la función residuo baje de un valor al que se le llamará de convergencia.

Este método iterativo para calcular la solución a la ecuación de conservación de la variable de progreso recibe el nombre de método de la secante. En este método se calculan los ceros comprendidos entre dos extremos de una función ( $f(Y_c)$ ) de forma iterativa. Cuando se encuentra un cero, se reduce el rango de búsqueda hasta que se encuentra una solución que no varía o apenas lo hace cuando se realiza la siguiente iteración.

Cuando se aplica el método anterior se pueden presentar dos situaciones: la primera de éstas es que se encuentre una solución dentro del rango definido y, por tanto, se puede buscar una solución posible que se encuentre dentro de las tablas que tienen información de  $C$  e  $Y_c$ ; la otra posibilidad es que no exista solución o ésta se encuentre fuera del rango definido al comenzar el método.

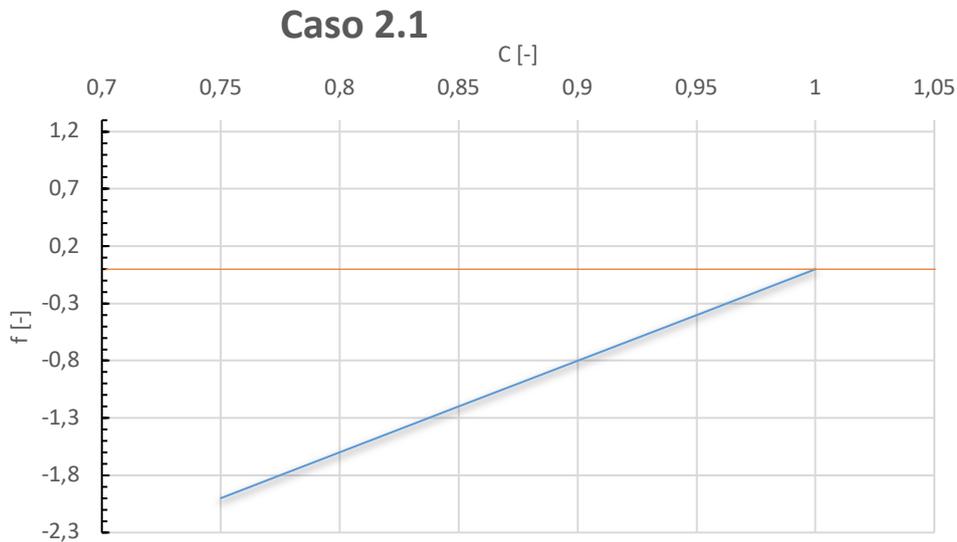
Se va a analizar el primer caso posible, Fig. 3.7. Para que esto suceda, se tiene que dar que  $f(Y_{C,Inert}) \cdot f(Y_{C,Steady}) < 0$ . En este caso se dice que hay cambio de signo y existe una solución aparente que se encuentra dentro de los límites y, por tanto, está dentro de la tabla que tiene información de  $C$  e  $Y_c$ .



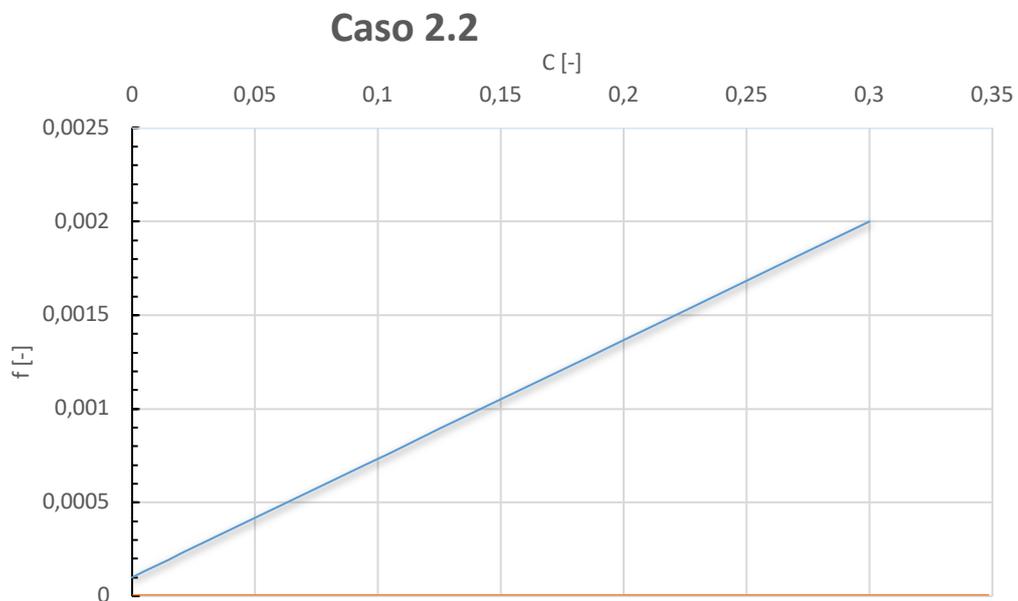
**Figura 3.7:** Existe una solución dentro de los límites

Si se analiza la segunda posibilidad, pueden suceder dos cosas, que esté fuera de los límites por el valor extremo inferior o por el valor extremo superior.

Para que esto se dé, debe ocurrir que  $f(Y_{C,inert}) \cdot f(Y_{C,steady}) > 0$ . Se dice que no hay cambio de signo y la solución se encuentra fuera del rango de estudio. Entonces el valor de corte con el eje "x" se encuentra fuera de la tabla que tiene información de  $C$  e  $Y_C$ . Es importante saber si se encuentra por debajo del límite inferior  $C = 0$  e  $Y_{C,steady}$  o, por el contrario, se encuentra por encima del límite superior  $C = 1$  e  $Y_{C,inert}$ .



**Figura 3.8:** Solución fuera de los límites del eje por la derecha,  $C > 1$  para el cambio de signo



**Figura 3.9:** Solución fuera de los límites del eje por la izquierda,  $C < 0$  para el cambio de signo

### 3.3.3.2. Balance de $Y_c$ en el caso transitorio

El término que corresponde con la variación temporal sólo estará presente cuando se trate de una simulación transitoria, pues en este caso  $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right) \neq 0$ . En primera instancia, se va a explicar la resolución en un caso transitorio, lo que lleva a analizar primeramente dicho término relativo a la variación temporal.

**I- Término transitorio:**  $\frac{\Delta}{\Delta t} \int (\rho \cdot Y_c) \cdot Factor2 dV$

Desarrollándolo:

$$\left\{ \frac{\Delta x}{\Delta t} \cdot 2\pi \cdot m_{Y_{c_i}} \right\} \cdot Factor2 - \frac{INT_{Y_c}}{\Delta t} \quad (3.13)$$

Donde:

$$2\pi \cdot m_{Y_{c_i}} \cdot Factor2 = 2\pi \iint \rho \cdot Y_c \cdot r \cdot Factor2 dr \approx 2\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot Y_c \cdot rk|_{i,k} \cdot Factor2 \quad (3.14)$$

$$INT_{Y_c} = \iiint \rho \cdot Y_c dV = \iiint \rho \cdot Y_c \cdot 2\pi \cdot r dr dx \approx 2\pi \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot (m_{Y_{c_i}} + m_{Y_{c_{i+1}}}) \quad (3.15)$$

Y usando estas simplificaciones, la expresión desarrollada queda como:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} [2\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot Y_c \cdot rk|_{i,k}] \cdot Factor2 - \left[ 2\pi \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot (m_{Y_{c_i}} + m_{Y_{c_{i+1}}}) \right] \quad (3.16)$$

**II- Término conectivo, entrada / salida:**  $\int (\rho \cdot u \cdot Y_c) \cdot Factor1 dA$

$$2\pi \cdot \dot{m}_{Y_{c_i}} \cdot Factor1 = 2\pi \iint \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r dr \cdot Factor1 \approx 2\pi \cdot \Delta r \cdot \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r|_{i,k} \cdot Factor1 \quad (3.17)$$

Desarrollándolo a flujo de salida menos entrada:

$$2\pi \cdot \Delta r \cdot Factor1 \cdot (\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r|_{i,k} - \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r|_{i-1,k}) \quad (3.18)$$

**III- Término fuente, también llamado SOURCE:**  $\int \dot{w}_c \cdot Factor2 dV$

$$SOURCE = \iiint \dot{w}_c dV \approx 2\pi \frac{\Delta x}{2} (\iint \dot{w}_c r dr_i + \iint \dot{w}_c r dr_{i+1}) = 2\pi \frac{\Delta x}{2} (m_{\dot{w}_{c_i}} + m_{\dot{w}_{c_{i+1}}}) \cdot Factor2 \quad (3.19)$$

Si se reagrupan todas las expresiones correspondientes a los tres términos y se reformula la ecuación de conservación de la variable de progreso, ésta quedaría:

$$\frac{2\Delta x}{\Delta t} \pi m_{Y_{c_i}} \text{Factor2} + 2\pi \Delta r \text{Factor1} (\rho u Y_c r|_{i,k} - \rho u Y_c r|_{i-1,k}) - 2\pi \frac{\Delta x}{2\Delta t} (m_{Y_{c_i}} + m_{Y_{c_{i+1}}}) = \text{SOURCE}$$

(3.18)

Esta expresión puede ser reagrupada como una función que depende de  $Y_c$ , en la cual  $f(Y_c)$  es el error de la ecuación  $Y_c + \frac{B_c \cdot Y_c + C_c}{A_c \cdot u_{i,k}} = 0$ :

$$f(Y_c) = A_c \cdot Y_c \cdot u(i, k) + B_c \cdot Y_c + C_c$$

Gracias a esta forma de agrupar los términos se obtiene la siguiente información:

1.  $A_c$  engloba la información que hay en el  $(i + 1, k)$ :

$$A_c = 2\pi \cdot \Delta r_i \cdot \rho \cdot r|_{i+1,k} \cdot [1 + \tan \theta_k \cdot \tan(\theta_k - \theta_{k-1})] \cdot \frac{1}{\cos \theta_k}$$

2.  $B_c$  se corresponde con aquellas variables que multiplican a  $Y_c$ , pero que no poseen el término de la velocidad:

$$B_c = 2\pi \cdot \Delta r_i \cdot \frac{\Delta x}{2\Delta t} \cdot \rho \cdot r|_{i+1,k} \cdot [1 + \tan \theta_k \cdot \tan(\theta_k - \theta_{k-1})]$$

3. Por último, el término  $C_c$  es la suma de los términos restantes, pertenecientes tanto al estacionario como al transitorio:

$$C_c = C_{c,steady} + 2\pi \cdot \frac{\Delta x}{2\Delta t} \cdot m_{Y_{c_i}} - \frac{INT_{Y_c}}{\Delta t}$$

Siendo  $C_{c,steady}$ :

$$C_{c,steady} = -2\pi \dot{m}_{Y_{c_i}} - \text{SOURCE}$$

Como resultado de estos cambios, los ficheros de salida que proporciona el modelo son más que cuando éste no era predictivo, los nuevos ficheros de salida son:

- A) *Flamelet\_temp2.dat*: en este fichero se escriben variables asociadas a la reactividad del chorro, es decir, variables que aportan información de cuándo empieza a quemar el chorro y el modo en el que lo hace. Algunas de los parámetros que el fichero incluye son: *Max C [-]*, *Max T [K]*, valores máximos que alcanzan los parámetros variable de progreso y temperatura en todo el dominio del chorro (axial y radialmente). También se guarda para

cada valor de  $Max C [-]$  y  $Max T [K]$ , las posiciones en las que se halla dicho máximo  $xLoL [m]$ ,  $rLoL [m]$ ,  $xmaxC [m]$ ,  $rmaxC [m]$  y el tiempo en el que se produce el primer encendido  $tsoc [s]$ . Todos estos valores se escriben en función del tiempo  $[s]$  que ocupa la primera columna del fichero.

B)  $xrdata_*.dat$ : DICOM guarda un paquete de ficheros con esta extensión. Dentro de cada paquete se guarda una variable determinada que puede ser entre otras:  $C_{ik} [-]$ ,  $T_{ik} [K]$ ,  $u_{ik} [m/s]$ ,  $f_{ik} [-]$ ,  $\rho_{oik} [Kg/m^3]$ . Estos ficheros siguen la misma estructura que los ' $xdata.dat$ ' anteriormente comentados, es decir, para ciertos instantes de tiempo se guardan los valores de las variables en todo el dominio del chorro, con la diferencia de que en estos ficheros también se discretiza radialmente, esto quiere decir que guarda los ficheros en 2D.

### 3.3.3.3. Balance de $Y_c$ en el caso estacionario

Si se analiza de nuevo la ecuación de conservación de la variable de progreso, la única diferencia con el modelo transitorio es el término de la derivada temporal. Este término en el modelo estacionario se anula  $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right) = 0$ . Éste hecho facilita la resolución y el cálculo de la variable de progreso. Y la ecuación de conservación queda de la siguiente forma Ec. 3.20:

$$\int \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot dA - \int \dot{w}_c \cdot dV = 0 \quad (3.20)$$

Como se puede ver la Ec. 3.20 es mucho más simple que la del modelo transitorio y, si se desarrollan los términos, quedaría:

$$2\pi \cdot \Delta r \cdot Factor1 \cdot (\rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r|_{i,k} - \rho \cdot u \cdot Y_c \cdot r|_{i-1,k}) - 2\pi \dot{m}_{Y_{c_i}} = SOURCE \quad (3.21)$$

A continuación, se reagrupan los términos de la ecuación desarrollada según la función  $f(Y_c) = A_c \cdot Y_c \cdot u_{i,k} + C_{c,steady}$ , en la cual  $f(Y_c)$  será el error de  $Y_c + \frac{B_c \cdot Y_c + C_c}{A_c \cdot u_{i,k}} = 0$  y de forma análoga al modelo transitorio:

1.  $A_c$  engloba la información numérica que hay en la celda  $(i + 1, k)$ :

$$A_c = 2\pi \cdot \Delta r_i \cdot \rho \cdot r|_{i+1,k} \cdot [1 + \tan \theta_k \cdot \tan(\theta_k - \theta_{k-1})] \cdot \frac{1}{\cos \theta_k}$$

2. Por último, el término  $C_c$  es la suma de los términos restantes, pertenecientes al estacionario. Por tanto, al término  $C_c$  se le llamará  $C_{c,steady}$ :

$$C_{c,steady} = -2\pi\dot{m}_{Y_{c_i}} - SOURCE$$

Una vez alcanzado este punto, se procede de la misma forma que en el modelo transitorio para llevar a cabo la resolución de la ecuación de conservación de la variable de progreso.

La ventaja que tiene este modelo es que permite ver la evolución completa del chorro, sin que cambie ningún parámetro con el tiempo. De esta manera, un cálculo con el modelo estacionario corresponde al chorro completamente desarrollado de un modelo transitorio. Esto es una gran ventaja, ya que el modelo estacionario se calcula en cuestión de segundos y permite obtener las propiedades más relevantes del chorro (*LoL*, penetración, temperatura máxima alcanzada, etc.). En este caso, no se calcula el tiempo de retraso en el autoencendido, pues como se ha comentado, no es una evolución temporal.

En el caso estacionario predictivo también se añaden los mismos ficheros que en el caso transitorio, con la única diferencia de que el fichero "*Flamelet\_temp2.dat*", en este caso, tan sólo tiene una línea.

### 3.3.4. La ecuación de transporte de la variable de progreso y su acoplamiento en DICOM

Ahora que ya se han comentado los dos métodos posibles para resolver la ecuación de conservación de la variable de progreso, se va a definir el procedimiento que se lleva a cabo en DICOM para solucionar dicho problema. La Fig. 3.10 muestra un esquema del bucle de acoplamiento. Téngase en cuenta que las ecuaciones de conservación de momento y fracción de mezcla tienen un planteamiento 1D, mientras que la variable de progreso es 2D. El acoplamiento entre todas ellas se debe a la presencia de la velocidad en los términos de los flujos de entrada/salida y de la densidad local en todos los términos de las ecuaciones.

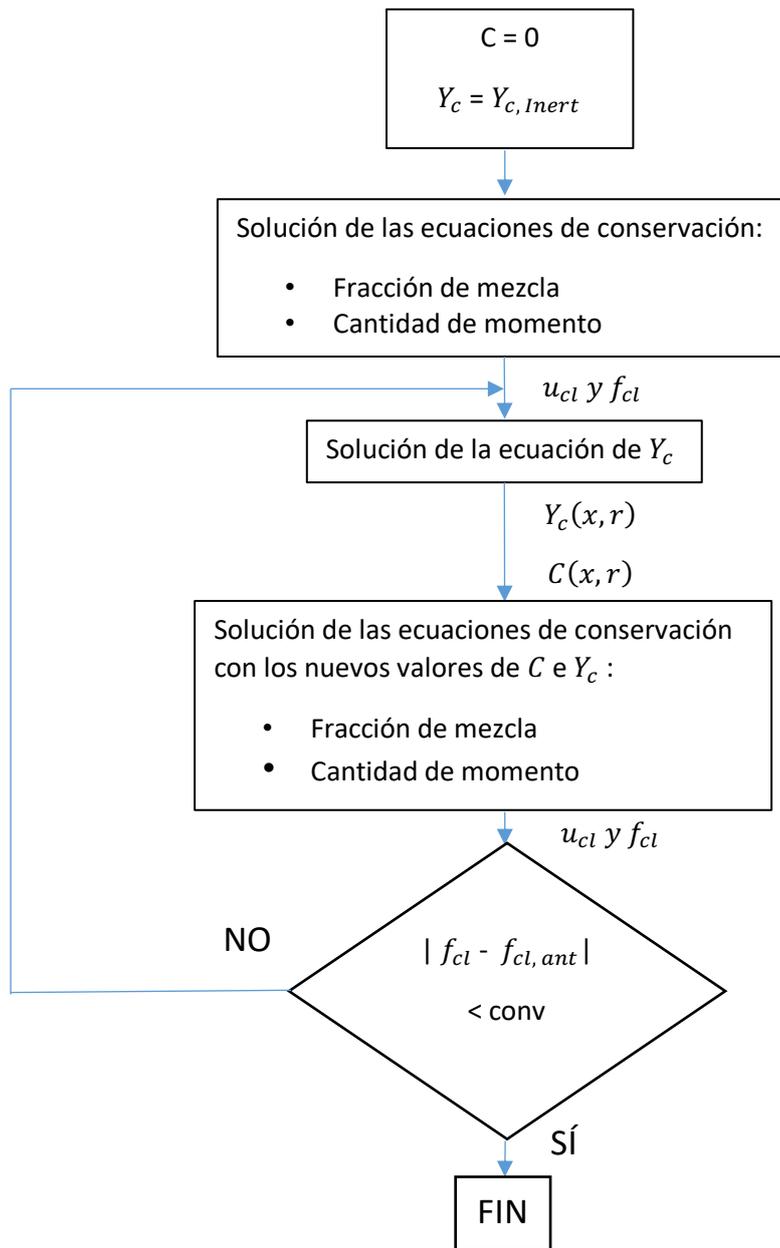
En primer lugar, hay que resolver las ecuaciones de conservación que van a permitir mediante el método iterativo de la secante, calcular el valor de la velocidad y la fracción de mezcla, ambas en el eje. En este bucle ya comienza a usarse el fichero de química tabulada llamado "*flamelet*", que aporta información sobre la reactividad del chorro. De este fichero se hablará en el siguiente apartado.

Tal y como se procede en el cálculo de la variable de progreso, se establecen dos límites para la fracción de mezcla. Un límite inferior  $f_0 = 0$  y un límite superior  $f_1 = 0.999$ , entre los cuales se aplicará el método de la secante. Si se encuentra una solución, se guardan los valores en las variables  $f_{cl}$  y  $u_{cl}$ , de tipo vector.

Una vez se tiene el valor de las variables en el eje, se procede a reconstruir el campo de velocidades y de fracciones de mezcla. Para ello, al principio del problema queda definido el perfil exponencial que se va a utilizar en cada variable, así que lo único que se deberá hacer será multiplicar el valor de la variable en el eje por el tipo de perfil exponencial adecuado. Por último, se interpolan los valores de las variables  $Y_{c,inert}$  e  $Y_{c,steady}$ , para un valor de  $C = 0$ , entrando en el fichero de la química tabulada con el valor de la fracción de mezcla y el valor de  $C$  en ese punto del chorro.

Tras la obtención de la información necesaria, comienza la resolución de la ecuación de conservación de la variable de progreso, asumiendo conocidos los campos de velocidad y fracción de mezcla. Al término del bucle de cálculo, que permite hallar el valor de  $C$  e  $Y_c$ , se recalculan algunas variables como la densidad, el término fuente y la temperatura. Como último paso, se resuelven una serie de integrales que servirán para el cálculo del instante posterior.

Ahora que ya ha acabado el bucle de cálculo de la variable de progreso y sus variables asociadas, comienza el proceso de acoplamiento entre  $C$ ,  $u(i, k)$  y  $f(i, k)$ . La manera de hacer este acoplamiento es muy sencilla, simplemente se debe repetir el bucle de cálculo de las ecuaciones de conservación, utilizando los nuevos valores de  $C$ , hasta que la solución de la fracción de mezcla  $f_{cl}$  no cambie entre dos iteraciones. Una vez termine este bucle de cálculo de las ecuaciones de conservación, ya se tendrá tanto el valor de la variable de progreso, como el acoplamiento entre ésta, la velocidad y la fracción de mezcla.

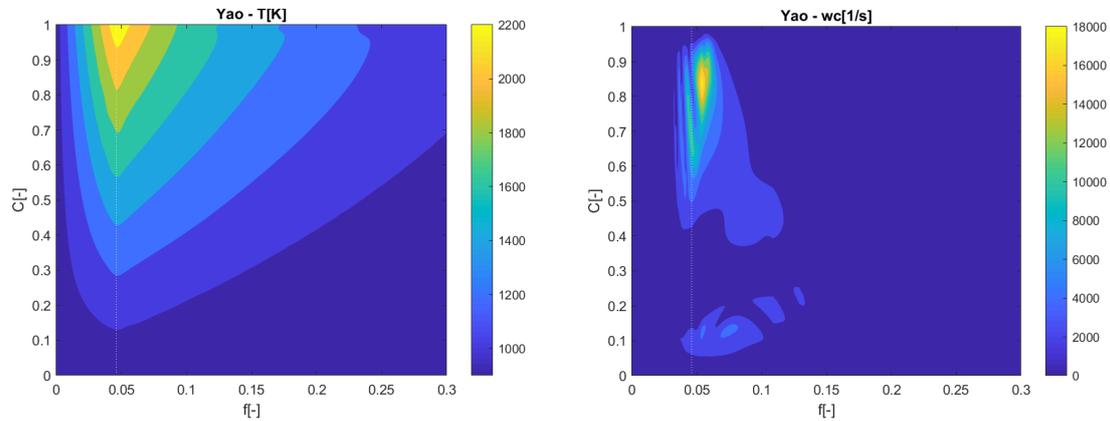


**Figura 3.10:** Esquema representativo del acoplamiento de la variable de progreso en DICOM

### 3.3.5. Fichero de química tabulada: “flamelet”

El fichero “*flamelet*” es un dato de entrada, cuya estructura es la de una tabla, que se le da a DICOM cuando se quiere calcular la reactividad del chorro. Este fichero depende del mecanismo químico que se asuma entre los productos que van a reaccionar en el seno del chorro. Existen diferentes mecanismos químicos, los dos que se han usado para calcular la reactividad del chorro son: el mecanismo “*Yao*” [3.7] y el mecanismo “*Nara*” [3.4].

Cada variable representada dentro de la “flamelet” ( $T, \rho, Y_i, \dot{w}_c \dots$ ) es función de dos parámetros que definen la tabla. Estos parámetros son la fracción másica  $f$  o  $Z$  y la variable de progreso normalizada  $C$ , quedando dichas variables como funciones que dependen de  $f$  y  $C$ . Para tener claro el funcionamiento de estas tablas, se han representado en la Fig. 3.11 las variables  $T$  y  $\dot{w}_c$ , en función de  $f$  y  $C$ , para una “flamelet” concreta.



**Figura 3.11:** Representación de la temperatura y el término fuente dentro de la flamelet en función de  $f$  y  $C$

En la Fig. 3.11 se puede ver cómo la variable de progreso normalizada está comprendida entre (0-1), y la fracción de mezcla entre (0-0,3), siendo 0,046 la fracción másica estequiométrica. En el punto de fracción másica estequiométrica es donde se alcanzan las mayores temperaturas en la “flamelet”. Sin embargo, los mayores valores del término fuente se alcanzan en valores de  $f$  un poco superiores al del valor estequiométrico, esto es, la reacción química alcanza velocidad máxima en dosados ligeramente ricos.

Cada una de estas tablas se genera a través de una simulación termoquímica externa, en la cual se mezcla combustible y aire en condiciones iguales a las del combustible y aire en el cálculo del chorro.

Existe un parámetro de la “flamelet”, denominado tasa de deformación o “Strain rate” ( $SR$ ), que indica la velocidad de difusión de la información (química) entre reactores o niveles de dosado. La tasa de deformación será utilizada como parámetro de ajuste del modelo, como se verá en el siguiente Capítulo.

Con el fin de poder leer y guardarse todos los datos incluidos en la tabla, se han implementado una serie de funciones. La primera de ellas cumple la función de lectura de la “flamelet”, la cual crea una estructura de variables en la que se van almacenando todos los datos. Las otras tres funciones tienen un objetivo común, una vez se conocen los datos de fracción de mezcla y variable de progreso, permiten realizar una interpolación de la variable que se quiere conocer en el punto en que se encuentra. Hay algunos parámetros que sólo dependen

de  $f$ , por lo que existe una función que sólo interpola en función de dicha variable. Las otras dos funciones interpolan en función de  $f$  y  $C$ , una de ellas construye una matriz de dos dimensiones con los datos que se van interpolando, mientras que la otra hace lo propio, pero en una matriz de tres dimensiones.

Todo lo relativo a la “*flamelet*” era muy importante, pues aparte de la implementación y resolución de la variable de progreso, sin la información que proporciona la “*flamelet*” acerca de la reactividad del chorro, no hubiera sido posible la resolución del problema de cálculo de un chorro reactivo.

Gracias a la resolución del problema de forma acoplada, DICOM permite calcular la longitud intacta o  $LoL$  y el tiempo de retraso que tiene lugar hasta el inicio de la combustión.

### 3.4. Conclusiones

A lo largo de este capítulo se ha introducido el modelo unidimensional de DICOM y las ecuaciones de conservación que gobiernan el modelo. Las ecuaciones se resuelven en cada celda para conocer toda la información del chorro, donde éstas son: la de velocidad  $u$  y la de fracción de mezcla  $f$ . La resolución de dichas ecuaciones da información acerca de muchas otras variables a parte de las ya resueltas, como la temperatura, la densidad, el momento...

En lo referente al interfaz del usuario, también se ha explicado qué datos de entrada necesita el modelo de DICOM para realizar los cálculos, tanto el modelo estacionario como el transitorio. La principal diferencia es que en el modelo estacionario las entradas son escalares (pues el valor de los datos permanece constante con el tiempo), mientras que en el modelo transitorio se trata de ficheros de texto, que almacenan la información de cómo la variable en cuestión cambia con el tiempo. Además, otra diferencia importante es que en el modelo transitorio hay más ficheros de salida que en el estacionario.

Uno de los puntos más importantes de este capítulo ha sido la explicación, definición y resolución de la ecuación de conservación de la variable de progreso. Ésta permite pasar de un modelo inerte a un modelo reactivo, objetivo principal de este trabajo. Se ha de destacar también la importancia que tiene acoplar la resolución de esta ecuación con la resolución de las ecuaciones de conservación (velocidad y fracción de mezcla). Pues sólo de esta manera se consigue que el cálculo además de reactivo sea predictivo. Sin embargo, este cambio ha generado una desventaja respecto a la anterior versión del modelo. Esta desventaja es el incremento del coste computacional que conlleva realizar las integrales en cada iteración, en lugar de coger los resultados tabulados en tablas e interpolar cuando se quieren calcular.

Por el contrario, a pesar de que el tiempo de cálculo haya aumentado, éste sigue siendo mucho menor que en un cálculo con CFD, aunque se asumen una serie de simplificaciones y de hipótesis que no son necesarias en un modelo CFD. Aun así, el modelo de DICOM supone un gran avance, pues permite el cálculo de modelos estacionarios y transitorios, inertes y reactivos con un tiempo de cálculo muy pequeño comparado con un CFD.



# Capítulo 4

## 4. Resultados: Calibración y validación del modelo

### 4.1. Introducción

Tras haberse expuesto la base teórica sobre la que se sustenta el modelo, y haberse demostrado y definido cómo se resuelve el problema acoplado en DICOM, se van a analizar los resultados que se han obtenido para diferentes ensayos después de haber calibrado el modelo.

Se va a comenzar por presentar la instalación utilizada para realizar los experimentos que han permitido la validación del modelo. Todos los datos relativos a los ensayos experimentales ya estaban disponibles, pues en los anteriores trabajos que se desarrollaron sobre DICOM, ya se habían validado los resultados con esta misma información [4.2].

A continuación, se van a ofrecer los resultados obtenidos del cálculo de una serie de casos reactivos. Esta batería de cálculos se realizó con la finalidad de poder evaluar la influencia de un parámetro llamado “*Strain Rate*” (*SR*) para el mecanismo químico “*Yao*”. El *SR* es propio de la “*flamelet*”, por lo que el mecanismo químico no será la única variable que defina la tabla de datos de la “*flamelet*”. Este parámetro representa la difusividad que existe entre los diferentes reactores de la tabla, a mayor *SR*, mayor difusividad.

Para poder tener una visión de la influencia que tiene el mecanismo químico en el desarrollo del chorro se ha calculado un caso con el mecanismo químico “*Nara*”.

También se ha estudiado la influencia de la temperatura del aire de la cámara, realizando un par de simulaciones para dos *SR* distintas a temperatura 800 K, en vez de 900 K, que es el caso al que se denomina “nominal”.

Por último, se han realizado dos ensayos, en uno de ellos se corta la inyección a los 500 microsegundos y en el otro se simula una inyección partida en la que se inyecta durante 500 microsegundos, se deja de inyectar otros 500 microsegundos y se vuelve a inyectar combustible durante 500 microsegundos más. Esta simulación se va a comparar con un experimento de la organización *Sandia National Laboratories*, publicado en la revista *SAE International Journal of Engines* [4.6].

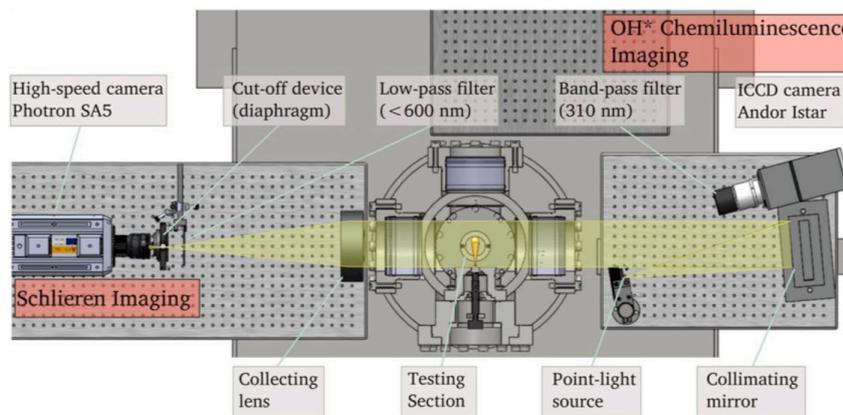
## 4.2. Calibración de los resultados experimentales

Para poder validar los cálculos de la nueva versión de DICOM hay que compararlos con datos obtenidos de ensayos experimentales. Para ello, en este apartado se va a explicar de qué forma se han obtenido los resultados y qué medios han sido necesarios para poder lograrlo [4.4].

El equipo del que se dispone para realizar los ensayos es una cámara de flujo constante, que es capaz de simular las condiciones termodinámicas que se dan dentro del cilindro de un motor Diesel. No sólo es capaz de simularlas, sino que también permite mantenerlas constantes a lo largo del experimento [4.1], lo que es una gran ventaja.

El sistema empleado es un sistema de inyección *common rail*, formado por una bomba de alta presión y un rail convencional provisto de un regulador electrónico de presión. Gracias a este sistema se pueden alcanzar unas presiones de hasta  $220\text{ MPa}$ , manteniendo este nivel de presión durante la inyección del combustible.

Con la intención de evitar daños en el sistema se dispone de un sistema de refrigeración que mantiene el inyector a una temperatura de  $343\text{ K}$ . En la siguiente figura se va a mostrar el sistema utilizado para los experimentos, Fig. 4.1.



**Figura 4.1:** Sistema para la visualización de resultados de los ensayos experimentales [4.2]

La curva de descarga de la velocidad de inyección permite realizar las mediciones de la tasa de inyección [5]. Para conseguir una estimación fiable se obtuvo el promedio de realizar cincuenta inyecciones consecutivas en cada ensayo. De esta forma se alcanzó una dispersión de tan sólo el 0.3%.

Todas las imágenes obtenidas se procesan con un algoritmo que es capaz de detectar el límite del chorro, una vez lo encuentra, calcula sus propiedades asociadas. Antes de comenzar la inyección (SOI) se representa el fondo de la imagen como un promedio de todas las fotos obtenidas. Una vez comienza la inyección, las imágenes que se obtienen se procesan restándoles la imagen de fondo. Tras este proceso, se invierte la imagen para que el chorro quede representado de forma brillante sobre un fondo oscuro. Para terminar, cada imagen se binariza mediante un umbral previamente seleccionado, consiguiendo así detectar los contornos del chorro. A partir de estos chorros, bien de imágenes iluminadas o de radiación propia de la llama, se pueden medir parámetros como la penetración del chorro con el tiempo, el tiempo de retraso o la distancia del *LoL*.

### 4.3. Ensayos experimentales de validación

El lugar que sirve de fuente de información para obtener los datos experimentales es la plataforma *Engine Combustion Network* [4.3]. Es una plataforma creada para una colaboración internacional entre diferentes empresas relacionadas con el sector automovilístico. Cada una de estas empresas realiza una serie de experimentos en sus instalaciones, para posteriormente compartir esos resultados en la ECN y poder validar los resultados entre todos los participantes del proyecto. De todas las líneas de investigación en la ECN, la que van a servir de apoyo a este proyecto, serán las de los motores Diesel, tanto de chorros inertes como reactivos, para la configuración llamada “Spray A”.

La tabla 4.1 muestra las condiciones de ensayo para el punto nominal y para el de baja temperatura

	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	T aire(K)	P aire (MPa)	X <sub>O2</sub> (%)	d <sub>0</sub> (m)	LoL (mm)	$\tau_{SOC}$ (μs)
<b>Spray A</b>	22,8	900	6	15%	0.09	17	434,69
<b>Baja T</b>	22,8	800	6	15%	0.09	28,35	993,5

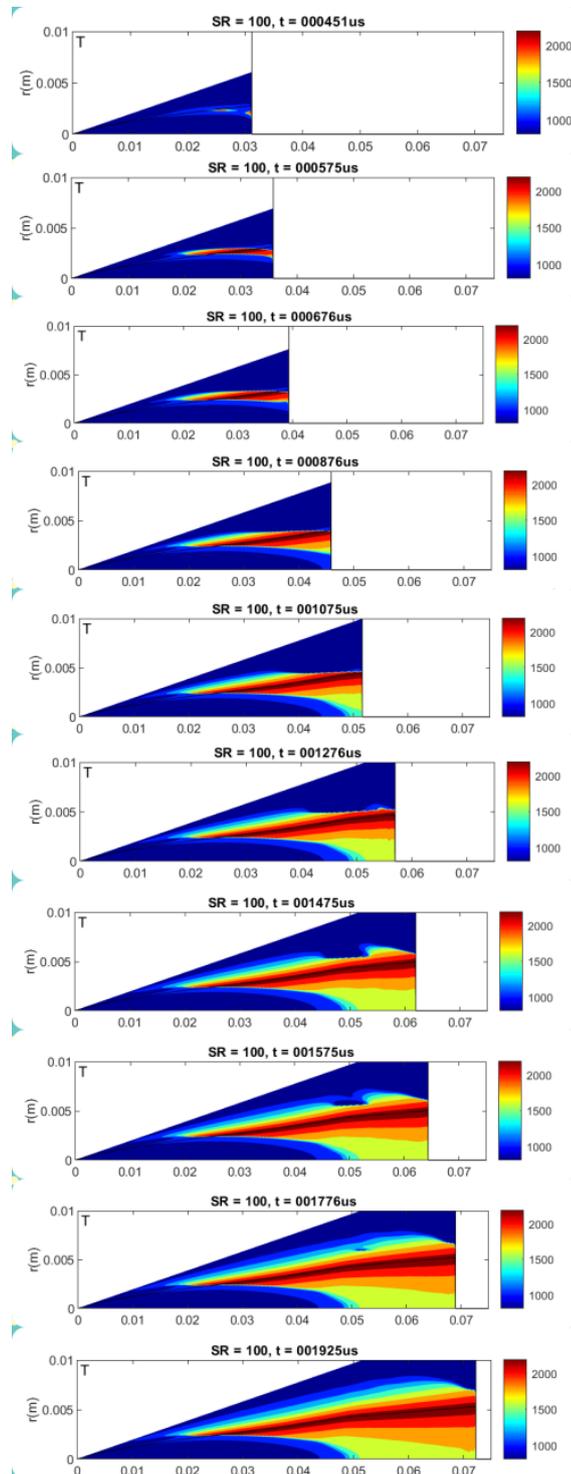
**Tabla 1:** Condiciones de los ensayos experimentales y los resultados de LoL y  $\tau_{SOC}$

Para el cálculo del *LoL* y del  $\tau_{SOC}$  en DICOM se establecen unas condiciones que se deben cumplir en el chorro. Estas condiciones son:

- *LoL*: La posición axial tal que la fracción másica de OH,  $Y_{OH}$ , alcance el 13% del máximo valor de la concentración de OH a lo largo de todo el chorro.

- $\tau_{SOC}$ : Cuando la temperatura en un punto del chorro supere un valor determinado por la temperatura del aire más 400K.

Una vez definidos estos umbrales para el cálculo en las simulaciones de estos parámetros, se van a presentar los resultados que arroja DICOM para el caso nominal.

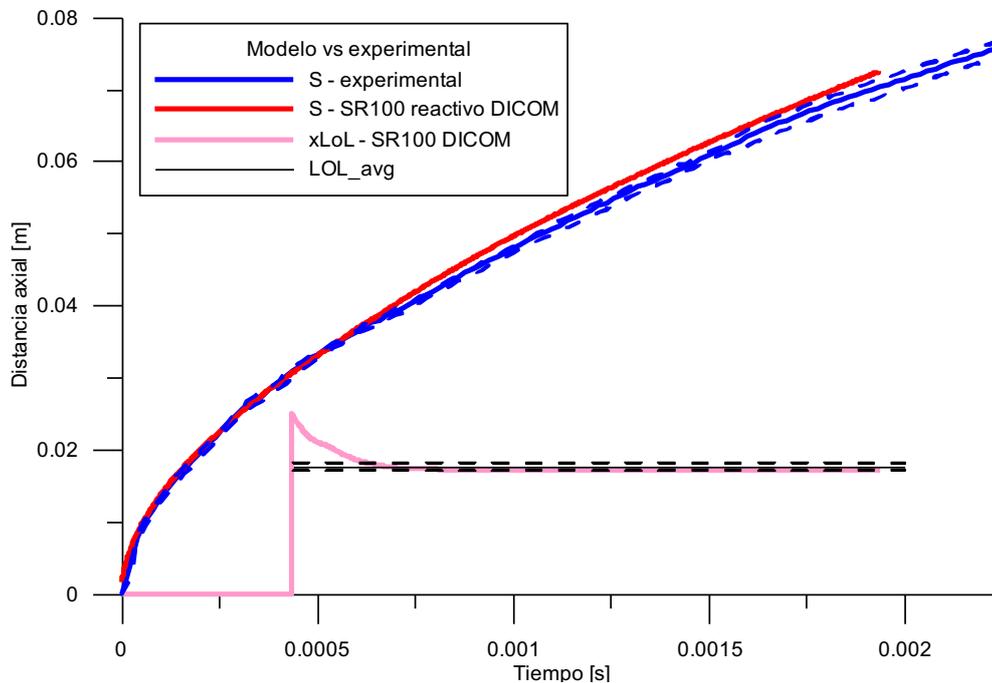


*Figura 4.2: Evolución de la temperatura en el chorro en el caso nominal de cálculo*

La Fig. 4.2 muestra la evolución temporal de la temperatura en el chorro durante el proceso de encendido. Si se estudia en esta evolución del mapa de temperaturas para las condiciones nominales, se puede concluir que el instante en el que enciende el chorro (primera imagen mostrada en la secuencia), es decir,  $\tau_{SOC}$ , es 440 microsegundos, tan sólo 6 microsegundos de retraso respecto a los resultados experimentales. Por lo que se puede decir, que la predicción es bastante buena. El *LoL* por otra parte, alcanza un valor en DICOM de aproximadamente 16,89 milímetros, el cual está también muy próximo de la medida experimental.

Estos mapas son muy representativos y permiten el estudio de la evolución del chorro con detalle. Sin embargo, a partir de ahora se van a analizar los resultados con otro tipo de gráficas. Siguen siendo mapas de temperatura, pero en lugar de la coordenada radial  $r$ , se representan por su radio relativo, es decir, en  $r/R$  (radio del chorro dividido por el radio total del chorro). Esto permitirá ver mejor la evolución del chorro cerca de la tobera de inyección. Además, cabe recordar que cada coordenada del chorro tiene una coordenada radial  $r/R$  constante, con lo que esta representación permite observar todas las trayectorias en paralelo.

A continuación, en la Fig. 4.3 se va a evaluar la predicción que hace DICOM de la penetración del chorro.



**Figura 4.3:** Comparación de las penetraciones entre el modelo DICOM y resultados experimentales

En esta figura, están representados los valores de penetración y longitud intacta para el caso experimental y el caso que modela DICOM. Las líneas discontinuas representan el intervalo de confianza de los valores experimentales.

Si se analizan las penetraciones, es visible el parecido que tienen. Durante los primeros 600 microsegundos DICOM reproduce la penetración a la perfección. Pero a partir de este instante, es cierto que DICOM predice una penetración un poco por encima de la experimental, aunque esta diferencia, en su punto de máximo valor, es de tan sólo 2 milímetros. Si se calcula el error respecto al valor experimental con la expresión  $\varepsilon = \frac{|S_{DICOM} - S_{exp}|}{S_{exp}} * 100$ , éste es:

$$\varepsilon = \frac{|0.072440945 - 0.070307341|}{0.070307341} * 100 = 3\%$$

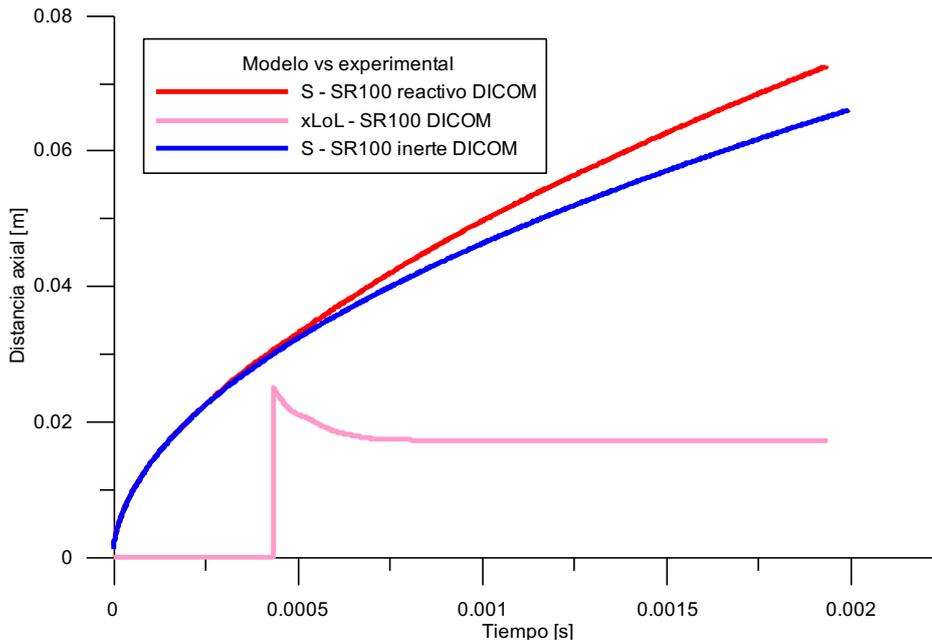
el cual, es un error muy pequeño.

Lo mismo ocurre con la longitud intacta y el tiempo de retraso. La longitud intacta posee una diferencia aún menor que las penetraciones, inferior a 1 milímetro, y el tiempo de retraso en DICOM es un poco superior al tiempo experimental, pero como se ha comentado antes, tan sólo 6 microsegundos.

Para terminar este apartado, se va a comparar los resultados de la última versión de DICOM, capaz de predecir la reactividad del chorro, con la versión anterior en la que DICOM tan sólo podía calcular un chorro inerte.

Las diferencias principales entre el modelo inerte y el modelo reactivo se observan en variables como la penetración, pues al incluir la reactividad del chorro en el cálculo, la consecuencia directa de la ignición del combustible es la aceleración del chorro, alcanzando una mayor penetración.

Seguidamente, se realiza una comparación entre un caso inerte y un caso reactivo. En la gráfica se representan las penetraciones para cada caso y, además, en el caso reactivo se va a ver el *LoL*, variable que sólo se puede calcular con la versión actual, pues para poder calcular esta variable en la versión anterior, se necesitaba hacer uso del *script* de Matlab.



**Figura 4.4:** Comparativa entre un caso de cálculo inerte y otro reactivo con el modelo DICOM

Tal y como se acaba de comentar, las diferencias en la penetración de ambos casos son evidentes. En primer lugar, se puede ver cómo durante los primeros 450 microsegundos ambas penetraciones son exactamente iguales, pero una vez se alcanza la distancia en la que el *LoL* aparece (indicación de que el chorro empieza a quemar), la penetración para el caso reactivo comienza a separarse de la del caso inerte y sufre una aceleración, debido a la quema del combustible, de tal forma que, si se traza una vertical para un tiempo determinado, la penetración para el caso reactivo es mayor que para el caso inerte.

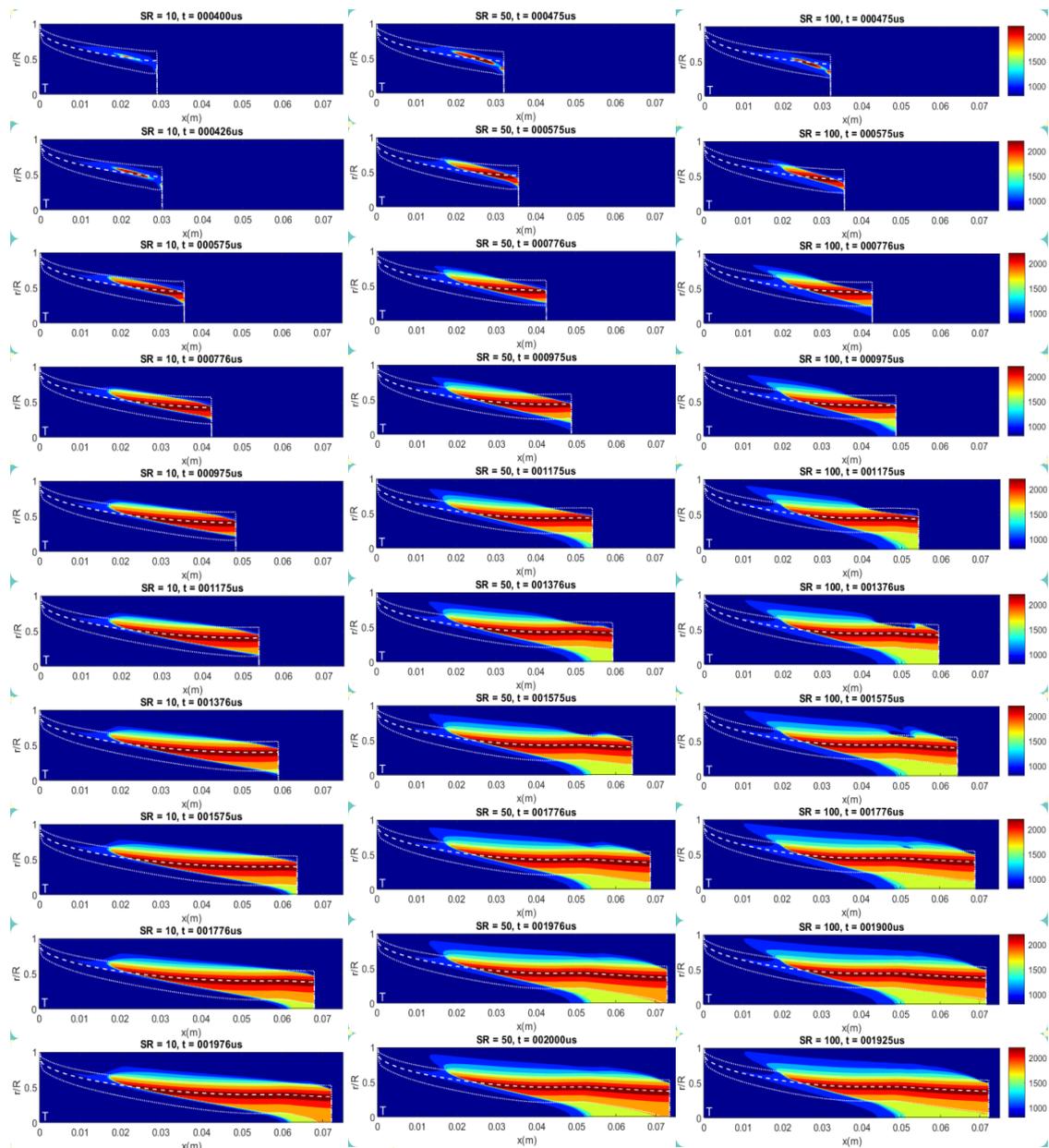
#### 4.4. Estudio de la influencia del *Strain Rate (SR)*

En este apartado se va a evaluar la influencia del parámetro *SR*, el cual se mide en unidades de  $[1/s]$ . Como se ha comentado en la introducción, el *SR* influye en la difusividad que existe entre las variables que se almacenan en la “*flamelet*”. Por tanto, para cada *SR* se tendrá una “*flamelet*” diferente y, en consecuencia, el chorro también reaccionará de manera distinta.

Los gráficos que se van a exponer a continuación (Fig. 4.5 y Fig. 4.6) son mapas de temperatura utilizados para analizar los distintos parámetros de influencia en el chorro. En estos gráficos el eje de abscisas es la distancia axial entre la tobera y la penetración del chorro en metros. Como se puede observar en la Fig. 4.4, el eje de ordenadas representa el radio del chorro  $r$ , dividido entre el radio máximo alcanzado  $R$ . Tal y como se ha indicado, ello permite observar en horizontal la evolución del chorro.

Esta serie de imágenes permiten la visualización de la evolución del chorro. En primer lugar, la penetración viene marcada por la línea vertical blanca a la que convergen las líneas discontinuas. Estas líneas discontinuas representan las trayectorias a lo largo del chorro que toman los radios de dosado rico (2.0 - la línea discontinua inferior inferior), estequiométrico (1.0 - la línea discontinua intermedia) y pobre (0.5 - la línea discontinua superior).

La variable representada en estos mapas es la temperatura, de la cual se puede estudiar su evolución durante el desarrollo del chorro. A la derecha del todo se muestra la escala con una temperatura mínima representada de 800 K y una temperatura máxima de 2200 K.

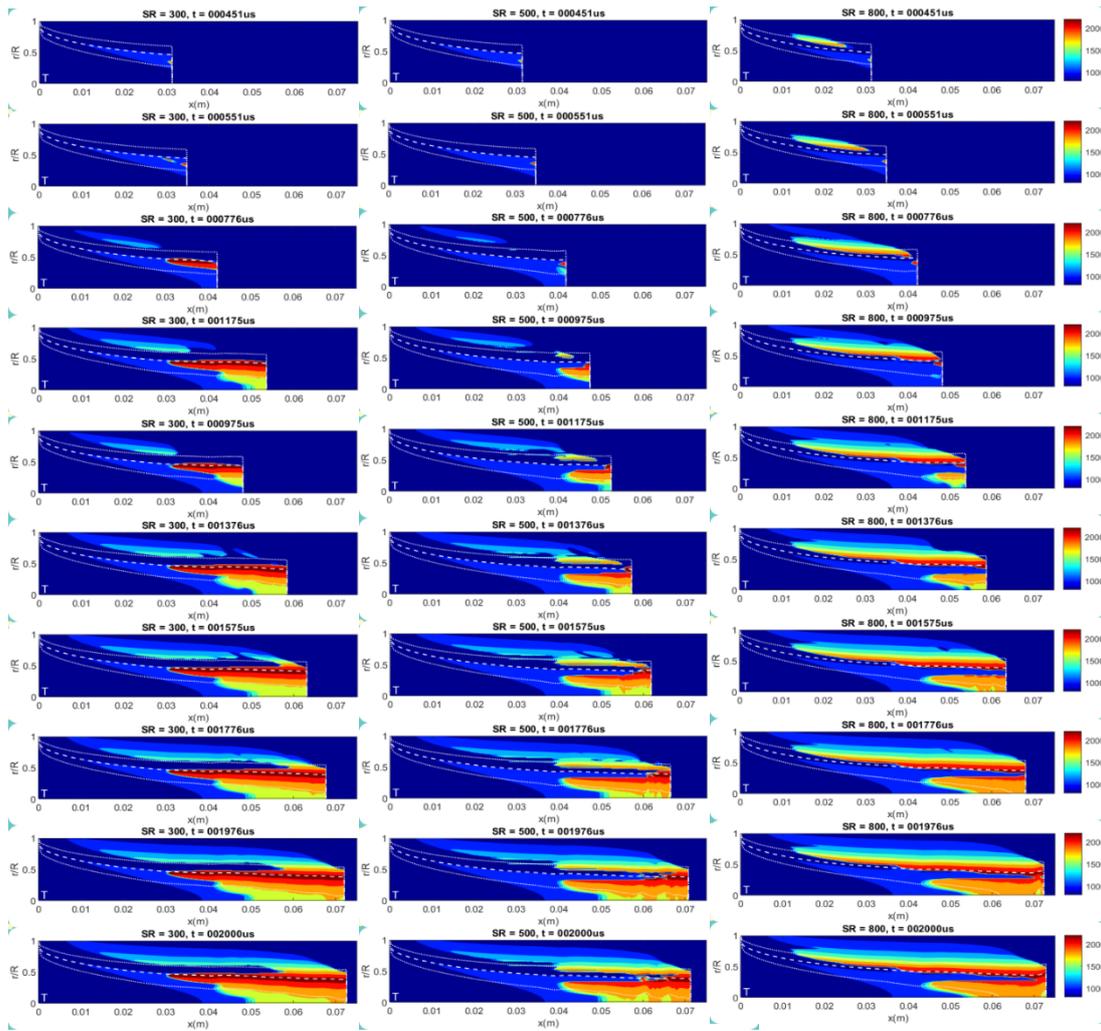


**Figura 4.5:** Mapa de la evolución temporal y espacial de la temperatura en el chorro para los casos:  $SR = 10$  [1/s],  $SR = 50$  [1/s],  $SR = 100$  [1/s]

Para poder estudiar qué influencia tiene el  $SR$  en el chorro se calcularon una serie de casos ( $SR$ : 10 [1/s], 50 [1/s], 100 [1/s], 300 [1/s], 500 [1/s], 800 [1/s]) que, tras procesar los resultados, evidenciaron la influencia que tiene sobre el tiempo de retraso ( $\tau_{soc}$ ). Se observa una clara tendencia: ésta es un menor  $\tau_{soc}$  para el menor valor de las  $SR$  ( $SR$  10 [1/s]) y, conforme se aumenta el  $SR$ , aumenta el  $\tau_{soc}$ . No sólo cabe destacar la influencia sobre el  $\tau_{soc}$ , sino que también varía la zona donde empieza a quemar el chorro y cómo el frente de llama se propaga.

Así pues, si se analiza la Fig. 4.5. se puede ver que para los  $SR$  más bajos no existe un gran cambio en el desarrollo del chorro. Pero, si se estudia con detalle, se puede destacar que el  $LoL$  se hace más pequeño conforme se disminuye el  $SR$ . Siendo el  $LoL$  para  $SR$  10 [1/s] de unos 17 mm y para el  $SR$  100 [1/s] un poco mayor, alrededor de 19 mm.

Además del  $LoL$ , se ve cómo, al bajar el  $SR$ , baja la anchura del chorro quemado, siendo el chorro completamente desarrollado para un  $SR$  10 [1/s] más fino que para  $SR$  100 [1/s]. Por último, si se centra la atención en el  $\tau_{soc}$ , cabe destacar que el encendido se retrasa al aumentar el  $SR$ . Entre valores tan bajos de  $SR$  no tiene mucha influencia, sin embargo, como se verá a continuación, para  $SR$  más grandes el  $\tau_{soc}$  sí que varía significativamente.

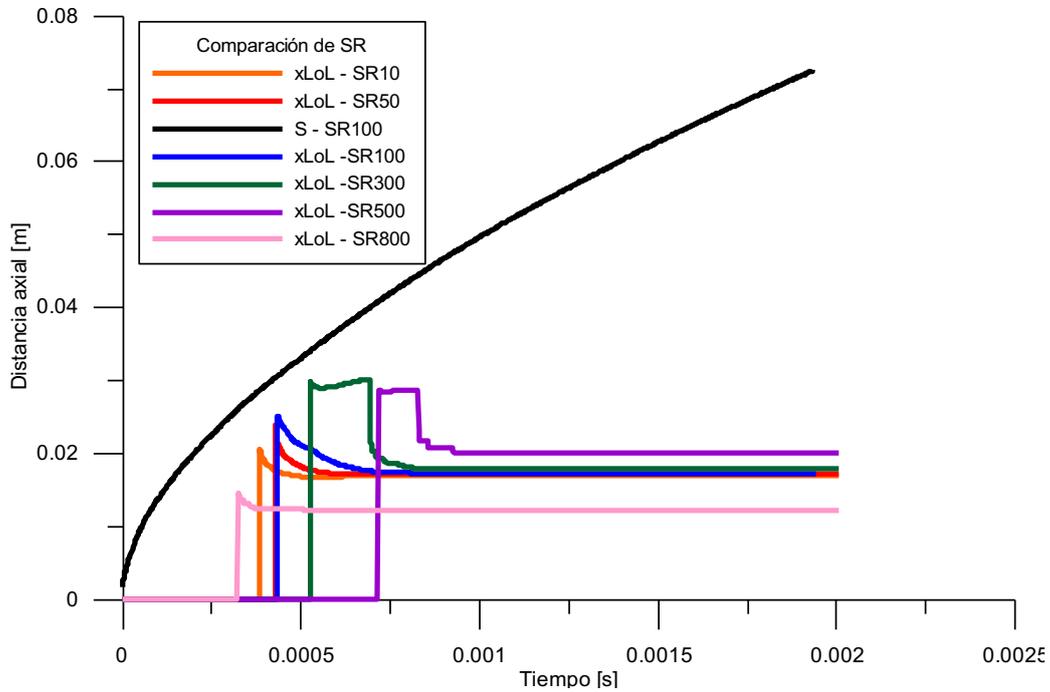


**Figura 4.6:** Mapa de la evolución temporal y espacial de la temperatura en el chorro para los casos  $SR = 300 [1/s]$ ,  $SR = 500 [1/s]$ ,  $SR = 800 [1/s]$

Si ahora se analiza la Fig. 4.6, se puede concluir que a mayor  $SR$  el chorro se desarrolla de forma diferente, además de hacerlo más irregularmente. Al inicio del encendido aparece una zona de alta temperatura que se sitúa alrededor de dosados pobres, cosa que para los  $SR$  más bajos de la Fig. 4.5 no sucedía. Pero ésta no es la única zona de encendido, pues como cabía esperar, encienden también alrededor de dosados estequiométricos y ricos. Se ha comprobado mediante un cálculo CFD análogo que, efectivamente, para  $SR$  altos el chorro comienza a encender por las zonas de dosado pobre.

Conforme va desarrollándose el chorro, estos dos encendidos se van aproximando hasta unirse casi al final de la simulación, lo que genera un hueco en el mapa de temperaturas, producido por una zona de bajas temperaturas que en función del  $SR$  analizado se sitúa en trayectorias del chorro diferentes.

Si se presta atención a  $SR\ 300\ [1/s]$ , este hueco se queda entorno a dosados pobres, en  $SR\ 500$  esta zona de bajas temperaturas se desplaza entorno a dosados estequiométricos, alcanzando la zona de dosados ricos en  $SR\ 800\ [1/s]$ .



**Figura 4.7:** Comparativa de LoL entre los SR simulados

En la Fig. 4.7 se muestra en función del tiempo y de la distancia axial la penetración del chorro y las longitudes intactas calculadas por el modelo para cada uno de los SR.

Si se analiza se puede ver cómo:

- Para los SR 10, 50 y 100 la longitud intacta alcanza (cuando se estabiliza) los 16,89 milímetros. Si se analiza el tiempo de retraso es de unos 440 microsegundos para SR 50 y 100, sin embargo, para SR 10 es del orden de 390 microsegundos.
- Para SR 300 la longitud intacta es muy similar a la de los SR más bajos. Por el contrario, el tiempo de retraso aumenta, alcanzando los 690 microsegundos.
- Para SR 500 aumentan tanto el tiempo de retraso como la longitud líquida, alcanzando respectivamente unos valores de 830 microsegundos y 20 milímetros.
- De forma contraria a la tendencia al aumentar SR, para el SR 800 bajan tanto la longitud intacta (12 milímetros) como el tiempo de retraso, 330 microsegundos.

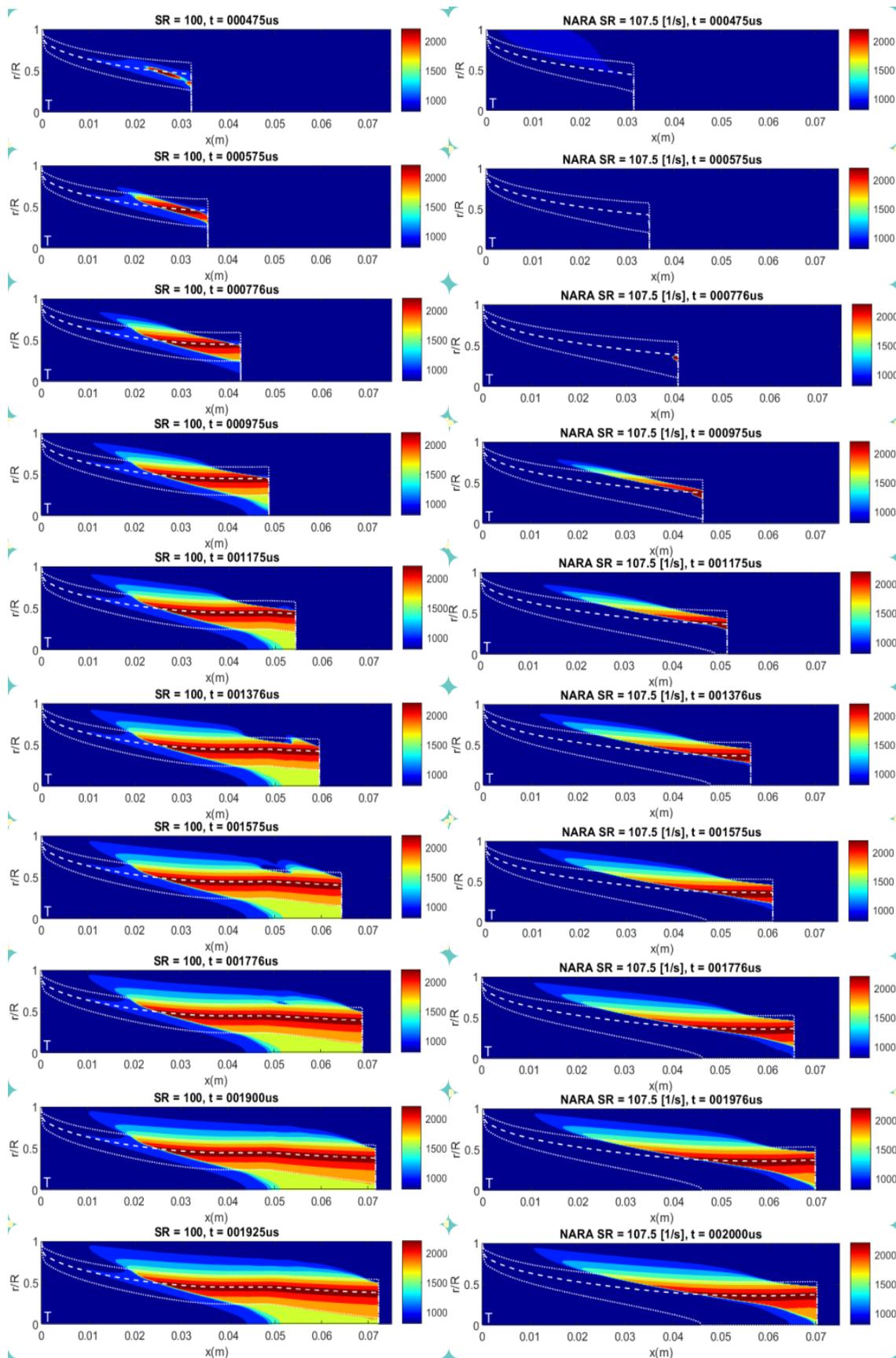
## 4.5. Estudio de la influencia del mecanismo químico

A lo largo de este apartado se va a estudiar cómo influye el mecanismo químico en la evolución del chorro. En primer lugar, se va a describir qué es lo que cambia al seleccionar un mecanismo químico u otro. Más tarde, con el análisis de los resultados se va a poder describir de forma más detallada la influencia que este parámetro tiene en el chorro.

La principal diferencia entre elegir el mecanismo químico “*Yao*” o el “*Nara*” es la velocidad de reacción que existe entre las diferentes especies presentes en el aire y el combustible. Así pues, el mecanismo “*Yao*” es un mecanismo que permite a las especies reaccionar de manera más rápida que en el caso del “*Nara*”. Esto se traduce en un menor tiempo de encendido  $\tau_{soc}$ , y, por tanto, el combustible se quemará más rápidamente.

Otra diferencia presente entre estos mecanismos es la complejidad de las reacciones que se desarrollan y la cantidad de especies químicas que son capaces de controlar, siendo el “*Nara*” el mecanismo más potente.

A continuación, se va a analizar con detalle cada uno de los dos mecanismos en función de la temperatura alcanzada mediante unos mapas gráficos y así poder comparar distintos parámetros del chorro para cada caso como  $LOL$  y  $\tau_{soc}$  entre otros en la Fig. 4.8.



**Figura 4.8:** Mapas de la evolución temporal y espacial de la temperatura para el mecanismo químico “Yao” (izquierda) y para el mecanismo químico “Nara” (derecha)

Como se acaba de explicar en la introducción de este apartado, la principal diferencia entre ambos mecanismos es la velocidad de reacción. Así pues, si se analizan los gráficos, se puede ver cómo el “*Yao*” empieza a quemar en torno a 475 microsegundos, mientras que el “*Nara*” comienza sobre 776 microsegundos. Por esto, tal y como se ha comentado al principio de este apartado, el mecanismo “*Yao*” permite una combustión más rápida, gracias a la mayor velocidad de reacción entre especies. Este efecto no sólo tiene importancia por la mayor o menor rapidez en el encendido, sino que, como se explicó en el capítulo 2, el mecanismo “*Nara*” acumula más combustible hasta que empieza a quemar, esto acaba traducándose en una mayor energía liberada en la fase de combustión premezclada.

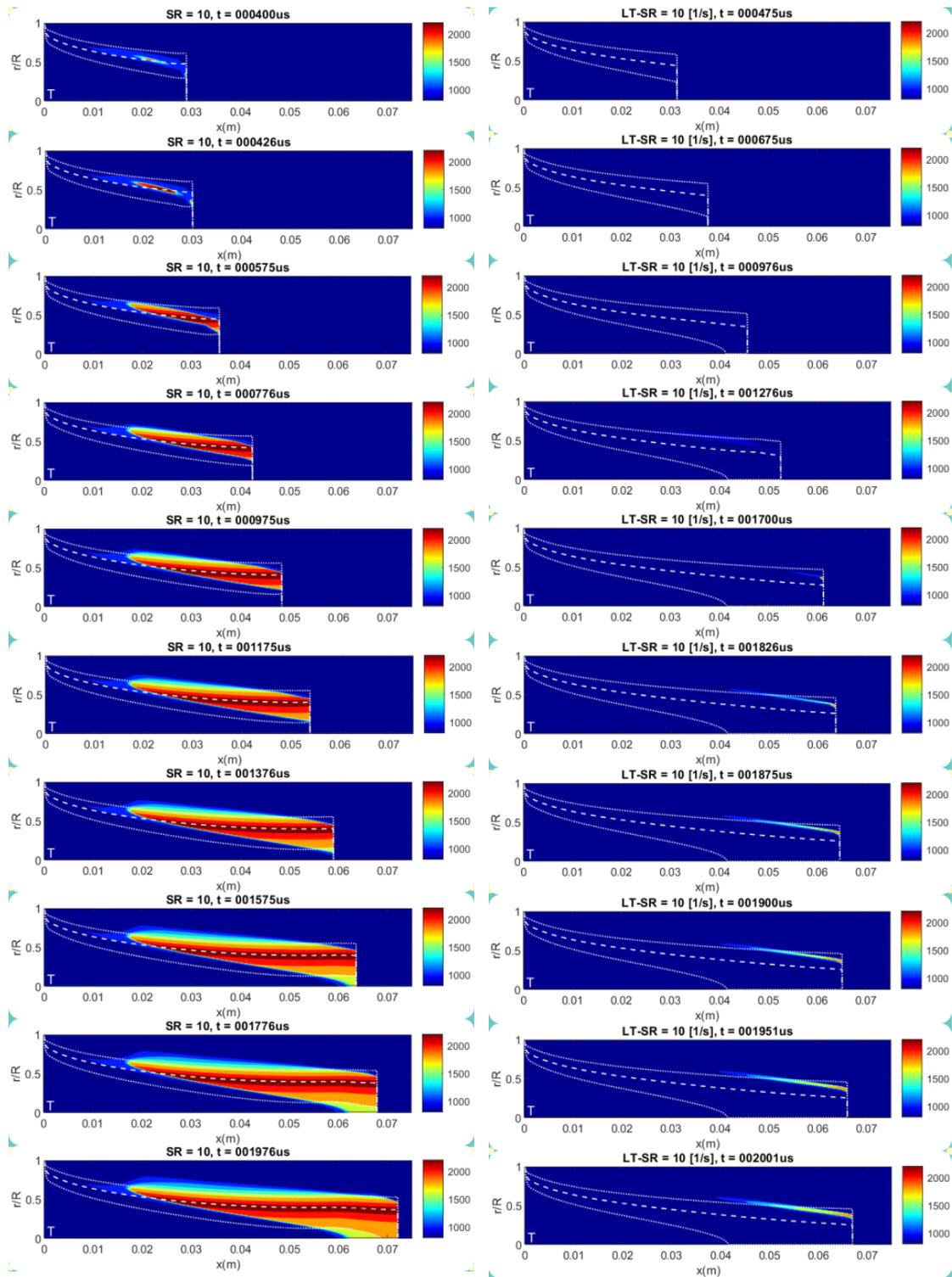
Si el análisis se centra ahora en el *LoL*, se ve que el “*Yao*” tiene un *LoL* (19 *mm*) un poco más corto que el “*Nara*” (un poco más de 20 *mm*). Sorprende que, al reaccionar más tarde, el chorro avanza más distancia antes de empezar a quemar y, cuando la llama se estabiliza, lo hace casi a la misma distancia en ambos casos, habiendo empezado la ignición en el caso del “*Nara*” 300 microsegundos más tarde.

Por último, conviene comentar que el mecanismo “*Yao*” alcanza una mayor penetración, pues para su instante final de cálculo (1925 microsegundos) penetra hasta 75 *mm*, mientras en el caso “*Nara*”, en el instante final 2000 microsegundos, tan sólo ha alcanzado los 70 *mm*, a pesar de haber estado el chorro más tiempo en desarrollo.

## 4.6. Estudio sobre la influencia de la temperatura del aire de la cámara de combustión

Durante este apartado se quiere estudiar cómo puede influir la temperatura del aire de la cámara en la evolución del chorro. Se van a comparar cuatro casos, dos de temperatura 900 K (denominado caso nominal) y dos casos de baja temperatura, 800 K (*Low Temperature*). Los dos casos para cada temperatura corresponden a dos *SR* diferentes, *SR* 10 [1/s] y *SR* 300 [1/s].

Se van a estudiar los casos de forma separada, dos a dos en función del *SR*. En primer lugar, se analizarán las dos temperaturas para *SR* 10 [1/s] y después, se hará lo propio para *SR* 300 [1/s]. Se pretende examinar la influencia que tiene este cambio de la temperatura del aire de la cámara en parámetros como el  $\tau_{SOC}$ , el *LoL* y la penetración, entre otros.



*Figura 4.9: Mapa temporal y espacial de temperaturas para los casos de alta y baja temperatura del aire de la cámara con  $SR = 10$  [1/s]*

En la Fig. 4.9 se representa a la izquierda el caso nominal para un  $SR$  10 y en la derecha el caso de baja temperatura del aire en la cámara para ese mismo  $SR$ .

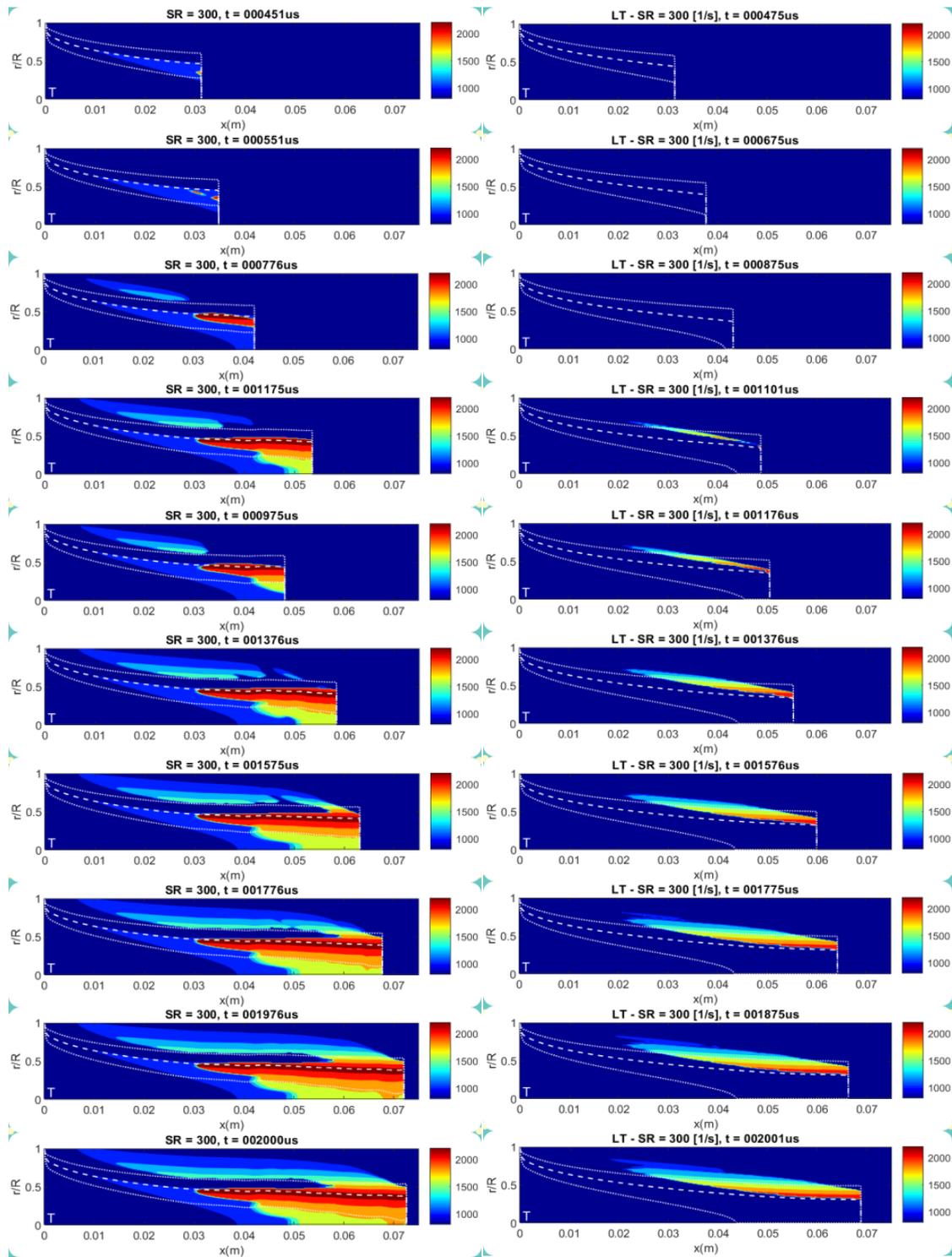
Como se puede ver, la temperatura en la cámara condiciona de manera muy significativa el inicio de la combustión. Al bajar la temperatura en la cámara, se retrasa el inicio de la combustión en 1500 microsegundos, lo cual provoca que, cuando para unas condiciones nominales el chorro ya está completamente desarrollado, en el caso de baja temperatura está empezando a quemar.

Este retraso en el encendido provocará el mismo efecto que se comentó para los casos de distinto mecanismo químico, es decir, como la combustión se retrasa, el chorro penetra más, antes de empezar a quemar, y el *LoL* se situará a mayor distancia de la tobera. Además, al haber estado más tiempo inyectando combustible y éste haber podido mezclarse mejor con el aire, el pico de energía liberada en la combustión premezclada sería mayor en el caso de baja temperatura.

Otros parámetros que vienen condicionados por este cambio en la temperatura son los radios de dosado (líneas discontinuas de color blanco). Estos radios alcanzan una distancia axial mucho menor en el caso de 800 K. Si se analiza el caso de radio de dosado rico (2.0), se puede ver cómo para el caso nominal llega hasta el final del chorro (75 mm), mientras que, para el caso de baja temperatura, este mismo radio de dosado tan sólo alcanza una distancia axial de 40 mm.

Se puede concluir que, para valores bajos de *SR* en los que no existe un elevado grado de difusividad, la temperatura en el aire de la cámara es un factor determinante, siendo el  $\tau_{soc}$  el parámetro más acusado. Pues, como se ha comentado, cuando el caso nominal ya está casi totalmente desarrollado es cuando el caso de baja temperatura empieza a quemar.

A continuación, se va a proceder a realizar el mismo tipo de gráfico comparativo en columnas para los casos nominal y de baja temperatura para una *SR* de 300 [1/s].



**Figura 4.10:** Mapas temporales de temperaturas y especies para los casos de alta y baja temperatura del aire de la cámara con  $SR = 300 [1/s]$

Análogamente a lo que se acaba de comentar en el caso anterior, para  $SR 300 [1/s]$  se puede ver en la Fig. 4.10 cómo, para la baja temperatura, el retraso en el encendido del chorro es significativo, alrededor de 800 microsegundos. Del mismo modo se puede apreciar cómo la penetración se reduce al bajar la temperatura en la cámara, igual que sucedía para  $SR 10 [1/s]$ .

Así pues, también se producirá un pico de energía liberada más grande en el caso de baja temperatura, como sucedía con el mecanismo químico “Nara” y con temperatura baja para  $SR\ 10\ [1/s]$ ,

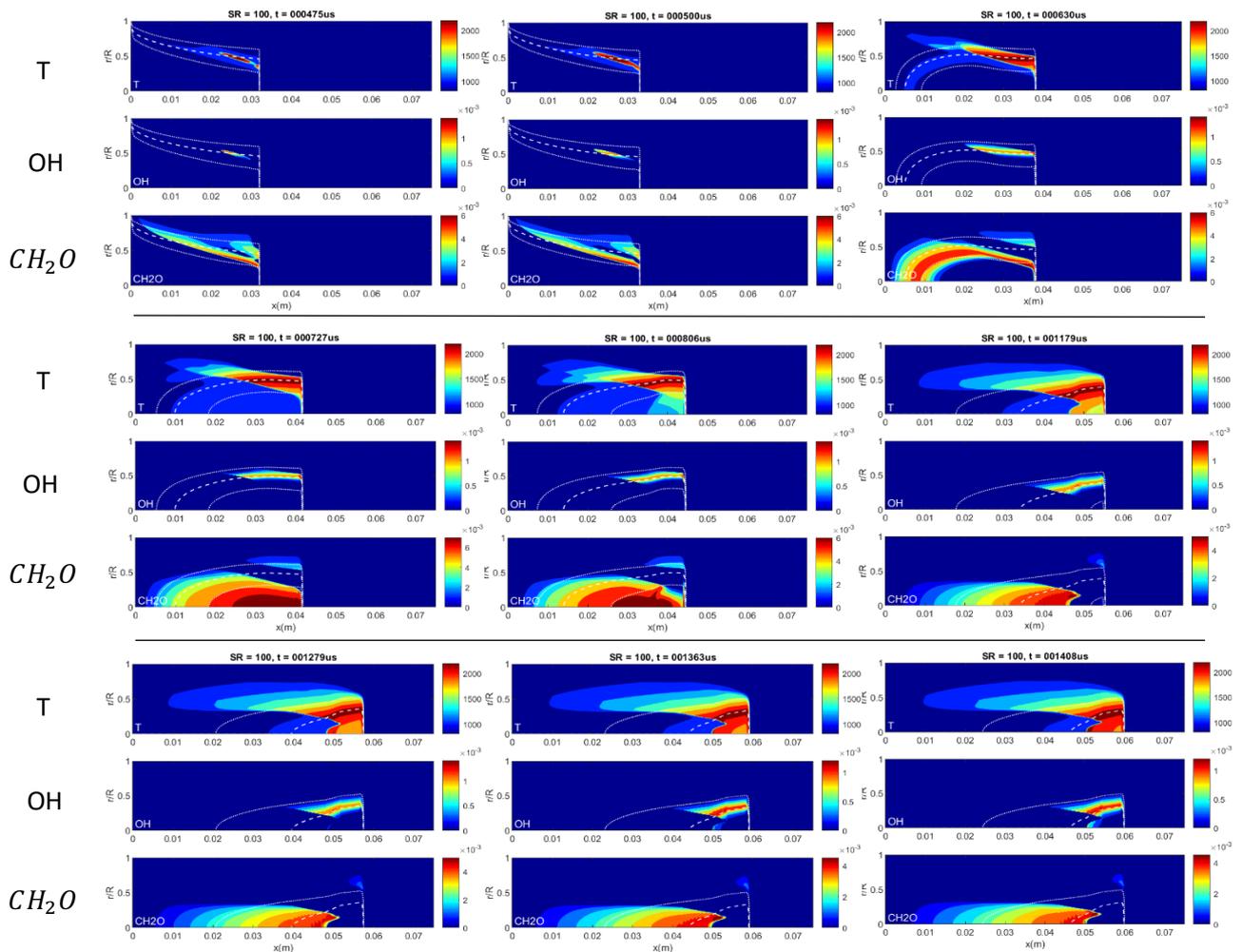
Además, conviene destacar que, para una temperatura menor en la cámara, el chorro enciende en dosados estequiométricos y pobres, pero no en dosados ricos, como sucede en el caso nominal. También se puede ver que el encendido en el caso nominal es más irregular, enciende en dos zonas distintas que acaban uniéndose. Por el contrario, con la temperatura del aire de 800 K el encendido sólo se concentra en una zona y se va propagando de forma más estable.

Se puede concluir que reducir la temperatura del aire de la cámara en tan sólo 100 K tiene efectos significativos en la penetración, en el tiempo de encendido y en la forma de desarrollarse el chorro. Este efecto se intensifica para valores bajos de  $SR$  donde el aumento en el  $\tau_{soc}$  es mucho mayor, por lo que una baja temperatura unida a una menor difusividad acaba produciendo un retraso en la combustión muy significativo.

## 4.7. Estudio sobre el desarrollo de inyecciones partidas

En este apartado se van a analizar dos casos de inyecciones pulsadas. El primer caso se ha usado como calibración del modelo, y para comprobar que el cálculo que hacía era razonable. El segundo caso se ha usado para constatar que la simulación de DICOM ante una inyección partida (500 microsegundos de inyección, 500 microsegundos sin inyectar y 500 microsegundos de inyección) es fiable y lo hace de forma adecuada. A fin de poder verificar la fiabilidad del programa ante un caso como éste, se han comparado los resultados con unos ensayos de los laboratorios *Sandia*. Estos ensayos se realizan debido a que tienen una mayor similitud con lo que sucede dentro de la cámara de combustión de un motor, se podría decir, que es un ensayo más realista.

En la Fig. 4.11 se muestra el primer caso que se ha mencionado, en el cual se inyecta solamente durante los primeros 500 microsegundos y después se deja de inyectar. Como se ha comentado, este caso sirvió de calibración del modelo para comprobar que DICOM era consistente ante cortes de inyección en los primeros instantes de la simulación y para la posterior simulación de una inyección partida.

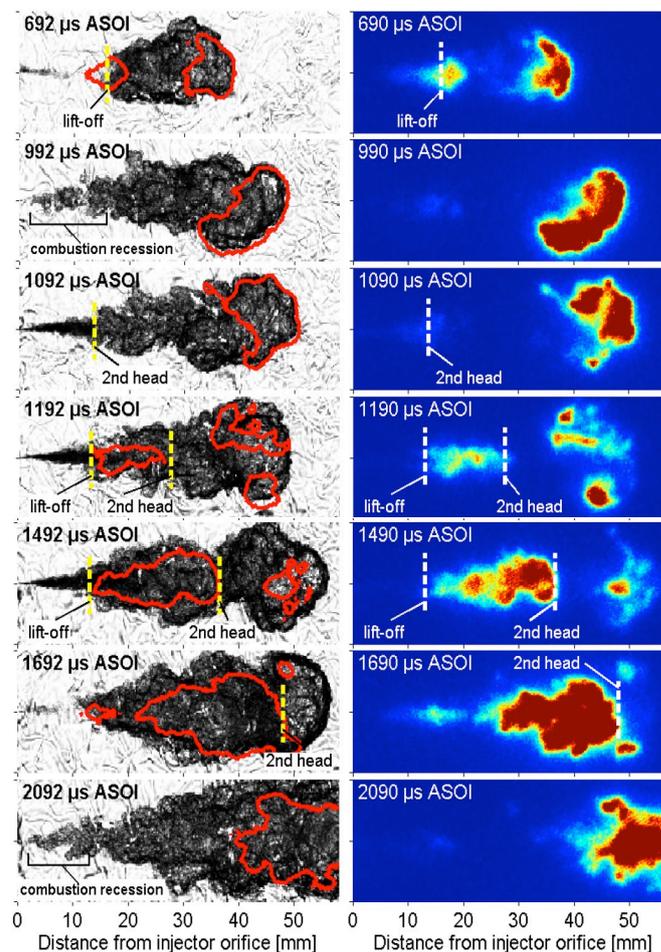


**Figura 4.11:** Mapa de temperaturas, formaldehído ( $CH_2O$ ) y del radical  $OH$  en una inyección corta de 500 microsegundos

Si se analizan los mapas de este ensayo, que incluye la temperatura y la fracción molar de radical hidroxilo ( $OH$ ) y formaldehído ( $CH_2O$ ), se puede ver cómo, al dejar de inyectar a los 500 microsegundos, las líneas de radios de dosado comienzan a caer desde su valor inicial, que para el primer instante de tiempo era 1. Esto es la causa directa del corte en la inyección, pues el combustible que se ha inyectado comienza a mezclarse con el aire que lo engloba provocando la reducción de la fracción de mezcla y, como ya no se vuelve a inyectar, la fracción de combustible empieza a disminuir.

También conviene destacar que, al igual que en el caso de  $SR\ 100\ [1/s]$ , el combustible comienza a quemarse en dosados estequiométricos. Esto es visible debido a que entorno a este dosado es donde se alcanzan las temperaturas más altas por primera vez, y donde hay mayor concentración de  $OH$ , especie relacionada con las reacciones de más alta temperatura. Después esta llama se propaga siendo más intensa en dosados ricos que en pobres, pues como se puede ver en los últimos instantes, la temperatura en dosados ricos alcanza los 2000 K, mientras que en dosados pobres se queda entorno a los 1000 K.

Por último, si se fija en cómo se desarrolla el formaldehído ( $CH_2O$ ), especie relacionada con las reacciones de baja temperatura, se puede ver cómo, cuándo se deja de inyectar, el chorro avanza y con él los radios de dosado. Pero una parte del chorro, formado principalmente por el formaldehído, retrocede en dirección a la tobera. Este hecho es muy interesante ya que, cuando se comparó con los estudios de *Sandia*, en sus resultados se veía este retroceso del chorro al cortar la inyección.



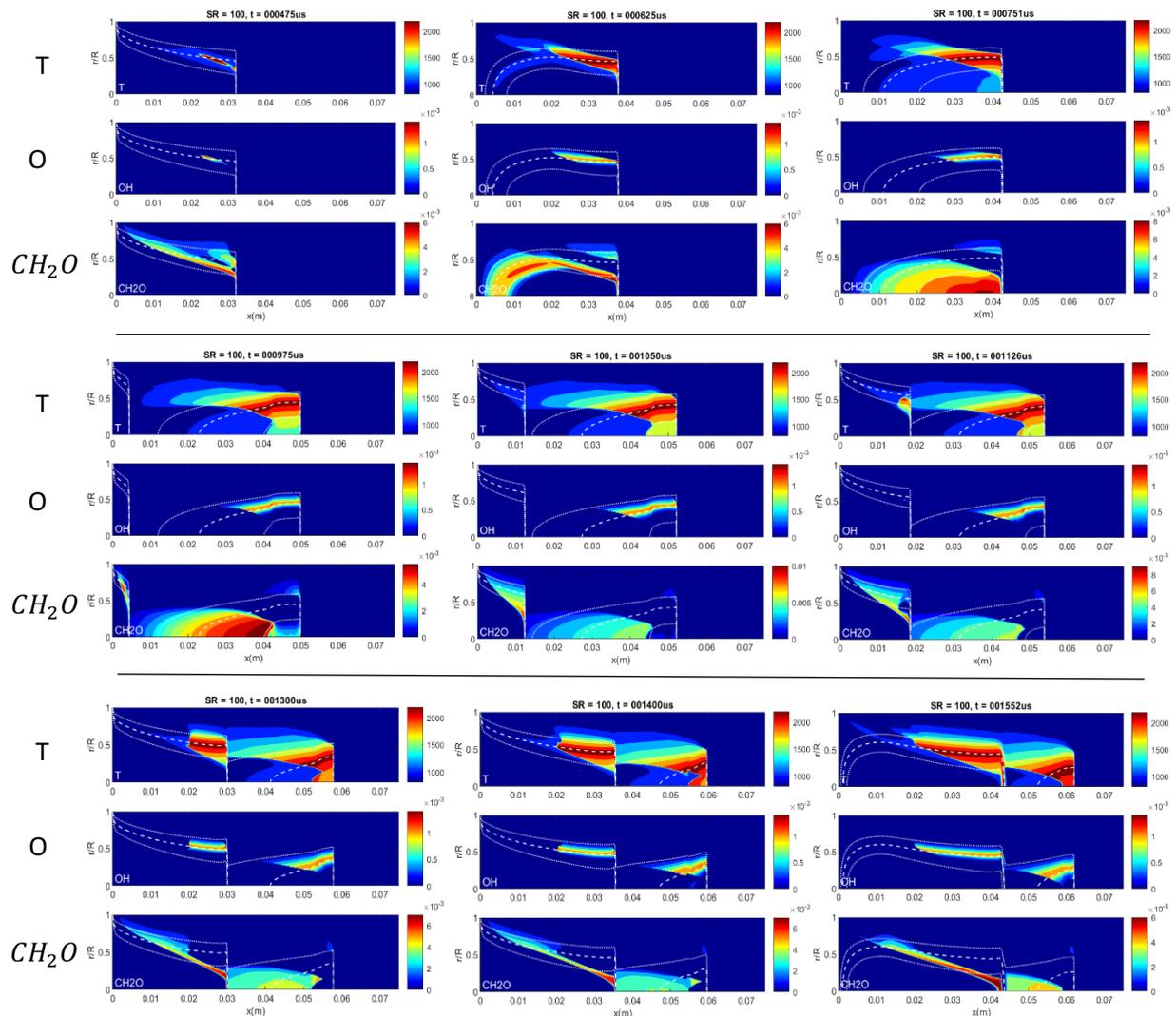
**Figura 4.12:** Representación de la penetración y del formaldehído en el experimento de *Sandia* [4.6]

En la Fig. 4.12 se puede ver el ensayo que realizó *Sandia* de la inyección partida. Los fotogramas corresponden a los instantes posteriores a la primera inyección. Entre los fotogramas presentes se incluyen el cese de la inyección durante 500 microsegundos (los tres primeros fotogramas) y la segunda inyección a partir de los 1000 microsegundos (los últimos cuatro fotogramas).

Las imágenes en blanco y negro corresponden a la penetración del chorro, pudiéndose observar las zonas donde el combustible enciende, mientras que las imágenes con el fondo azul representan la concentración de formaldehído en el chorro.

Si se analizan los fotogramas correspondientes al cese de la inyección, se puede ver cómo el formaldehído retrocede cuando se deja de inyectar combustible. Existen ciertas similitudes con la simulación corta con DICOM. Entre estas similitudes hay que destacar la anteriormente mencionada, el modelo de DICOM predice el retroceso del chorro, visible cuando se estudia el desarrollo del formaldehído en el chorro en la Fig. 4.11.

A continuación, se va a comparar el ensayo experimental de la inyección partida con el cálculo que se realizó con el modelo DICOM. Para ello, en la Fig. 4.13 se van a mostrar los resultados del cálculo en forma de mapas de temperatura, formaldehído y  $OH$ , como se vio para el caso de la inyección corta.



**Figura 4.13:** Mapa de temperaturas, formaldehído y del radical  $OH$  en una inyección partida, con 500 microsegundos de inyección, 500 microsegundos de parada y unos últimos 500 microsegundos de reinyección.

En la Fig. 4.13 se puede apreciar cómo, al dejar de inyectar, las líneas correspondientes a los radios de dosado tienden a caer por la falta de combustible inyectado, tal y como se podía ver en la Fig. 4.11. Además, estas líneas de dosado vuelven a aparecer cuando tiene lugar la

segunda inyección, la cual sucede a partir de unos 1000 microsegundos. Una vez esta segunda masa de combustible avanza, tarda muy poco tiempo en quemar.

Esta segunda llama se propaga de forma muy rápida, alcanzando a la llama de la primera inyección antes de que ésta se extinga.

Si el análisis se centra en la especie  $OH$ , se puede ver cómo, tanto en la primera como en la segunda inyección, la distribución de dicha especie es muy similar, pues se concentra en ambas inyecciones entorno a dosados estequiométricos.





# Capítulo 5

## 5. Conclusiones globales

### 5.1. Introducción

En el presente capítulo se van a exponer las conclusiones más relevantes que se han extraído a lo largo de este proyecto. Estas conclusiones están relacionadas tanto con el desarrollo teórico del proyecto, como con la evolución e implementación del programa, y con los resultados obtenidos una vez terminado y depurado el modelo.

Primero de todo, hay que recordar que el objetivo principal de este trabajo era actualizar el programa de modelado DICOM, con el fin de introducir una nueva funcionalidad en el mismo. Dicha funcionalidad consistía en que el programa fuera capaz de predecir la reactividad del chorro y así poder conocer, a priori y de manera global, la forma de comportarse de un determinado combustible dentro de un MCIA Diesel de inyección directa.

### 5.2. Conclusiones

Como se introdujo en el primer capítulo, los fabricantes de coches se ven obligados a renovar y mejorar sus motores Diesel debido a la cada vez más estricta normativa que les atañe. Con este programa lo que se puede conseguir es modelar cualquier combustible que en un principio no tendría por qué funcionar en un motor Diesel. De esta forma, se podrá averiguar qué tipo de comportamiento tienen diferentes combustibles en un motor Diesel, y poder buscar alternativas que permitan alcanzar un menor consumo y una menor emisión de contaminantes.

A continuación, se va a hablar del proceso de implementación, donde se puede decir que han surgido contratiempos y dificultades que no han facilitado el objetivo de conseguir un programa predictivo. Se va a analizar la metodología usada para poder conseguir la finalidad de tener un modelo DICOM capaz de ser predictivo:

- El primer paso fue desarrollar las funciones que posteriormente se introducirían en el modelo, con el fin de poder trabajar con los ficheros de la química reactiva tabulada dentro del programa.

- Tras haber desarrollado las funciones que eran necesarias, se comenzó a preparar el código del caso transitorio. Esta parte era mucho más compleja y costosa que en el caso estacionario, pero era la prioridad del proyecto, ya que, una vez completado el desarrollo del código en el apartado transitorio, en el estacionario sería mucho más simple y rápido. Como cabía esperar, esta modificación del código ocupó la mayor parte de la duración del proyecto, por el contrario, el cambio en la parte estacionar se realizó y calibró en cuestión de un par de semanas.

Para finalizar este capítulo, se van a exponer las conclusiones a las que se ha llegado tras analizar los resultados de todas las simulaciones realizadas con DICOM. A lo largo de todo el proyecto se ha querido comprobar la validez del modelo para muchos tipos de ensayos, con el objetivo de obtener un programa con un amplio espectro de posibilidades de simulación, de manera que no sólo fuera predictivo en casos nominales con condiciones típicas de ensayo.

Con todo esto, se puede decir que DICOM es capaz de predecir el comportamiento del chorro Diesel para las siguientes condiciones de funcionamiento:

- Diferentes mecanismos químicos: DICOM ha permitido el cálculo con precisión para dos tipos de mecanismos químicos, el mecanismo químico “Yao” y el mecanismo “Nara”. Los resultados mostraron que el modelo es fiel a la realidad, pues el “Yao” es un mecanismo químico más rápido, y los resultados reproducen estos menores  $\tau_{SOC}$  para el “Yao”, obteniéndose también un menor valor de  $LoL$ .
- Batería de *Strain Rates*: Se ha calculado una batería de seis casos en los que el factor condicionante ha sido el  $SR$  que, como se ha explicado en el capítulo 4, tiene influencia en la difusión presente entre las distintas variables asociadas al chorro. Se puede concluir que, cuando se baja el  $SR$ , el  $\tau_{SOC}$  es menor. Tal y como se ha dicho antes, cuando se trata de los tres valores más bajos de  $SR$  los cambios no son significativos, aunque sí se puede apreciar el aumento del  $\tau_{SOC}$  con el incremento del  $SR$ . Sin embargo, en lo referente a los  $SR$  más elevados (300, 500, 800), aquí sí que es mucho más evidente la influencia de este parámetro, ya que los  $\tau_{SOC}$  aumentan considerablemente, y la distribución que toma el desarrollo de las temperaturas, como se puede ver en la Fig. 4.3, es mucho más irregular que para los casos de bajo  $SR$ .
- Temperaturas distintas del aire de la cámara: Se han simulado casos para dos temperaturas diferentes, 800 K y 900 K. Se puede decir que DICOM predice el retraso que existe en el inicio combustión en el caso de baja temperatura. Esta afirmación es completamente cierta pues al estar el aire a menor temperatura, las condiciones óptimas para la ignición del combustible acaban por darse más tarde que si se tratara del caso nominal de 900 K. Otra cosa que ha resultado interesante es la influencia conjunta de la temperatura y el  $SR$ . Se ha

podido observar que cuando existe una baja temperatura y poca difusión, el desarrollo del chorro se retrasa considerablemente. Sin embargo, al tener una baja temperatura y una mayor difusión, este retraso en el desarrollo del chorro no es tan importante.

Por último, si el análisis se centra en la comparación de los resultados obtenidos por DICOM con los resultados experimentales, se puede concluir que:

- En el caso con condiciones nominales, DICOM es capaz de predecir tanto la penetración, el  $LoL$ , como el  $\tau_{soc}$  con gran precisión. El hecho de tener trayectorias independientes, entre las que no se difunde información penaliza en algunos aspectos, sobre todo cuando nos encontramos en valores altos de  $SR$ , pues, como se ha podido ver en el capítulo anterior, se generaban unos huecos donde el chorro era incapaz de quemar para  $SR$  (300, 500 y 800). Ello indicaba que el valor de  $SR$  recomendable sería menor de 300 [1/s].
- En el caso de baja temperatura, las predicciones de DICOM no son tan buenas como en el caso nominal. El  $\tau_{soc}$  sufre un gran retraso con respecto al caso experimental, pues, si se comparan los 993,5 microsegundos de tiempo de retraso del caso experimental con los 1800 microsegundos que predice DICOM, la diferencia es mucho mayor que en el caso nominal.



# Bibliografía

## Capítulo 1

[1.1] Broatch A. *Metodología experimental*. Apuntes, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 2013.

[1.2] García-Oliver J. M., Colomina R. *Modelado 1D de chorros con diferentes combustibles en un motor Diesel*, junio 2018.

[1.3] García-Oliver J.M., Saiz M. *Aplicación de un modelo unidimensional al estudio de la llama diesel*, octubre 2011.

[1.4] García-Oliver J.M., Sanchis A. *Desarrollo y aplicación de un modelo unidimensional para la predicción de chorros Diesel de inyección directa en condiciones inertes y reactivas*, julio de 2006.

[1.5] Pastor J. V. *Fundamentos técnicas Ópticas*. Apuntes, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 2013.

[1.6] Payri R., Viera J. P., Gopalakrishnan V., Szymkowicz P. G. *The effect of nozzle geometry over internal flow and spray formation for three different fuels*. Fuel 2016; 183:20-33.

## Capítulo 2

[2.1] Aggarwal S. K., *A Review of Spray Ignition Phenomena: Present Status and Future Research*. Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 24, pp. 565-600, 1998.

[2.2] Bardi, M., Payri, R., Malbec, L.M., Bruneaux, G., Pickett, L.M., Manin, J., Bazyn, T. and Genzale, C.L. *Engine Combustion Network: Comparison of Spray Development, Vaporization and Combustion in Different Combustion Vessels*. Atomization and Sprays, Vol. 22, pp. 807-842, 2012.

[2.3] 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.

- [2.4] 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.
- [2.5] 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.
- [2.6] Espey Ch. y Dec J. E. *The effect of TDC temperature and density on the liquid-phase fuel penetration in DI Diesel engine*. Transactions of the SAE, Vol 104 nº4, pp. 1400-1414, 1995.
- [2.7] Glassman I. *Combustion*. Academic Press, Inc., second edition, 1987.
- [2.8] Heywood J. B. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering 1988.
- [2.9] Lefèbvre A. *Atomization and Sprays*. CRC, 1988.
- [2.10] Livengood J. C. y Wu P. C. *Correlation of Autoignition Phenomenom in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines*. In Proceedings of the Fifth International Symposium on Combustion, pág. 347, 1955.
- [2.11] Naber J. D., Siebers D.L. *Effects of gas density and vaporization on penetration and dispersion of Diesel sprays*. SAE Paper 960034, 1996.
- [2.12] Plee S. L. y Ahmad T. *Relative Roles of Premixed and Difussion Burning in Diesel Combustion*. SAE Paper 831733, 1983.
- [2.13] 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.
- [2.14] Smallwood G. J. y Gülder Ö L. *Views on the Structure of Transient Diesel Sprays*. Atomization and Sprays, Vol. 10, pp. 355-386, 2000.
- [2.15] Z. Pemberthy and L. Daniel, *Caracterización de los procesos de Inyección-Combustión Diesel mediante visualización y procesado digital de imágenes*, Riunet, mayo 2010.

## Capítulo 3

- [3.1] 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.
- [3.2] García-Oliver J. M., Colomina R. *Modelado 1D de chorros con diferentes combustibles en un motor Diesel, junio 2018*.
- [3.3] García-Oliver J. M., Vera-Tudela W. *Dicom V6.3 user manual. 2015*.
- [3.4] Krithika N., Perrine P., Heinz P. *A chemical mechanism for low to high temperature oxidation of n-dodecane as a component of transportation fuel surrogates*. *Combustion and Flame* 161 (2014), 866–884.
- [3.5] 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.
- [3.6] Pastor J., Payri R., García-Oliver J. M., Nerva J., *Schlieren Measurements of the ECN-Spray at Penetration under Inert and Reacting Conditions*. SAE Technical Paper 2012-01-0456, 2012.
- [3.7] Yuanjiang Pei, Tong Yao, Bei-Jing Zhong, Sibendu Somd, Tianfeng Lu, Kai Hong Luo. *A compact skeletal mechanism for n-dodecane with optimized semi-global low-temperature chemistry for diesel engine simulations*. *Fuel* 191 (2017) 339–349.

## Capítulo 4

- [4.1] Delacourt E., Desmet B., Besson B., *Characterisation of very high-pressure diesel sprays using digital imaging techniques*. *Fuel* 2005, 84 (7-8): 859-867.
- [4.2] Desantes J. M., García-Oliver J. M., Xuan T., Vera-Tudela W. *A study on tip penetration velocity and radial expansion of reacting Diesel sprays with different fuels*. *Fuel* 207 (2017) 323-335.
- [4.3] *“Engine Combustion Network”* [en línea]. California, 16 junio 2011.  
<http://www.sandia.gov/ecn/> [Consulta: 14 septiembre 2011].
- [4.4] Payri R., Salvador F. J., Gimeno J., Viera J. P. *Experimental analysis on the influence of nozzle geometry over the dispersion of liquid n-dodecane sprays*. *Front Mech Eng* 2015; 1;1-10.

[4.5] Payri R., Viera J. P., Gopalakrishnan V., Szymkowitz P. G. *The effect of nozzle geometry over internal flow and spray formation for three different fuels*. Fuel 2016; 183:20-33.

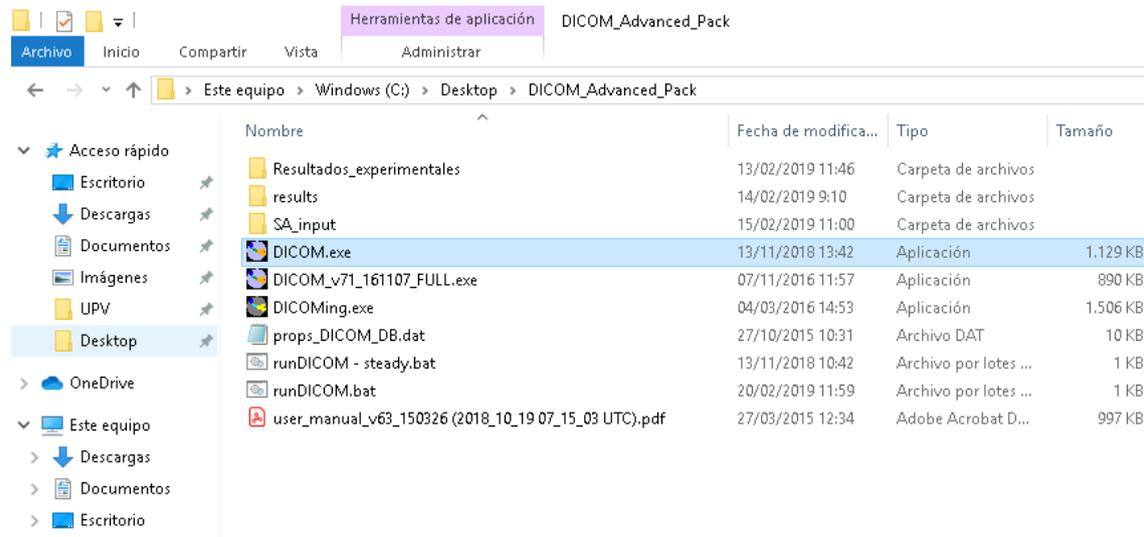
[4.6] Scott Skeen, Julien M., Lyle M. P., *Visualization of Ignition Processes in High-Pressure Sprays with Multiple Injections of n-Dodecane*. Sandia National Laboratories, 2015-01-0799.

# ANEXO I: MANUAL DEL USUARIO

En el presente anexo se pretende explicar el funcionamiento del programa DICOM a nivel usuario. Se van a explicar los pasos debe realizar el usuario del programa para que sea capaz de utilizar el programa sin ningún tipo problema.

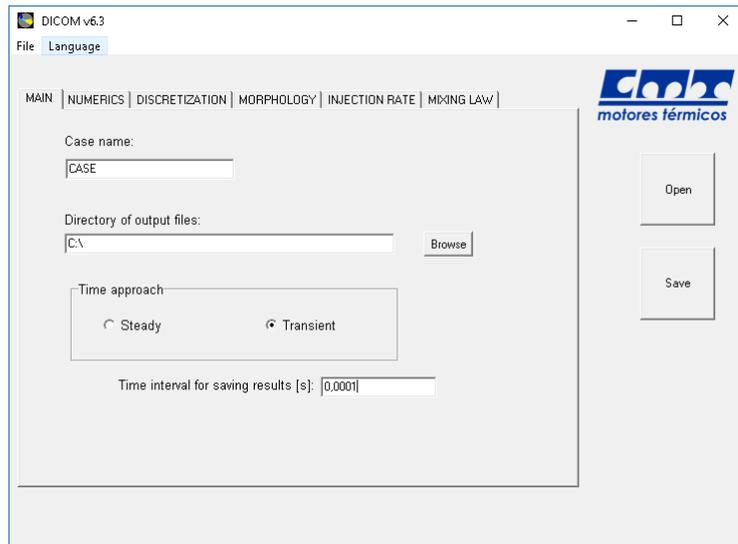
El programa DICOM necesita una serie de ficheros para poder usarse. Dentro de estos ficheros están el ejecutable “DICOM.exe”, el fichero denominado “runDICOM.bat” y el fichero de propiedades de los combustibles “props\_DICOM\_DB.dat”.

Los ficheros que se acaban de mencionar han de estar todos ubicados en la misma carpeta.



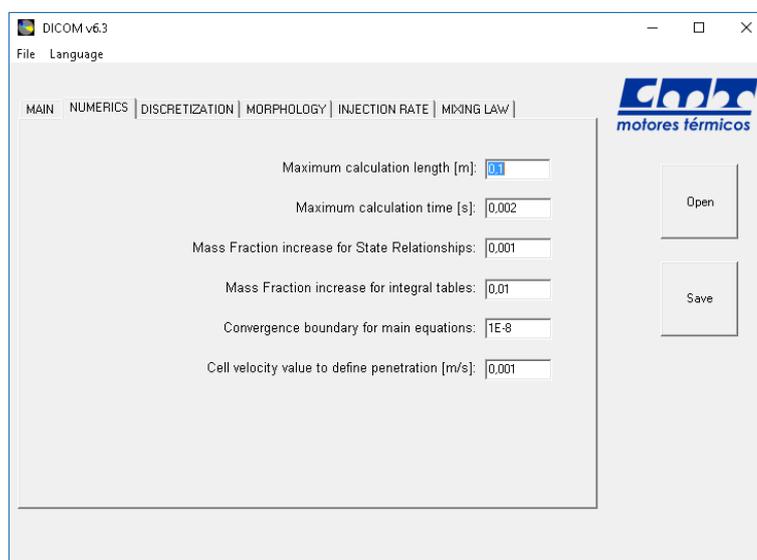
*Figura 6.1: Lista de ficheros que se requieren para poder usar el programa*

En primer lugar, se va a desarrollar cómo se ha de usar la interfaz del usuario, también llamada “DICOMing.exe”, para un caso transitorio. En este ejecutable se introducen los datos de entrada para la simulación que se quiera hacer y la carpeta de salida donde DICOM debe guardar los resultados. Seguidamente se detallan cada uno de los pasos tras hacer doble “click” en este fichero:



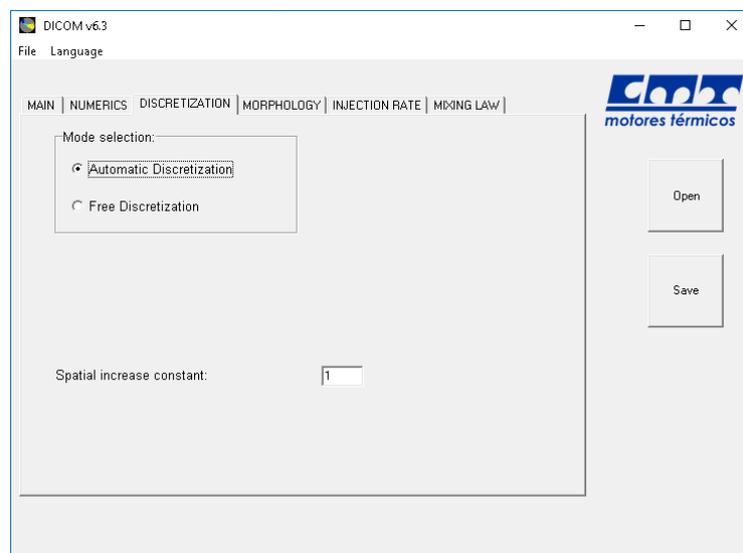
**Figura 6.2:** Primera página de campos a rellenar dentro del ejecutable “DICOMing.exe”

- En esta ventana se deberá introducir:
  - El nombre con el que se quiere guardar el caso que se va a simular (*case name*).
  - La carpeta donde se guardarán los resultados del cálculo, incluyendo la ruta completa (*Directory of output files*).
  - Además del tipo de ensayo que se pretenda realizar (estacionario - “steady” o transitorio - “transient”).
  - El incremento temporal que se desee para guardar los datos de salida (este último campo sólo se rellenará en el caso de haber elegido un modelo transitorio).



**Figura 6.3:** Segunda ventana de campos a rellenar de entradas que definen el chorro

- Los campos que se van a rellenar ahora y en las siguientes ventanas son los relativos a propiedades del chorro.
  - El primero que se introduce es la longitud máxima de cálculo que se desea.
  - El tiempo máximo de cálculo que se quiere simular.
  - Después, se introduce el incremento de fracción másica para el cálculo de las relaciones de estado.
  - El incremento de la fracción másica para el cálculo de las integrales (estos dos últimos parámetros se recomienda dejarlos con los valores preestablecidos).
  - El valor de convergencia que se impone a la hora de hacer las diferentes iteraciones para el cálculo de algunas ecuaciones.
  - Por último, la velocidad mínima que se va a considerar a la hora de calcular la penetración (cuando el valor sea inferior al introducido el chorro habrá terminado de penetrar).



**Figura 6.4:** Tercera ventana de datos a rellenar relativa al tipo de discretización

- En esta ventana los campos que se deben rellenar son los relativos al tipo de discretización que se quiere imponer, existiendo dos posibilidades:
  - La primera posibilidad es la discretización automática. En esta discretización DICOM calcula automáticamente el incremento que se hará de un paso al siguiente en cada iteración.

- La otra opción es discretización libre. Aquí será el usuario quien imponga la discretización que se llevará a cabo durante el cálculo del ensayo. Si se selecciona este caso, se pedirá que se introduzcan dos campos más, ver Fig. 6.5:

- “Courant number”: donde se elige el incremento temporal que se desea.
- “Spatial increase”: donde se selecciona el incremento espacial deseado.

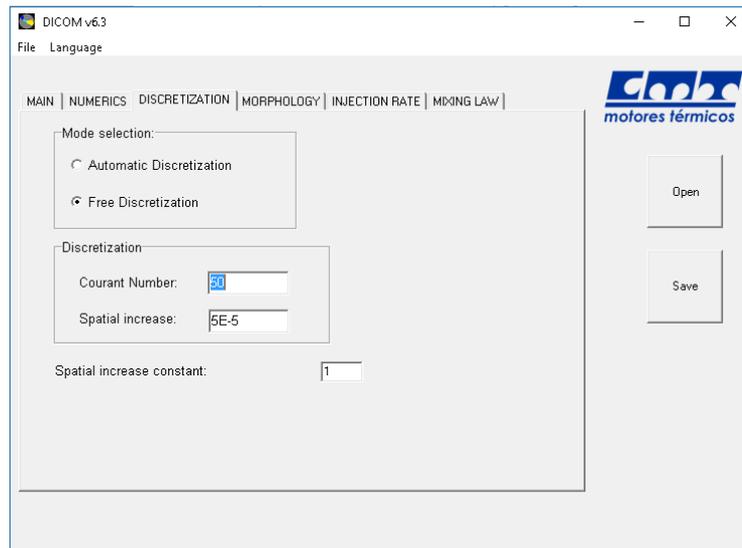


Figura 6.5: Ventana de discretización libre

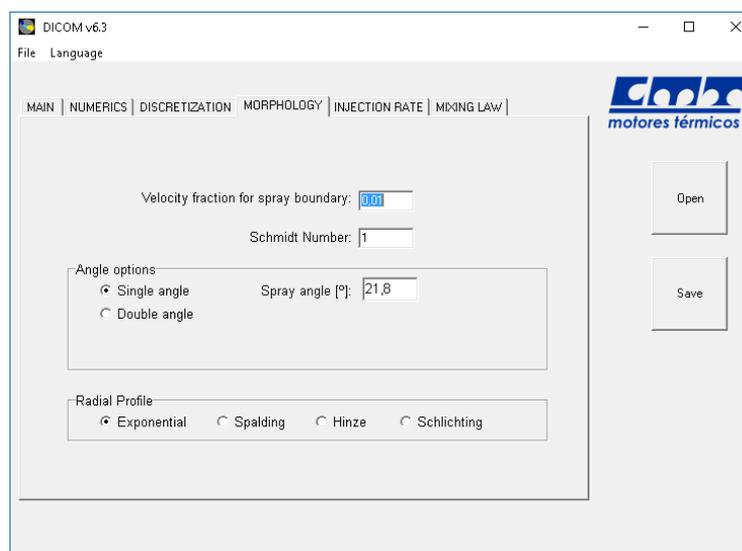
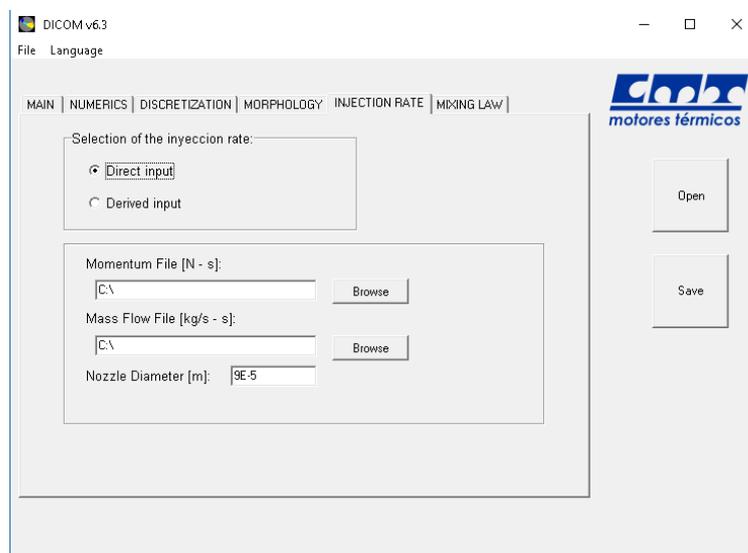


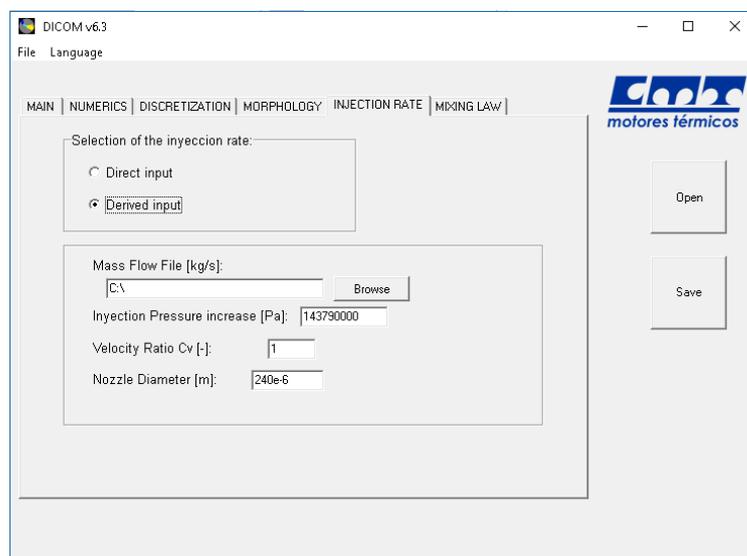
Figura 6.6: Cuarta ventana de datos de entrada relativos a la morfología del chorro

- Los datos de entrada que se deben introducir en esta ventana definen la morfología del chorro, y son los siguientes:
  - Límite de velocidad: éste define cuándo acaba el chorro radialmente. El valor introducido es una constante sin unidades, la cual se multiplicará por el valor de la velocidad en el eje, de tal forma que el resultado de esta multiplicación será la velocidad que exista en el límite radial del chorro.
  - El número de Schmidt: ratio de difusividad que existe en el momento y en la cantidad de masa de combustible.
  - Las opciones del ángulo: se puede elegir entre una apertura simple del chorro y una apertura doble. En el primer caso, sólo introduciremos el valor del ángulo de apertura del chorro, y en el segundo se deberán de introducir los dos ángulos de apertura que se desean.
  - El tipo de perfil radial: esta selección permite elegir entre cuatro tipos de funciones que definirán la distribución radial de las propiedades del chorro. Normalmente se utiliza el perfil exponencial.

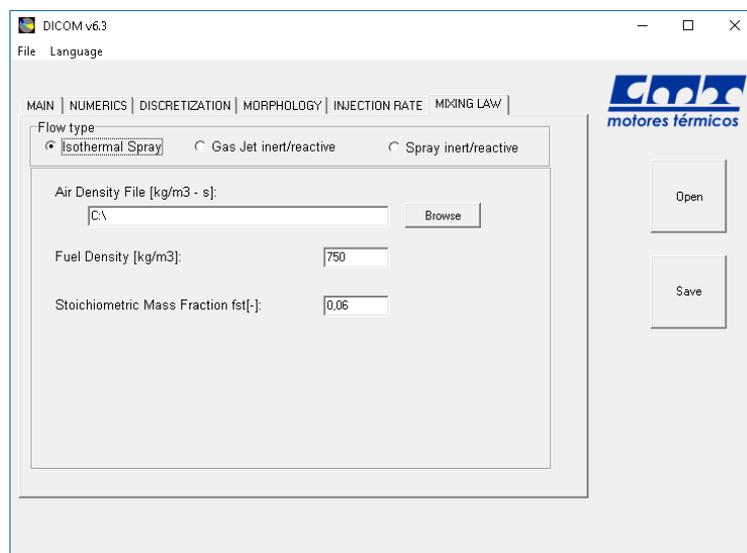


**Figura 6.7:** Quinta ventana de datos de entrada relativos a la tasa de inyección

- En la entrada relativa a la tasa de inyección existen dos posibilidades que el usuario puede elegir:
  - Entrada directa: si se elige esta opción, el usuario deberá proporcionarle la ruta de los ficheros de tasa de cantidad momento y masa que desee utilizar para el cálculo, ver Fig. 6.7.
  - Entrada derivada: de forma contraria, si se selecciona esta alternativa, el usuario sólo tendrá que proporcionar la tasa de cantidad de masa, la presión de inyección, la ratio de velocidad y el diámetro de la tobera. Con estos datos DICOM calcula automáticamente la tasa de momento, ver Fig. 6.8.



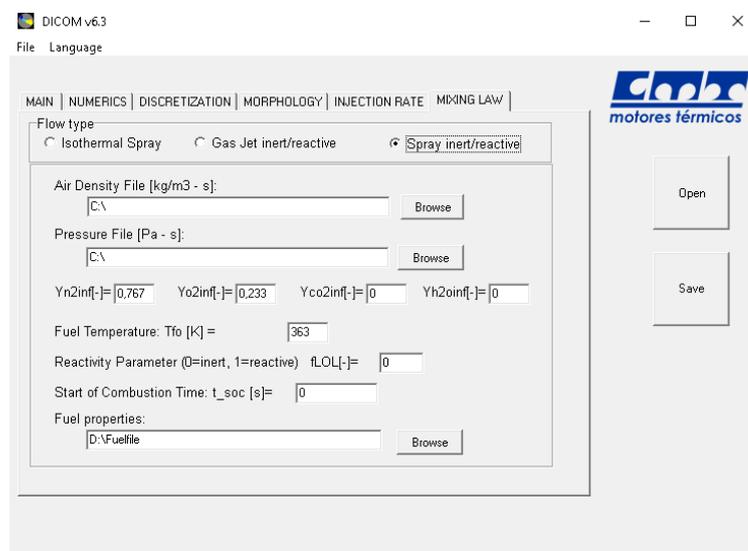
**Figura 6.8:** Datos de entrada para una tasa de inyección derivada



**Figura 6.9:** Sexta ventana de datos de entrada del modelo relativos a la ley de mezcla

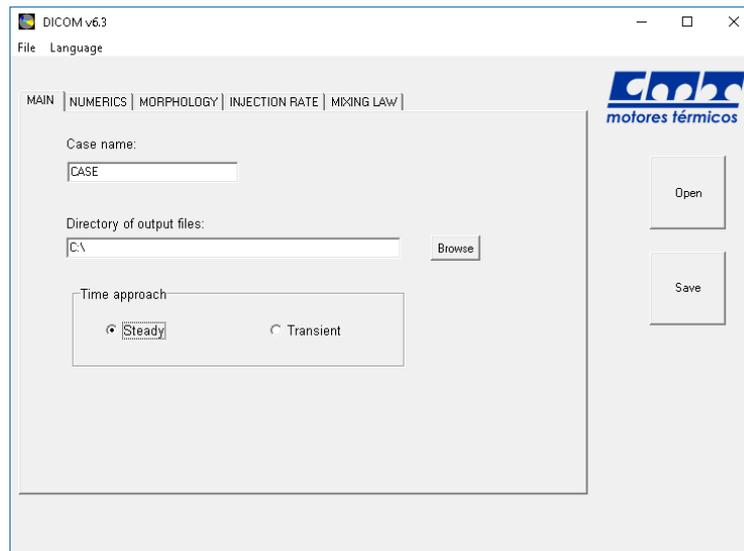
- En este último apartado se dan a elegir tres opciones de ley de mezcla. La primera de ellas es *spray* isoterma, como se muestra en la Fig. 6.9. Las otras dos opciones son chorro gaseoso inerte o reactivo, o *spray* inerte o reactivo. En estas dos últimas posibilidades se rellenan los mismos campos.
  - *Spray* isoterma: si el usuario quiere simular un *spray* isoterma, deberá introducir la ruta donde se encuentra el fichero de la densidad del aire, la densidad del combustible y la fracción de mezcla estequiométrica.
  - Chorro gaseoso / *spray*, inerte / reactivo: tal y como se puede ver en la Fig. 6.10, los campos a rellenar, si se selecciona esta opción, son el fichero de densidad del aire; el fichero de presión de inyección; el valor de la concentración en el aire de la cámara de nitrógeno, oxígeno, dióxido de carbono y agua; la temperatura del combustible; la fracción de mezcla a partir de la cual hay reactividad; el tiempo de retraso en el encendido; y el fichero donde se encuentra qué combustible se quiere utilizar.

Todos los parámetros que se introducen como ficheros necesitan la ruta completa. Además, la fracción de mezcla y el tiempo de retraso no se deben de rellenar si se desea un cálculo reactivo, pues son parámetros que calcula DICOM en la última versión de forma predictiva.



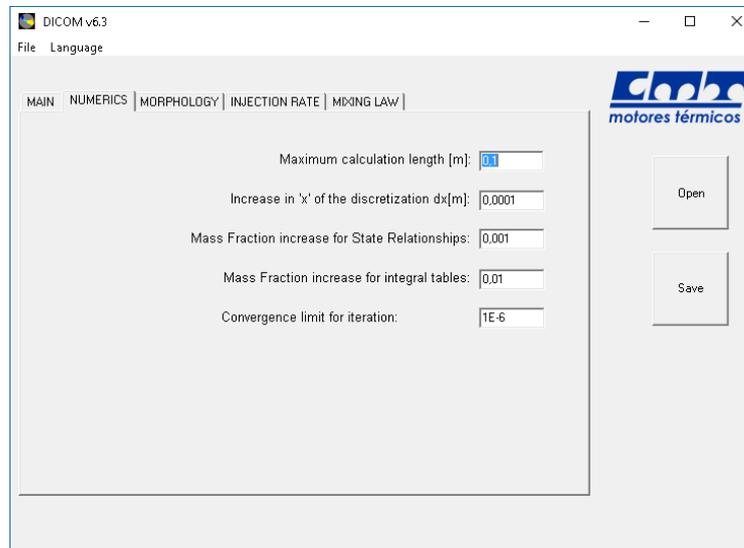
**Figura 6.10:** Ventana de datos para una ley de mezcla de *spray* o chorro gaseoso

Una vez se ha explicado cómo se usa la interfaz del usuario para un caso transitorio, se va a hacer lo mismo, pero con el caso estacionario.



**Figura 6.11:** Ventana de selección del caso estacionario

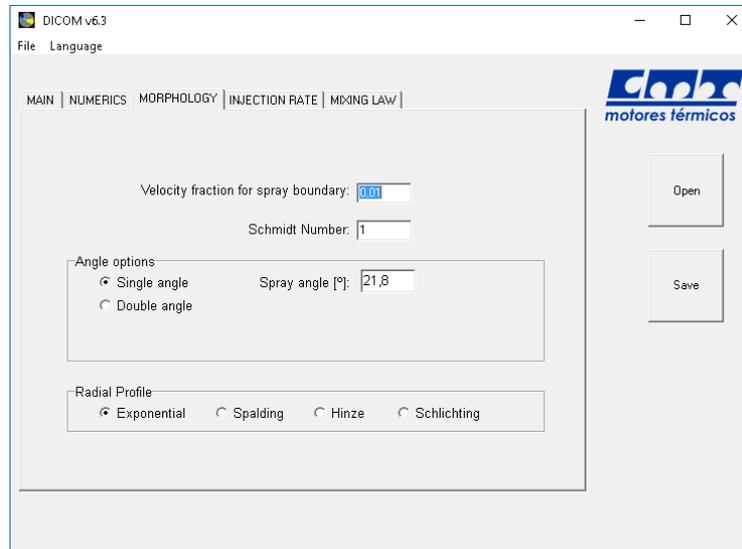
- Esta ventana es exactamente igual que la primera comentada para el caso transitorio. La única diferencia que existe entre ambas es que no es necesario introducir el incremento temporal para guardar los datos, pues bien, al encontrarnos en un caso estacionario, todos los datos son constantes con el tiempo.



**Figura 6.12:** Segunda ventana de datos de entrada para el modelo estacionario

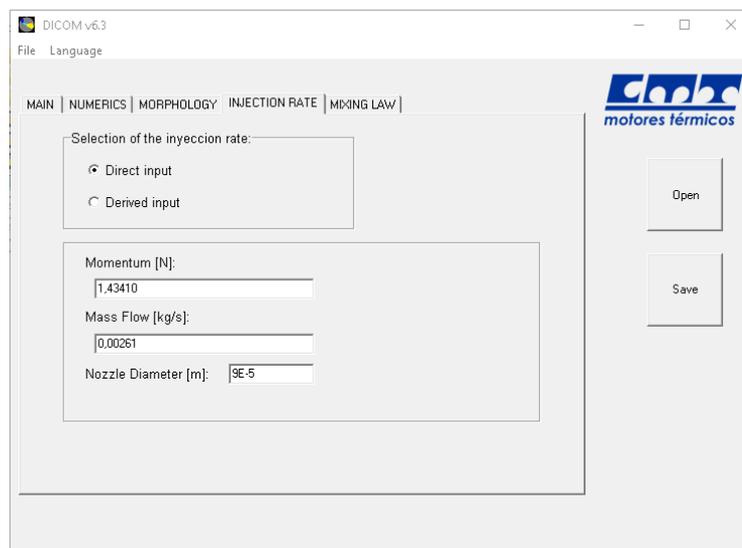
- En la ventana “numerics”, Fig. 6.12, sí que existen diferencias entre estacionario y transitorio. Los parámetros a rellenar en el caso estacionario son:
  - Longitud máxima de cálculo.
  - Incremento que se va a realizar en la discretización espacial “dx”.
  - Incremento en la fracción de masa para el cálculo de las relaciones de estado.

- Incremento en la fracción de masa para el cálculo de las integrales.
- El valor de convergencia que se usará cuando DICOM utilice métodos iterativos para la resolución de ecuaciones.



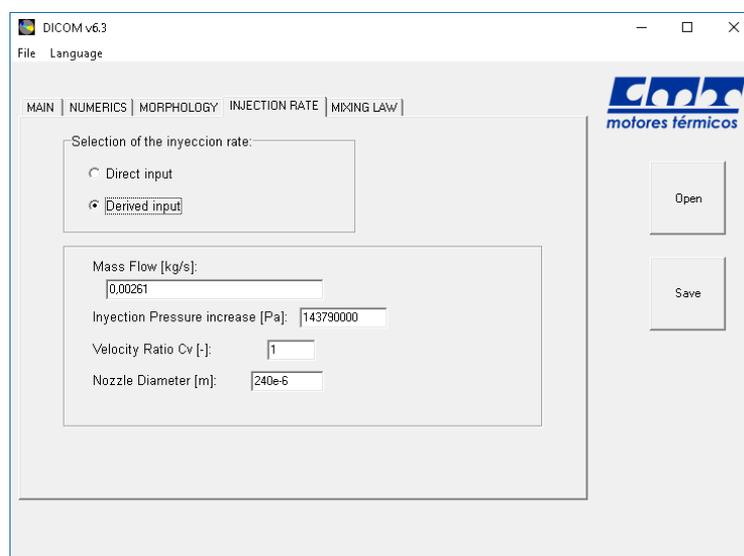
**Figura 6.13:** Ventana de datos relacionados con la morfología del chorro

- Al igual que sucedía en el caso transitorio, Fig. 6.6, para el caso estacionario, en la ventana de morfología del chorro, Fig. 6.13, los campos que se deben introducir son los mismos, aunque se trate del caso estacionario en vez del transitorio

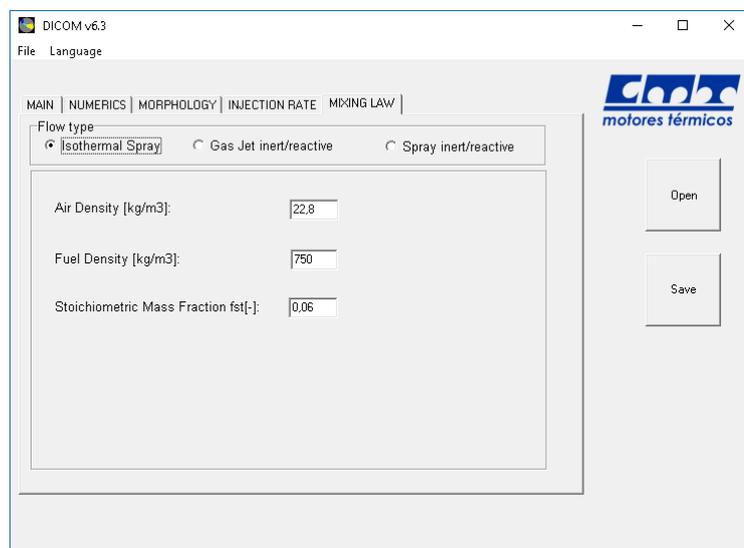


**Figura 6.14:** Ventana de datos relacionados con la tasa de inyección

- Del mismo modo que sucedía en el caso transitorio, en el caso estacionario se puede seleccionar entre una tasa de inyección directa o derivada.
  - Inyección directa: Fig. 6.14, habrá que introducir el momento, la cantidad de masa inyectada y el diámetro de la tobera. Los dos primeros parámetros ya no serán ficheros de datos, sino escalares. Cabe recordar que, al encontrarnos en un caso estacionario, estos dos datos no cambiarán con el tiempo.
  - Inyección derivada: Fig. 6.15, se deberá introducir el flujo de masa, la presión de inyección, la ratio de velocidad y el diámetro de la tobera, pues, al igual que sucedía en el transitorio, el flujo de momento lo calcula automáticamente DICOM.

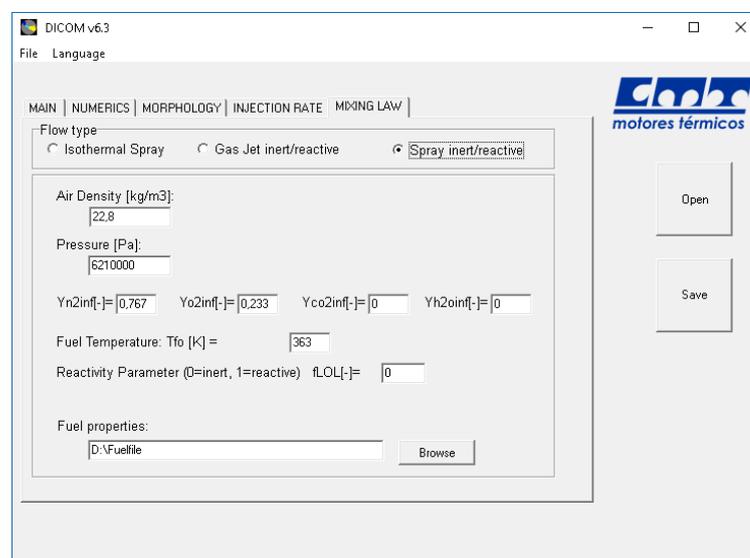


**Figura 6.15:** Datos de entrada para una tasa de inyección con entrada derivada



**Figura 6.16:** Ventana de datos relativos a la ley de mezclas. Opción de spray isoterma

- En el apartado de ley de mezcla las posibilidades son las mismas que para el caso transitorio.
  - *Spray* isoterma: en este apartado se deberá introducir la densidad del aire, la densidad del combustible y la fracción de mezcla estequiométrica. Todos estos parámetros en forma de escalares, tal y como se puede ver en le Fig. 6.16.
  - Chorro gaseoso / *spray*, inerte / reactivo: si se observa la Fig. 6.17, se pueden ver los campos que se han de rellenar. Son exactamente los mismos que en el caso del transitorio, con la ligera diferencia de que, en el apartado densidad del aire, ahora se deberá introducir en forma de escalar. El resto de los datos no cambian del modelo transitorio al estacionario.



**Figura 6.17:** Datos relativos a la ley de mezclas. Caso de *spray* o chorro gaseoso

Todos los ficheros mencionados se obtienen con el paquete DICOM, es decir, con el resto de ejecutables. Una vez se poseen estos ficheros, el usuario los puede modificar a su gusto, y así poder elegir la densidad del aire, la tasa de cantidad momento o de masa, etc., que desee.

Una vez se rellena toda la información necesaria que pide “DICOMing.exe”, éste genera un fichero de texto que habrá que pasarle a DICOM. En este fichero se encuentran recogidos todos los datos que el usuario le ha proporcionado acerca del caso que quiere simular. Si se analiza la Fig. 6.18 se puede ver cómo es el fichero de texto que genera este ejecutable, si se trata de un caso estacionario.

```

1 C12-900-228-15-150r
2 Tipus = 2
3 dir_datos = D:\DICOM
4 deltat_guardar = 0.0001
5
6 NUMERICS
7 xmax = 0.1
8 tfinal = 0.0047
9 deltax = 0.001
10 deltax_tabla = 0.01
11 conv = 1e-06
12 u_conv = 0.001
13
14 DISCRETIZATION
15 discretització = 1
16 -
17 -
18 const_deltax = 1
19
20 MORPHOLOGY
21 lim = 0.01
22 Sc = 1
23 ang_type = 2
24 ang = 15.75
25 ang2 = 25.0
26 x_ang = 0.015
27 perfil = 1
28
29 INJECTION RATE
30 taxa = 1
31 dir_CDM = D:\DICOM\PRFs\Conditions\momentum_SA_5000us_150MPa.txt
32 dir_M = D:\DICOM\PRFs\Conditions\massflow_C12_5000us_150MPa.txt
33 d0 = 9.00000e-05
34 -
35
36 MIXING LAW
37 llei = 3

```

**Figura 6.18:** Fichero de entrada que genera el ejecutable de la interfaz del usuario

Al fijarse en este fichero, están presentes todas las variables que se han introducido en la interfaz del usuario. Pero se debe destacar una variable de las que se encuentran en este fichero. Se trata de la variable “tipus”.

Esta variable determinará si se quiere un estacionario “tipus = 1”; un estacionario reactivo-predictivo “tipus = 3”; o, por el contrario, se desea un transitorio “tipus = 2”; o, por último, un transitorio reactivo-predictivo “tipus = 4”. Este valor lo deberá de introducir el usuario en función del caso que quiera simular, y lo hará una vez se haya generado este fichero de texto.

A continuación, habrá que preparar el fichero “runDICOM.bat”, ver Fig. 6.1. Para realizar este paso, se ha de hacer “click” con el botón derecho y seleccionar la opción “editar”, tras esto el fichero se abrirá de la siguiente forma, Fig. 6.19.



**Figura 6.19:** Fichero “runDICOM.bat” para editar

En la Fig. 6.19 se puede ver que hay dos rutas escritas. La primera ruta corresponde con el ejecutable "DICOM.exe", donde se debe incluir la ruta completa y el fichero ejecutable que se selecciona. El segundo fichero del que se escribe la ruta completa es el fichero que nos genera la interfaz del usuario, el mostrado en la Fig. 6.18.

Tras este último paso, ya está todo listo para realizar la simulación. Lo único que hay que hacer es guardar los cambios hechos en "runDICOM.bat", cerrar la ventana de la Fig. 6.19 y, para acabar, hacer doble "click" en el fichero "runDICOM.bat". Con esto, la simulación ya habrá comenzado.



# DOCUMENTO II: PRESUPUESTO

## Presupuesto final del proyecto

En el presente documento se pretende estimar el precio de la inversión que se necesita realizar para el desarrollo del proyecto. La duración total del proyecto han sido 5 meses, durante los cuales se ha trabajado un total de 20 días al mes, a razón de 5 horas diarias.

El presupuesto se desglosa en dos secciones diferentes, pues se trata de un proyecto de investigación:

- 1- Mano de obra
- 2- Amortización de equipos e instalaciones.

Para realizar este cálculo se han utilizado las tarifas legales vigentes y la moneda es el €. Gracias a la división realizada en el presupuesto se va a poder calcular el coste total necesario.

### I. Cuantificación de los rendimientos

Para el desarrollo de este proyecto se ha empleado el trabajo de dos personas: el ingeniero tutor y el ingeniero desarrollador. Pero antes de nada se tiene que detallar el coste de la mano de obra de un ingeniero industrial titulado, y así poder conocer el coste que implica tanto el ingeniero tutor como el alumno. Tabla 1.1:

SALARIO BRUTO MENSUAL	4200,00 €
Salario (12 pagas)	50400,00 €
Salario (2 pagas extra)	8400,00
Seguridad social (23.6 %)	11894,40 €
Desempleo (7,6 %)	3830,40 €
Formación profesional (0,9 %)	453,60 €
Fondo de garantía social (0,2 %)	100,80 €
<b>Coste total para la empresa</b>	<b>71632,2 €</b>

**Tabla 2:** Salario bruto mensual de un ingeniero industrial titulado

Para el cálculo del coste por día del ingeniero se realiza la proporción en función de los días trabajados, y el salario por día es de:

Concepto	Coste (€/día)
Salario por día trabajado	298,47

**Tabla 3:** Salario diario que recibe un ingeniero industrial titulado

El sueldo que recibe el ingeniero desarrollador es el pertinente a un contrato de prácticas:

Concepto	Coste (€/mes)	Coste (€/día)
Salario de un contrato de prácticas	400	20

**Tabla 4:** Desglose del salario de un ingeniero desarrollador

El ingeniero tutor conlleva un coste de mano de obra del 50% y el ingeniero que desarrolla el proyecto un 100%.

Cargo	Coste (€/día)	Porcentaje (%)	Coste final (€/día)
Ingeniero tutor	298,47	50	149,24
Alumno desarrollador	20	100	20

**Tabla 5:** Coste diario por trabajador

## II. Cálculo de la amortización de equipo

Durante el presente proyecto el equipamiento utilizado no ha sido cuantioso. Éste se reducía a los ordenadores utilizados por el ingeniero tutor y el alumno desarrollador. A parte de este cálculo, también se realizará el de las instalaciones y licencias informáticas.

Concepto	Precio unidad (€)
Ordenador ingeniero tutor	1550
Ordenador alumno desarrollador	1500

**Tabla 6:** Coste unitario de los ordenadores

La amortización de los diferentes equipos se puede calcular mediante la fórmula:

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

donde  $P$  es el coste total del equipo en €,  $t$  el tiempo trabajado,  $a$  el porcentaje de uso por equipo y  $T$  la vida útil de los distintos equipos.

$P = 3050$  €,  $t = 0,0685$  años,  $a = 85\%$  y  $T = 4$  años

$A = 44,40$  €

El coste relacionado con la amortización de los equipos asciende a **44,40 €**.

### III. Cálculo del uso de las instalaciones (climatización y electricidad) por mes y trabajador

Concepto	Consumo	Coste (€/mes*trabajador)
Potencia facturada	6,36 kW x 20 días x 0,112758 €/kW·día	14,34
Energía facturada	229 kWh x 0,122125 €/kWh	27,97
Impuesto sobre la electricidad	5,11269632 % sobre 56,24 €	2,88
Alquiler de equipos de medida	20 días x 0,02663 €/día	0,53
Seguro y protección de pagos	1 mes x 1 €/mes	1
<b>Coste total</b>		<b>46,72</b>

**Tabla 7:** Coste de las instalaciones

El coste de las instalaciones total para los dos empleados durante el proyecto asciende a: **467,20 €**

IV. Licencias informáticas para los equipos

Concepto	Coste (€/año)
Licencia de Matlab R2018b	1600
Licencia de DICOM	Libre
Licencia de Microsoft office 2019	88

**Tabla 8:** Coste de las licencias informáticas

El coste al que ascienden las licencias informáticas para los dos empleados durante el proyecto si los multiplicamos por el tiempo de uso de los programas, será de: **231,26 €**

V. Presupuesto total

Concepto	Coste (€)
Salarios brutos	16923,38
Amortización de equipos	44,40
Consumo energético	467,20
Licencias informáticas	231,26
Base imponible	17756,24
IVA (21%)	3728,81
Coste	21485,05
Beneficio industrial (6%)	1289,10
Gastos generales (13%)	2793,06
Coste total del proyecto	25567,21

**Tabla 9:** Resumen total del presupuesto

El presupuesto final del trabajo asciende a una cantidad de **VEINTICINCO MIL QUINIENTOS SESENTA Y SIETE CON VEINTIUNO EUROS.**