



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



Trabajo Fin de Máster en Ingeniería Aeronáutica

# Modelado CFD de la evolución de un chorro Diesel en condiciones de motor

Autora: Irene Gil García

Tutor: José María García Oliver

Director Experimental: Adrián Pandal Blanco

Curso académico 2015-2016



---

**Documento 1:**  
**Memoria**

---



# Tabla de contenidos

<b>1</b>	<b>INTRODUCCIÓN</b> .....	<b>- 13 -</b>
1.1	ANTECEDENTES .....	- 13 -
1.2	OBJETIVOS.....	- 15 -
1.3	ESTRUCTURA DEL PROYECTO .....	- 16 -
<b>2</b>	<b>CONCEPTOS PREVIOS</b> .....	<b>- 17 -</b>
2.1	INTRODUCCIÓN .....	- 17 -
2.2	DESCRIPCIÓN DEL CHORRO DIESEL EN CONDICIONES INERTES.....	- 17 -
2.2.1	<i>Estructura del chorro Diesel en condiciones inertes</i> .....	- 19 -
2.3	PROCESO DE COMBUSTIÓN CONVENCIONAL EN CHORROS DIESEL .....	- 19 -
2.3.1	<i>Estructura de la llama</i> .....	- 21 -
2.4	PARÁMETROS ANALIZADOS .....	- 22 -
<b>3</b>	<b>METODOLOGÍA DE MODELADO EN OPENFOAM</b> .....	<b>- 29 -</b>
3.1	INTRODUCCIÓN .....	- 29 -
3.2	MODELO SIGMA-Y.....	- 29 -
3.3	MODELO DE COMBUSTIÓN .....	- 32 -
3.4	MALLADO.....	- 33 -
3.5	CONDICIONES DE CONTORNO .....	- 35 -
3.6	MODELO DE TURBULENCIA .....	- 41 -
<b>4</b>	<b>ANÁLISIS DE RESULTADOS</b> .....	<b>- 45 -</b>
4.1	INTRODUCCIÓN .....	- 45 -
4.2	DEFINICIÓN DEL PROBLEMA.....	- 45 -
4.3	ANÁLISIS DEL SPRAY A EN AMBIENTE INERTE .....	- 48 -
4.3.1	<i>Ambiente inerte no evaporativo</i> .....	- 48 -
4.3.2	<i>Ambiente inerte evaporativo</i> .....	- 54 -
4.4	ANÁLISIS DE SPRAY A EN CONDICIONES REACTIVAS .....	- 56 -
4.4.1	<i>Introducción</i> .....	- 56 -
4.4.2	<i>Estudio del caso de referencia</i> .....	- 58 -
4.4.3	<i>Estudio paramétrico de temperatura</i> .....	- 65 -
4.4.4	<i>Estudio paramétrico de Presión de inyección</i> .....	- 69 -
4.4.5	<i>Estudio paramétrico de densidad</i> .....	- 72 -
4.4.6	<i>Estudio paramétrico de la concentración de oxígeno</i> .....	- 76 -
4.5	CONCLUSIONES.....	- 78 -
<b>5</b>	<b>CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS</b> .....	<b>- 81 -</b>
5.1	TRABAJOS FUTUROS.....	- 83 -
<b>6</b>	<b>BIBLIOGRAFÍA</b> .....	<b>- 85 -</b>

# ANEXOS

<b>I. PROGRAMAS DE POST-PROCESADO .....</b>	<b>- 89 -</b>
I.1 PROGRAMA PARA OBTENER PENETRACIÓN Y FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE LÍQUIDO - 89	
-	
I.2 PROGRAMA PARA OBTENER VISCOSIDAD Y LONGITUD TURBULENTA.....	- 92 -
I.3 PROGRAMA PARA OBTENER PENETRACIÓN, RADIOS, FLUJOS, VELOCIDAD Y COMPOSICIÓN EN EL EJE .....	- 96 -
I.4 PROGRAMA PARA OBTENER LOS PRINCIPALES RESULTADOS EN .MAT .....	- 108 -
I.5 PROGRAMA PARA CALCULAR LA DISTANCIA DE LIFT-OFF .....	- 112 -
I.6 PROGRAMA PARA CALCULAR EL TIEMPO DE RETRASO .....	- 118 -
I.7 PROGRAMA PARA OBTENER EL RATIO DE PENETRACIONES INERTE-REACTIVO .....	- 123 -
<b>II. TUTORIAL DE OPENFOAM .....</b>	<b>- 129 -</b>
II.1 INTRODUCCIÓN .....	- 129 -
II.2 CONFIGURACIÓN DEL CASO INERTE .....	- 129 -
<i>II.2.1 Condiciones iniciales.....</i>	<i>- 130 -</i>
<i>II.2.2 Carpeta constant .....</i>	<i>- 131 -</i>
<i>II.2.4 Carpeta System .....</i>	<i>- 134 -</i>
II.3 CONFIGURACIÓN DEL CASO REACTIVO.....	- 137 -
<i>II.3.1 Condiciones iniciales.....</i>	<i>- 137 -</i>
<i>II.3.2 Carpeta constant .....</i>	<i>- 139 -</i>
II.4 CÁLCULO DEL CASO .....	- 140 -
II.5 POST-PROCESADO .....	- 141 -
<b>III. ESTUDIO DEL ENGLOBAMIENTO DE AIRE Y DEL COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO DEL CHORRO DIESEL.....</b>	<b>- 145 -</b>
III.1 INTRODUCCIÓN .....	- 145 -
III.2 DEFINICIÓN DE LOS MÉTODOS.....	- 145 -
III.3 CASOS ESTUDIADOS .....	- 150 -
III.4 ANÁLISIS DEL MÉTODO .....	- 150 -
<i>III.4.1 Método del radio .....</i>	<i>- 150 -</i>
<i>III.4.2 Método de las líneas de corriente .....</i>	<i>- 152 -</i>
III.5 RESULTADOS .....	- 159 -
III.6 SCRIPTS MATLAB .....	- 163 -
<i>III.6.1 Script streamlines.....</i>	<i>- 163 -</i>
<i>III.6.2 Script método radio .....</i>	<i>- 172 -</i>

# Índice de figuras

FIG. 2.1. GEOMETRÍA AXISIMÉTRICA DEL CHORRO DIESEL .....	19 -
FIG. 2.2 ESQUEMA DE LA ESTRUCTURA DE LA LLAMA DIESEL DURANTE EL PROCESO DE COMBUSTIÓN [1] .....	21 -
FIG. 2.3. PENETRACIÓN Y LONGITUD LÍQUIDA DEL CHORRO .....	23 -
FIG. 2.4. CHORRO DIESEL CON LAS DIFERENTES DEFINICIONES DE ÁNGULO DE APERTURA [2].....	24 -
FIG. 2.5. REPRESENTACIÓN DE DISTANCIA DE LIFT OFF [3].....	24 -
FIG. 2.6. TIEMPO DE RETRASO [4] .....	25 -
FIG. 3.1. EJEMPLO FICHERO “BLOCKMESHDICTION” .....	34 -
FIG. 3.2. MALLA 2D AXISIMÉTRICA CON DETALLE DE LA ZONA DEL INYECTOR -	34
FIG. 3.3. EJEMPLO CONTORNOS DE LA MALLA EN EL FICHERO “BLOCKMESHDICTION” .....	35 -
FIG. 3.4. EJEMPLO CARPETA “0” .....	36 -
FIG. 3.5. EJEMPLO DE ARCHIVO DE LAS CONDICIONES DE CONTORNO DE TEMPERATURA .....	37 -
FIG. 3.6. EJEMPLO DEL CÓDIGO DE CONDICIONES DE CONTORNO DE TEMPERATURA EN EL FICHERO “SIGMAYCONSTANTS” .....	37 -
FIG. 3.7. GENERADOR DE TASAS DE INYECCIÓN DE LA PÁGINA WEB DE CMT [8] ..	38 -
FIG. 3.8. ESQUEMA DEL PERFIL NO UNIFORME DE VELOCIDAD Y DEL PERFIL UNIFORME CON EL ÁREA EFECTIVA [7] .....	40 -
FIG. 3.9. TASA DE INYECCIÓN.....	40 -
FIG. 3.10. EJEMPLO DE ARCHIVO DE LA CONDICIÓN DE CONTORNO DE LA ENERGÍA CINÉTICA TURBULENTA.....	41 -
FIG. 3.11. EJEMPLO FICHERO RASPROPERTIES.....	42 -
FIG. 4.1. REPRESENTACIÓN DEL DOMINIO DE CÁLCULO .....	45 -
FIG. 4.2. COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN (IZQUIERDA) Y LVF (DERECHA) EN EL ESTUDIO PARAMÉTRICO DE $I_T$ .....	50 -
FIG. 4.3. COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN (IZQUIERDA) Y LVW (DERECHA) EN EL ESTUDIO PARAMÉTRICO DE $L_T$ .....	51 -
FIG. 4.4. RESULTADOS DE VISCOSIDAD TURBULENTA (IZQUIERDA) Y ESCALA INTEGRAL (DERECHA) EN EL ESTUDIO DE $I_T$ EN $T=3MS$ .....	53 -
FIG. 4.5. RESULTADOS DE VISCOSIDAD TURBULENTA (IZQUIERDA) Y ESCALA INTEGRAL (DERECHA) EN EL ESTUDIO DE $L_T$ EN $T=3MS$ .....	53 -
FIG. 4.6. COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN (IZQUIERDA) Y LVF (DERECHA) ENTRE CASO NO EVAPORATIVO Y CON EVAPORACIÓN $T=2.5MS$ .....	55 -
FIG. 4.7. COMPARACIÓN EVAPORATIVO Y NO EVAPORATIVO DEL RADIO DEL 1% DE FRACCIÓN DE MEZCLA EN EL EJE, RADIO ESTEQUIOMÉTRICO (IZQUIERDA) Y ENGLOBAMIENTO (DERECHA) EN $T=2.5MS$ .....	56 -

FIG. 4.8. PENETRACIÓN (SUPERIOR) Y RATIO DE PENETRACIÓN (INFERIOR) ENTRE CASO INERTE Y REACTIVO .....	59 -
FIG. 4.9 DISTANCIA DE LIFT-OFF EXPERIMENTAL Y OBTENIDA CON LOS MÉTODOS PARA EL CASO BASE REACTIVO.....	60 -
FIG. 4.10. DERIVADA DE LA TEMPERATURA MÁXIMA RESPECTO AL TIEMPO (CASO BASE REACTIVO) .....	61 -
FIG. 4.11. COMPARACIÓN DEL CAMPO EXPERIMENTAL DE FRACCIÓN MÁXICA DE OH (PARTE SUPERIOR) Y EL OBTENIDO CON EL MODELO CFD (PARTE INFERIOR) .....	62 -
FIG. 4.12. COMPARACIÓN DEL CAMPO EXPERIMENTAL DE FORMALDEHIDO (PARTE SUPERIOR) Y EL OBTENIDO CON CFD (PARTE INFERIOR).....	63 -
FIG. 4.13. COMPARACIÓN CAMPO EXPERIMENTAL DE FORMALDEHÍDO (PARTE SUPERIOR) Y EL OBTENIDO CON EL MODELO CFD (PARTE INFERIOR).....	64 -
FIG. 4.14. COMPARACIÓN DEL CAMPO EXPERIMENTAL DE FORMALDEHÍDO CORRESPONDIENTE A PAH (SUPERIOR) Y EL CAMPO DE ACETILENO OBTENIDO EN CFD.....	65 -
FIG. 4.15. COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN PARA DIFERENTES TEMPERATURAS AMBIENTALES.....	66 -
FIG. 4.16. DISTANCIA DE LIFT-OFF EN EL ESTUDIO PARAMÉTRICO DE TEMPERATURA. CASO BASE (SUPERIOR IZQ.), 850K (SUPERIOR DCHA.), 800K (INFERIOR IZQ.), 750K (INFERIOR DCHA) Y GRÁFICA COMPARATIVA (INFERIOR).....	67 -
FIG. 4.17. LOL SEGÚN EL CRITERIO DEL 2% DEL MÁXIMO DE COMPOSICIÓN DE OH RESPECTO AL TIEMPO EN EL ESTUDIO DE TEMPERATURAS.....	68 -
FIG. 4.18. TIEMPO DE RETRASO EN EL ESTUDIO DE TEMPERATURAS SEGÚN EL CRITERIO DE $T^a+400$ (AZUL), DE LA DERIVADA MÁXIMA DE LA TEMPERATURA (ROJO) Y DATOS EXPERIMENTALES (NEGRO).....	69 -
FIG. 4.19. COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN PARA DIFERENTES PRESIONES DE INYECCIÓN .....	70 -
FIG. 4.20. DISTANCIA DE LIFT-OFF EN EL ESTUDIO PARAMÉTRICO DE PRESIÓN DE INYECCIÓN. CASO BASE (SUPERIOR IZQ.), 100MPA (SUPERIOR DCHA.) Y 50MPA (INFERIOR IZQ.) Y GRÁFICA COMPARATIVA (INFERIOR DCHA). ....	71 -
FIG. 4.21. TIEMPO DE RETRASO EN EL ESTUDIO DE PRESIÓN DE INYECCIÓN ...	72 -
FIG. 4.22.COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN PARA DIFERENTES DENSIDADES ..	73 -
FIG. 4.23. DISTANCIA DE LIFT-OFF EN EL ESTUDIO PARAMÉTRICO DE DENSIDAD. CASO BASE (SUPRIOR IZQ.), 15.2KG/M <sup>3</sup> (SUPERIOR DCHA.) Y 7.6KG/M <sup>3</sup> (INFERIOR IZQ.) Y GRÁFICA COMPARATIVA (INFERIOR DCHA.) .....	74 -
FIG. 4.24. TIEMPO DE RETRASO EN EL ESTUDIO DE DENSIDAD AMBIENTAL .....	75 -
FIG. 4.25. COMPARACIÓN DE PENETRACIÓN PARA DIFERENTES CONCENTRACIONES DE OXÍGENO.....	76 -
FIG. 4.26. DISTANCIA DE LIFT-OFF EN EL ESTUDIO PARAMÉTRICO DE CONCENTRACIÓN DE OXÍGENO. 21% DE O <sub>2</sub> (SUPRIOR IZQ.), CASO BASE	



(SUPERIOR DCHA.) Y 13% O <sub>2</sub> (INFERIOR IZQ.) Y GRÁFICA COMPARATIVA (INFERIOR DCHA) .....	- 77 -
FIG. 4.27. TIEMPO DE RETRASO EN EL ESTUDIO DE PORCENTAJE DE OXÍGENO-	78 -
FIG. I.1 EJEMPLO GRÁFICA DE PENETRACIÓN, LONGITUD LÍQUIDA Y FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE LÍQUIDO. CASO EVAPORATIVO Y NO EVAPORATIVO BASE...	91 -
FIG. I.2 EJEMPLO DE GRÁFICA DE VISCOSIDAD (IZQUIERDA) Y LONGITUD TURBULENTA (DERECHA), PARA EL CASO DE ESTUDIO DE LA INTENSIDAD TURBULENTA .....	- 96 -
FIG. I.3 EJEMPLO DE GRÁFICA DE FLUJOS PARA EL CASO INERTE-REACTIVO BASE .....	- 108 -
FIG. I.4 EJEMPLO DE LOL .....	- 118 -
FIG. I.5 EJEMPLO DE TIEMPO DE RETRASO .....	- 122 -
FIG. I.6 EJEMPLO DE RATIO DE PENETRACIONES (ESTUDIO DE TEMPERATURAS)...	127 -
FIG. III.1 MÉTODO DE REFERENCIA PARA EL CÁLCULO DEL ENGLOBAMIENTO Y COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO .....	- 146 -
FIG. III.2 MÉTODO DEL RADIO .....	- 147 -
FIG. III.3 MÉTODO LÍNEAS DE CORRIENTE .....	- 148 -
FIG. III.4 DETALLE DEL MÉTODO DE LAS LÍNEAS DE CORRIENTE PARA OBTENER LOS PUNTOS INICIALES .....	- 149 -
FIG. III.5. COMPARACIÓN ENGLOBAMIENTO Y COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO EN EL CASO DE 900K REACTIVO (SUPERIOR), 900K INERTE (CENTRAL) Y 750K REACTIVO (INFERIOR), TODO PARA 3MS .....	- 151 -
FIG. III.6. CAMPO DE DENSIDADES PARA EL CASO DE 750K ABIERTO.....	- 152 -
FIG. III.7. SUCESIÓN DE LÍNEAS DE CORRIENTE SEGÚN EL PUNTO INICIAL.....	- 153 -
FIG. III.8 COMPARACIÓN DE ENGLOBAMIENTO Y COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO EN EL CASO DE 900K REACTIVO PARA DIFERENTES PUNTOS DE INICIO DE LAS STREAMLINES. 12MM(SUPERIOR IZQ.), 14MM (SUPERIOR DCHA.), 17MM (INFERIOR IZQ.) Y 20MM (INFERIOR DCHA.), (3MS) .....	- 154 -
FIG. III.9 COMPARACIÓN DE ENGLOBAMIENTO Y COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO EN EL CASO DE 900K INERTE PARA DIFERENTES PUNTOS DE INICIO DE LAS STREAMLINES. 12MM(SUPERIOR IZQ.), 14MM (SUPERIOR DCHA.), 17MM (INFERIOR IZQ.) Y 20MM (INFERIOR DCHA.), (3MS) .....	- 155 -
FIG. III.10 GASTO MÁSICO A LO LARGO DE UN TUBO DE CORRIENTE. LÍNEAS DE CORRIENTE PARA EL CASO INERTE (SUPERIOR IZQ.), RESULTADO DEL GASTO MÁSICO PARA EL CASO INERTE A LO LARGO DEL TUBO DE CORRIENTE MAGENTA (INFERIOR IZQ.), LÍNEAS DE CORRIENTE PARA EL CASO REACTIVO (SUPERIOR DCHA.) Y GASTO MÁSICO PARA EL CASO REACTIVO A LO LARGO DEL TUBO DE CORRIENTE MAGENTA (INFERIOR DCHA.) TODO PARA 3MS	- 156 -
FIG. III.11 TASA DE INYECCIÓN REAL.....	- 157 -
FIG. III.12 TASA DE INYECCIÓN CONSTANTE .....	- 157 -

**FIG. III.13** SUCESIÓN DE LÍNEAS DE CORRIENTE CON RESPECTO AL TIEMPO CON LA TASA CONSTANTE EN EL CASO 900K REACTIVO CON MALLA ABIERTA. SE TIENE 1MS (SUPERIOR IZQ.), 1.5MS (SUPERIOR DCHA.), 2MS (CENTRAL IZQ.), 2.5MS (CENTRAL DCHA.), 3MS (INFERIOR IZQ.) Y 3.5MS (INFERIOR DCHA.).....- 158 -

**FIG. III.14** COMPARACIÓN ENTRE INERTE Y REACTIVO DEL CASO DE 900K CON MALLA ABIERTA (3MS) ..... - 159 -

**FIG. III.15** COMPARACIÓN ENTRE INERTE Y REACTIVO DEL CASO DE 800K CON MALLA ABIERTA (3MS) ..... - 160 -

**FIG. III.16** COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO MALLA ABIERTA VS CERRADA CASO 900K REACTIVO (3MS) ..... - 161 -

**FIG. III.17** COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO MALLA ABIERTA VS CERRADA CASO 800K REACTIVO (3MS) ..... - 161 -

**FIG. III.18** COEFICIENTE DE ENGLOBAMIENTO MALLA ABIERTA VS CERRADA CASO 750K REACTIVO (3MS) ..... - 162 -

**FIG. III.19** LÍNEAS DE CORRIENTE PARA EL CASO DE 900K REACTIVO CON MALLA CERRADA A 3MS..... - 162 -

# Índice de tablas

TABLA 4.1. CONDICIÓN NOMINAL DE SPRAY A DEFINIDAS POR LA ECN [4] ....	- 46 -
TABLA 4.2. CONDICIÓN NOMINAL NO EVAPORATIVO DE SPRAY A [4] .....	- 46 -
TABLA 4.3. PARÁMETROS GEOMÉTRICOS DE LA TOBERA 675 .....	- 47 -
TABLA 4.4. TABLA RESUMEN DE LOS ESTUDIOS PARAMÉTRICOS REACTIVOS...	- 48 -
TABLA 4.5. PROPIEDADES DEL CASO BASE REACTIVO .....	- 48 -
TABLA 4.6. RESUMEN CASOS ANALIZADOS EN AMBIENTE INERTE NO EVAPORATIVO .....	- 49 -
TABLA 4.7. CONFIGURACIÓN CASO BASE EN CONDICIONES INERTES CON EVAPORACIÓN .....	- 54 -
TABLA 4.8. RESULTADOS DE TIEMPO DE RETRASO PARA EL CASO BASE REACTIVO, EXPERIMENTAL Y CON LOS DIFERENTES CRITERIOS.....	- 60 -
TABLA III.1. CASOS ESTUDIADOS.....	- 150 -



# 1 Introducción

## 1.1 Antecedentes

Actualmente el sector de la automoción tiene una gran importancia en la industria, siendo uno de los campos en la ingeniería que ha experimentado más avances desde su origen y en el que se siguen llevando a cabo proyectos de investigación en la actualidad.

El sector del automóvil hoy en día tiene una dependencia casi total de los combustibles fósiles, lo que hace que cada día se planteen nuevos retos para seguir evolucionando debido a la limitada disponibilidad de éstos, el incremento de los precios y el deseo, cada vez mayor, por parte de la sociedad de utilizar combustibles alternativos, con el fin de disminuir las emisiones contaminantes a la atmósfera.

Dentro del campo de los motores de combustión interna alternativos (conocidos como MCI), existen los motores de encendido provocado (MEP) y los de encendido por compresión (MEC), que son, en el presente, la alternativa más eficiente en cuanto a la producción de energía mecánica a partir de la combustión del combustible fósil en el sector de la automoción. Estos últimos son conocidos como motores Diesel.

Hasta el principio de los 90 coexistían dos familias de motores MEC, los motores de inyección directa e indirecta. En los primeros, el combustible normalmente se inyecta directamente en el cilindro, y en los de inyección indirecta existe una precámara adicional al cilindro en la que se inyecta el combustible (normalmente se encuentra en la culata).

Inicialmente, la inyección directa se utilizaba en motores de gran cilindrada, y la indirecta para automoción, pero, la mejora en los sistemas de inyección ha ido permitiendo un uso general de la inyección directa en casi todos los motores MEC, puesto que presenta ventajas en cuanto a rendimiento y menos pérdidas de calor.

En las últimas décadas se ha impulsado el estudio del proceso de inyección de combustible y la consiguiente formación de la mezcla de aire-combustible, puesto que juegan un papel muy importante en la combustión y en la formación de contaminantes

en los motores Diesel. Se necesitan desarrollar teorías que permitan predecir de forma precisa los procesos que ocurren dentro de éstos, con el objetivo de obtener una mayor eficiencia y reducción de contaminantes.

El modelado de los chorros Diesel sigue siendo actualmente una tarea difícil debido a la cantidad de fenómenos complejos que tienen lugar en ellos, como puede ser la atomización primaria, la cual aún no ha sido completamente entendida.

El presente proyecto intenta profundizar en este campo de investigación, muy presente actualmente en la industria de la automoción y que está en continuo desarrollo. Se ha simulado el comportamiento de un chorro Diesel en condiciones de motor, con un modelo de atomización completamente Euleriano, el cual se considera más adecuado para la descripción de la atomización primaria en chorros Diesel.

Durante más de treinta años, el modelado de los chorros Diesel se ha llevado a cabo usando el Método Discreto de Gotas (DDM, “Discret Droplet Method”), que aplica una descripción lagrangiana del spray líquido, presentando varios inconvenientes para el modelado de flujos densos bifásicos. En este modelo, las gotas o fragmentos líquidos del chorro se rastrean en el espacio físico, por lo que se ha de suponer un tamaño de éstos. En cambio, el modelo completamente euleriano utilizado en el presente Trabajo Fin de Máster, conocido como  $\Sigma$ -Y, trata al flujo bifásico (compuesto por gas y líquido) como un único flujo multi-especie en el que el proceso de atomización se modela desde una ecuación de densidad de superficie de la interfase sin tener que asumir ningún tamaño preestablecido de los fragmentos líquidos.

Empleando los medios y conocimientos de los que dispone el Departamento de Máquinas y Motores térmicos de la Universidad Politécnica de Valencia ha sido posible realizar los diversos experimentos y poder así obtener conclusiones acerca del modelo  $\Sigma$ -Y.

## 1.2 Objetivos

Con todo ello, los objetivos del presente proyecto, se resumen en los siguiente párrafos.

El objetivo principal es realizar un estudio detallado de las características principales del chorro Diesel al ser inyectado, mediante el uso del modelo  $\Sigma$ -Y. La modelización del chorro se ha llevado a cabo mediante el software libre de simulación CFD llamado OpenFOAM, con el que se han configurado los diferentes parámetros de los casos estudiados.

Los casos estudiados han sido varios, comenzando por el chorro Diesel inerte, es decir, sin que se produzca la reacción de combustión de la mezcla, tanto en condiciones no evaporativas como evaporativas. Con el chorro inerte sin evaporación lo que se pretende es hacer una calibración de los parámetros de turbulencia que tienen implicación en el modelo y tras ello se realiza una validación del modelo con el chorro inerte evaporativo, para comprobar si se trata o no de una buena herramienta de cálculo y de si los parámetros escogidos son los adecuados.

La mayor parte del presente Trabajo Fin de Máster se dedica al estudio del chorro Diesel en condiciones reactivas, en las que sí tiene lugar la reacción de combustión. Con ellos se ha operado de forma sistemática, haciendo un estudio de influencia de la variación del valor de diferentes parámetros, como puede ser la temperatura del gas en la cámara de combustión, su densidad, la presión de inyección y el porcentaje de oxígeno en el ambiente.

Para realizar la validación de la precisión del modelo se han utilizado datos experimentales procedentes de la base de datos propiedad de una red de diferentes institutos internacionales, conocida como Engine Combustion Network, entre los que es miembro el Departamento de Máquinas y Motores Térmicos.

Por otra parte, se han desarrollado rutinas para el post-proceso de los resultados obtenidos con CFD, los cuales se han implementado con Matlab, con el fin de analizar los diferentes parámetros del chorro.

## 1.3 Estructura del proyecto

El presente Trabajo Fin de Máster se puede dividir en tres documentos: el documento principal que es la Memoria, Pliego de Condiciones y el Presupuesto.

En la Memoria se exponen las bases teóricas en las que se fundamenta el trabajo, los estudios que se han realizado, así como los procedimientos que se han seguido para su realización, seguido de la exposición de resultados y conclusiones.

- ❖ En el Capítulo 2 se hace una introducción teórica acerca del chorro Diesel, su estructura y los procesos que tienen lugar en él. Por otra parte, se definen las principales magnitudes analizadas durante todo el Trabajo Fin de Máster.
- ❖ En el Capítulo 3 se explica la metodología que se ha de seguir para el modelado del chorro Diesel en OpenFOAM. Se comienza explicando el modelo de atomización utilizado (Sigma-Y) y de combustión. Se comentan las características principales del mallado en OpenFOAM y las condiciones de contorno que se han de introducir y para finalizar se explica de forma teórica el modelo de turbulencia utilizado.
- ❖ En el Capítulo 4 se exponen los resultados obtenidos y se analizan llegando a conclusiones.
- ❖ En el último capítulo, el Capítulo 5, se presentan las conclusiones generales del Trabajo Fin de Máster.
- ❖ En la última parte de la memoria se incluyen los Anexos, que incluyen los programas de post-procesado realizados con Matlab, un tutorial para adquirir conocimientos básicos para poder realizar un cálculo tanto inerte como reactivo de un chorro Diesel con OpenFOAM. Y, para finalizar, se añade un tercer Anexo que contiene un estudio acerca del englobamiento de aire por parte del chorro Diesel con tres métodos distintos.

El segundo documento, es el Pliego de Condiciones en el que se presenta la normativa y seguimiento técnico en la ejecución del Trabajo.

El último documento es el Presupuesto, en el que se desglosan los costes que conllevaría la realización del Trabajo.



## 2 Conceptos previos

### 2.1 Introducción

En este capítulo se va hacer una breve descripción general del problema, para así tener un conocimiento previo de conceptos, que facilitarán la comprensión del presente Trabajo.

Se comenzará con una descripción del chorro de combustible, de su estructura, los fenómenos que tienen lugar durante la inyección del combustible Diesel en la cámara de combustión y los principales parámetros que lo caracterizan, que serán analizados a lo largo de todo el proyecto.

### 2.2 Descripción del chorro Diesel en condiciones inertes

El chorro Diesel se caracteriza por su carácter no estacionario, una elevada presión de inyección, un alto nivel de turbulencia y, especialmente, por estar formado por dos fases diferentes: una fase continua (el gas del ambiente) y una dispersa (el combustible en estado líquido). Por otra parte, la evolución del chorro Diesel dentro de la cámara de combustión depende principalmente de la forma con la que se introduce el combustible y de su interacción aerodinámica con el aire. Todo ello hace que sea muy difícil tener una descripción completa y precisa del mismo.

Los principales fenómenos que tienen lugar en el chorro son la atomización, coalescencia y evaporación, los cuales se describen a continuación.

#### **Atomización**

La atomización es el proceso por el cual un líquido se disgrega en gotas de menor tamaño que las iniciales.

El chorro Diesel tras salir de la tobera de inyección, y a cierta distancia de ésta, se empieza a atomizar y se considera que la atomización es completa cuando desaparece el ligamento líquido y sólo existen gotas y gas del ambiente englobado en su interior. La distancia que hay entre el orificio y donde empieza la atomización se denomina como longitud intacta, la cual depende de las condiciones operativas del motor, de las características del sistema de inyección, de la geometría del orificio de la tobera, de si hay o no cavitación y de la relación de densidades entre el líquido y el ambiente.

La atomización es muy importante en motores Diesel, puesto que de la calidad de este proceso dependen la distribución, el número y el tamaño de las gotas de combustible creadas a la salida del inyector, y con ello la calidad de la mezcla aire/combustible. Cuanto menor sea el tamaño de las gotas, mayor será la superficie de interacción aire-combustible, con lo que aumentará la tasa de evaporación y así la eficacia de la combustión será mayor.

## **Coalescencia**

Cuando el chorro se ha disgregado en gotas, éstas pueden chocar unas con otras creando gotas de mayor tamaño. Este es el fenómeno conocido como coalescencia.

Es un fenómeno muy frecuente en este tipo de chorros puesto que hay una gran cantidad de gotas y grandes velocidades de dispersión que favorecen la interacción entre ellas.

La probabilidad de interacción entre dos gotas depende de las velocidades de ambas, de sus direcciones y de la concentración local de combustible, por lo tanto, hay una mayor frecuencia de colisión de gotas en la zona más densa del chorro, esto es, en la zona cercana a la tobera y en el eje.

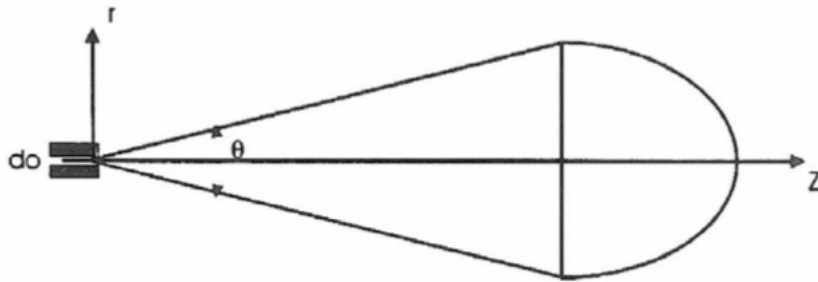
## **Evaporación**

Una vez atomizado el chorro, las gotas avanzan en la cámara de combustión y para poder mezclarse con el aire deben evaporarse, empezando a cobrar importancia el proceso de interacción de las gotas con el aire lo que determinará la formación de la mezcla. El intercambio energético entre el gas englobado a elevada temperatura, junto con la difusión térmica y másica en la interfase gota-gas, son los fenómenos que controlan la evaporación.

En los motores Diesel, los fenómenos de difusión térmica y másica asociados a la evaporación son más rápidos, por lo que tienen menos importancia que los de mezcla, así pues, el proceso de evaporación está controlado esencialmente por la mezcla.

## 2.2.1 Estructura del chorro Diesel en condiciones inertes

En cuanto a la estructura del chorro, cabe decir que resulta muy difícil describirla de forma precisa, pero en términos generales, a partir de observaciones experimentales que se han hecho del mismo, se puede decir que es prácticamente axisimétrico. Esta hipótesis permite simplificar el problema y definir dos zonas principales del mismo:



*Fig. 2.1. Geometría axisimétrica del chorro Diesel*

- ❖ Una primera parte cónica con vértice el orificio del inyector, en la que se comporta como un chorro estacionario. La longitud de esta parte corresponde al 70% de la longitud total del chorro. Es una parte muy importante porque determina los procesos de mezcla ya que el chorro a la salida del inyector debe abrirse para englobar el aire tanto por el frente como por los lados.
- ❖ La segunda parte del chorro es una parte elíptica con carácter no estacionario que corresponde al 30% de la longitud del chorro. Se denomina parte transitoria del chorro.

## 2.3 Proceso de combustión convencional en chorros Diesel

Si se trata de un chorro reactivo, además de los procesos anteriormente explicados de atomización, mezcla y evaporación, también tendrá lugar la combustión. Este proceso se puede sintetizar en tres fases:

- ❖ **Fase de retraso al autoencendido.** Esta fase comienza en el momento en el que se inyecta el combustible en estado líquido en la cámara de combustión y finaliza con el autoencendido espontáneo de la mezcla, empezando aquí la siguiente fase de combustión premezclada. En esta fase influyen fenómenos tanto físicos como químicos.

El chorro, en este punto, se enfrenta a un ambiente de elevada densidad y comienza a desintegrarse en gotas, aumentando la interfase aire-combustible. Además, la cantidad de movimiento del chorro inyectado hace que el aire sea arrastrado hacia su interior. Estos fenómenos de atomización y englobamiento de aire, descritos anteriormente, hacen que el combustible en estado líquido aumente su temperatura y comience a evaporarse.

En paralelo a los fenómenos físicos, tienen lugar los químicos. La parte química del autoencendido comienza cuando aparece el combustible evaporado. Para los combustibles Diesel, la química del autoencendido consta de dos fases: una primera que ocurre a baja temperatura y es poco exotérmica y una segunda muy exotérmica, cuya aparición marca el inicio de la siguiente fase. Con las reacciones de baja temperatura comienza el proceso de oxidación del combustible, el cual depende de la temperatura de la cámara y del tipo de combustible (mediante el número de cetano, el cual es alto si el combustible presenta gran facilidad para autoencenderse).

- ❖ **Fase de combustión premezclada.** Esta fase se caracteriza por tres fenómenos básicos:

- La cinética química del autoencendido entra en una fase de alta temperatura, con lo que la tasa de consumo crece muchísimo y como consecuencia se tiene una elevada tasa de liberación de calor.
- A partir del consumo de combustible se forman tanto especies finales (como el  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ ) como especies intermedias, precursoras del hollín. Aparece hollín incandescente en la zona frontal del chorro, dando lugar a una llama de coloración amarilla-anaranjada. La radiación térmica del hollín será dominante durante el resto del proceso de combustión.
- Por último, al final de esta fase se establece el frente de llama por difusión que caracterizará el resto de la combustión, lo que acentúa el carácter transitorio de esta fase, puesto que es un enlace entre el chorro no reactivo y la llama de difusión.

- ❖ **Fase de combustión por difusión.** Tras encenderse el chorro, el proceso de combustión pasa a la fase de difusión, en el que el frente de llama se consolida.

En esta fase, la liberación de calor viene controlada por el proceso de mezcla entre el combustible evaporado y el aire del interior de la cámara, siendo la liberación de calor más elevada cuanto más rápida sea la mezcla. El proceso de mezcla está controlado por la cantidad de movimiento que introduce el chorro al ser inyectado.

La estructura de la llama alcanza la estabilidad hasta que cesa la inyección, momento a partir del cual, la tasa de combustión cae y el fenómeno de oxidación está controlado por la turbulencia que queda en la cámara de combustión hasta que se consume todo el combustible presente.

### 2.3.1 Estructura de la llama

El proceso de combustión modifica la estructura del chorro, encontrándose varias zonas. Al ser la fase de combustión por difusión la que mayor parte ocupa en el proceso de combustión, el estudio de la llama de difusión Diesel ha sido objeto de múltiples estudios. Se ha llegado a realizar un modelo conceptual de ésta, el cual se observa en la Figura 2.2 (propuesto por Dec [1]).

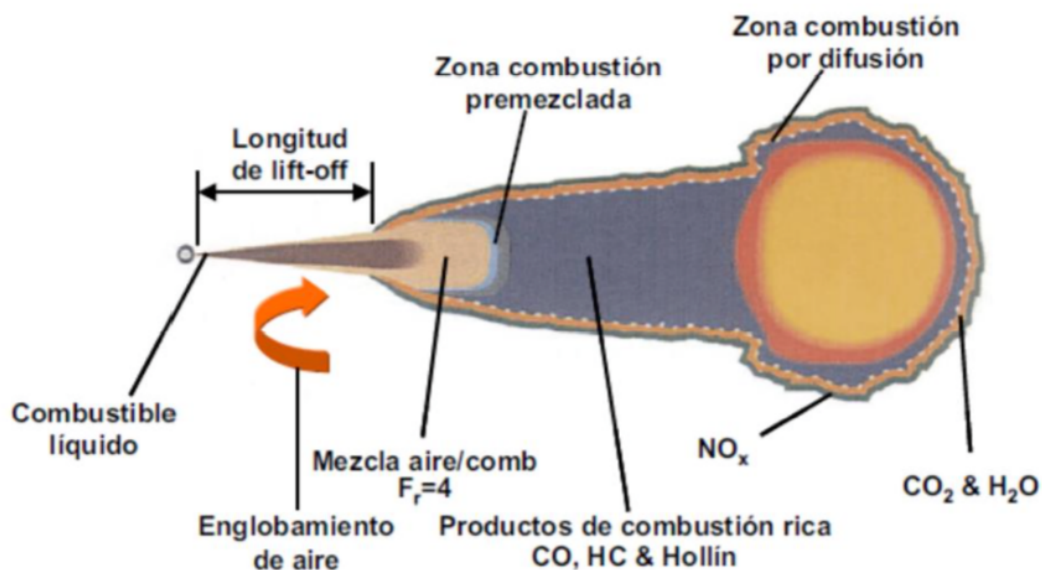


Fig. 2.2 Esquema de la estructura de la llama Diesel durante el proceso de combustión [1]

- ❖ Una primera zona en la que su longitud se denomina como distancia de despegue de llama o LOL (Lift-Off Length). Es una zona en contacto inmediato con la tobera inyección y el chorro tiene una apariencia inerte. Es una zona en la que la

mezcla se va preparando puesto que la combustión no puede comenzar hasta que no esté el combustible mezclado con el aire.

- ❖ A partir del LOL, la llama adquiere la estructura típica de llama de difusión, con una zona interna ocupada por combustible sin quemar y productos parciales de la combustión, rodeados por la superficie de reacción la cual está situada en la zona con dosado estequiométrico. La parte frontal de la llama se ensancha debido a un vórtice que corresponde a la parte transitoria del chorro durante su penetración en la cámara.
- ❖ Al final de la primera zona, se encuentra una tercera, más pequeña, de reacción premezclada, que consume todo el oxígeno englobado en la primera zona, de forma que, a partir de aquí, la concentración de oxígeno en el interior del chorro es nula.

La parte azulada de la llama que se observa en la Figura 2.2 corresponde con una zona de alta concentración de hidrocarburos sin quemar, monóxido de carbono y hollín, debido a que hay poco oxígeno. La zona más anaranjada es donde se produce la combustión y, por lo tanto, se tendrán los productos normales de ésta,  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ . Por último, la zona gris es donde aparecen los óxidos de nitrógeno, puesto que en esta zona hay gran concentración de oxígeno y elevadas temperaturas.

## 2.4 Parámetros analizados

A continuación, se describirán una serie de conceptos que caracterizan al chorro Diesel y que se analizan a lo largo del presente proyecto: penetración, longitud líquida, ángulo de apertura, distancia de Lift Off (LOL), tiempo de retraso y flujos.

### **Penetración**

La penetración del chorro se define como la evolución del mismo con respecto al tiempo  $S(t)$ , es decir, la distancia que recorre el chorro desde el orificio de salida a medida que se va mezclando con el aire, a lo largo del tiempo. En la Figura 2.3 se puede ver un esquema en el que se representa la penetración del chorro.

Los factores que principalmente afectan a la penetración son, el flujo de cantidad de movimiento del mismo a la salida de la tobera de inyección y la interacción aerodinámica con el gas ambiente. También depende del diámetro del orificio de salida del inyector, de la presión de inyección, e inversamente proporcional a la densidad del ambiente y al ángulo de apertura del chorro, [2].

Numéricamente se define como la distancia desde el orificio hasta la posición axial correspondiente a una fracción másica menor del 0.1%.

### Longitud líquida

Se define longitud líquida como la distancia que alcanza el combustible en fase líquida hasta que se evapora totalmente. Esta magnitud depende de la intensidad de la atomización. Se muestra gráficamente en la Figura 2.3, llamado como  $u$ .

Se define numéricamente como la distancia a partir de la cual la fracción másica de líquido es menor al 1%.

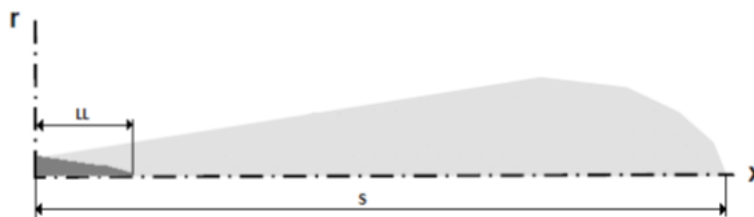


Fig. 2.3. Penetración y longitud líquida del chorro

### Ángulo de apertura del chorro

Se trata de un parámetro con bastante importancia que describe la evolución global del chorro, mostrado en la Figura 2.4. El ángulo de apertura se puede considerar como un indicativo del grado de mezcla.

Esta magnitud se suele determinar experimentalmente mediante visualizaciones del chorro, puesto que no existe una definición clara debido a las grandes fluctuaciones que tiene la superficie del mismo. Sin embargo, algunos autores ([2]) proponen que se puede medir un ángulo medio trazando dos líneas rectas que se ajusten al contorno del chorro y que pasen por el orificio de salida; otros autores postulan que se puede definir haciendo pasar estas dos rectas tangenciales a la superficie del chorro pero a una distancia fija al inyector, o distinguiendo entre dos o más ángulos dependiendo de la distancia al inyector.

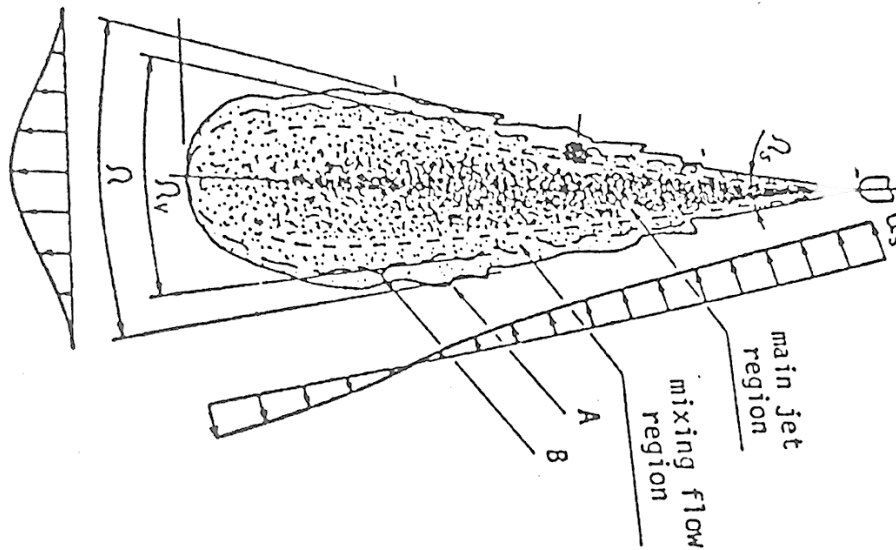


Fig. 2.4. Chorro Diesel con las diferentes definiciones de ángulo de apertura [2]

El ángulo de apertura del chorro depende fundamentalmente de la relación de densidades entre el líquido inyectado y el gas ambiental, es decir de la interacción aerodinámica entre ambos y de la geometría del orificio de salida del inyector.

### Distancia de Lift Off

En el caso de chorros en condiciones reactivas, a parte de los parámetros explicados anteriormente, se analizará la distancia de lift off (LOL) y el tiempo de retraso.

El fenómeno de Lift off es el hecho de que la llama se encuentra “despegada” de la tobera de inyección, es decir, la zona de reacción comienza a partir de una cierta distancia mínima al inyector. Esta distancia mínima entre el inyector y la llama se conoce como distancia de lift off, tal y como se ve en la Figura 2.5.

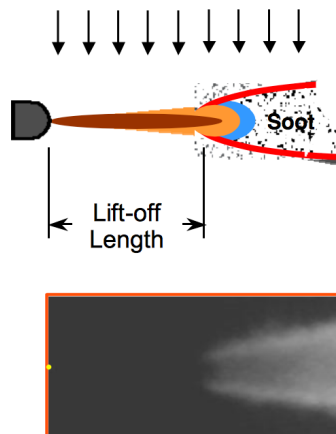


Fig. 2.5. Representación de distancia de Lift Off [3]



Este parámetro se ve afectado por la velocidad de inyección (un aumento en la velocidad de inyección mueve el punto de estabilización de la llama aguas abajo), de la temperatura del aire (la cual influye, a su vez, en la difusividad térmica y en la velocidad de combustión laminar), de la densidad del aire ambiental (que afecta, a su vez, a la difusividad térmica, a la velocidad de combustión laminar y al ángulo de apertura del chorro), de la concentración de oxígeno (influye de manera inversamente proporcional en el LOL) y del diámetro de la salida del inyector.

### Tiempo de retraso

El tiempo de retraso se define como el tiempo que transcurre entre que el chorro sale del inyector hasta que se inicia la combustión.

Según la organización Engine Combustion Network, ECN, experimentalmente este parámetro se puede definir de varias formas, según el incremento de presión o según la quimioluminiscencia a elevada temperatura [4].

Si se utiliza la definición según el incremento de presión se tiene que establecer un límite de presión para cada condición, de forma que se asegure que el incremento de presión corresponda con el comienzo de la combustión a alta temperatura, siendo este umbral diferente para diferentes tasas de inyección, retrasos de encendido, liberación de calor de la llama fría... (Figura 2.6)

En cuanto a la definición debido a la quimioluminiscencia, el tiempo de retraso se mide cuando la luminosidad alcanza el 50% de la quimioluminiscencia de la temperatura más elevada cuando se mantiene constante, no siendo ésta la luminosidad del hollín.

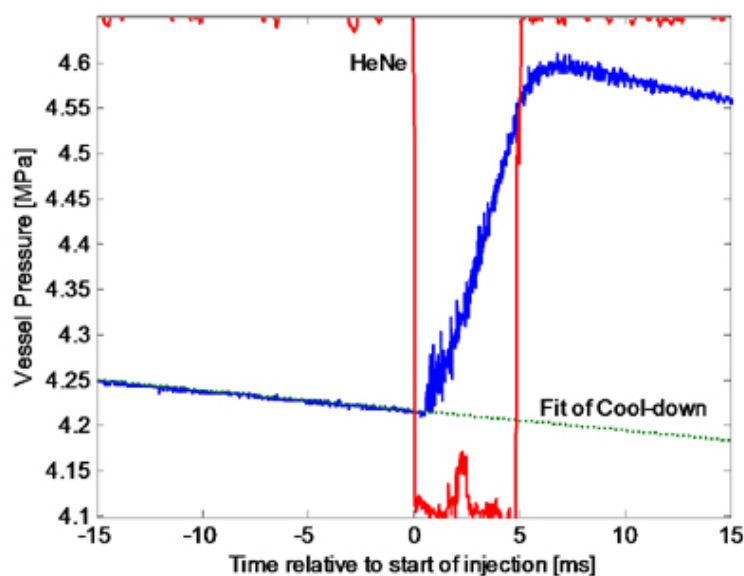


Fig. 2.6. Tiempo de retraso [4]

## Flujos

Otras magnitudes que se van a analizar en los casos de estudio del presente Trabajo corresponden a parámetros obtenidos mediante integrales radiales, es decir, son parámetros que proporcionan información de cada sección a lo largo del chorro.

Las magnitudes radiales estudiadas han sido el flujo de cantidad de movimiento ( $\dot{M}$  [N]), el gasto másico total ( $\dot{m}$  [kg/s]) el cual aporta información sobre el englobamiento de aire por parte del chorro, el flujo másico de combustible ( $\dot{m}_f$  [kg/s]) y la cantidad de masa de combustible que se encuentra en cada sección ( $m_f$  [kg/m]). Esta última magnitud no es un flujo en realidad porque no implica transporte.

El cálculo de los parámetros mencionados se realiza mediante la integración de las siguiente expresiones:

$$\dot{M}(x) = \int \rho u^2 dA \quad \text{Ec. 2.1}$$

$$\dot{m}(x) = \int \rho u dA \quad \text{Ec. 2.2}$$

$$\dot{m}_f(x) = \int \rho u Y_f dA \quad \text{Ec. 2.3}$$

$$m_f(x) = \int \rho Y_f dA \quad \text{Ec. 2.4}$$

Donde  $Y_f$  es la fracción másica de combustible,  $\rho$  es la densidad total y  $u$  es la velocidad.

El englobamiento  $\dot{m}(x)$ , representado en la ecuación 2.2, es uno de los parámetros más importantes de los chorros Diesel para caracterizar el proceso de mezcla. Se trata de un fenómeno por el cual el aire que se encuentra dentro de la cámara de combustión es arrastrado por el chorro que se inyecta en ésta pasando a formar parte del mismo, de manera que a medida que la distancia al origen del chorro aumenta, el gasto másico a través de una superficie perpendicular al chorro crece.

Este fenómeno tiene varias consecuencias en el chorro, entre otras:

- Incremento de su anchura
- Disminución de la velocidad al crecer la distancia al eje
- Su densidad se reduce

Por último, para caracterizar el englobamiento de aire por parte del chorro se utiliza también el *coeficiente de englobamiento*, el cual se calcula como:

$$C_{eng} = \frac{d\dot{m}(x)}{dx} \frac{d_{eq}}{\dot{m}_o} \quad \text{Ec. 2.5}$$

Donde  $\dot{m}_o$  es el gasto másico inicial y  $d_{eq}$  es el diámetro equivalente, que se define como un diámetro ficticio, matemáticamente se calcula como:

$$d_{eq} = d_0 \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_a}} \quad \text{Ec. 2.6}$$

Donde  $d_0$  es el diámetro del orificio de salida del inyector,  $\rho_f$  es la densidad del combustible y  $\rho_a$  es la densidad del gas ambiental.



# 3 Metodología de modelado en OpenFoam

## 3.1 Introducción

En el presente capítulo se va a desarrollar una explicación de cómo se han modelado los casos que se han analizado a lo largo del proyecto. Los casos corresponden, en general, con la inyección de un chorro de combustible líquido en un ambiente gaseoso que puede ser inerte o reactivo.

En el análisis de un caso con OpenFoam se necesitan tres pasos, el preprocesado, el cual se comentará a continuación, el cálculo en sí y por último el postprocesado, que se hará utilizando los datos que se obtienen tras el cálculo del CFD con otros softwares externos, como por ejemplo Matlab o ParaFoam. En los Anexos (I y II) se hará una explicación más detallada de cómo configurar un caso y lanzarlo, con ejemplos, así como de los códigos de postprocesado realizados.

## 3.2 Modelo Sigma-Y

El modelo de atomización  $\Sigma$ -Y utilizado en el Trabajo, es un modelo basado en la representación euleriana de la atomización y dispersión del spray, tratando el flujo bifásico, compuesto por gas y líquido, como un único flujo multi-especie con densidad variable y con un único campo de velocidades. A diferencia de otros modelos como el DDM (en el cual las gotas o fragmentos líquidos del spray son rastreadas en el espacio físico de forma Lagrangiana) o el modelo ELSA (el cual se trata de un modelo euleriano con transición Lagrangiana a gotas cuando se alcanza una cierta fracción volumétrica de líquido), la aproximación euleriana del modelo  $\Sigma$ -Y es más adecuada para la descripción de la atomización primaria de los chorros Diesel, pasando la fase euleriana líquida a fase vapor.

El modelo original propuesto por Vallet se basa en cuatro hipótesis fundamentales, [5]:

- La tensión superficial y la viscosidad actúan sólo en las escalas pequeñas, lo que corresponde con números de Reynolds y Weber infinitos. Esto implica que las características a escalas grandes del flujo sólo dependerán de las variaciones de la densidad. Por lo tanto, la tensión superficial y la viscosidad sólo tendrán efecto en las características de las pequeñas escalas, como puede ser en los tamaños de gotas. Bajo la hipótesis de que el flujo saliente del inyector opera a un elevado número de Reynolds y Weber, es posible asumir la separación de las características de las escalas grandes del flujo, como es el transporte de masa, del proceso de atomización que ocurre en escalas más pequeñas.
- El campo de velocidades de un flujo bifásico es impredecible, pero puede ser estudiado en términos de valores medios como se hace para flujos turbulentos compuestos por una sola fase. Estos valores medios pueden calcularse mediante un modelo de dos ecuaciones, de forma similar al modelo  $k-\varepsilon$  en un flujo monofásico. La mezcla de líquido y gas es tratada como un fluido con densidad variable y que fluye con un único campo de velocidad.
- La dispersión de la fase líquida en la fase gaseosa puede ser modelada mediante un flujo de difusión turbulenta, en este caso se utiliza la ley de Fick o ley de gradiente, que refleja el efecto de la velocidad relativa entre las dos fases.
- La geometría media de las estructuras líquidas puede ser caracterizada mediante el seguimiento del área superficial media de la interfase líquido-gas por unidad de volumen, no considerando el diámetro medio de las gotas, puesto que éstas no son siempre esféricas.

En este modelo se hace uso de dos ecuaciones de transporte, que se explican en detalle más abajo, una ecuación para el transporte de fracción másica de líquido ( $\tilde{Y}$ ), la cual modela la mezcla turbulenta de líquido, y una ecuación de transporte para la densidad superficial de la interfase ( $\Sigma$ ), que sirve para caracterizar el proceso de atomización.

### Ecuación $\tilde{Y}$

Para definir la dispersión de la fase líquida se hace uso de una función indicadora que toma valor unidad en la fase líquida, y valor nulo en la fase gas. Se denomina  $\bar{Y}$  a la fracción media en volumen de líquido, y se define la fracción media de masa promediada como  $\tilde{Y} = \frac{\bar{\rho Y}}{\bar{\rho}}$ . Con ello la ecuación promedio de transporte para la fracción másica de líquido, dada por Favre, es:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}'_i \tilde{Y}'}{\partial x_i} \quad \text{Ec. 3.1}$$

Donde  $u'_i = u_i - \tilde{u}_i$  corresponde a las fluctuaciones turbulentas de velocidad ponderadas en densidad y  $Y' = Y - \tilde{Y}$  a las fluctuaciones turbulentas de la fracción másica de líquido. El término de difusión turbulenta de líquido,  $\widetilde{u'_i Y'}$ , hace referencia al efecto de la velocidad relativa entre las dos fases.

Con ello se caracterizan los movimientos de las grandes escalas del fluido.

### **Ecuación $\Sigma$**

La atomización en escalas pequeñas, se modela resolviendo una ecuación de transporte para la evolución de la densidad del área superficial de la interfase,  $\Sigma$ , originalmente propuesta por Vallet y Borghi (1999). Esta densidad superficial puede entenderse como la cantidad de superficie espacial por unidad de volumen en un tiempo y posición dados.

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{u_j \bar{\Sigma}}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D_\Sigma \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_j} \right) + (A + a) \bar{\Sigma} - V_s \bar{\Sigma}^2 - \bar{\Sigma}_{vap} \quad \text{Ec. 3.2}$$

Donde  $D_\Sigma$  es el coeficiente de difusión tomado usualmente como la viscosidad turbulenta sobre el número de Schmidt. Los términos  $A$  y  $a$  son escalas de tiempo inversas que definen la tasa a la cual se produce el área superficial. Específicamente, el término  $A$  modela la creación de área superficial por medio del estrechamiento de la interfase debido a gradientes de velocidad y el término  $a$  tiene en cuenta la producción de área en la interfase a escalas pequeñas. El término  $V_s$  conlleva los efectos de la destrucción de interfase debido a la coalescencia (tiene dimensiones de m/s), y por último,  $\bar{\Sigma}_{vap}$  modela los efectos de producción de superficie en la interfase mediante evaporación.

Con ello, en lugar de resolver los fenómenos individuales de la atomización, utiliza esta ecuación de transporte (Ecuación 3.2) para caracterizar la velocidad con que se crea densidad superficial de la interfase y evitar suponer un tamaño concreto de las gotas de líquido.

Por otra parte, el tamaño medio de las gotas de líquido se pueden calcular a través de la magnitud  $\bar{\Sigma}$ , el área media de la interfase por unidad de volumen.

Este modelo ha sido aplicado en el estudio de inyección directa de chorros Diesel proporcionando buenas predicciones del comportamiento de éste en comparación con los datos experimentales.

### 3.3 Modelo de combustión

En los casos estudiados bajo condiciones reactivas, esto es, con combustión, se tiene que hacer un acoplamiento del modelo con un modelo de combustión, tal y como se explica en [6].

La estrategia del modelo de combustión se conoce como UFPV, “Unsteady Flamelet/Progress Variable”, siendo el utilizado en este Trabajo el implementado por Winklinger [7]. Este modelo de combustión se basa en los siguientes conceptos:

- **Concepto de Flamelet.** Este concepto sugiere que una llama turbulenta se puede representar como un conjunto de llamas laminares.
  
- **Modelado de una supuesta PDF (“Probability Density Function”).** Para considerar el efecto de la turbulencia en el proceso de la combustión, se adoptan supuestas PDF’s para describir la distribución estadística de las variables independientes del proceso.
  
- **Colección de flamelets.** Se genera una colección de flamelets, lo que permite guardar todas las propiedades involucradas en el proceso de combustión, como función de un número reducido de variables independientes en una tabla.

Se utilizan tablas de la fracción másica de las especies, pero en la bibliografía se puede encontrar otro método de tabulación.

Para completar el modelado del chorro inerte con el modelo de combustión se necesitan añadir una serie de ecuaciones: una ecuación de transporte para el fracción de mezcla media, la varianza de la fracción de mezcla y la tasa media de la disipación escalar.



## 3.4 Mallado

Para lograr una buena precisión en los cálculos realizados es muy importante desarrollar una malla adecuada, con un dominio que incluya las áreas que se quieran simular y con un tamaño de celdas tal que sea capaz de captar todas las características y variaciones del flujo, puesto que el cálculo en CFD se basa en resolver ecuaciones diferenciales de conservación para cada celda discreta.

Por otra parte, se ha de realizar un estudio de malla para conseguir que los resultados obtenidos sean independientes de su estructura y resolución.

La malla ha sido creada y optimizada en trabajos previos [6], por lo que el presente proyecto no aborda el estudio de ésta. Se trata de una malla 2D axisimétrica, con resolución no uniforme.

En OpenFoam la malla se define en el fichero “blockMeshdict” que se encuentra dentro de la carpeta “PolyMesh” dentro, a su vez, de la carpeta “Constant”.

El dominio a mallar se define mediante vértices y bloques, como se puede ver en la Figura 3.1. El tamaño de celdas se define dando el número de éstas por cada bloque en sentido axial y radial.

En el ejemplo mostrado, en el Bloque 1, compuesto por los vértices 2-3-4-5-0-1-1-0, se tienen 495 celdas en la dirección axial, y 10 en la dirección radial, lo cual, sabiendo que el Bloque 1 de la malla mide 0.0447mm en dirección radial, corresponde a un tamaño de celda radial de 4.47 $\mu$ m.

```

\*-----*
|=====|
| \ \ \ \ | F i e l d       | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ \ \ | O p e r a t i o n | Version: 1.6
| \ \ \ \ | A n d             | Web:      http://www.openfoam.org
| \ \ \ \ | M a n i p u l a t i o n |
|=====|
\*-----*
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  object       blockMeshDict;
}
// *****

convertToMeters 0.001;

//La longitud axial de la malla ahora son 79.813344005166300 mm y radial 24.768943482872200 +r efectivo!=
24.824248537664200 mm
//y el patch fuel (que hace las veces de inyector) será de 0.0447 mm de radio -> radio EFECTIVO 0.0442507424.

vertices
(
  (0 0 0) //vert=0
  (79.813344005166300 0 0) //vert=1
  (0 0.0447 -0.003895862) //vert=2
  (79.813344005166300 0.0447 -0.003895862) //vert=3
  (79.813344005166300 0.0447 0.003895862) //vert=4
  (0 0.0447 0.003895862) //vert=5
  (0 24.904867452 -2.178893569) //vert=6
  (79.813344005166300 24.904867452 -2.178893569) //vert=7
  (79.813344005166300 24.904867452 2.178893569) //vert=8
  (0 24.904867452 2.178893569) //vert=9
);

blocks
(
  hex (2 3 4 5 0 1 1 0) (495 1 10) simpleGrading (189.5494469 1 1)
  hex (5 4 3 2 9 8 7 6) (495 1 85) simpleGrading (189.5494469 1 382.5001704) //6 7 8 9 2 3 4 5
)

```

Fig. 3.1. Ejemplo fichero “blockMeshDict”

La malla tendrá celdas más pequeñas en torno al inyector puesto que es la zona donde más rápidamente cambiarán las variables y, por lo tanto, se requiere más precisión. En las zonas más alejadas se utilizarán celdas más grandes, ya que utilizar todo el dominio con un tamaño pequeño de celda aumentaría mucho el tiempo de cálculo. Por lo tanto se trata de una malla no uniforme.

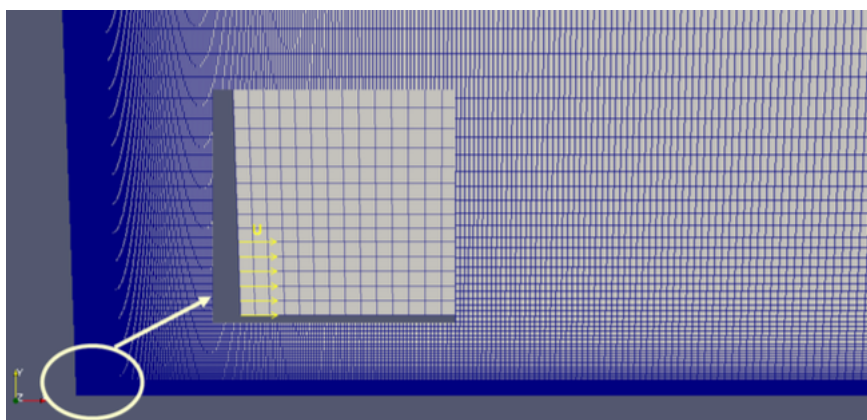


Fig. 3.2. Malla 2D axisimétrica con detalle de la zona del inyector

Por último, se han de especificar los contornos de la malla (Figura 3.3), así como las clases de las condiciones de contorno que se van a aplicar en cada uno de ellos, como entrada, salida, condiciones cíclicas o pared, entre otras. Por ejemplo, en el eje se impone la condición de vacío, “empty”, para indicar que no hay pared.

```

edges
(
);

patches
(
  patch fuel
  (
    (2 0 0 5)
  )
  wall wall1
  (
    (6 2 5 9)
  )
  wall wall2
  (
    (3 1 1 4)
    (7 3 4 8)
    (6 7 8 9)
  )
  wedge side1
  (
    (2 3 1 0)
    (6 7 3 2)
  )
  wedge side2
  (
    (5 4 1 0)
    (9 8 4 5)
  )
  empty axis
  (
    (0 1 1 0)
  )
);

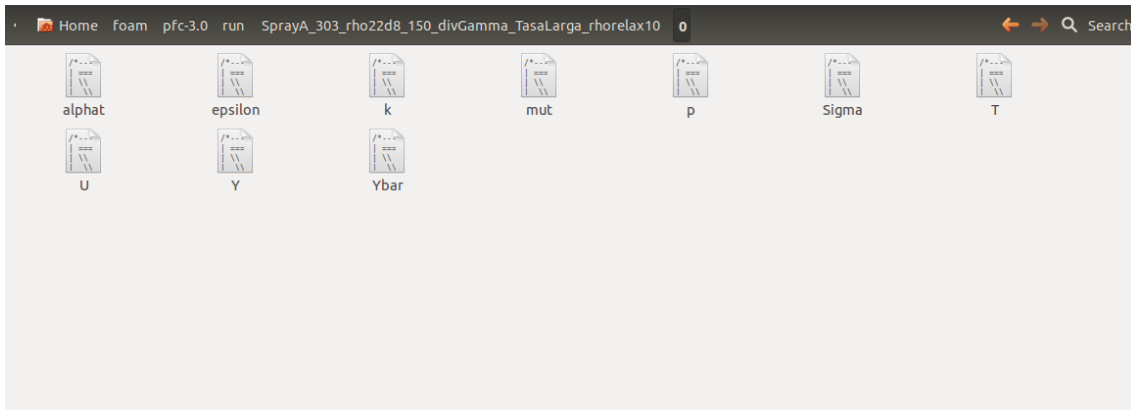
mergePatchPairs
(
);

```

Fig. 3.3. Ejemplo contornos de la malla en el fichero “blockMeshDict”

## 3.5 Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno se encuentran dentro de la carpeta “0” del caso. En la siguiente imagen se muestra el interior de esta carpeta y los ficheros principales que contiene, que podrán variar según el caso analizado.



**Fig. 3.4. Ejemplo carpeta “0”**

En general, las condiciones de contorno que se introducen en los casos son temperatura del gas ambiental, la temperatura del combustible, presión en la cámara, la velocidad, la energía cinética turbulenta y la disipación turbulenta, siendo estos dos últimos necesarios para definir el modelo de turbulencia. Las condiciones, tanto los gradientes de los parámetros como sus valores, han de especificarse en cada uno de los contornos creados en la malla.

En cuanto a temperatura, se tiene que introducir en el fichero “T” la temperatura correspondiente en los diferentes contornos de la malla definida, tanto la del ambiente (que se ha de introducir en *internalField* y en las *Wall 1 y 2*) como la temperatura a la que se encuentra el combustible (que se debe de indicar en la sección de la malla llamada como *Fuel*).

```

/*----- C++ -----*/
|=====|
| \    /  | F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \  /   | O p e r a t i o n  | Version: 1.5-dev
|   \/    | A n d                | Revision: exported
|   /\    | M a n i p u l a t i o n | Web:      http://www.OpenFOAM.org
|=====|
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       T;
}
// *****

dimensions      [0 0 0 1 0 0 0];

internalField   uniform 303;

boundaryField
{
    fuel
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 343;
    }
    wall1
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 303;
    }
    wall2
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 303;
    }
    side1
    {
        type      wedge;
    }
    side2
    {
        type      wedge;
    }
    axis
    {
        type      empty;
    }
}

```

Fig. 3.5. Ejemplo de archivo de las condiciones de contorno de temperatura

Las condiciones de contorno de la temperatura también han de ser modificadas en el fichero “sigmaConstants” que se encuentra dentro de la carpeta “Constant”. Se ha de introducir la temperatura ambiental y del combustible en las líneas del código dedicadas a ello.

```

//Ambient and fuel Temperature
Tamb [0 0 0 1 0 0 0] 303;      // K
Tfuel [0 0 0 1 0 0 0] 343;    // K

```

Fig. 3.6. Ejemplo del código de condiciones de contorno de temperatura en el fichero “sigmaConstants”

La condición de contorno de la presión se introduce en el fichero “P”, y junto con la temperatura definen las condiciones en la cámara. La densidad se obtiene conocida la presión del gas ambiental y su temperatura a través de:

$$p = \frac{\rho T}{PM} \quad \text{Ec. 3.3}$$

Donde  $\rho$  es la densidad del gas ambiente, R es la constante universal, T es la temperatura del ambiente y PM es el peso molecular del gas ambiental (que dependerá de si el caso es inerte o reactivo, pues en el primero sólo se tendrá N<sub>2</sub> y en el segundo, además, se tendrá que tener en cuenta el O<sub>2</sub>).

Con respecto a la velocidad “U”, la energía cinética turbulenta “k”, y la disipación turbulenta “ε”, se ha utilizado un fichero con una tasa de inyección definida. Las tasas de inyección han sido obtenidas de la página web del CMT [9], a través del generador virtual de tasas de inyección disponible, donde se introduce la presión de inyección, el coeficiente de descarga, el diámetro del orificio del inyector, la densidad del combustible y el tiempo de inyección. El generador de tasas de inyección se muestra en la Figura 3.7 y la tasa de inyección como gasto másico en función del tiempo se muestra en la Figura 3.9.

#### Virtual Injection Rate Generator

Injection Pressure [MPa]: <input type="text" value="150"/>	Back Pressure [MPa]: <input type="text" value="6"/>
Outlet Diameter [mm]: <input type="text" value="0.0894"/>	Discharge Coefficient [-]: <input type="text" value="0.90"/>
Fuel Density [kg/m3]: <input type="text" value="713.13"/>	Injection Time [ms]: <input type="text" value="1.50"/>
<input type="checkbox"/> Old version (not recommended)*	

\* The new version (07/24/2013) is the recommended one. The difference between the two versions is the shape of the curve during the ramp up. In the new version the ROI ramp up is slower according to the recommendations found in SAE Paper 2013-24-0001. The old version is available only for backward compatibility.

Fig. 3.7. Generador de tasas de inyección de la página web de CMT [8]

Para obtener, posteriormente, el campo de velocidades, de energía cinética y disipación turbulenta, se tiene que tener en cuenta la complejidad del estudio del flujo en la salida del inyector debido a las dimensiones tan pequeñas existentes en el orificio, y las altas velocidades que se alcanzan dentro de éste. Esto hace que el análisis del flujo interno en el canal del inyector se suela hacer mediante parámetros medidos en el orificio de salida, [6]. Uno de estos parámetros es el coeficiente de descarga, que se calcula como el ratio entre el gasto másico real y el teórico (que proviene de la ecuación de Bernuilli).

El gasto másico teórico se puede calcular mediante la Ecuación 3.4, donde  $u_{th}$  es la velocidad teórica (Ecuación 3.5),  $A_0$  es el área geométrica y  $\rho_f$  es la densidad del combustible.

$$\dot{m}_{f,th} = \rho_f u_{th} A_0 \quad \text{Ec. 3.4}$$

$$u_{th} = \sqrt{\frac{2\Delta p}{\rho}} \quad \text{Ec. 3.5}$$

Con ello, el coeficiente de descarga se puede calcular como:

$$C_d = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_{f,th}} = \frac{\dot{m}_f}{A_0 \sqrt{2\rho_f \Delta p}} \quad \text{Ec. 3.6}$$

Este coeficiente mide la eficiencia del orificio a la hora de expulsar el flujo, lo que incluye las pérdidas de presión por la fricción con la pared y así como las pérdidas debidas al perfil no uniforme de velocidad a la salida del orificio. Teniendo esto en cuenta se puede definir un perfil de velocidades uniforme, y rectangular, que asegura el gasto másico real (Figura 3.8). El valor de este perfil de velocidades se conoce como velocidad efectiva,  $u_{eff}$ , y la sección por la que fluye es el área efectiva,  $A_{eff}$ .

$$u_{eff} = \frac{\dot{m}_f}{\rho_f A_{eff}} \quad \text{Ec. 3.7}$$

$$A_{eff} = \frac{\pi}{4} (D_0 \sqrt{C_a})^2 \quad \text{Ec. 3.8}$$

Donde  $D_0$  es el diámetro del orificio de salida del inyector y  $C_a$  es el coeficiente de área. Este coeficiente proviene de que el coeficiente de descarga puede ser descompuesto en dos contribuciones, una debido a la reducción de área debido al perfil no uniforme de velocidades ( $C_a$ ) y otra contribución debida a las pérdidas de presión, incluidas en el coeficiente de velocidad ( $C_v$ ).

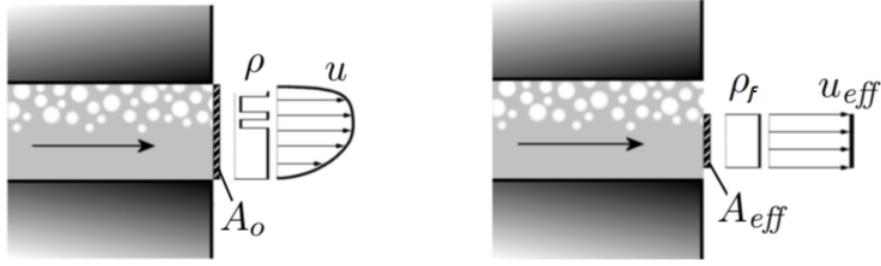


Fig. 3.8. Esquema del perfil no uniforme de velocidad y del perfil uniforme con el área efectiva [7]

Como el fichero de la tasa de inyección consta de los instantes de tiempo de la inyección y del gasto másico para cada instante, teniendo en cuenta lo explicado en los párrafos anteriores, se puede calcular el perfil uniforme de velocidad efectiva y con ello la energía cinética turbulenta y la disipación, haciendo uso de las siguientes expresiones:

$$k = \frac{3}{2}(U \cdot I_t)^2 \quad \text{Ec. 3.9}$$

$$\varepsilon = \frac{0.09^{0.75} k^{1.5}}{L_{caract}} \quad \text{Ec. 3.10}$$

Siendo  $\dot{m}$  el gasto másico,  $\rho_f$  la densidad del combustible,  $I_t$  es la intensidad turbulenta,  $k$  es la energía cinética turbulenta y  $L_{caract}$  es la longitud característica de la turbulencia.

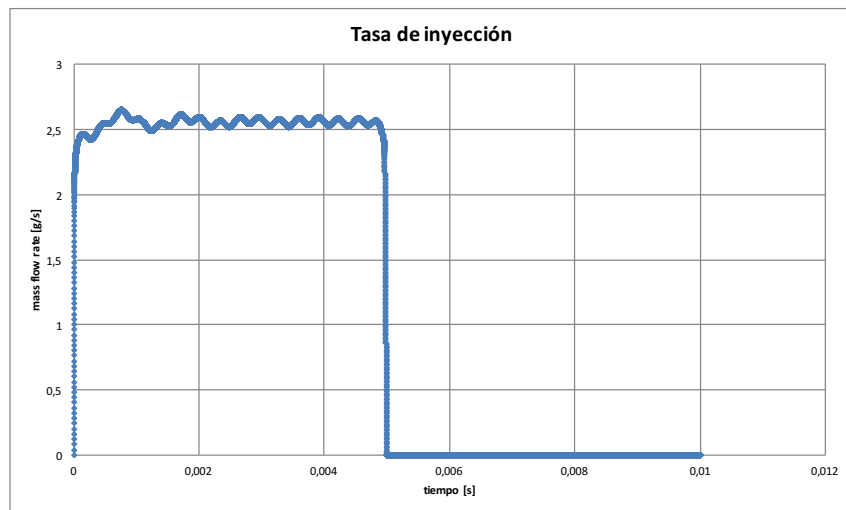


Fig. 3.9. Tasa de inyección



Con todo ello se obtienen una serie de perfiles para la velocidad, la disipación turbulenta y la energía cinética turbulenta, que se introducen en forma de ficheros de texto en la condiciones de contorno correspondiente a la entrada, como se muestra en la Figura 3.10 del fichero de la energía cinética turbulenta a modo de ejemplo.

```

/*-----*-- C++ *-----*/
=====
Field      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
Operation  | Version: 1.5-dev
And        | Revision: exported
Manipulation | Web: http://www.OpenFOAM.org
-----*--
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        volScalarField;
  location     "0";
  object       k;
}
// *****

dimensions    [0 2 -2 0 0 0];
internalField uniform 0.0148;
boundaryField
{
  fuel
  {
    type          timeVaryingUniformFixedValue;
    fileName      "$FOAM_CASE/k_SprayA_coSigma";
    outOfBounds   clamp;
    value         uniform 1261.5;
  }
  wall1
  {
    type          zeroGradient;
  }
  wall2
  {
    type          zeroGradient;
  }
  side1
  {
    type          wedge;
  }
  side2
  {
    type          wedge;
  }
  axis
  {
    type          empty;
  }
}

// *****

```

Fig. 3.10. Ejemplo de archivo de la condición de contorno de la energía cinética turbulenta

### 3.6 Modelo de turbulencia

Los modelos de turbulencia de dos ecuaciones son los modelos más sencillos que son capaces de determinar, en cada punto del flujo, dos variables turbulentas relacionadas, a partir de las cuales, otras magnitudes pueden ser obtenidas. Al contrario de otros modelos de turbulencia de una ecuación o algebraicos, no necesitan de ningún conocimiento adicional de la estructura local del flujo turbulento, y por ello pueden ser capaces de lidiar con diferentes escenarios.

A la hora de seleccionar las variables turbulentas a resolver, la energía turbulenta  $k$  es siempre una buena opción puesto que está gobernada por una ecuación de transporte relativamente sencilla. Dependiendo de cuál sea la otra variable que se resuelve en el modelo, aparecen diferentes modelos de dos ecuaciones como son  $k-\varepsilon$  y  $k-\omega$ .

El modelo de turbulencia seleccionado en este caso ha sido una variante del modelo  $k-\varepsilon$ , se trata del *High desity Ratio  $k-\varepsilon$*  (*HDR  $k-\varepsilon$* ). La selección del modelo de turbulencia se especifica en el fichero “RASProperties”, en la carpeta “Constant”, donde también se han de introducir todos los coeficientes correspondientes al modelo seleccionado.

```

/*----- C++ -----*/
=====
\\  F i e l d           | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\  O p e r a t i o n   | Version: 1.6
\\  A n d               | Web: www.OpenFOAM.org
\\  M a n i p u l a t i o n
/*----- C++ -----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       RASProperties;
}

// *****

RASModel        highDensityRatioKEpsilon;

turbulence      on;

printCoeffs     on;

highDensityRatioKEpsilonCoeffs //PLM161110
{
    Cmu          0.09;
    C1           1.60; //PLM261110
    C2           1.92;
    C3          -0.33;
    alphah       1.111; // 1/Pr Inversa de numero de Prandtl
    alphak       1;
    alphaEps     0.76923;
    Sc           0.9; //Schmidt
    relax        1.0; //
}

// Wall function coefficients
wallFunctionCoeffs
{
    // kappa
    kappa        0.4187;
    // E
    E            9;
}

// *****
    
```

Fig. 3.11. Ejemplo fichero RASProperties

El modelo  $k-\varepsilon$  es uno de los modelos de turbulencia de dos ecuaciones más utilizados, a pesar de que no consigue buenos resultados en casos con grandes gradientes adversos de presión. A parte de la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta, consta de otra para la disipación turbulenta  $\varepsilon$  para representar las propiedades turbulentas del flujo. La variable  $\varepsilon$  determina la escala de la turbulencia, mientras que  $k$  determina la energía en ésta.

La ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta viene dada por la Ecuación 3.11.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -\frac{1}{\rho} \overline{u_j p} - \frac{1}{2} \overline{u_i u_i u_j} + 2\nu \overline{u_i s_{ij}} \right) - \varepsilon \quad \text{Ec. 3.11}$$

Donde el primer término de la derecha,  $P_k$ , es la producción de energía turbulenta. El segundo término puede ser interpretado como el gradiente de un flujo que actúa para redistribuir  $k$ , y por ello se denomina como término de transporte de energía turbulenta, y es el único término de la ecuación que necesita de modelado.

Y la ecuación de transporte de la disipación se muestra en la Ecuación 3.12.

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\nu + \nu_t / \sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad \text{Ec. 3.12}$$

La variante *HDR*  $k$ - $\varepsilon$  que se utiliza en el presente proyecto permite tener en cuenta la diferencia de densidades que existe entre el fuel y el gas.

Cabe mencionar que se hace uso de un valor de  $C_{1\varepsilon}$  corregido, 1.60, en lugar del valor estándar, 1.44, como se indica en trabajos previos [9] puesto que se sabe que estos modelos tienden a sobreestimar la dispersión radial del chorro.



## 4 Análisis de resultados

### 4.1 Introducción

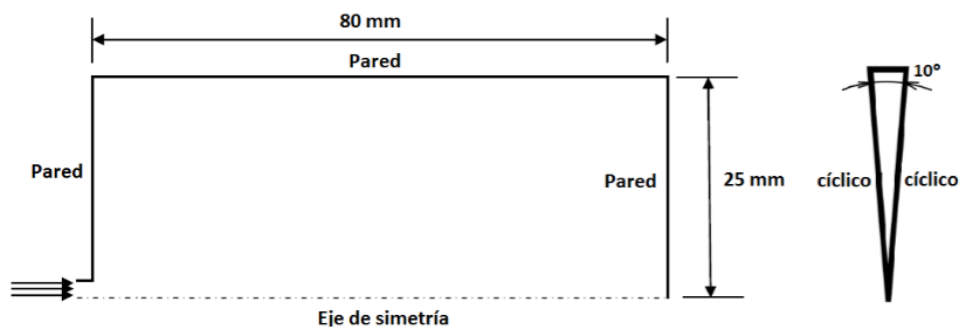
El objetivo principal de este proyecto es analizar el chorro Diesel en condiciones reactivas aplicando el modelo de atomización  $\Sigma$ -Y. Sin embargo, antes de entrar directamente al estudio en combustión del spray, se debe hacer un análisis de validación del modelo en condiciones inertes para calibrar ciertos parámetros y lograr un mejor entendimiento del mismo.

En el presente capítulo se van a exponer los resultados obtenidos con las diferentes configuraciones que se han estudiado, así como una comparación con los datos experimentales disponibles, haciendo especial hincapié en los casos con combustión.

Los datos experimentales son proporcionados por la ECN, Engine Combustion Network. Se trata de una red de institutos de investigación que colaboran en torno al tema de la combustión en condiciones de motor [4], en la que se encuentran publicados una multitud de datos experimentales que han sido utilizados en el presente Trabajo Fin de Máster para validar los resultados de las simulaciones.

### 4.2 Definición del problema

En general, el dominio de cálculo para los casos estudiados a lo largo del proyecto se muestra en la Figura 4.1.



*Fig. 4.1. Representación del dominio de cálculo*

Se trata de un espacio de sección angular cilíndrica de  $10^\circ$ , con 25mm de longitud radial y 80 ó 108mm de longitud axial, dependiendo del caso.

Por otra parte, para llevar a cabo las simulaciones se han utilizado las condiciones de la base de datos de “Spray A” que proporciona la ECN [4]. Específicamente, la condición de “Spray A” consiste en la inyección de un chorro libre Diesel en un ambiente quiescente, cuyas condiciones nominales se muestran en la Tabla 4.1.

<b>Combustible</b>	n-dodecano
<b>Temperatura del gas ambiental</b>	900 K
<b>Presión del gas ambiental</b>	Cercana a 6.0Mpa
<b>Densidad del gas ambiental</b>	22.8 kg/m <sup>3</sup>
<b>Oxígeno en ambiente</b>	0% en casos no reactivos, 15% en reactivos
<b>Temperatura del combustible</b>	363 K
<b>Presión de inyección</b>	150 Mpa

*Tabla 4.1. Condición nominal de Spray A definidas por la ECN [4]*

Para los casos analizados con ambiente inerte no evaporativo, se han utilizado los datos de “Spray A” en condiciones no evaporativas proporcionadas, también, por la ECN, los cuales se especifican en la Tabla 4.2.

<b>Combustible</b>	n-dodecano
<b>Temperatura del gas ambiental</b>	303 K
<b>Densidad del gas ambiental</b>	22.8 kg/m <sup>3</sup>
<b>Composición del ambiente</b>	100% N <sub>2</sub>
<b>Temperatura del combustible</b>	343 K
<b>Presión de inyección</b>	150 Mpa

*Tabla 4.2. Condición nominal no evaporativo de Spray A [4]*

En cuanto al inyector utilizado en los cálculos, se trata de un inyector axial de un único orificio que corresponde al Serial# 210675, en lo siguiente llamada como tobera 675, cuyas características geométricas se muestran en la Tabla 4.3.

Serie	$D_0$ [ $\mu\text{m}$ ]	$D_i$ [ $\mu\text{m}$ ]	$L/D_0$ [-]	$r/D_0$ [-]	Factor k	Offset a la salida [ $\mu\text{m}$ ]
210675	89.4	116	11.5	0.23	2.7	53

Tabla 4.3. Parámetros geométricos de la tobera 675

Con estas condiciones se han analizado varios tipos de casos, que se pueden englobar en dos categorías: casos en ambiente inerte y casos en ambiente reactivo.

❖ **Casos en ambiente inerte.** Se trata de casos utilizados para calibrar los parámetros de turbulencia y validar la precisión del modelo. El gas ambiental está compuesto por 100% de  $N_2$ , es decir, no hay presencia de oxígeno y no se produce la reacción química entre combustible y aire. Los estudios realizados con este ambiente se pueden descomponer, a su vez, en dos subtipos:

- Casos no evaporativos. La malla que se ha utilizado tiene 80mm de longitud axial. Por otra parte la temperatura del gas ambiental es de 303K y la temperatura del combustible líquido es de 343K.
- Casos evaporativos. La geometría del problema es igual a la de los casos no evaporativos, salvo que la malla utilizada es de 108mm de longitud axial, la temperatura del gas ambiental es ahora de 900K y la del combustible de 363K.

❖ **Casos en ambiente reactivo.** Corresponden al estudio principal del proyecto. En estos casos el gas ambiental posee ahora  $N_2$  y  $O_2$  produciéndose la combustión de la mezcla. El estudio de los casos reactivos se ha basado en un análisis paramétrico de diferentes condiciones ambientales, para ver su efecto en las características del chorro. En estos casos, la malla utilizada es la misma que para los casos inertes evaporativos.

- Estudio de la temperatura ambiental. En estos casos se ha estudiado cómo afecta la variación de la temperatura del gas ambiente. Se han estudiado tres temperaturas: 750K, 800K y 850K.
- Estudio de la presión de inyección. En estas simulaciones se ha estudiado el efecto que tiene la variación de la presión de inyección, siendo las presiones analizadas de 50Mpa y 100Mpa.
- Estudio de la densidad del gas ambiental. Se han analizado las densidades de  $7.6\text{kg/m}^3$  y  $15.2\text{kg/m}^3$ .
- Estudio del porcentaje de oxígeno en el ambiente. En estos casos se han estudiado la presencia de 13% y 21% de  $O_2$  en el ambiente.

Los estudios se pueden resumir en la siguiente tabla.

T <sup>a</sup> ambiente [K]	Densidad ambiente [kg/m <sup>3</sup> ]	Presión ambiente [Mpa]	Presión de inyección [Mpa]	%O <sub>2</sub>
<b>750</b>	22.8	4.969	150	15
<b>800</b>	22.8	5.3	150	15
<b>850</b>	22.8	5.63	150	15
900	<b>7.6</b>	1.98	150	15
900	<b>15.2</b>	3.97	150	15
900	22.8	5.96	<b>50</b>	15
900	22.8	5.96	<b>100</b>	15
900	22.8	5.97	150	<b>13</b>
900	22.8	5.91	150	<b>21</b>

Tabla 4.4. Tabla resumen de los estudios paramétricos reactivos

Estos casos han sido comparados con un caso establecido como referencia, cuyas condiciones son :

T <sup>a</sup> amb. [K]	Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]	Pinyección [Mpa]	%O <sub>2</sub> [-]
900	22.8	150	15

Tabla 4.5. Propiedades del caso base reactivo

## 4.3 Análisis del Spray A en ambiente Inerte

### 4.3.1 Ambiente inerte no evaporativo

En los casos inertes no evaporativos no se produce la evaporación del combustible líquido a gas. Se trata de casos más sencillos que son de gran utilidad para realizar validaciones del modelo.

Como se ha explicado en la introducción del presente capítulo, la malla 2D axisimétrica utilizada en estas simulaciones corresponde con un dominio de 80mm de longitud axial y de 25mm de longitud radial.



En algunas situaciones es necesario especificar valores apropiados a la turbulencia en las condiciones de contorno donde se produce la entrada del flujo, estos son, entre otros, la intensidad turbulenta ( $I_t$ ) y la escala de longitud turbulenta ( $L_t$ ).

La intensidad turbulenta se define como el ratio entre la raíz cuadrada media (RMS, Root Mean Square) de las fluctuaciones de la velocidad,  $u'$ , y la velocidad media del flujo,  $u_{avg}$ . Generalmente, se considera que una intensidad turbulenta del 1% o menor es muy baja y por el contrario, un valor de 10% o mayor se considera elevado.

Por otra parte, la escala de longitud turbulenta es una magnitud física, que está relacionada con el tamaño de los remolinos más grandes que contienen la energía en un flujo turbulento. La longitud máxima de la escala está delimitada por la longitud característica del dominio, en este caso el diámetro del inyector.

En estos casos, el estudio se ha centrado en la calibración de estos parámetros de la turbulencia, considerando como caso de partida  $I_t=5\%$  y  $L_t=10\%$ , y siendo la configuración general de los casos la que se establece en la Tabla 4.2.

Los estudios paramétricos de intensidad turbulenta y longitud turbulenta se resumen en la siguiente tabla.

Caso	Intensidad turbulenta	Longitud turbulenta
<b>BASE</b>	<b>5%</b>	<b>10%</b>
<b>Caso 1</b>	1%	10%
<b>Caso 2</b>	2.5%	10%
<b>Caso 3</b>	5%	5%
<b>Caso 4</b>	5%	20%

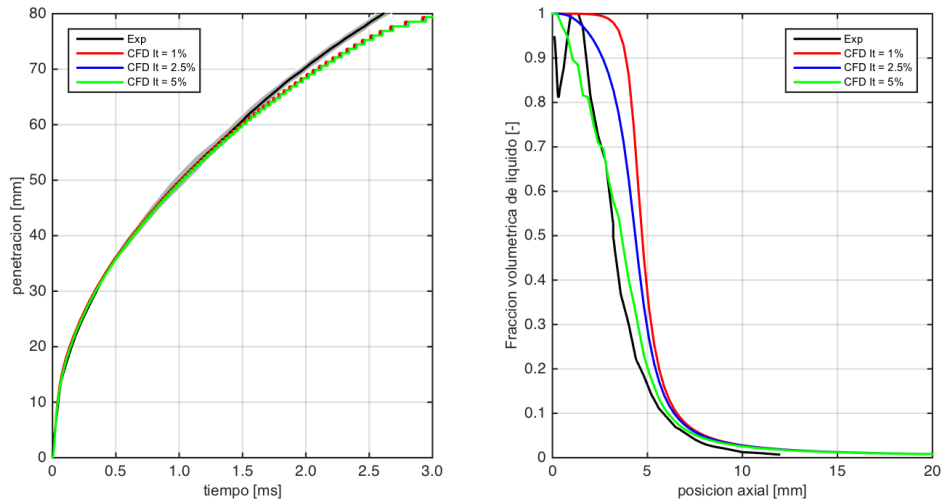
*Tabla 4.6. Resumen casos analizados en ambiente inerte no evaporativo*

Como se puede observar en la Tabla 4.6, se han realizado dos estudios paramétricos, uno variando la intensidad turbulenta y otro variando la escala de longitud turbulenta, con respecto al caso base, para así ver el efecto que tienen ambas magnitudes.

Los resultados que se han obtenido han sido penetración, fracción volumétrica de líquido (también llamada de forma abreviada LVF, de “Liquid Volume Fraction”), viscosidad turbulenta y escala integral. En este caso no hay longitud líquida puesto que

el chorro no ha llegado a evaporar, por lo que no tiene sentido medir una longitud líquida cuando todo es líquido.

En el caso del estudio paramétrico de intensidad turbulenta, se comparan la penetración y la fracción volumétrica de líquido entre todos los casos y los resultados experimentales.



**Fig. 4.2. Comparación de penetración (izquierda) y LVF (derecha) en el estudio paramétrico de  $I_t$**

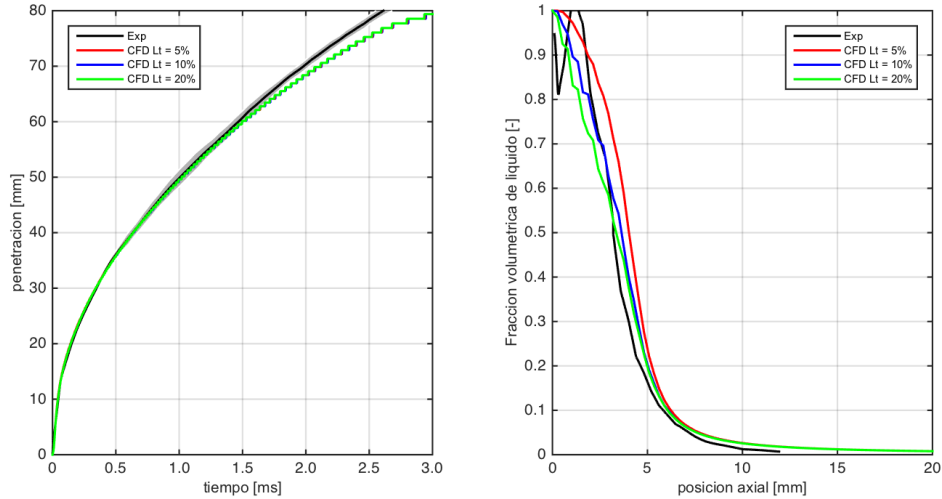
Se puede observar en la Figura 4.2 (izquierda) que, en cuanto a los resultados de penetración, la variación de la intensidad turbulenta no tiene un gran efecto en este parámetro y que, a su vez, hay una gran precisión en los datos obtenidos con el modelo CFD comparados con los experimentales, especialmente durante los primeros 2ms. Después de este instante, el hecho de estar alcanzando el final del dominio de cálculo puede comenzar a tener algún efecto sobre los resultados.

Sin embargo, donde se aprecian las mayores diferencias es en la fracción volumétrica de líquido. El caso del 2.5% de  $I_t$  reproduce con más o menos exactitud la zona inicial del chorro con respecto a los datos experimentales, desviándose de éstos conforme avanza. El caso del 5% es el que mejor reproduce la tendencia experimental, tanto la zona intermedia como la inicial. En cuanto al caso del 1% se puede ver que no es un parámetro turbulento adecuado puesto que las discrepancias con el caso experimental son importantes y, como se ha explicado antes, una intensidad turbulenta de 1% es demasiado baja.

Se puede observar que la LVF (Figura 4.2 dcha.) sigue una tendencia definida, conforme se va incrementando el valor de la intensidad turbulenta las curvas van

decreciendo más rápidamente. Analizar casos con  $I_t$  mayores no merecería la pena, puesto que la tendencia es clara y los cálculos serían más inestables.

En cuanto al estudio de la longitud turbulenta, los resultados de penetración y LVF se muestran en la siguiente figura.



**Fig. 4.3.** Comparación de penetración (izquierda) y LVF (derecha) en el estudio paramétrico de  $L_t$

Al igual que en el estudio paramétrico de la intensidad turbulenta, la variación de la longitud turbulenta no tiene un gran efecto sobre la penetración del chorro (Figura 4.3 izquierda), notándose mayores diferencias en la fracción volumétrica de líquido (derecha).

Se puede ver que la LVF en el caso de  $L_t=5\%$  reproduce la parte inicial del chorro, creciendo las discrepancias con respecto al resultado experimental conforme avanza. El caso del 20% se queda por debajo en la zona inicial del chorro y reproduce bastante bien la zona intermedia/final de éste, pero un valor de  $L_t$  del 20% se puede considerar como muy elevado. En cuanto al caso con  $L_t=10\%$ , es un caso intermedio a los mencionados, que se asemeja al experimental en la zona inicial y reproduce la tendencia de la zona intermedia y final del chorro.

Además, la tendencia de las curvas de LVF conforme se usa un valor de  $L_t$  mayor es igual a la que surge conforme se utiliza un valor mayor de  $I_t$ , es decir las curvas van desplazándose aguas abajo y siendo cada vez más inestables. Al usar una longitud turbulenta más elevada, el proceso de mezcla también es más rápido, y por ello la LVF decrece más rápido.

Por último, un detalle que se observa también es que la variación de la longitud turbulenta tiene un efecto menor que la variación de la intensidad turbulenta. Por lo que éste último, se puede decir, que es un parámetro que tiene más incidencia en los cálculos a la hora de seleccionarlo.

Otros dos parámetros que se han analizado para completar el estudio de intensidad y longitud turbulenta (Figuras 4.4 y 4.5) y así llegar a una conclusión clara, han sido la viscosidad turbulenta y la escala integral.

La viscosidad cinemática turbulenta se calcula haciendo uso del modelo de turbulencia utilizado, y no se trata de una característica del fluido, sino que depende de las características del flujo que se investiga. Matemáticamente se puede calcular siguiendo la Ecuación 4.1.

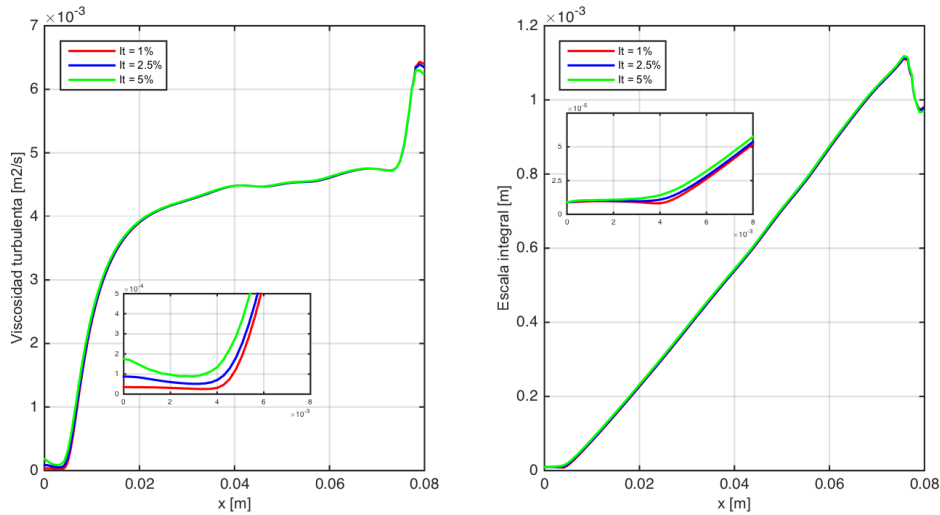
$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{Ec. 4.1}$$

En cuanto a la escala integral se ha calculado mediante la siguiente expresión:

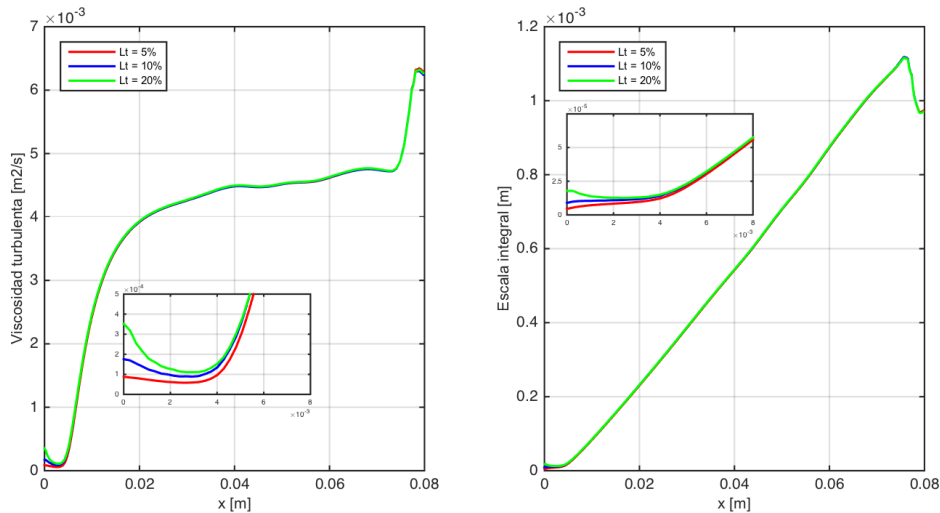
$$\ell = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad \text{Ec. 4.2}$$

Siendo  $C_\mu$  en las Ecuaciones 4.1 y 4.2 la constante empírica especificada en el modelo de turbulencia que toma el valor de 0.09.

Los resultados para ambos estudios paramétricos se muestran en las Figuras 4.4. y 4.5.



**Fig. 4.4. Resultados de viscosidad turbulenta (izquierda) y escala integral (derecha) en el estudio de  $I_t$  en  $t=3ms$**



**Fig. 4.5. Resultados de viscosidad turbulenta (izquierda) y escala integral (derecha) en el estudio de  $L_t$  en  $t=3ms$**

En cuanto a la viscosidad turbulenta (Figuras 4.4 y 4.5 izquierda), las diferencias se dan al comienzo de la curva, es decir al inicio del chorro, en el área cercana a la tobera de inyección, y conforme va avanzando éstas desaparecen. En estas figuras también se ha creado una sub-figura que representa un zoom de esta zona inicial, donde se aprecia que en los casos con los valores más elevados asignados de intensidad y longitud turbulenta, 5% y 20% respectivamente, el valor de  $\nu_t$  al principio del chorro es mayor, lo que afecta al proceso de mezcla entre aire y combustible.

Aumentar la viscosidad turbulenta hace que el proceso de mezcla sea más rápido, lo que explica que la fracción volumétrica de líquido caiga antes, tal y como se muestra en las Figuras 4.2 y 4.3 (dcha.).

Con respecto a la escala integral (Figuras 4.4 y 4.5 derecha), las mayores diferencias también surgen en el inicio del chorro, pero estas diferencias son menores que en el caso de la viscosidad turbulenta. El máximo que se observa al final de las gráficas, se debe a que el chorro ha llegado a su penetración máxima en ese tiempo dado, que en las figuras 4.4 y 4.5 es 3ms, por lo que a partir de ahí ya no existe chorro, por lo que la escala integral del ambiente es menor.

Como conclusión a este estudio de calibración de los parámetros de la turbulencia se puede decir que, si se seleccionan los valores adecuados, los resultados sucesivos a lo largo del trabajo serán independientes del nivel de turbulencia y por ello se ha escogido para las siguientes simulaciones un 5% de intensidad turbulenta y 10% de longitud turbulenta, puesto que, aparte de proporcionar unos mejores resultados como se ha visto anteriormente, también han sido los parámetros seleccionados previamente por otros autores en sus estudios [10].

### 4.3.2 Ambiente inerte evaporativo

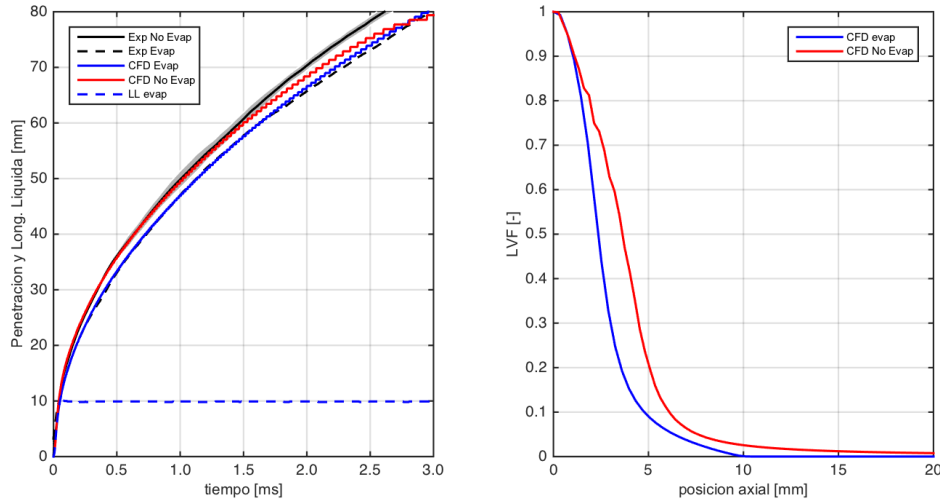
Tras la calibración de los parámetros de turbulencia con casos inertes no evaporativos, se pasa a la validación de un caso con evaporación.

La malla utilizada para este cálculo es de 108mm de longitud en la dirección axial del chorro, como se ha comentado en la Introducción y la configuración del caso es la mostrada en la Tabla 4.7.

$T^a$ amb. [K]	$T^a$ combustible [K]	Densidad amb. [kg/m <sup>3</sup> ]	P amb. [Mpa]	P inyección [Mpa]	%O <sub>2</sub> [-]
900	363	22.8	6	150	0

Tabla 4.7. Configuración caso base en condiciones inertes con evaporación

El análisis del caso inerte evaporativo se ha enfocado a compararlo con el caso inerte sin evaporación, para estudiar el efecto que tiene dicha evaporación en las características del chorro Diesel. Se tiene que tener en cuenta, a la hora de obtener los resultados y comparar, que en condiciones con evaporación se tendrá combustible en estado líquido, combustible en estado vapor y el gas ambiental, y que en el caso no evaporativo sólo se tiene gas del ambiente y combustible en estado líquido.



**Fig. 4.6. Comparación de penetración (izquierda) y LVF (derecha) entre caso no evaporativo y con evaporación  $t=2.5ms$**

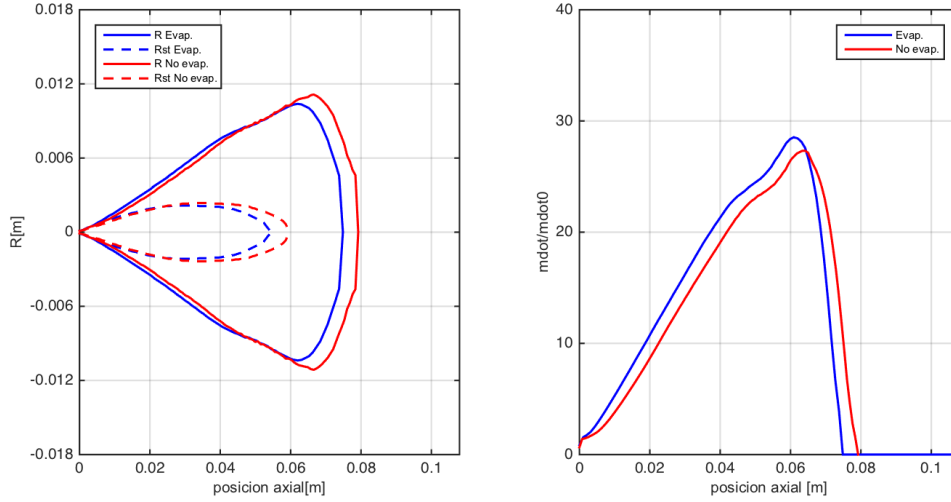
En la figura 4.6 se hace una comparación de la penetración (izquierda) y LVF (derecha) entre el modelo evaporativo (en azul) y no evaporativo (en rojo), y sus respectivos datos experimentales, así como de la predicción de la longitud líquida del caso evaporativo. Como se puede observar la penetración del chorro obtenida con el modelo evaporativo en CFD tiene una gran precisión si se compara con los datos experimentales.

Comparando entre caso evaporativo y no evaporativo, se puede ver que la penetración del primero queda por debajo de la del caso isoterma, es decir, el caso evaporativo penetra más lentamente que el caso evaporativo. Según estudios realizados [11], la evaporación puede llegar a reducir la penetración un 20% en relación a casos no evaporativos.

Una razón por la que la penetración es mayor al no haber evaporación es debido a que la densidad local es más baja, por lo que el chorro penetra más rápido, en cambio, cuando hay evaporación se produce un enfriamiento de los gases calientes que entran debido al propio proceso de evaporación, lo que provoca que la densidad local aumente y con ello que la penetración disminuya. En el Capítulo 2, ya se explicó que la penetración es inversamente proporcional a la densidad del ambiente.

En cuanto a la fracción volumétrica de líquido (Figura 4.6 derecha), se puede apreciar que, en el caso con evaporación, ésta cae mucho más rápido que en el caso sin evaporación. Esto se debe a que, al evaporarse, el líquido desaparece mucho antes.

Otros resultados que se pueden comparar para completar este estudio es el radio del chorro, entendido como el 1% de la fracción de mezcla en el eje, el radio correspondiente a la composición estequiométrica considerando un ambiente con 21% de  $O_2$  (Figura 4.7 izquierda) y el englobamiento (Figura 4.7 derecha).



**Fig. 4.7.** Comparación evaporativo y no evaporativo del radio del 1% de fracción de mezcla en el eje, radio estequiométrico (izquierda) y englobamiento (derecha) en  $t=2.5ms$

En cuanto al radio, se puede ver que el chorro con evaporación es más ancho en la zona estacionaria que el no evaporativo, de acuerdo con los resultados de penetración. La penetración y el ángulo de salida del chorro están muy relacionados con el englobamiento, presentando el chorro no evaporativo un englobamiento ligeramente menor que el caso con evaporación, lo que explica que tenga una mayor penetración y que sea un chorro más estrecho.

El chorro evaporativo intercambia momento con el aire de alrededor más rápidamente, lo que hace que englobe más y mezcle más rápido que el caso no evaporativo. Este hecho se debe a que la densidad en el caso evaporativo del combustible en estado vapor y del gas del ambiente son más similares entre ellas, en cambio, la diferencia de densidad en el caso no evaporativo es más elevada, debido a la presencia de combustible sólo en estado líquido, lo cual hace el proceso de mezcla más lento.

## 4.4 Análisis de Spray A en condiciones reactivas

### 4.4.1 Introducción

Tras haber comprobado la calidad de los resultados obtenidos con el modelo en los casos inertes y habiendo escogido los parámetros de turbulencia más adecuados para



los cálculos, se puede comenzar con el estudio de la inyección del chorro en ambiente reactivo con el modelo de atomización  $\Sigma$ -Y combinado con un modelo de combustión.

El ambiente en la cámara, que en los casos inertes estaba compuesto sólo por Nitrógeno, ahora contendrá, además, Oxígeno. El dominio de cálculo es el presentado en la Figura 4.1 y se ha utilizado la misma malla que en el caso inerte evaporativo, es decir, de 108mm de longitud axial.

Se comenzará con el análisis del caso base reactivo y la discusión de los resultados obtenidos para estas condiciones. Una vez visto el comportamiento para el caso base, se procederá a realizar el estudio paramétrico que incluye diferentes condiciones de temperatura ambiente, presión de inyección, densidad ambiente y porcentaje de oxígeno, tal y como se ha explicado más detalladamente en la Introducción del presente capítulo.

En cuanto a los resultados obtenidos en todos los casos de estudio, se ha analizado la penetración, la distancia de Lift-Off (LOL) y el tiempo de retraso, todos ellos definidos en el Capítulo 2.

La distancia de Lift-Off ha sido calculada siguiendo diferentes criterios, propuestos diversos autores, [6] , en un tiempo suficiente para que la llama esté estabilizada, se suele tomar el promedio entre 2.5ms y 4ms.

- ❖ **Método del 2% del máximo de OH.** Se obtiene el LOL como la distancia desde el orificio de salida del inyector hasta el punto donde se tiene una concentración del 2% del máximo de la fracción másica OH.
- ❖ **Método del 14% del máximo de OH.** Este método es igual al anterior con la salvedad de que se busca el punto con 14% del máximo de la fracción másica de OH.
- ❖ **Método  $T+400K$ .** Con este método se calcula el LOL como la distancia desde la salida del inyector hasta el punto dónde el chorro alcanza una temperatura igual a la del gas ambiente sumándole 400K.

Los datos experimentales que se tienen de LOL para cada caso, proporcionados por la ECN, han sido obtenidos midiendo la quimioluminiscencia del OH, determinando que el LOL es la distancia desde el orificio del inyector hasta donde se alcanza aproximadamente el 50% del valor de nivelación correspondiente.

El tiempo de retraso también se ha calculado con dos métodos diferentes:

- ❖  **$T+400K$** . Se calcula el tiempo de retraso como el tiempo que transcurre entre que el chorro es inyectado y la temperatura máxima alcanza un valor igual temperatura ambiental más 400K.
- ❖ **Método de la derivada máxima de la temperatura máxima**. Este método calcula el tiempo de retraso como el tiempo transcurrido desde que el chorro sale del inyector hasta que la derivada de la temperatura máxima con respecto al tiempo alcanza su máximo.

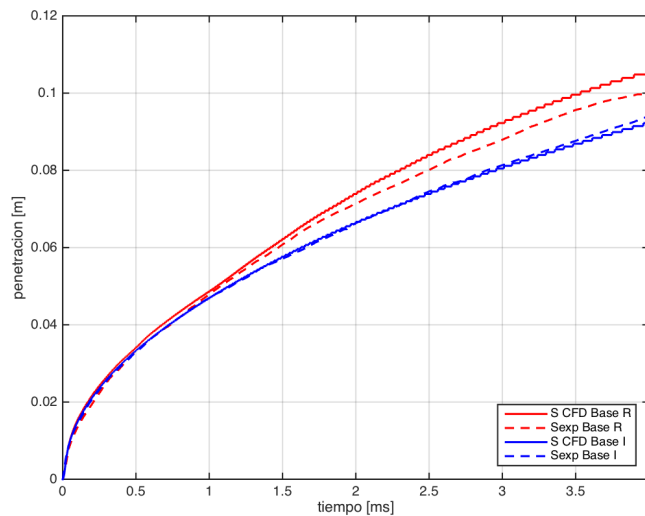
En cuanto a los resultados experimentales que se han utilizado de la ECN para comparar con los tiempos de retraso obtenidos con el modelo CFD, en el Capítulo 2 aparece una descripción detallada del proceso seguido.

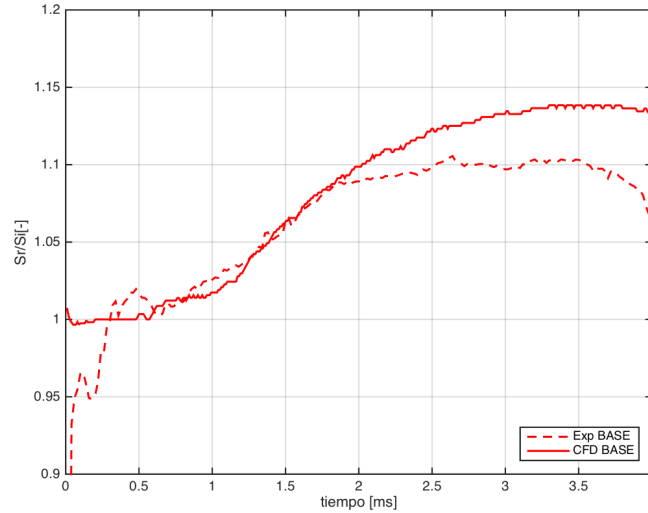
## 4.4.2 Estudio del caso de referencia

Las condiciones establecidas para el caso que sirve como base para comparar los resultados de los estudios paramétricos se muestran en la Tabla 4.5.

En primer lugar se ha analizado la evolución de la penetración del vapor del chorro con respecto al tiempo, tanto para las condiciones inertes como reactivas (Figura 4.8 superior), así como el ratio entre ambas penetraciones (inferior).

La penetración en el caso reactivo es mayor, debido a que al producirse la reacción de combustión hay una mayor liberación de calor, lo que provoca que la densidad disminuya y por ello la penetración es más elevada que en el caso inerte.





**Fig. 4.8. Penetración (superior) y ratio de penetración (inferior) entre caso inerte y reactivo**

Por otra parte, comparando con los datos experimentales que se tienen, se puede ver que la penetración del spray inerte predicha por el modelo encaja perfectamente con las medidas experimentales, sin embargo, en el caso reactivo, el modelo es capaz de reproducir la tendencia, pero, después del proceso de autoignición, la penetración está ligeramente sobreestimada con respecto a los valores experimentales.

Además se ha obtenido el ratio de penetraciones (Figura 4.8 inferior), tanto para las predicciones del modelo como para las medidas experimentales. En este último caso, se observa que en la zona no reactiva del chorro el ratio debería ser uno, puesto que es una zona donde aún no ha tenido lugar la reacción de combustión y, por tanto, debería comportarse como si fuese inerte. Sin embargo, no es así, se dan valores menores a la unidad, lo cual puede deberse a la influencia de los valores tan pequeños que tiene en esta zona la penetración.

En el caso de los resultados con el modelo CFD, sí que se cumple esta condición. Hasta la zona cercana al punto donde se produce la combustión, el ratio entre inerte y reactivo es igual a la unidad.

En la Figura 4.9 se muestran los contornos del campo de temperatura, con la distancia de LOL experimental (representada como un línea blanca) y los valores predichos por los tres criterios (representados con diferentes símbolos).

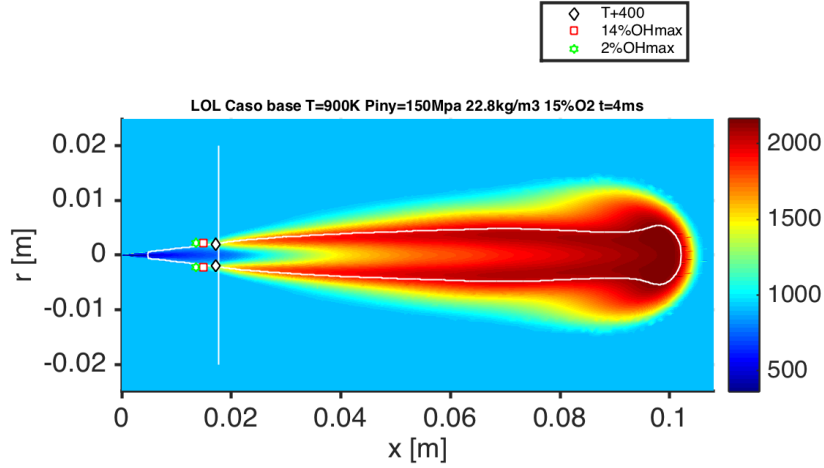


Fig. 4.9 Distancia de Lift-Off experimental y obtenida con los métodos para el caso base reactivo

El criterio del 14% del máximo de la fracción másica de OH predice una distancia de LOL que es bastante cercana a la medida experimental, siendo el LOL del criterio  $T^a+400K$  el más preciso y el caso del 2% del máximo de OH el que más discrepancias presenta.

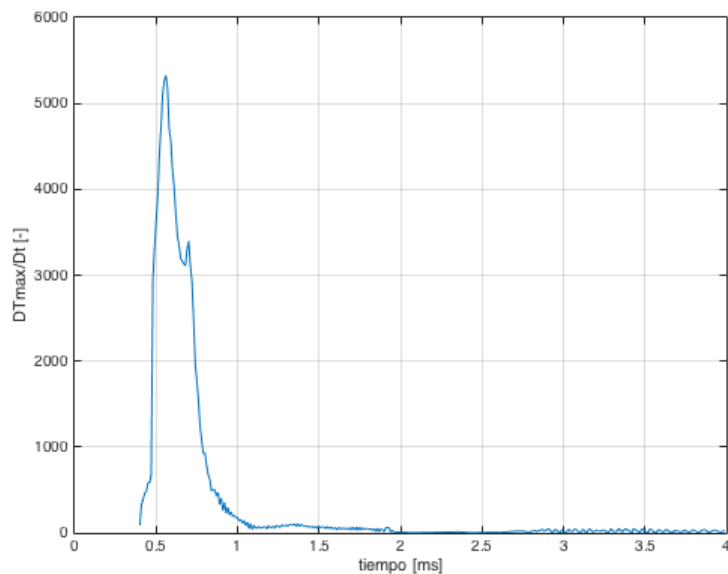
El caso de  $T^a+400K$  parece que es el criterio que mayor precisión en los resultados de LOL presentará, pero se comprobará cuando se realice es estudio paramétrico de las diferentes condiciones ambientales.

En cuanto al tiempo de retraso, los resultados obtenidos se muestran resumidos en la Tabla 4.8.

Criterio	Tiempo de retraso [ms]
Experimental	0.435
$T^a+400K$	0.5659
$\frac{DTmax}{Dt}$	0.56

Tabla 4.8. Resultados de tiempo de retraso para el caso base reactivo, experimental y con los diferentes criterios

La derivada de la temperatura máxima tiene la forma mostrada en la Figura 4.10, donde el tiempo de retraso se toma como el tiempo en el que esta derivada alcanza su máximo, es decir, en el primer pico que aparece.



*Fig. 4.10. Derivada de la temperatura máxima respecto al tiempo (caso Base reactivo)*

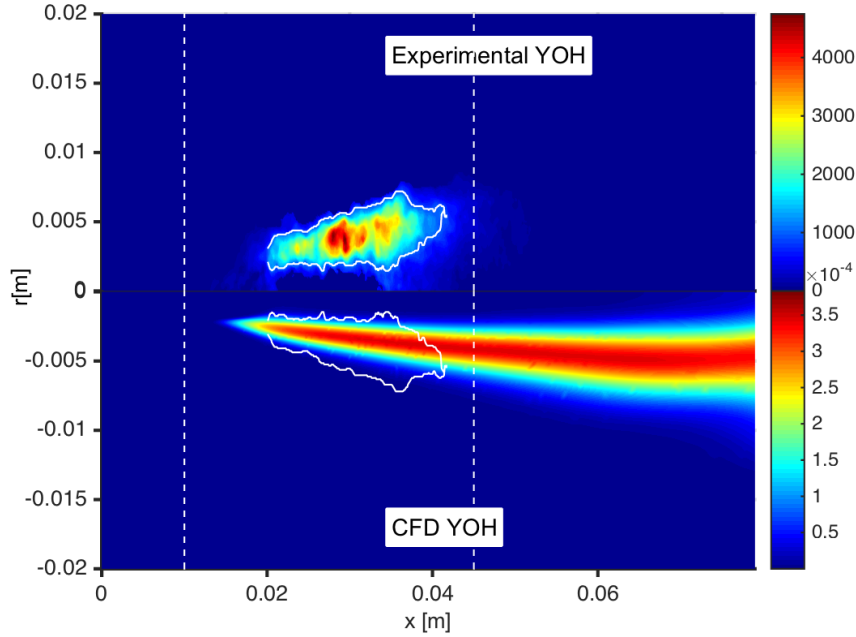
Se puede ver en la Tabla 4.8 que hay discrepancias entre el tiempo de retraso experimental y el predicho por el modelo utilizando los dos criterios, obteniendo valores más altos en el caso de la simulación. Comparando entre ambos criterios, se observa que los valores de tiempo de retraso son muy similares, sin embargo, la efectividad de cada uno de ellos también se comprobará cuando se realicen los sucesivos estudios paramétricos.

Para el caso de referencia se han obtenido resultados adicionales, puesto que existen más medidas experimentales y, así, tener un estudio más completo del mismo. Estos resultados son los campos de la fracción másica de OH y formaldehído, que se comparan con los datos experimentales proporcionados por el Laboratorio IFPEN (Instituto Francés del Petróleo y Nuevas Energías), el cual forma parte de la ECN (Figuras 4.11 y 4.12).

Estas dos especies, OH y  $CH_2O$ , son interesantes puesto que están relacionadas con las reacciones de alta y baja temperatura en un chorro reactivo, respectivamente, y ayudan a entender los principales procesos que gobiernan la combustión. El OH, por ejemplo, se puede utilizar como un marcador del frente de llama.

Los datos experimentales de OH de IFPEN se han obtenido basándose en la quimioluminiscencia del OH en estado excitado,  $OH^*$ , haciendo uso de una cámara CCD intensificada, y PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence) del OH en estado fundamental, con una lámina láser de 18mm x 0.5mm y un tiempo de exposición de 50ns, [12].

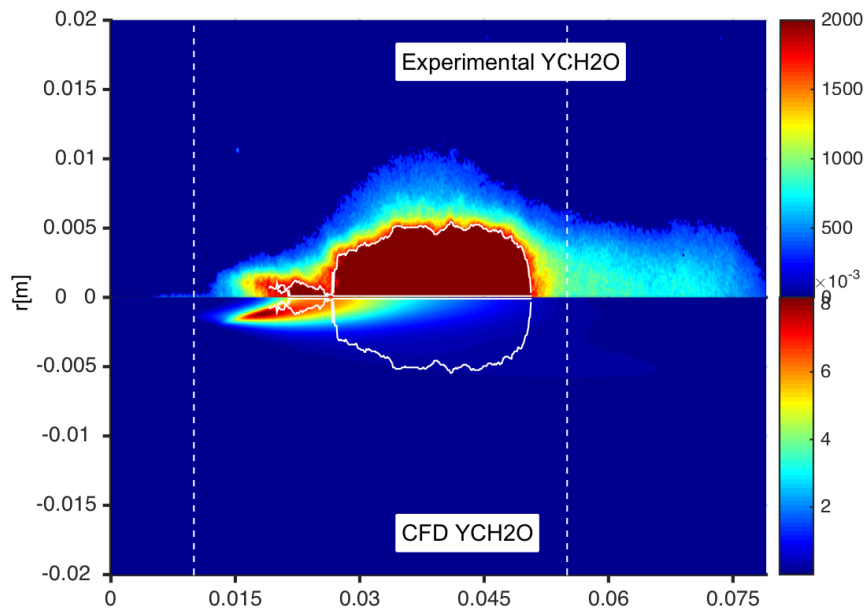
En la figura 4.10 se representa la comparación entre los datos experimentales (parte superior) y los obtenidos en CFD del campo de fracción másica de OH, donde las líneas discontinuas blancas representan el ancho de la lámina láser de PLIF para el OH y el contorno continuo blanco representa la isolínea del 20% de la máxima concentración de OH experimental.



*Fig. 4.11. Comparación del campo experimental de fracción másica de OH (parte superior) y el obtenido con el modelo CFD (parte inferior)*

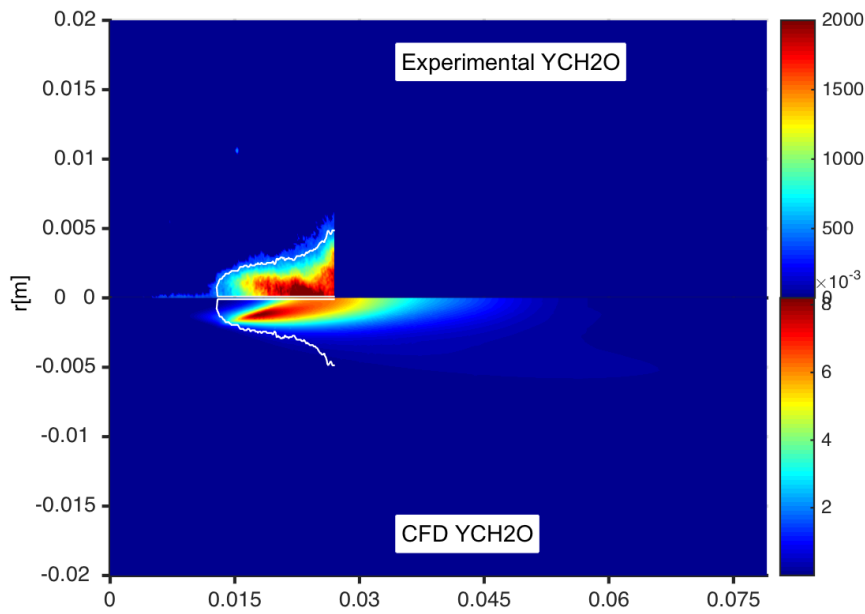
Comparando ambos resultados, se puede ver que el inicio de la medida del OH en el modelo CFD comienza antes que los datos experimentales, esto se puede deber a que en el experimento, el OH se excita con una cierta frecuencia, a la cual puede que no se haya captado nada en esa zona inicial. Por otra parte, la zona de alta concentración de OH predicha con CFD se corresponde de forma precisa con la misma zona experimental, además en ambos aparece en la zona central del área creada por la isolínea.

En cuanto a los datos experimentales del formaldehído, relacionados con las reacciones químicas de baja temperatura, se han obtenido, también, con PLIF, con una lámina láser de 45mm x 0.5mm a 100mJ/pulso, haciendo uso de un cámara CCD intensificada y una combinación de diferentes filtros y lentes, [12].



*Fig. 4.12. Comparación del campo experimental de formaldehído (parte superior) y el obtenido con CFD (parte inferior)*

En la Figura 4.12, como en la del OH, las líneas discontinuas representan la lámina láser de PLIF para el formaldehído y la línea continua representa la isolínea del 20% del máximo de formaldehído. En el campo experimental (parte superior de la figura) no todo es formaldehído, éste se ve afectado por otras especies, como pueden ser hidrocarburos poli-aromáticos (PAH), precursores del hollín. Por este motivo se ha decidido representar, en otra figura, la parte que se considera correspondiente al formaldehído, esto es, la cola que aparece en la parte izquierda del campo experimental (Figura 4.13).



*Fig. 4.13. Comparación campo experimental de formaldehído (parte superior) y el obtenido con el modelo CFD (parte inferior)*

Como se puede ver ahora más claramente, el campo de formaldehído obtenido con CFD reproduce con precisión la zona de alta concentración y el área donde se encuentra en comparación con los datos experimentales.

La parte restante del campo experimental de formaldehído se ha comparado con el campo de acetileno obtenido con CFD (Figura 4.14), puesto que éste es también un precursor del hollín, pero en este caso, al no ser las mismas especies, las discrepancias entre las áreas donde se sitúan son mayores.



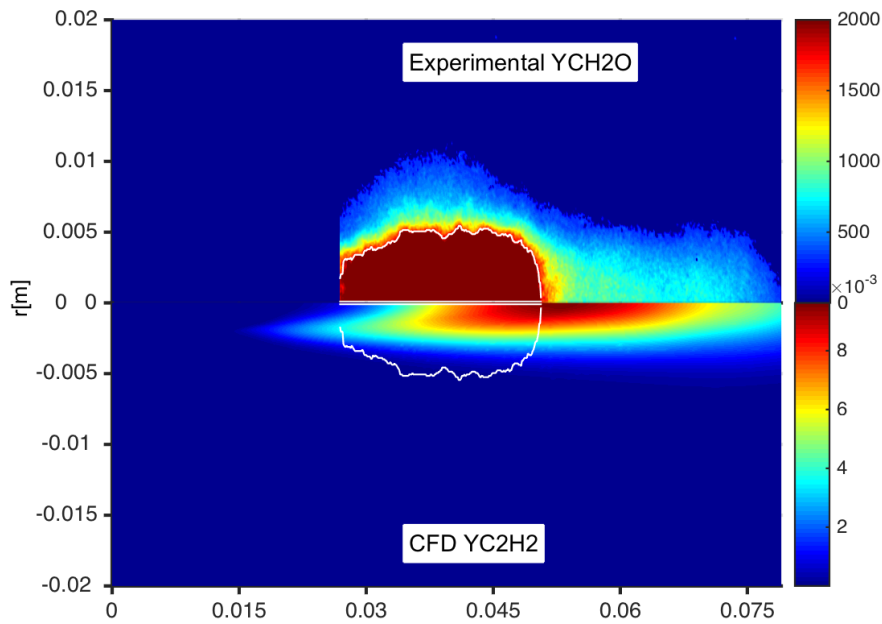


Fig. 4.14. Comparación del campo experimental de formaldehído correspondiente a PAH (superior) y el campo de acetileno obtenido en CFD

### 4.4.3 Estudio paramétrico de temperatura

Tras el estudio más profundo del caso base reactivo para tener una idea general del comportamiento del modelo, se realizan cuatro estudios paramétricos.

El estudio paramétrico de temperatura se ha basado en el análisis de tres casos con tres temperaturas del gas ambiental diferentes: 750K, 800K y 850K, para ver el efecto de ésta en las características del chorro reactivo, además de incluir el caso base.

Como ya se explicó en el Capítulo 2, en Metodología en OpenFoam, los cambios en los casos se han de realizar en la Carpeta “0”, en los ficheros de temperatura y presión.

Lo primero que se compara es la evolución de la penetración del chorro con el tiempo para los diferentes casos de temperatura ambiental, Figura 4.15. En la parte inicial del chorro se ve que la temperatura del ambiente no afecta pues ésta es una parte inerte en todos los casos, donde no ha tenido lugar aún la combustión, y la densidad del ambiente se mantiene constante.

Es a partir del proceso de autoencendido donde la penetración para las diferentes condiciones de temperatura comienza a diferenciarse. Los casos con una temperatura menor, como son 750K y 800K, son menos reactivos, con lo que la densidad del ambiente es mayor y por ello tienen una penetración menor que los casos con temperaturas más elevadas, esto es 850K y 900K.

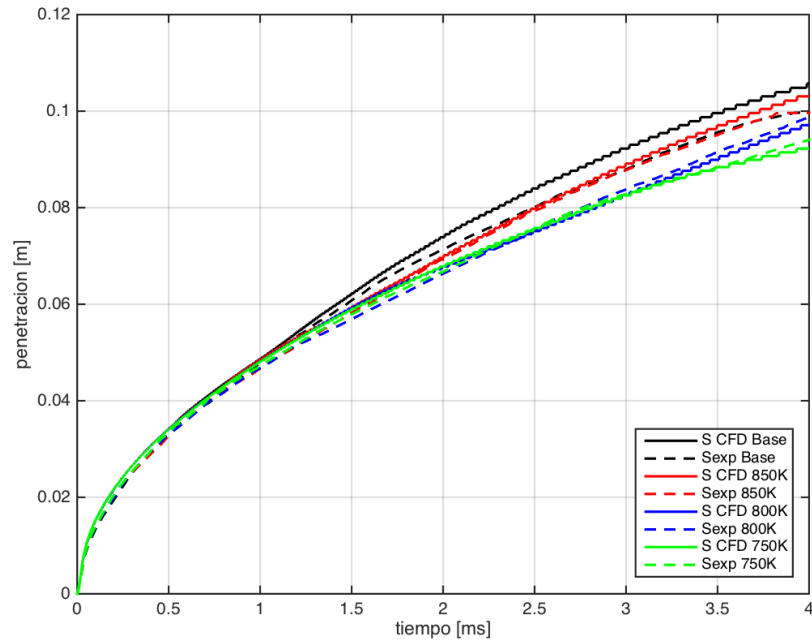
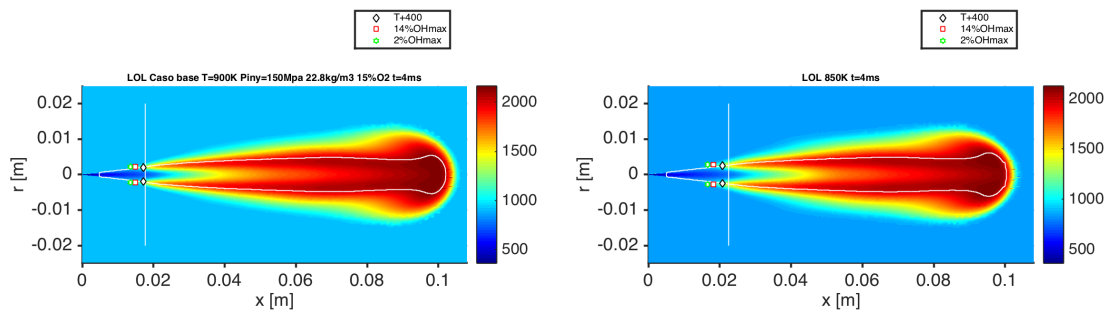


Fig. 4.15. Comparación de penetración para diferentes temperaturas ambientales

En cuanto a la distancia de Lift-Off, en Figura 4.16 se muestran los casos estudiados utilizando los diferentes criterios presentados. En las cuatro primeras imágenes se muestran los campos de temperatura media en la que se representan los diferentes métodos mediante símbolos y la medida experimental se muestra por medio de la línea vertical blanca. La última imagen de la Figura 4.16 es una comparación de las medidas de LOL estimadas por los criterios, comparadas con la experimental.



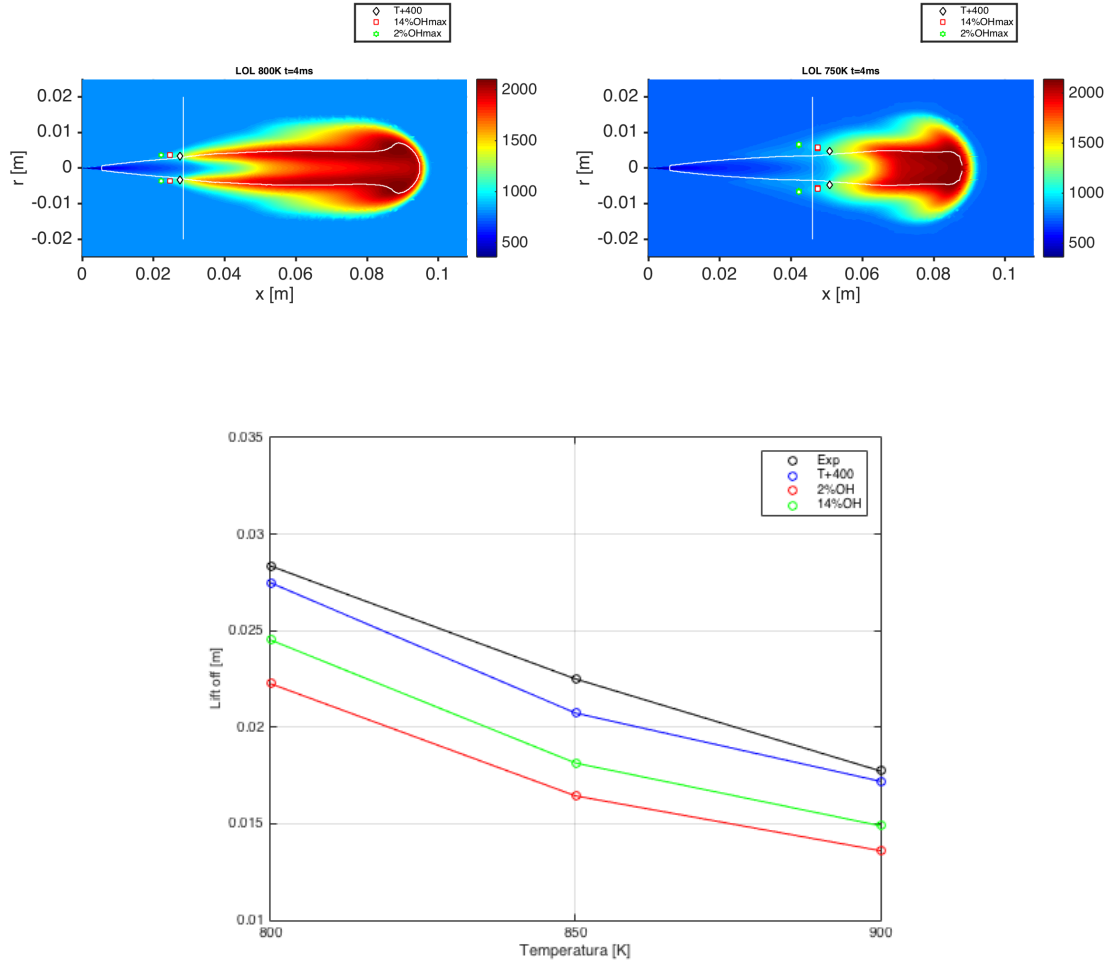


Fig. 4.16. Distancia de Lift-Off en el estudio paramétrico de temperatura. Caso base (superior izq.), 850K (superior dcha.), 800K (inferior izq.), 750K (inferior dcha) y gráfica comparativa (inferior)

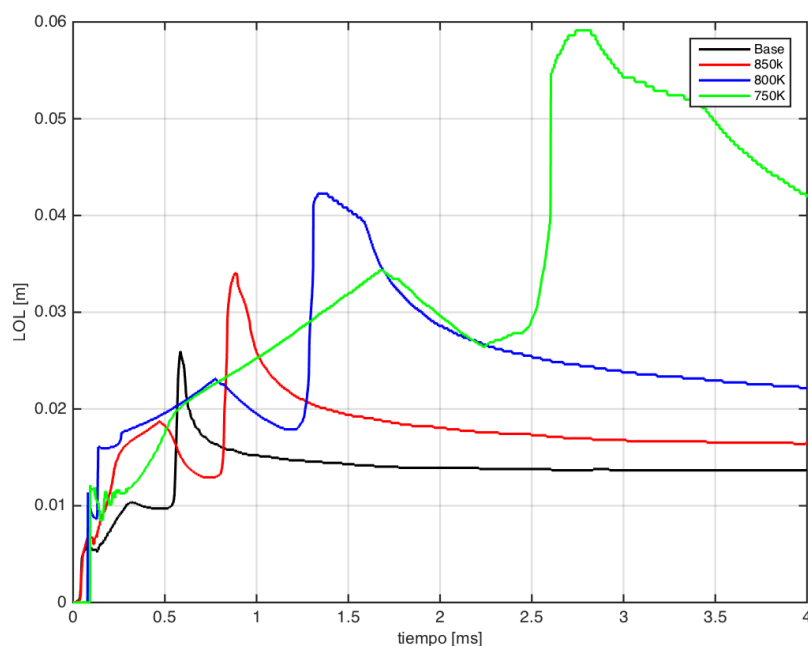
Se puede comprobar que conforme la temperatura del ambiente decrece, la distancia de Lift-Off aumenta, puesto que la reactividad disminuye y por ello la mezcla encenderá más tarde.

En estas imágenes también se puede comprobar que la penetración del chorro disminuye conforme la temperatura ambiental es menor, puesto que todas ellas han sido obtenidas en el mismo tiempo tras el comienzo de la inyección (4ms).

Por otra parte, se corrobora que el método de  $T^a+400\text{K}$  para calcular el LOL en el modelo CFD es el que mejores resultados proporciona en comparación con el experimental (lo cual también se observa en la gráfica comparativa de la Figura 4.16 inferior), salvo en el caso de 750K. Éste es un caso especial puesto que es el menos

reactivo de todos, lo que hace que necesite tiempos más largos hasta llegar al encendido. El análisis que se ha realizado en este proyecto llega hasta un tiempo de 4ms tras el comienzo de la inyección, el cual no es suficiente para que este caso consiga tener una llama estabilizada y por ello existen mayores discrepancias entre el LOL obtenido para el CFD y el experimental.

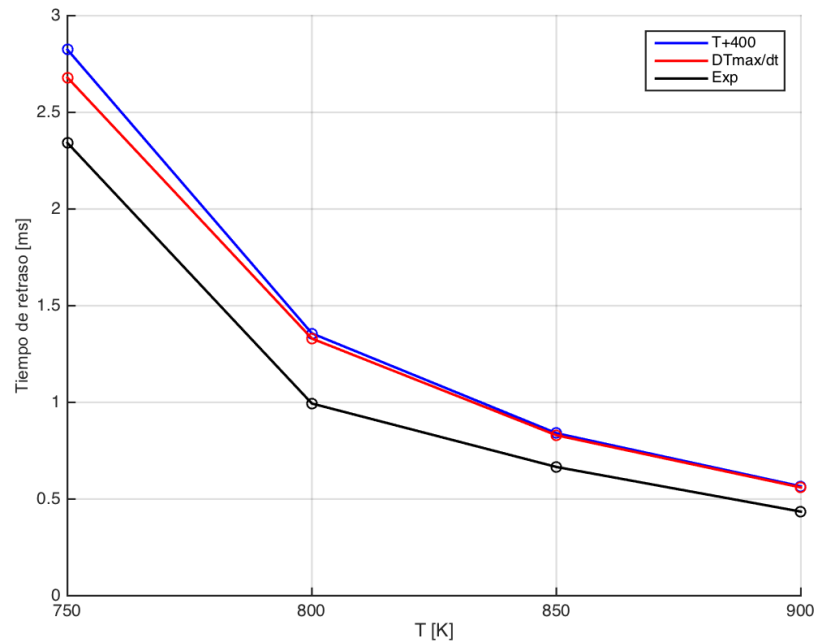
Este último hecho se puede comprobar si se muestra la evolución de la distancia de LOL con respecto al tiempo para cada caso, Figura 4.17. Se puede ver que el caso de 750K (verde) no consigue estabilizarse como el resto de casos, no ha convergido totalmente el LOL.



*Fig. 4.17. LOL según el criterio del 2% del máximo de composición de OH respecto al tiempo en el estudio de temperaturas*

Con respecto al tiempo de retraso, se ha hecho una comparativa, en forma de gráfica, de los resultados obtenidos con los diferentes criterios para cada caso, como se muestra en la Figura 4.18.

Como era de esperar, el tiempo de retraso más elevado se da para el caso menos reactivo, el de 750K, y conforme la temperatura ambiental va aumentando, las condiciones son más reactivas, y el tiempo de retraso va disminuyendo, es decir, la combustión tiene lugar antes.



*Fig. 4.18. Tiempo de retraso en el estudio de temperaturas según el criterio de  $T^{\alpha}+400$  (azul), de la derivada máxima de la temperatura (rojo) y datos experimentales (negro)*

Otro detalle que se puede observar en la Figura 4.18, es que los diferentes criterios utilizados para obtener el tiempo de retraso de las simulaciones CFD obtienen resultados muy similares entre sí, consiguiendo predecir la tendencia de las medidas experimentales, sin embargo, ambos lo sobreestiman con respecto a los valores experimentales.

#### 4.4.4 Estudio paramétrico de Presión de inyección

En este estudio se ha variado la presión de inyección con respecto a la del caso base, lo que implica que no se modifican las condiciones ambientales dentro de la cámara de combustión. Para ello se modifica la tasa de inyección y se crean los nuevos ficheros de texto con las condiciones de contorno de velocidad, energía cinética turbulenta y disipación turbulenta y se introducen en los ficheros correspondientes de la carpeta “0”, tal y como se explicó en la sección 3.4.

Las presiones de inyección que se han estudiado han sido 100Mpa y 50Mpa, junto con el caso base, es decir, 150Mpa. Para ellos se han obtenido las mismas variables que en el caso de estudio de temperatura, para ver cómo afecta esta magnitud en el

comportamiento del chorro Diesel reactivo. Cabe decir, que al disminuir la presión de inyección, la tasa disminuye y con ello la masa total inyectada para un mismo intervalo de tiempo.

La penetración se muestra en la Figura 4.19, donde se puede ver que es menor al disminuir la presión de inyección. Por otra parte, el modelo CFD reproduce la tendencia de la penetración experimental, sin embargo, la sobreestima, asemejándose más al experimental conforme se tiene una presión menor.

Se comprueba que la penetración del chorro es mayor conforme crece la presión de inyección, puesto que la velocidad aumenta con ello.

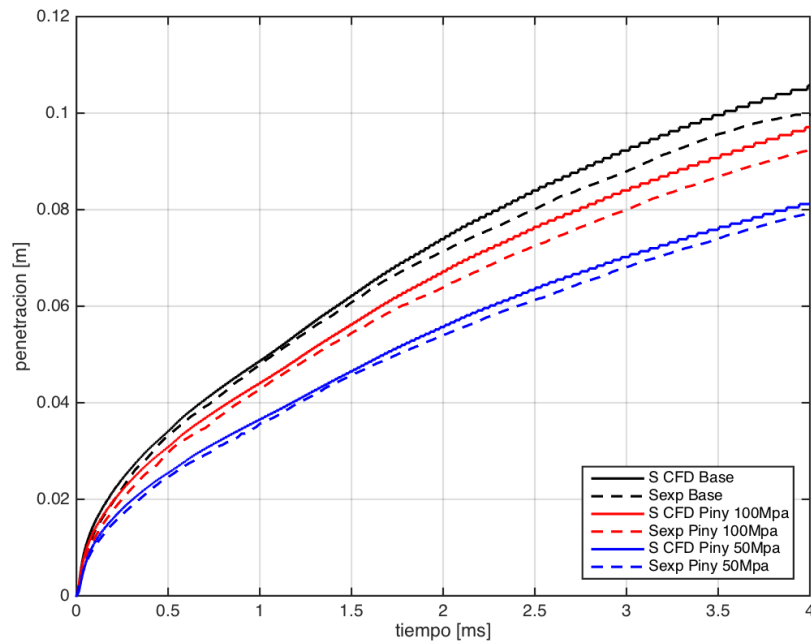


Fig. 4.19. Comparación de penetración para diferentes presiones de inyección

En cuanto a la distancia de Lift-Off, en este caso, se muestra en la Figura 4.20, donde, al igual que en el caso de temperaturas, la línea blanca vertical representa el LOL experimental y los símbolos, los diferentes criterios de cálculo. Además la imagen inferior de la Figura 4.20 muestra una comparativa entre los valores de los criterios en CFD y los experimentales.

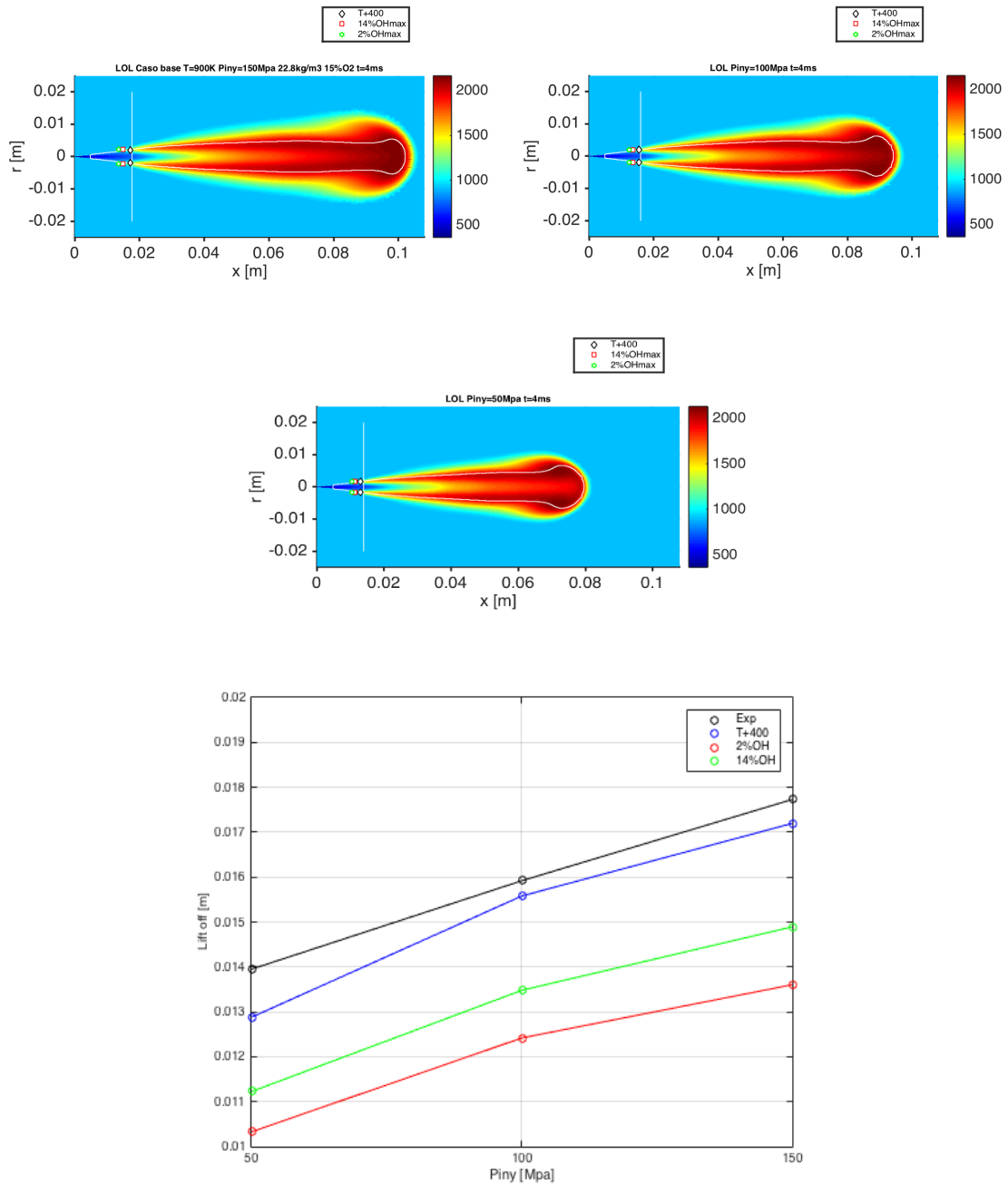


Fig. 4.20. Distancia de Lift-Off en el estudio paramétrico de presión de inyección. Caso base (superior izq.), 100Mpa (superior dcha.) y 50Mpa (inferior izq.) y gráfica comparativa (inferior dcha).

En este estudio, se vuelve a comprobar que el método de T<sup>a</sup>+400K para obtener la distancia de LOL con el modelo CFD es el que proporciona el resultado más preciso con respecto al valor obtenido en las medidas experimentales.

Por otra parte, con estas imágenes, también se puede ver gráficamente que la penetración del chorro es menor con la disminución de la presión de inyección.

En cuanto a los resultados del tiempo de retraso se muestran en la Figura 4.21. El tiempo de retraso es mayor conforme disminuye la presión de inyección. Al disminuir ésta, el caso se hace menos reactivo y necesitará un tiempo mayor para comenzar la reacción de combustión de la mezcla.

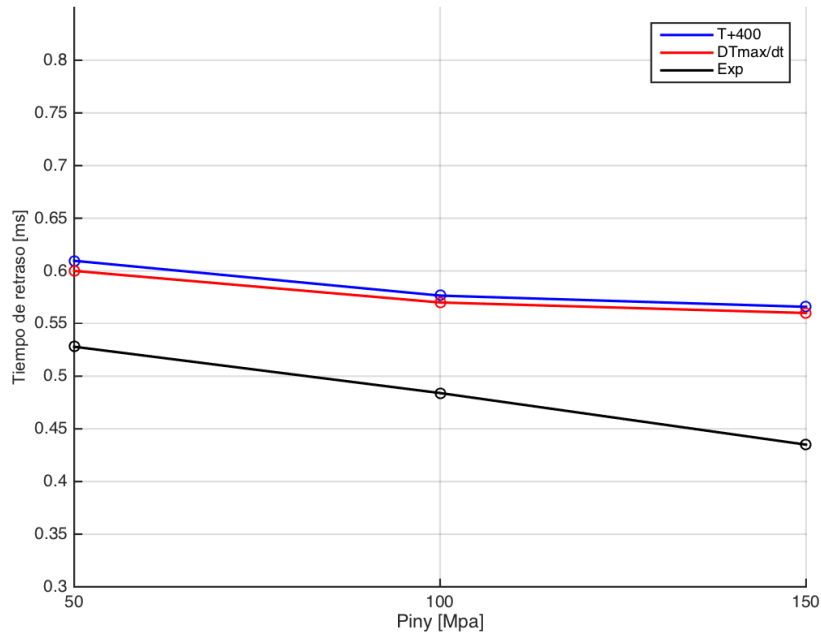


Fig. 4.21. Tiempo de retraso en el estudio de presión de inyección

El modelo CFD, con ambos métodos de cálculo del tiempo de retraso, consigue, de nuevo, predecir la tendencia de los casos experimentales, es decir, un tiempo de retraso más lento para la presión de inyección más baja y un tiempo más rápido para la presión de inyección más elevada, pero nuevamente sobreestimando la magnitud de este parámetro. En este caso, es el método de  $T^a+400K$  el que predice unos resultados más alejados de los obtenidos experimentalmente.

#### 4.4.5 Estudio paramétrico de densidad

Tras el estudio de presión de inyección, se estudia cómo afecta a las características del chorro la modificación de la densidad del ambiente, siendo las densidades analizadas de  $7.6 \text{ kg/m}^3$  y de  $15.3 \text{ kg/m}^3$ , junto con el caso base, es decir  $22.8 \text{ kg/m}^3$ .



Como se sabe, la penetración es inversamente proporcional a la raíz cuarta de la densidad del ambiente, lo cual se puede comprobar en la Figura 4.22. El caso con una densidad menor tiene una penetración más elevada que los demás, puesto que la densidad afecta esencialmente a la cantidad de aire englobado por el chorro, por lo que, cuando la densidad decrece, el englobamiento también lo hace, lo que provoca que el chorro se frene más lentamente, y con ello que penetre de forma más rápida.

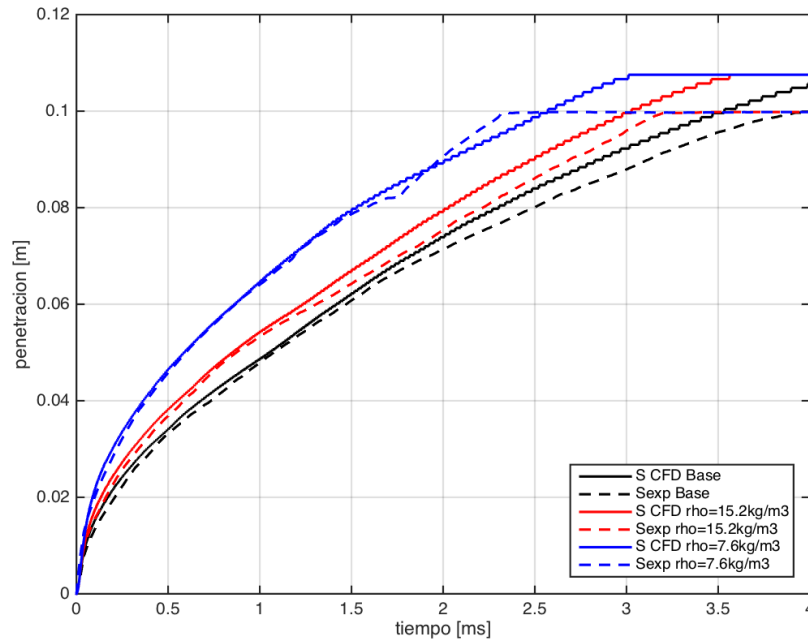


Fig. 4.22. Comparación de penetración para diferentes densidades

En este caso, las simulaciones CFD también logran captar la tendencia de la penetración experimental, pero sobreestimando, de nuevo, los valores. El caso CFD con condiciones menos reactivas, el de menor densidad del gas ambiental, vuelve a ser el que mejor se adapta a las medidas experimentales.

Las medidas experimentales, en este caso, sólo llegan hasta 0.1m de penetración porque la ventana de medida utilizada no consigue abarcar más allá de este valor, por ello en la figura anterior las penetraciones experimentales se mantienen constantes en 0.1m.

En cuanto a la distancia de Lift-Off, se presentan, de nuevo, con el campo de temperaturas medias (Figura 4.23). Los símbolos representan los diferentes criterios de cálculo de este parámetro y la línea vertical blanca, la medida experimental. La imagen inferior muestra, de nuevo, una comparativa entre los valores de los criterios y experimentales.

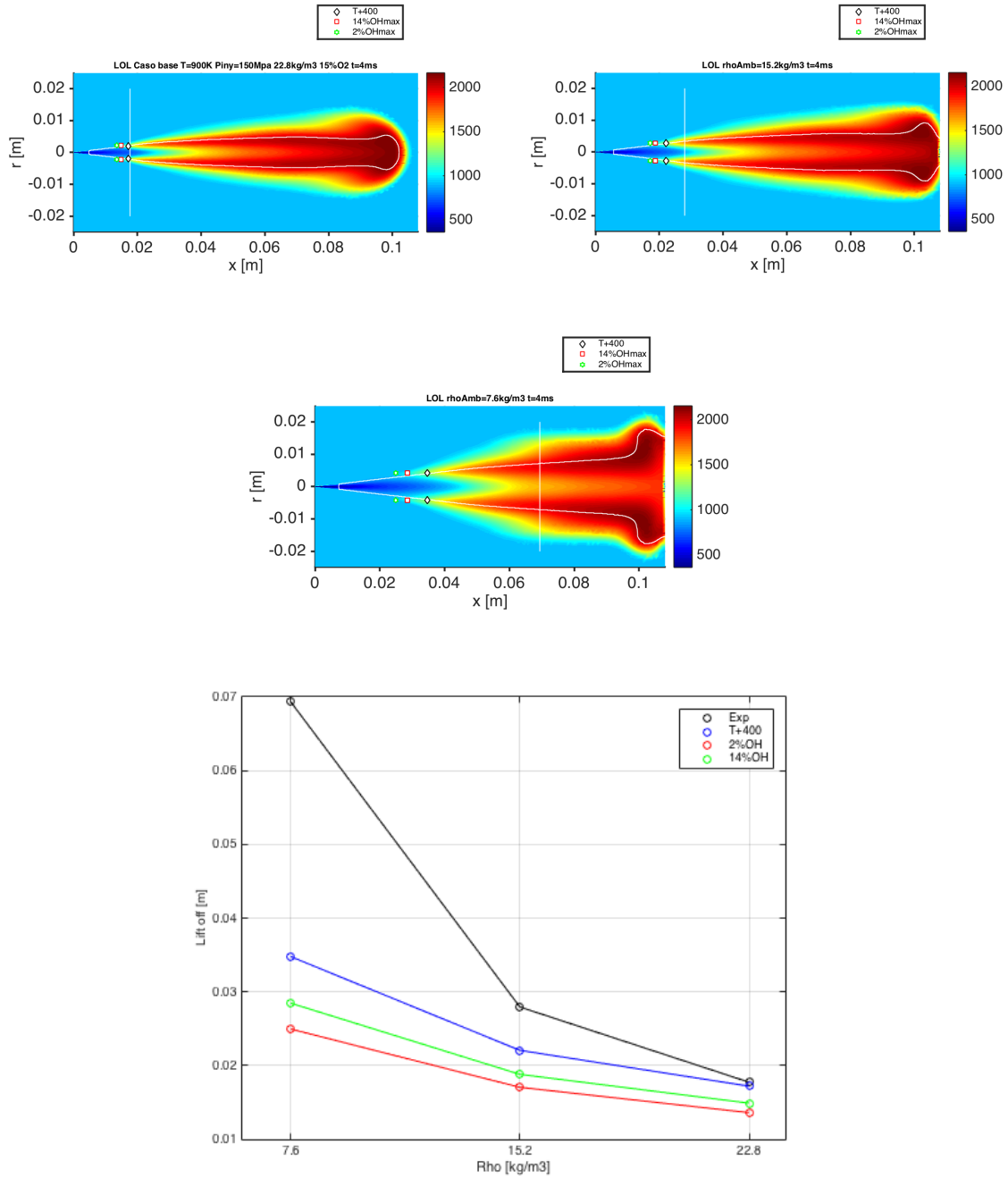


Fig. 4.23. Distancia de Lift-Off en el estudio paramétrico de densidad. Caso base (superior izq.), 15.2kg/m<sup>3</sup> (superior dcha.) y 7.6kg/m<sup>3</sup> (inferior izq.) y gráfica comparativa (inferior dcha.)

Lo primero que se observa en la figura del LOL es que éste aumenta cuando la densidad del ambiente disminuye, puesto que el ambiente en la cámara tiene unas condiciones menos reactivas. En cuanto a los datos experimentales, se puede ver que el método de  $T^a+400\text{K}$  es el que proporciona una estimación más cercana a éstos, sin embargo, en el caso de la densidad de  $7.6 \text{ kg/m}^3$  el modelo no consigue predecir el LOL experimental, siendo las discrepancias muy elevadas, lo cual ha sido observado también en otros estudios realizados con otros modelos de atomización, siendo más crítico para la

correcta predicción de este parámetro el mecanismo químico utilizado y el modelo de combustión. Cabe mencionar, que en algunos casos el chorro llega a chocar con la pared de la malla, lo cual podría solucionarse utilizando una malla con una longitud axial mayor.

El tiempo de retraso para este estudio se presenta en la Figura 4.24, donde se puede ver que va disminuyendo al aumentar la densidad del ambiente en la cámara. En este caso, el modelo CFD consigue, de nuevo, captar la tendencia de las medidas experimentales. Para el caso de  $7.6 \text{ kg/m}^3$ , al igual que en el LOL, el modelo se aleja de los experimentos, teniendo estos últimos un valor de tiempo de retraso bastante más elevado que el obtenido mediante el CFD. El hecho de que la combustión sea más rápida explica que el tiempo de retraso sea más corto y que la distancia de LOL, analizada anteriormente, sea más corta.

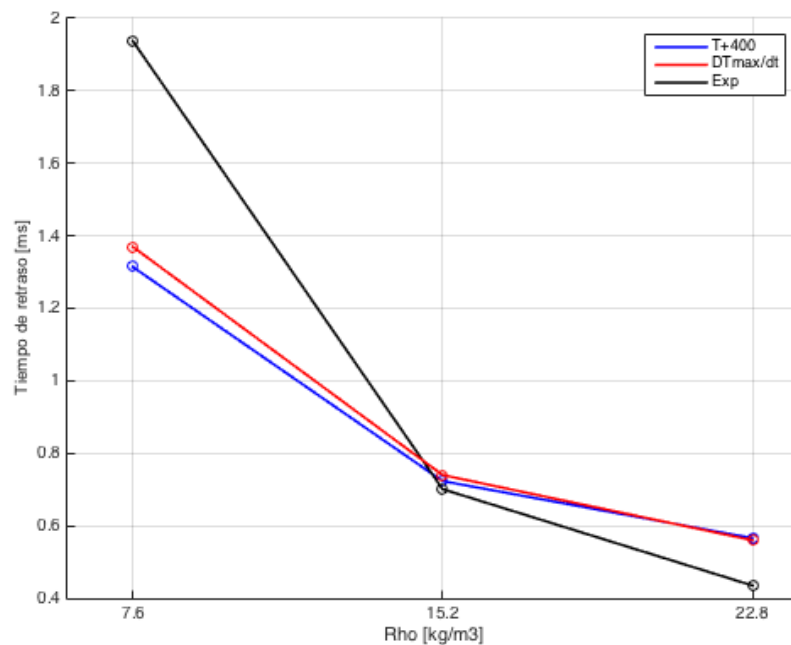


Fig. 4.24. Tiempo de retraso en el estudio de densidad ambiental

### 4.4.6 Estudio paramétrico de la concentración de oxígeno

En este apartado se hace un estudio de cómo afecta al chorro Diesel el porcentaje de oxígeno en la composición del gas ambiental dentro de la cámara. Se ha estudiado una composición con 13% y 21% de oxígeno, comparándose con el caso nominal (15% de  $O_2$ ).

Conforme se reduce el porcentaje de oxígeno en la composición el ambiente es menos reactivo, por lo que la penetración será menor, tal y como se muestra en la Figura 4.25, en cambio, si el % de  $O_2$  aumenta, se tendrá un ambiente más reactivo lo cual favorece a que el chorro penetre más.

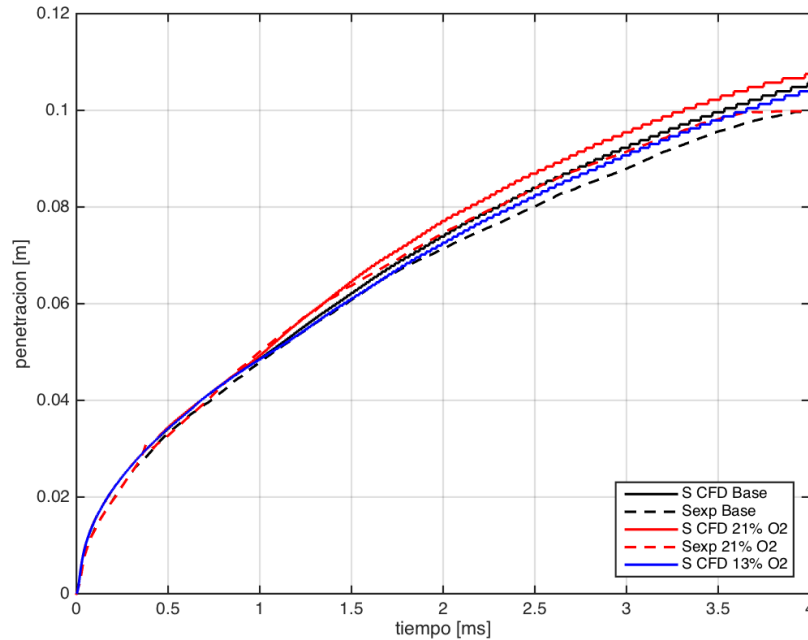


Fig. 4.25. Comparación de penetración para diferentes concentraciones de oxígeno

Por otra parte, se puede ver que en la parte inicial del chorro no afecta la composición del gas ambiental, puesto que es una zona inerte donde la composición no tiene prácticamente ningún efecto y la temperatura y densidad en la cámara se mantienen iguales en los tres casos. Es a partir del momento en el que se produce la combustión de la mezcla donde comienzan a aparecer las diferencias.

De nuevo, el modelo CFD consigue estimar la tendencia de las curvas de penetración experimentales, sin embargo, como en todos los estudios anteriores, hace una sobreestimación de ésta.

En la Figura 4.26, se representa con símbolos la distancia de Lift-Off según cada criterio y para cada caso, así como el LOL experimental (línea vertical blanca). Como se puede ver la distancia de Lift-Off disminuye al aumentar la concentración de oxígeno en el gas ambiental, puesto que éste se hace más reactivo.

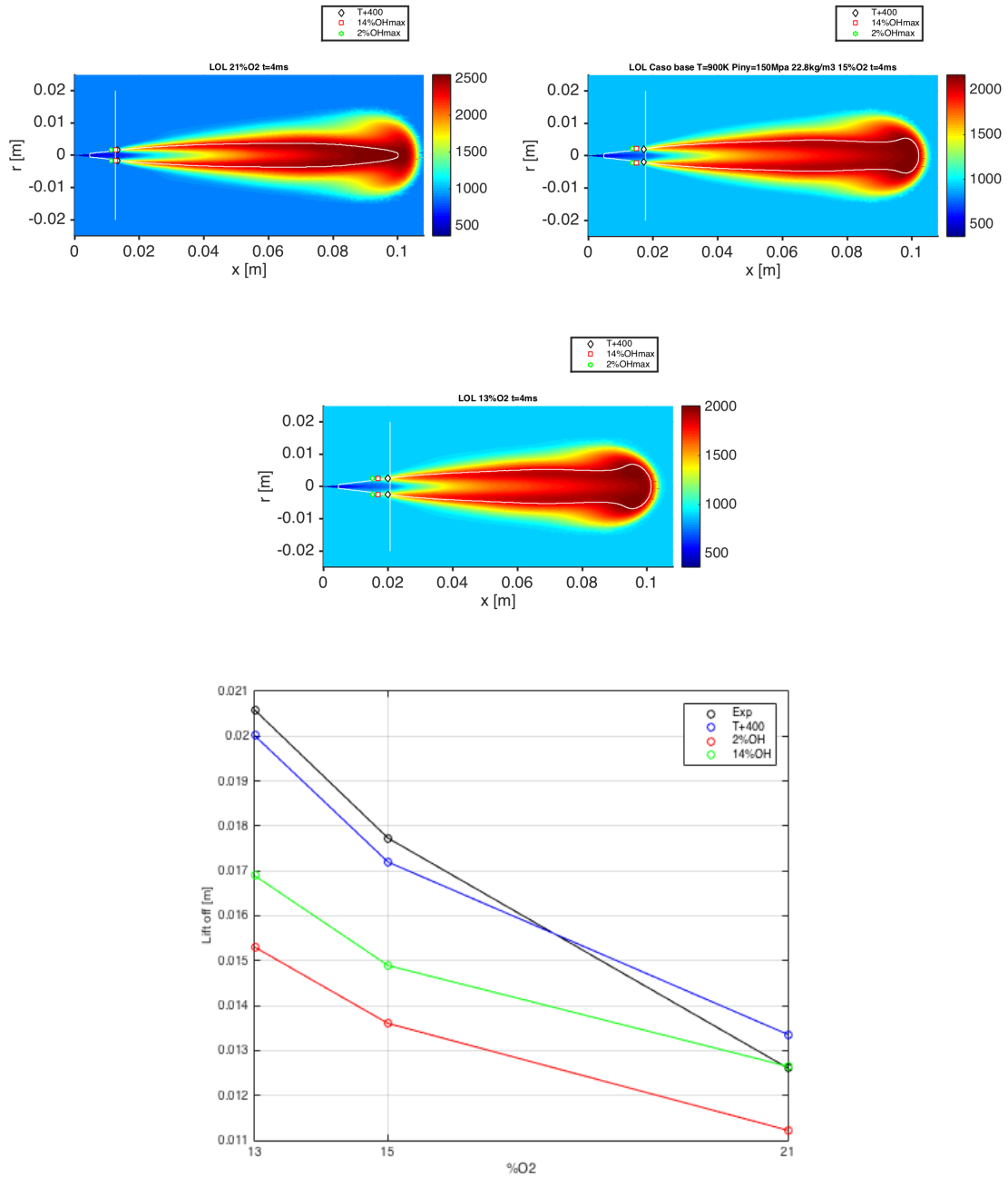


Fig. 4.26. Distancia de Lift-Off en el estudio paramétrico de concentración de oxígeno. 21% de O<sub>2</sub> (superior izq.), caso base (superior dcha.) y 13% O<sub>2</sub> (inferior izq.) y gráfica comparativa (inferior dcha)

En este caso, el método de T<sup>a</sup>+400 es el que vuelve a proporcionar unos resultados más precisos con respecto a las medidas experimentales de distancia de Lift-Off, siendo el del 2% de la máxima concentración de OH el que peores resultados estima.

Por último, se estudia el tiempo de retraso, el cual, como es de esperar viendo los resultados de LOL, disminuye al aumentar la reactividad del ambiente en la cámara, esto es al incrementarse el porcentaje de oxígeno ambiental. Al aumentar éste, se necesitará menos tiempo para que comience la reacción de combustión de la mezcla.

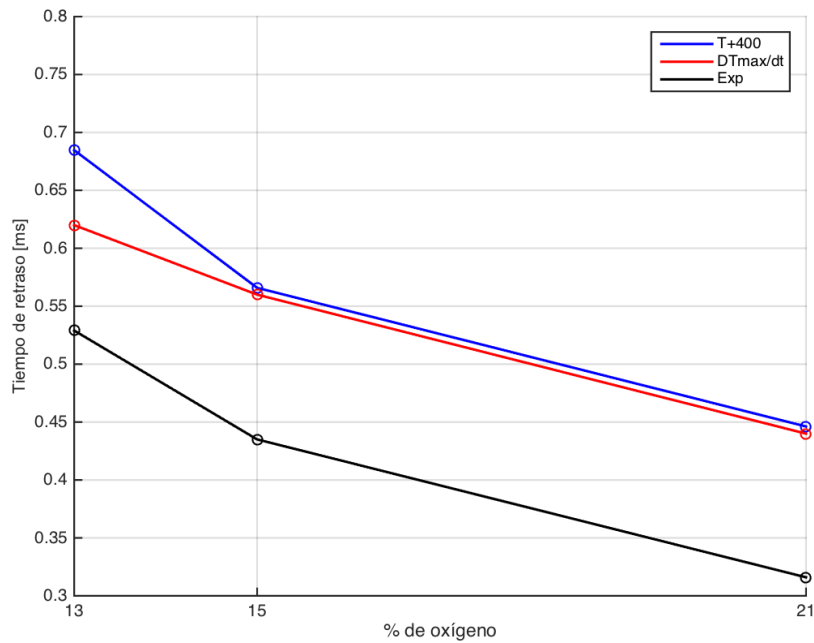


Fig. 4.27. Tiempo de retraso en el estudio de porcentaje de oxígeno

El modelo CFD consigue predecir la tendencia del tiempo de retraso, pero, de nuevo, no estima los mismos valores que los experimentales, en este caso, sobreestimándolos.

## 4.5 Conclusiones

Con los estudios de calibración de los parámetros de turbulencia en el chorro no evaporativo se concluye que los valores óptimos para realizar los cálculos son de 5% de intensidad turbulenta y 10% de longitud turbulenta.

Para comprobar la validez del modelo calibrado se hace una comparación entre el chorro inerte evaporativo y no evaporativo, donde se comprueba la eficiencia de éste en las condiciones impuestas.

En condiciones reactivas, se comprueba que el chorro tiene una penetración menor conforme se disminuye la temperatura, el porcentaje de oxígeno en la cámara y la presión de inyección, y, por el contrario, mayor conforme se disminuye la densidad de ambiente. Las distancias de LOL y tiempo de retraso aumentan conforme disminuyen estos parámetros.

En general, el modelo consigue predecir las variables típicas del chorro en condiciones reactivas dentro del orden de magnitud, así como reproducir las tendencias experimentales, en un amplio rango de condiciones de funcionamiento.

Cabe mencionar, que para completar el estudio del chorro, en el Anexo III se ha hecho un estudio del englobamiento y coeficiente de englobamiento, a pesar de no ser el objetivo principal del presente Trabajo.





## 5 Conclusiones y trabajos futuros

En el presente capítulo se van a presentar las conclusiones más importantes derivadas tras los estudios realizados en el Capítulo 4. Por un lado se obtienen conclusiones del estudio del chorro en condiciones inertes, y por otro, conclusiones del chorro en condiciones reactivas.

### Chorro en condiciones inertes

En primer lugar, se ha realizado un estudio en condiciones inertes no evaporativas para calibrar los parámetros turbulentos correspondientes a la condición de contorno del orificio de inyección, es decir, la intensidad y longitud turbulenta. Se ha visto que no tienen un gran efecto sobre los resultados obtenidos (penetración del chorro), siempre y cuando se elijan dentro de un rango razonable, siendo la intensidad turbulenta la que mayor efecto tiene en los cálculos.

Se ha comprobado también, que el uso de valores más elevados de estas magnitudes turbulentas agiliza el proceso de mezcla. Este hecho se puede observar en la viscosidad turbulenta, la cual, conforme se incrementa la intensidad turbulenta o longitud turbulenta, aumenta su valor en las inmediaciones de la tobera de inyección, es decir, en el comienzo del chorro. Al aumentar la viscosidad turbulenta, el proceso de mezcla es más rápido y la fracción volumétrica de líquido cae de forma más rápida como se ha comprobado al principio del Capítulo 4. Finalmente, y a la vista de los resultados analizados, para este Trabajo Fin de Máster, se ha seleccionado una intensidad turbulenta del 5% y una longitud turbulenta del 10% del diámetro del orificio de inyección.

Tras la selección de los parámetros de turbulencia se ha comprobado el rendimiento del modelo con un caso evaporativo, comparándolo frente a medidas experimentales de penetración, y, además, evaluando las diferencias existentes entre dos chorros generados con el mismo inyector, presión de inyección y densidad del ambiente, pero uno a alta temperatura (evaporativo) y otro prácticamente isoterma (no evaporativo). Son dos chorros iguales que penetran de forma diferente debido a la temperatura del gas ambiental en la cámara, siendo ésta de 900K en el caso evaporativo y de 303 en el no evaporativo.

En cuanto a la comparación con las medidas experimentales, el modelo CFD reproduce éstas de forma precisa, comprobándose así su validez en este caso.

Comparando entre ambos chorros, se observa que la penetración del chorro evaporativo es más lenta que la del no evaporativo. El chorro evaporativo será más ancho porque tiene una mayor tasa de englobamiento de aire debido a la mayor similitud entre las densidades del combustible en estado vapor y del gas dentro de la cámara.

### **Chorro en condiciones reactivas**

Una vez el modelo ha sido adecuadamente calibrado y está validado, se estudian los casos reactivos, en los que tiene lugar la reacción de combustión. Los principales resultados obtenidos han sido de penetración, distancia de Lift-Off y tiempo de retraso.

En rasgos generales, se puede observar que al ir disminuyendo las condiciones ambientales en la cámara de combustión para temperatura y porcentaje de oxígeno, así como la presión de inyección, la penetración es menor, ocurriendo lo contrario al disminuir la densidad ambiental. Con estas condiciones, el tiempo de retraso será mayor, es decir, la mezcla aire-combustible necesitará un tiempo mayor para que tenga lugar la reacción de combustión, y, con ello la distancia de Lift-Off será mayor. Lo contrario ocurre conforme el ambiente en la cámara es más reactivo.

Otra conclusión que se puede sacar de las gráficas de penetración, es que el modelo CFD, en todos los casos, logra captar con precisión la tendencia de la penetración experimental, aunque, para los casos más reactivos, ésta queda sobreestimada.

Se ha comprobado que en los casos estudiados el criterio de  $T^a+400K$  para calcular el LOL es el que estima de forma más precisa esta magnitud, en comparación con los datos experimentales disponibles, por lo tanto se podría decir que este sería un método correcto y preciso para calcular el LOL con los datos procedentes de CFD. El peor criterio, en todos los casos, se ha observado que es el del 2% del máximo de la concentración de OH.

Con respecto al tiempo de retraso se ha visto que el modelo capta de forma precisa la tendencia si se compara con los datos experimentales, pero obteniendo valores más elevados. Esto no se debe al propio modelo de atomización utilizado y que está siendo

validado, sino se debe a que el mecanismo químico utilizado en la combustión es lento, lo que hace que las reacciones tengan lugar más lentamente y por ello los tiempos de retraso son más elevados que los experimentales. La selección de este mecanismo químico no está dentro de los objetivos del presente Trabajo Fin de Máster, viene impuesto.

Con todo ello se puede decir que las propiedades globales de la llama, LOL y tiempo de retraso, así como la penetración del chorro son estimadas de forma adecuada por el modelo  $\Sigma$ -Y en todos los casos analizados, quedando así confirmada la validez del modelo en un amplio rango de condiciones de funcionamiento típicas de los motores Diesel.

## 5.1 Trabajos futuros

A la vista de los resultados, se pueden sugerir algunos trabajos futuros para así mejorar el modelo en su conjunto. Como se ha comprobado en el Capítulo 4, el tiempo de retraso siempre queda sobreestimado, lo cual no se debe al modelo de atomización, sino al mecanismo químico que utiliza para la combustión, el cual es lento. Se podría utilizar otro mecanismo más rápido, para que el tiempo de retraso no quedase sobreestimado con respecto a los datos experimentales.

Por otra parte, también se podría trasladar este modelo a LES (“Large Eddy Simulation”), donde esperarían mejoras, tanto en el modelado de la turbulencia (puesto que en RANS es bastante simple), como en las estimaciones de los parámetros característicos.



## 6 Bibliografía

- [1] J. Dec, A conceptual model of DI diesel combustion based on laser-sheet Imaging, SAE paper 970873, 1997.
- [2] D. Correas Jiménez, Estudio Teórico-Experimental del Chorro Libre Diesel Isotermo, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, 1998.
- [3] L.Siebers, Dennis; S.Higgins, Brian, «Flame Lift-Off in DI Diesel Sprays: Impact on Soot Formation,» *Diesel Engine Emission Reduction Workshop*, 20-24 Agosto 2000.
- [4] «Engine Combustion Network,» [En línea]. Available: <http://www.sandia.gov/ecn/cvdata/dsearch/dataDef.php>.
- [5] A. Vallet, A. Burluka y R. Borghi, Development of a eulerian model for the "atomization" of a liquid jet, University of Ruen, Ruen, France.
- [6] A. Pandal Blanco, Implementation and Development of an Eulerian Spray Model for CFD Simulations of Diesel Sprays, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, 2016.
- [7] J. Winklinger, Implemetation of a Combustion Model based on the Flamelet Concept and its Application to turbulent reactive Sprays, Doctoral Thesis, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos, Universidad Poltécnica de Valencia, 2014.
- [8] «Centro de Motores Térmicos,» [En línea]. Available: <http://www.cmt.upv.es/ECN03.aspx>.
- [9] P. S.B., Turbulent Flows, Cambrigde Univeristy press, 2000.
- [10] A.Pandal, J.M.Pastor, J.M.García-Oliver, E.Baldwin y D.P.Schmidt, «A consistent, scalable model for Eulerian spray modeling,» *International Journal of Multiphase FLOW*, 2016.
- [11] S. Naber y D. Siebers, «Effects of Gas Density and Vaporization on Penetration and Dispersion of Diesel Sprays,» *SAE Technical Paper n°960034*, 1996.
- [12] N. Maes, M. Meijer, N. Dam, B. Somers, H. Baya Toda, G. Bruneaux, S. skeen y L. Pickett, «Characterization of Spray A flame for parametric variations in ECN constant-volume vessels using chemiluminiscence and laser-induced fluorescence».
- [13] N. Trask, Implementation of an eulerian atomization model to characterize primary spray formation, University of Massachusetts, 2010.



---

# Anexos

---





# I. Programas de post-procesado

En el presente capítulo se va a realizar una explicación de los principales scripts realizados en Matlab para el post-procesado de los resultados obtenidos tras el cálculo con OpenFOAM.

## I.1 Programa para obtener penetración y fracción volumétrica de líquido

Con este script se pretende que en una sola imagen se muestre en la parte de la izquierda de la figura la penetración, con la longitud líquida en el caso que la haya, y a la derecha de la figura la fracción volumétrica de líquido o LVF.

Para realizarlo se ha utilizado el fichero `mysummary.txt` que contiene toda la información acerca de penetración y longitud líquida para cada instante de tiempo y los ficheros del sets en el eje para la fracción volumétrica de líquido. Por lo tanto, primero se tienen que cargar y leer los ficheros `mysummary.txt` y los ficheros del sets correspondientes al eje y al tiempo indicado por el usuario de cada caso indicando la ruta en la que se encuentran, para ello se utiliza el comando `dlmread` y `load`.

En `mysummary` y en los sets la información se encuentra en forma de columnas por lo que la penetración, longitud líquida y LVF corresponderá a una cierta columna respectivamente que se han de cargar en las diferentes variables que creamos para ello. Hay que llevar cuidado que según el caso, la columna que corresponde a cada magnitud puede variar.

```
A =
dlmread('/Volumes/irene/cmt/inerte/SprayA_303_rho22d8_150_divGamma_TasaLarga_rhorelax10/mysummary.txt','\t',1,0);

B =
dlmread('/Volumes/irene/cmt/evaporative/SprayA_900_rho22d8_150_divGamma_Tau50_Cchild8_rhorelax10_TasaLarga_HDkEps_MeshR_nViscousH_closed/mysummary.txt','\t',1,0);
```

```

tiA = B(:,1).*1000; % cargamos el tiempo que me da el openFOam lo
pasamos a milisec
peA = B(:,6).*1000; % cargamos la penetracion en cfd en mm
tiB = C(:,1).*1000; % tiempo cfd en milisec
peB = C(:,8).*1000; % penetracion evaporativo
LL = C(:,6).*1000; % longitud líquida

% MODELO CFD 1
perf1 =
load(sprintf('/Volumes/irene/cmt/inerte/SprayA_303_rho22d8_150_divGamm
a_TasaLarga_rhorelax10/sets/0.00%s/axis_rho_Y_Ybar_p_T_d32_Sigma_k_eps
ilon.xy',time));
axiscfd1 = perf1(:,1).*1000; %posicion axial del modelo CFD 1
Yvolcfd1 = perf1(:,4); % fraccion volumetrica del modelo CFD 1
%Modelo CFD
perf2 =
load(sprintf('/Volumes/irene/cmt/evaporative/SprayA_900_rho22d8_150_di
vGamma_Tau50_Cchild8_rhorelax10_TasaLarga_HDkEps_MeshR_nViscousH_close
d/sets/0.00%s/axis_Y_Yv_Yvsatleek_Zv_Ytotal_Ybar_rho_rholiq_rhogas_d32
_Sigma_T_p_h.xy',time));
axiscfd2 = perf2(:,1).*1000;
Yvolcfd2 = perf2(:,7); % fraccion volumetrica del modelo CFD 2

```

Tras ello se grafican los dos parámetros. Para que aparezcan ambos en la misma figura se utiliza el comando *subplot*.

```

f = figure;
set(f,'Position',[10 40 750 360],'Color','w');
set(f,'visible','off');
subplot(1,2,1) %penetracion
f1 = plot(tiA,peA,'b-','LineWidth',1.5); %modelo 1
hold on
f2 = plot(tiB,peB,'r-','LineWidth',1.5); %modelo 2
hold on
f3 = plot(tiC,LL,'b','LineWidth',1.5,'LineStyle','--');
xlabel('tiempo [ms]','FontName','Arial','FontSize', 10);
ylabel('Penetracion y Long. Liquida
[mm]','FontName','Arial','FontSize', 10);
grid on
set(gca,'Xtick',0:0.5:3,'XtickLabel',{'0','0.5','1.0','1.5','2.0','2.5

```

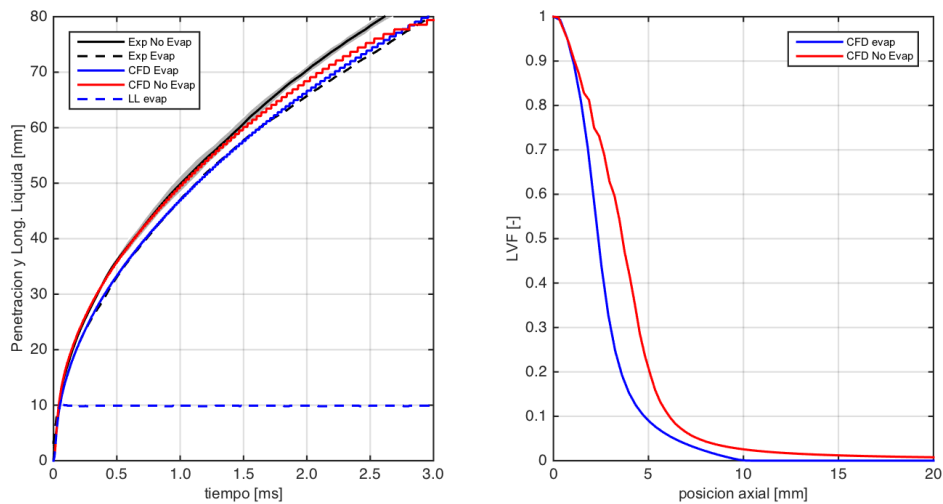
```

', '3.0'
axis([0 3.0 0 80])
h = legend([f1 f2 f3], , 'CFD No Evap', 'CFD Evap', 'LL
evap', 'Location', 'NorthWest');
set(h, 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 7);
subplot(1,2,2) % grafica LVF
plot(axiscfd1, Yvolcfd1, 'b-', 'LineWidth', 1.5); %modelo 1
hold on
plot(axiscfd2, Yvolcfd2, 'r-', 'LineWidth', 1.5); %modelo 2
hold off
xlabel('posicion axial [mm]', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 10);
ylabel('LVF [-]', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 10);
grid on
axis([0 20 0 1]);
h1 = legend('CFD No evap', 'CFD Evap', 'Location', 'northeast');
set(h1, 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 7);

```

### Ejemplo

El resultado final a modo de ejemplo se muestra en la Figura I.1.



*Fig. I.1 Ejemplo gráfica de penetración, longitud líquida y fracción volumétrica de líquido.  
Caso evaporativo y no evaporativo Base*

## I.2 Programa para obtener viscosidad y longitud turbulenta

Esta rutina calcula y muestra en una misma figura dos gráficas, a la izquierda la viscosidad turbulenta y a la derecha la longitud turbulenta.

Primero el usuario ha de introducir el nombre de los casos que va a querer analizar y comparar, así como sus respectivas rutas. Los ficheros se cargan en .mat en los que se encuentran los principales parámetros guardados de cada caso dependientes del tiempo.

```
%% cargamos los datos
Caso1 = 'It = 1%';
Caso2 = 'It = 2.5%';
Caso3 = 'It = 5%';

cas1 = load('/Volumes/irene/cmt/tfm irene/codigos postp/obtener
mat/Tamb303k_P150Pa_rho22.8kgm3_It1_Lt10_i.mat');

cas2 = load('/Volumes/irene/cmt/tfm irene/codigos postp/obtener
mat/Tamb303k_P150Pa_rho22.8kgm3_It2.5_Lt10_i.mat');

cas3 = load('/Volumes/irene/cmt/tfm irene/codigos postp/obtener
mat/Tamb303k_P150Pa_rho22.8kgm3_It5_Lt10_i.mat');

cmu = 0.09;
```

Para obtener un conjunto de gráficas dependientes del tiempo se realiza un bucle que recorra cada tiempo y vaya calculando, para cada uno, la viscosidad, longitud turbulenta y obtenga las gráficas.

En el cálculo de estas dos magnitudes, se cargan las posiciones axiales, la energía cinética turbulenta y disipación, que se pueden obtener indicándolo en el fichero SampleDict. Posteriormente se calcula la viscosidad y longitud turbulenta y se grafican.

```
%% Graficas
for i = 1:length(cas1.globalstr)
    time1 = str2double(cas1.globalstr(i).Post1.time);
```

```

x1 = cas1.globalstr(i).Post1.xcl;
x2 = cas2.globalstr(i).Post1.xcl;
x3 = cas3.globalstr(i).Post1.xcl;

k1 = cas1.globalstr(i).Post1.k;
k2 = cas2.globalstr(i).Post1.k;
k3 = cas3.globalstr(i).Post1.k;

e1 = cas1.globalstr(i).Post1.epsilon;
e2 = cas2.globalstr(i).Post1.epsilon;
e3 = cas3.globalstr(i).Post1.epsilon;

nut1 = cmu.*k1.^2./e1; % calculo visco. turb
nut2 = cmu.*k2.^2./e2;
nut3 = cmu.*k3.^2./e3;

lt1 = cmu^(3/4)*k1.^(3/2)./e1; % calculo Long. turb
lt2 = cmu^(3/4)*k2.^(3/2)./e2;
lt3 = cmu^(3/4)*k3.^(3/2)./e3;

f=figure('visible', 'off');
set(f,'Position',[10 40 750 360],'Color','w');
subplot(1,2,1) % Gráfica viscosidad turbulent
[H1] = plot(x1,nut1,'color','r','linewidth',1.5);
hold on
[H2] = plot(x2,nut2,'color','b','linewidth',1.5);
hold on
[H3] = plot(x3,nut3,'color','g','linewidth',1.5);

xlabel('x [m]','FontName','Arial','FontSize', 10);
ylabel('Viscosidad turbulenta','FontName','Arial','FontSize', 10);
grid on

h = legend([H1 H2
H3],sprintf('%s',Caso1),sprintf('%s',Caso2),sprintf('%s',Caso3),'Location','NorthWest');

set(h,'FontName','Arial','FontSize',7);

hold off %zoom zona inicial
if time1>=0.0015

```

```

hb = axes('position',[0.2 0.25 0.328282828/2 0.37037037/2]);
[H1] = plot(x1,nut1,'color','r','linewidth',1.5);
hold on
[H2] = plot(x2,nut2,'color','b','linewidth',1.5);
hold on
[H3] = plot(x3,nut3,'color','g','linewidth',1.5);
grid on
xlim([0 0.008]);
ylim([0 0.5*10^(-3)]);
set(gca, 'Xtick',0:0.002:0.01,'Ytick',0:0.0001:0.5*10^(-
3),'FontSize',5);
subplot(1,2,2) %Gráfica escala integral

[H1] = plot(x1,lt1,'color','r','linewidth',1.5);
hold on
[H2] = plot(x2,lt2,'color','b','linewidth',1.5);
hold on
[H3] = plot(x3,lt3,'color','g','linewidth',1.5);

xlabel('x [m]','FontName','Arial','FontSize', 10);
ylabel('Escala integral','FontName','Arial','FontSize', 10);
grid on
h = legend([H1 H2
H3],sprintf('%s',Caso1),sprintf('%s',Caso2),sprintf('%s',Caso3),'Locat
ion','NorthWest');
set(h,'FontName','Arial','FontSize',7);

hold off %ahora lo que se hace es hacer un zoom de la zona inicial
para apreciar las diferencias
if time1<0.0005
    ha = axes('position',[0.73 0.45 0.328282828/2 0.37037037/2]);
%esto es para que me cree unos ejes encima del subplot anterior en esa
posicion
else
    ha = axes('position',[0.6 0.5 0.328282828/2 0.37037037/2]);
end
[H1] = plot(x1,lt1,'color','r','linewidth',1.5);
hold on
[H2] = plot(x2,lt2,'color','b','linewidth',1.5);

```

```

hold on
[H3] = plot(x3,lt3,'color','g','linewidth',1.5);
grid on
xlim([0 0.008]);
ylim([0 0.075*10^(-3)]);
set(gca, 'Xtick',0:0.002:0.01,'Ytick',0:0.000025:0.1*10^(-
3),'FontSize',5);

```

Como se observa en el fragmento del código, tanto para la viscosidad como la longitud turbulenta se realizan unas subgráficas más pequeñas dentro de cada una de ellas que representan un zoom de la zona inicial, que es la que verdaderamente interesa. La situación de este zoom se maneja con un bucle que depende del instante de tiempo, para que así no estorbe este subplot.

Por último se procede a guardar las gráficas, otorgando un nombre que depende del tiempo al que pertenece y se cierra el bucle principal.

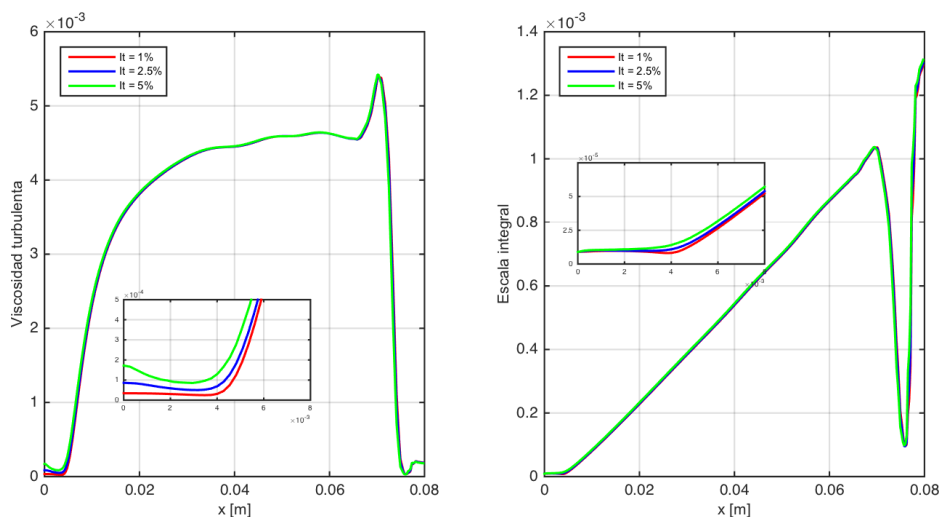
```

%guardar graficas
name =
sprintf('/Users/irene/Desktop/tfmirene/viscoTurb_escIntegral/Grafico_t
=%1.2fms.png',time1*1000);
set(f,'PaperPositionMode','auto');
saveas(f,name,'png');
close(f);
end

```

## Ejemplo

A continuación se muestra un ejemplo de cómo es el aspecto de las gráficas de viscosidad y longitud turbulenta obtenidas con este script.



*Fig. I.2 Ejemplo de gráfica de viscosidad (izquierda) y longitud turbulenta (derecha), para el caso de estudio de la intensidad turbulenta*

### I.3 Programa para obtener penetración, radios, flujos, velocidad y composición en el eje

Lo que se pretende con esta rutina de post-procesado es obtener en una misma figura cuatro gráficas que muestren cuatro parámetros típicos de un chorro y que además las muestre para diferentes instantes de tiempo.

La primera gráfica mostrará la penetración y la longitud líquida, en el caso que la haya. La segunda mostrará el radio de composición y el radio estequiométrico, la tercera mostrará el englobamiento de aire y la cantidad de movimiento y la última mostrará la velocidad y concentración en el eje del chorro.

Para ello, primero hay que indicar por parte del usuario el nombre de los casos para que aparezcan posteriormente en las leyendas y sus rutas, así como la ruta de salida para guardar las gráficas, como se muestra a continuación:



```

%Nombres casos
Caso1 = 'Inerte';
Caso2 = 'Reactivo';

%Ruta del caso
cas1 = '
/Volumes/irene/cmt/evaporative/SprayA_900_rho22d8_150_divGamma_Tau50_C
child8_rhorelax10_TasaLarga_HDkEps_MeshR_nViscousH_closed';

cas2 = '
/Volumes/irene/cmt/SprayA_900_rho22d8_150_Cchild8_TStep1_HDkEps_parabo
l_51_syncr_time_sigma1.41_Zlim_1e3_NewMesh';

%Ruta de salida de datos
salida = '/home/pfc/Desktop/tfm_irene/comp_InertReact';

```

Tras ello se debe indicar el valor de ciertas variables de las cuales va a depender el cálculo: la geometría de a tobera, es decir el diámetro, la longitud axial de la malla, el número de puntos radiales en los sets que se han obtenido al realizar el Sample, el dosado de combustible para el que esté dedicado el cálculo (en este caso de ejemplo se está comparando el caso base inerte y base reactivo). También se introducen los límites de concentración radial y axial y por último las posiciones de las variables que se necesitan, concentración total y densidad, en los ficheros de cada caso. La posición de estas últimas variables dependen del orden que se le haya dado en el fichero SampleDict.

```

% geometria
r0 = (0.089e-3)/2;

%Variables axiales
Lx = 108e-3;      %longitud axial

%Variables radiales
npr = 300;      %número de puntos radiales

% Dosado
Fst_inert = 0.0482728;
comb= 'C12H26';

Fst_reactivo = 0.0482728; %este es el que se tiene que usar para el
caso reactivo base

%Calculo dosados
yst = Fst_inert/(1+Fst_inert);

```

```

zst = Fst_reactivo/(1+Fst_reactivo);

% limites
limr = 0.01;    %limite concentracion radial
lims = 0.001;  %limite concentracion axial

% posiciones de las variables
ypos1 = 6; % posicion concentracion total en caso 1
dpos1 = 8; % posicion densidad en caso 1
ypos2 = 8; % posicion concentracion total en caso 2
dpos2 = 19; % posicion densidad en caso 2

```

Tras esta introducción de variables y cálculos iniciales se pasa a obtener la penetración, longitud líquida y ordenar las carpetas del fichero sets resultado del cálculo con OpenFoam.

Lo que se hace es abrir el directorio de cada caso, y como en el script anterior explicado, obtener de `mysummary.txt` la penetración y la longitud líquida. Posteriormente, manteniéndonos en la carpeta del caso, se abre la carpeta `sets` donde está el resto de información que necesitamos y se procede a ordenar las carpetas temporales que se tienen dentro. Los nombres de las carpetas se guardan en un vector llamado `timeFolders*`. El bucle que ordena las carpetas no comienza desde 1, sino desde 3 puesto que LINUX crea dentro de cada carpeta dos archivos adicionales `'.'` y `'..'` que no necesitamos. Esto se muestra en el siguiente fragmento del código.

```

%Abrimos directorio CASO1
cd (cas1)
%Calcula la penetracion de openFoam
a = dlmread('/mysummary.txt','\t', 1, 0);
ta1 = a(:,1)*1000; %t en ms
S1 = a(:,8);
LL1 = a(:,6);

%Ordenamos carpetas de openfoam
cd sets
folders1 = dir; %folders tiene todos los instantes de tiempo para los

```

```

que hemos hecho el calculo de sample
for k = 3:length(folders1)%ordena los ficheros de cada tiempo que
hemos grabado en el sample
timeFolders1{k-2} = folders1(k).name;
end
time = zeros(size(timeFolders1));
for k = 1:length(timeFolders1)
    time(k) = str2double(timeFolders1{k});%convertimos los nombres de
los ficheros a numeros para ordenarlos
end
time = sort(time);
for k = 1:length(timeFolders1)
    % give OpenFOAM format
    if time(k) > 0 && time(k) < 1e-04
        format shortE
        timeFolders1{k} = num2str(time(k)); %volvemos a escribir el
vector con los nombres ordenados
        format short
    else
        timeFolders1{k} = num2str(time(k));
    end
end %los timeFolders estan como strings y ordenados y tiene los
tiempos que hemos grabado

```

Tras ordenar las carpetas se pasa a cargar la densidad, la concentración y la velocidad, primero en el eje y posteriormente en cada corte radial. Para ello se crea un bucle que recorre todas las carpetas temporales del sets, va entrando en cada de ellas cargando las variables que necesitamos. Este bucle es el bucle principal y llega hasta el final del código, puesto que queremos una figura para cada instante de tiempo, así pues, calcula todas las variables para cada instante de tiempo y obtiene su gráfica.

En esta primera parte que se muestra del código del bucle principal, se obtienen las magnitudes de densidad, concentración y velocidad axiales, puesto que se lee de cada carpeta temporal el fichero que comienza por 'axes...'. Estos ficheros contienen la información en columnas, así pues, en cada variable creada se carga la columna correspondiente a la magnitud que se quiere.

```

for t=2:length(timeFolders1) %No lee carpeta 0 y por eso termina en t-
1
    cd (cas1);
    cd sets
    names1= dir(timeFolders1{t});
    fil = sprintf ('%s/%s',timeFolders1{t},names1(4).name
        A = load(fil);

    xc11 = A(:,1);%rellenamos los datos de recorrido axial
    yc11 = A(:,ypos1);%rellenamos los datos de concentracion axial
    dc11 = A(:,dpos1);%rellenamos los datos de densidad axial

    fil = sprintf ('%s/%s',timeFolders1{t},names1(3).name
        A = load(fil);
        uc11 = A(:,2);%rellenamos los datos de velocidad axial en eje
x

```

Tras las variables axiales, se inicializan y cargan las variables en los cortes radiales. Se tiene que crear para ello un bucle a parte para que recorra todas las secciones que hemos decidido que haya en el sets y se van cargando las magnitudes que queremos: posición radial, densidad y concentración.

```

nsec1=length(names1)/2-3; %numero de secciones que hay
R1 = zeros(1,nsec1); % radio
Rst1 = zeros(1,nsec1); %radio estequimico/trico
Dx = Lx/nsec1; %variables axiales entre numero de secciones en el
caso 1, el diferencia de x
x1 = 0:nsec1-1;
x1 = Dx*x1;
mdot1=zeros(1,nsec1); %se inicializan
mf1=zeros(1,nsec1);
Mdot1=zeros(1,nsec1);
mfdot1=zeros(1,nsec1);
r1=zeros(npr,nsec1);
y1=zeros(npr,nsec1);
d1=zeros(npr,nsec1);
u1=zeros(npr,nsec1);

```

```

for c=1:1:nsec1
    fil = sprintf ('%s/%s',timeFolders1{t},names1(2*c+4).name);
    A = load(fil);

    r1(:,c)= A(:,1); %posicion radial
    y1(:,c) = A(:,ypos1) ; %fraccion masica radial
    d1(:,c) = A(:,dpos1) ; %densidad radial

    fil = sprintf ('%s/%s',timeFolders1{t},names1(2*c+3).name); %
    A = load(fil);
    u1(:,c) =A(:,2); %velocidad radial

end

```

### Cálculo de los radios

Con todas las variables cargadas, se procede al cálculo de los radios, el de concentración y el estequiométrico. Lo primero es ver cuáles son las posiciones axiales que tienen una concentración mayor que un límite que se ha fijado al principio del script, que en este caso es el 1 por mil. Para estas posiciones se normaliza el perfil y se buscan las posiciones que tengan una concentración mayor a otro límite, que se fija también al principio, y en este caso es el 1%. Estas posiciones se guardan en un vector que es el radio de composición.

Lo mismo se hace para el radio estequiométrico, se guardan en un vector las posiciones que contienen concentración estequiométrica.

```

%Calcula radio R (donde y=1%ycl)
ns=find(y1(1,:)>lims);
for j=1:length(ns) %radio cas1, sin evp
    PN = y1(:,ns(j))./y1(1,ns(j));
    n = 1 + find(PN>limr, 1, 'last' );
    R1(ns(j)) = r1(n,ns(j));
End

```

```
%Calcula radio Rst (donde y=yst)
vj = find(y1(1,:)>yst); %radio esteq, caso 1
for j=1:length(vj)
    n = 1 + find(y1(:,vj(j))>yst, 1, 'last' );
    Rst1(vj(j)) = r1(n,vj(j));
end
```

### Cálculo de flujos: englobamiento y cantidad de movimiento

Como en la tercera figura aparecerán el englobamiento y la cantidad de movimiento se han de calcular sus respectivas integrales.

```
for j=1:nsec1 %caso 1
    k=1;
    while (r1(k+1,j)<=R1(j))
        mdot1(j) = mdot1(j) + 0.5 * (d1(k,j)*u1(k,j) +
d1(k+1,j)*u1(k+1,j)) * pi * (r1(k+1,j)^2 - r1(k,j)^2);
        mf1(j) = mf1(j) +
0.5*(d1(k,j)*y1(k,j)+d1(k+1,j)*y1(k+1,j))*pi*(r1(k+1,j)^2-
r1(k,j)^2);%TIM
        Mdot1(j) = Mdot1(j) +
0.5*(d1(k,j)*u1(k,j)^2+d1(k+1,j)*u1(k+1,j)^2)*pi*(r1(k+1,j)^2-
r1(k,j)^2);
        mfdot1(j) = mfdot1(j) +
0.5*(d1(k,j)*u1(k,j)*y1(k,j)+d1(k+1,j)*u1(k+1,j)*y1(k+1,j))*pi*(r1(k+1
,j)^2-r1(k,j)^2);
        k=k+1;
    if k>=npr
        break
    end
end
end
```

Como se ve, se hacen cuatro integrales, la del englobamiento de aire por parte del chorro, la cantidad de masa de combustible, la cantidad de movimiento y el gasto másico de combustible, pero para los resultados sólo se utilizarán el englobamiento y la cantidad de movimiento.

## Gráficas

Como ya se tienen todas las variables cargadas o calculadas se procede a realizar los plots.

El primer plot será el de la penetración y longitud líquida:

```
f=figure('visible', 'off');
    set(f, 'Position',[100 100 1980 1080], 'Color', 'w');
    %Penetracion y tasa
    subplot('Position',[0.075757576 0.555555556 0.328282828
0.37037037]);

    axis([0 max(ta1) 0 0.1]);
    [H1]=plot(ta1,S1);
    hold on;
    [H2]=plot(ta2,S2);
    hold on;
    [H3]=plot(ta2,LL2);
    hold on
    [H4]=plot(ta1,LL1);
    hold on ;

    set(H1, 'color', 'blue', 'LineWidth',1.5);
    set(H2, 'color', 'red', 'LineWidth',1.5);
    set(H3, 'color', 'red', 'LineWidth',1.5, 'LineStyle', '--');
    set(H4, 'color', 'blue', 'LineWidth',1.5, 'LineStyle', '--');
    hold on
    grid on;

    hold on;
    xlim([0 max(ta1)]);
    ylim ([0 0.12]);
    xlabel('t[ms]');
    ylabel('x[m]');
    set(gca, 'FontSize',12);
    LEY=[H1,H2,H3,H4];
    legend(LEY,sprintf('S %s',Caso1),sprintf('S
%s',Caso2),sprintf('LL %s',Caso2),sprintf('LL
%s',Caso1), 'Location', 'NortheastOutside');
```

```
set (legend, 'position', [0.43 0.848 0.06 0.06], 'FontSize',8);
```

El segundo plot (superior derecha) será el del radio de concentración en el eje y estequiométrico.

```
%Radios
```

```
subplot('Position',[0.555555556 0.555555556 0.328282828
0.37037037]);

[H0]=plot(x1,R1, 'LineWidth',1.5);
hold on;
[H1]=plot(x1,Rst1,'LineWidth',1.5);
hold on;
[H2]=plot(x2,R2,'LineWidth',1.5);
hold on;
[H3]=plot(x2,Rst2,'LineWidth',1.5);
hold on;
[H4]=plot(x1,uminus(R1), 'LineWidth',1.5);%para pintar la
partede abajo, los negativos y tener un frente cerrado
hold on;
[H5]=plot(xst1,uminus(Rst1),'LineWidth',1.5); %para pintar la
partede abajo, los negativosy tener un frente cerrado
hold on;
[H6]=plot(x2,uminus(R2),'LineWidth',1.5);
hold on;
[H7]=plot(x2,uminus(Rst2),'LineWidth',1.5);

hold on;
grid on;
xlim([0 0.108]);
ylim([-0.018 0.018]);
xlabel('x[m]');
ylabel('R[m]');
set(gca, 'Xtick',0:0.02:0.108,'Ytick',-
0.018:0.006:0.018,'FontSize',12);
set(H0,'color','b','LineWidth',1.5); %hay que pintar las dos
partes del mismo color
set(H1,'color','b','LineStyle','--');
```



```

set(H2,'color','r','LineWidth',1);
set(H3,'color','r','LineStyle','--','LineWidth',1.5);
set(H4,'color','b','LineWidth',1.5);
set(H5,'color','b','LineStyle','--');
set(H6,'color','r','LineWidth',1);
set(H7,'color','r','LineStyle','--','LineWidth',1.5);

LEY=[H0 H1 H2 H3];

legend(LEY,sprintf('R %s',Caso1),sprintf('Rst %s',Caso1),
sprintf('R %s',Caso2), sprintf('Rst
%s',Caso2),'Location','NortheastOutside');

set (legend, 'position', [0.88 0.848 0.07 0.06], 'FontSize',8);

```

Tras los radios se realiza el plot de los flujos, adimensionalizados con el valor de referencia, tanto de englobamiento como de cantidad de movimiento.

```

%Flujo

subplot('Position',[0.075757576 0.092592593 0.328282828
0.37037037]);

hold on;

[AX1,H1,H2]=plotyy(x1,Mdot1/Mdot1(1),x1,mdot1/mdot1(1));
%adimensionalizados con I0 yM0

hold on;

hold (AX1(1),'on') %AX(1) is the left axes and AX(2) is the
right axes

hold (AX1(2),'on')

[H3]=plot(AX1(1),x2,Mdot2/Mdot2(1));

hold on;

[H4]=plot(AX1(2),x2,mdot2/mdot2(1));

xlim([0 0.108]);

ylim(AX1(1),[0 2]);

ylim(AX1(2),[0 45]);

grid on;

xlabel('x[m]');

ylabel(AX1(1),'Mdot/Mdot0');

ylabel(AX1(2),'mdot/mdot0');

```

```

set(H2, 'LineWidth', 1.5, 'color', 'b');
set(H1, 'color', 'b', 'LineWidth', 1.5, 'LineStyle', '--');
set(H3, 'color', 'r', 'LineWidth', 1.5, 'LineStyle', '--');
set(H4, 'color', 'r', 'LineWidth', 1.5);

set(AX1, 'Xtick', 0:0.01:0.108, 'FontSize', 12);
set(AX1(1), 'Ytick', 0:0.3:2, 'FontSize', 12);
set(AX1(2), 'Ytick', 0:5:45, 'FontSize', 12);
LEY=[H1 H2 H3 H4];
legend(LEY, sprintf('Mdot %s', Caso1), sprintf('mdot
%s', Caso1), sprintf('Mdot %s', Caso2), sprintf('mdot %s', Caso2));
set (legend, 'position', [0.42 0.371 0.07 0.06], 'FontSize', 8);

```

Y por último el plot de la velocidad (adimensionalizada con el valor de referencia) y la concentración en el eje.

*%Concentracion y Velocidad en el eje*

```

subplot('Position', [ 0.5555555556 0.092592593 0.328282828
0.37037037]);

[H0]=plot(xc11, yc11);
hold on;
[H1]=plot(xc12, yc12);
hold on;
[H2]=plot(xc11, uc11./uc11(1)); %adimensionalizado con U0
hold on;
[H3]=plot(xc12, uc12./uc12(1));

grid on;
xlabel('x[m]');
ylabel('Y u/u0');
ylim([0 1.2]);
xlim([0 0.108]);

set(gca, 'FontSize', 12);

```

```

set(H0, 'LineWidth',1.5,'color','b');
set(H1, 'LineWidth',1.5,'color','r');
set(H2, 'LineWidth',1.5,'color','b','LineStyle','--');
set(H3, 'LineWidth',1.5,'color','r','LineStyle','--');
Ley=[H0,H1,H2,H3];
legend(Ley,sprintf('Ycl %s',Caso1),sprintf('Ycl
%s',Caso2),sprintf('Ucl/U0 %s',Caso1),sprintf('Ucl/U0
%s',Caso2),'location','NortheastOutside');
set (legend, 'position', [0.88 0.386 0.07 0.06],'FontSize',8);

```

## Guardado de las gráficas

Para finalizar el script y el bucle principal se realiza el guardado de las gráficas en el directorio que se ha fijado de salida.

```

%guardar
    name1 =
sprintf('%s/Grafico_t=%1.2fms.png',salida,str2num(timeFolders1{t})*100
0);

    set(f,'PaperPositionMode','auto');
    saveas(f,name1,'png');

    close(f);
end

```

Con ello se guardará una figura con las cuatro gráficas para cada instante de tiempo.

## Ejemplo

En el siguiente ejemplo se muestra la comparación entre el caso inerte base y reactivo, para  $t=3\text{ms}$ .

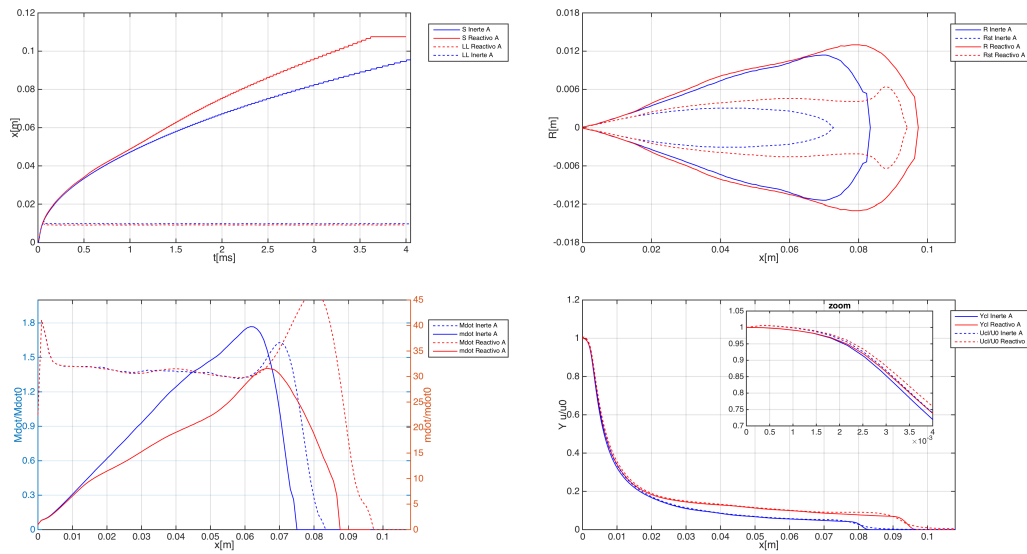


Fig. I.3 Ejemplo de gráfica de flujos para el caso inerte-reactivo base

## I.4 Programa para obtener los principales resultados en .mat

Lo que se pretende con este script es guardar los principales resultados en un archivo .mat, para no tener que ir recalculando todos los parámetros cada vez y sólo tendríamos que cargar el fichero para recuperarlos.

El script guarda los resultados obtenidos en I.3, es decir, concentración, densidad, posición axial, velocidad tanto en el eje como en los cortes radiales hechos, los radios y los flujos, pero también otros parámetros útiles como temperatura en el eje, energía cinética turbulenta, disipación turbulenta, la concentración de OH, de  $C_2H_2$ , entre otros.

En primer lugar el usuario ha de introducir el nombre del caso y sus principales características, temperatura, presión de inyección y densidad del ambiente. También se tienen que introducir el número de puntos radiales y secciones que se ha decidido que tenga el sample, y, como en el script definido en I.3, ,as variables geométricas, dosado, límites y las posiciones en los ficheros de los parámetros que se desean guardar en la estructura. El ejemplo del código que se muestra es para un caso reactivo.

```
case_folder = '/home/pfc/foam/pfc-3.0/run/reactive/Estudio_T/';
% Datos para dar nombre al fichero al guardarlo
Tamb = input('Introduce la temperatura del caso: ','s');
P     = input('Introduce la presion: ','s');
rhoamb = input('Introduce la densidad del ambiente: ','s');

n_r = 300; %numero puntos radiales (cambiar cuando no sea igual)
n_x = 100; %numero secciones
% geometria
r0 = (0.089e-3)/2; %el diametro 0.089mm de la tobera 675

%Variables axiales
Lx = 108e-3; %longitud axial

% limites
limr = 0.01; %limite concentracion radial
lims = 0.001; %limite concentracion axial

Fst=0.067961165;
yst = Fst/(1+Fst);

%posiciones en los ficheros de los datos que se quieren sacar
zpos      = 8 ; % posicion concentracion total en nombre fichero
caso con evaporacion Y+Yv = Ytotal
dpos      = 19; %posicion densidad en nombre fichero caso con
evaporacion, Rho)
YOHpos    = 9;
YCH2Opos  = 10;
YC12H16pos = 11;
YO2pos    = 12;
YCOpos    = 13;
YCO2pos   = 14;
YC2H2pos  = 15;
YH2Opos   = 16;
Tpos      = 20;
```

Tras definir las variables, se inicializan a cero los campos de la estructura.

```

%definimos los datos que contiene la estructura
globalstr = struct();
globalstr.Post1.time      = 0;
globalstr.Post1.xc1      = zeros(n_x,1);
globalstr.Post1.ucl      = zeros(n_x,1);
globalstr.Post1.zc1      = zeros(n_x,1);
globalstr.Post1.dcl      = zeros(n_x,1);
globalstr.Post1.Tcl      = zeros(n_x,1);
globalstr.Post1.xrad     = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.Ry       = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.Ru       = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.Rst      = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.Rst05    = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.Rst2     = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.u        = zeros(n_r,n_x); %campo de velocidades
direccion x
globalstr.Post1.rho      = zeros(n_r,n_x); %campo de densidades
globalstr.Post1.z        = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YC12H16 = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YO2      = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YCO      = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YCO2     = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YOH      = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YCH2O    = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YC2H2    = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.YH2O     = zeros(n_r,n_x);
globalstr.Post1.mdot     = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.Mdot     = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.mfdot    = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.mf       = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.mfmix1   = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.mfmix05  = zeros(1,n_r);
globalstr.Post1.mfmix2   = zeros(1,n_r);

```

Como en el script I.3, se ordenan las carpetas de la carpeta sets de la misma forma (por ello no se especifica el código), y se calculan los parámetros para cada tiempo mediante un bucle que recorre las carpetas de tiempo y se van almacenando en la estructura, de forma que se tiene una estructura principal llamada globalstr y dentro de ésta una serie de subestructuras, tantas como instantes de tiempo, que en su interior tienen almacenados las magnitudes que se ha indicado al principio. El cálculo de las variables es análogo al explicado en el script I.3, lo único que cambia es que dentro del bucle principal hay que guardar las variables en los campos del struct asignados para cada una de ellas, lo cual se realiza en el siguiente fragmento del código, que se añade al final del bucle principal.

```

globalstr(t).Post1.time      = timeFolders1{t};
    globalstr(t).Post1.xcl    = xcl;
    globalstr(t).Post1.ucl    = ucl;
    globalstr(t).Post1.zcl    = zcl;
    globalstr(t).Post1.dcl    = dcl;
    globalstr(t).Post1.Tcl    = Tcl;
    globalstr(t).Post1.xrad    = xrad;
    globalstr(t).Post1.Ry     = Rly;
    globalstr(t).Post1.Ru     = Ru;
    globalstr(t).Post1.Rst    = Rst;
    globalstr(t).Post1.Rst05  = Rst05;
    globalstr(t).Post1.Rst2   = Rst2;
    globalstr(t).Post1.u      = u;
    globalstr(t).Post1.rho    = d;
    globalstr(t).Post1.z      = z;
    globalstr(t).Post1.YC12H16 = YC12H16;
    globalstr(t).Post1.YO2    = YO2;
    globalstr(t).Post1.YCO    = YCO;
    globalstr(t).Post1.YCO2   = YCO2;
    globalstr(t).Post1.YOH    = YOH;
    globalstr(t).Post1.YCH2O  = YCH2O;
    globalstr(t).Post1.YC2H2  = YC2H2;
    globalstr(t).Post1.YH2O   = YH2O;
    globalstr(t).Post1.mdots  = mdots;
    globalstr(t).Post1.Mdots  = Mdots;
    globalstr(t).Post1.mfdots = mfdots;

```

```
globalstr(t).Post1.mf      = mf;  
globalstr(t).Post1.mfmix1 = mfmix1;  
globalstr(t).Post1.mfmix05 = mfmix05;  
globalstr(t).Post1.mfmix2 = mfmix2;
```

Por último se cierra el bucle y se guarda la estructura creada en .mat:

```
filename = sprintf('/home/pfc/Desktop/tfm irene/codigos postp/obtener  
mat/Reactivo/Tamb%sk_P%sPa_rhoamb%skgm3_R_BASE.mat', Tamb, P, rho);  
save(filename, 'globalstr');
```

## I.5 Programa para calcular la distancia de Lift-Off

Para los casos reactivos se calcula la distancia de Lift-Off con tres métodos distintos y se grafican conjunto al campo de temperaturas medias, comparándose con los resultados experimentales.

En este script, primero el usuario introduce el nombre del caso, su temperatura ambiental, el valor de la fracción de mezcla estequiométrica (que dependerá del % de O<sub>2</sub>), la carpeta de entrada donde se encuentra el caso y la carpeta de salida, donde quiere que se guarde la gráfica resultado.

Cabe decir que en este script se hace uso de la carpeta superficies del sample y no de los sets como se hace en los casos anteriores.

```
%% load data  
casename = input('Case name: ', 's');  
Tamb = input('Ambient Temperature: ', 's');  
Zst= input('Zst value: ', 's');  
  
InputFolder =  
'/Users/irene/Desktop/tfmirene/REACTIVO_900/mallaCerrada';
```



```
OutputName = '/Users/irene/Desktop/tfmirene/REACTIVO_900/LOL900';
```

Tras ello se abre la carpeta surfaces donde se encuentra el caso, y se cargan los ficheros del campo de OH, de temperatura y de la concentración. Estos ficheros están ordenados en forma de columnas, donde las tres primeras corresponden a (x,y,z) y la cuarta a la magnitud que se quiere. Por ello, se cargan en diferentes variables cada magnitud, leyendo la columna en la que se encuentran.

```
cd(InputFolder)
cd surfaces
cd 0.004

ficheroT = dlmread('/T_axisymm2Dplane000.raw',' ', 2, 0);
ficheroOH = dlmread('/OH_axisymm2Dplane000.raw',' ', 2, 0);
ficheroZF = dlmread('/ZF_axisymm2Dplane000.raw',' ', 2, 0);

x = ficheroT(:,1);
r = ficheroT(:,2);
T = ficheroT(:,4);
ZF = ficheroZF(:,4);
OH = ficheroOH(:,4);

Tcalc = str2num(sprintf('%s', Tamb)); %temperatura ambiente del calculo
TLOL = Tcalc+400;
```

Se crea una malla positiva en la dirección radial y se interpolan los datos anteriores en los puntos de esta malla.

```
% create uniform mesh only positive radial direction
xCont = 0:0.0001:0.108;
yCont = 0:0.00005:0.0248;
nx = length(xCont);
nr = length(yCont);

[Xq,Yq] = meshgrid(xCont, yCont);
```

```

%% interpolate data

Fx = TriScatteredInterp(x,r,x);
Fr = TriScatteredInterp(x,r,r);
FT = TriScatteredInterp(x,r,T);
FOH = TriScatteredInterp(x,r,OH);
FZF = TriScatteredInterp(x,r,ZF);

qx = Fx(Xq,Yq);
qr = Fr(Xq,Yq);
qT = FT(Xq,Yq);
qOH = FOH(Xq,Yq);
qZF = FZF(Xq,Yq);

```

El primer criterio para calcular el LOL es el de la temperatura del ambiente +400K, se encuentra la posición axial y radial donde se da esta temperatura.

```

%% find LoL x,y coordinates. Criterion: T0+400 (T0=900K,850,800,750)
xLOL1 = FT.X(FT.V >= TLOL, 1);
yLOL1 = FT.X(FT.V >= TLOL, 2);
ind1 = find(xLOL1==min(xLOL1)); %index of LoL
x1 = xLOL1(ind1(1));
y1 = yLOL1(ind1(1));

```

El segundo y tercer criterio es el de 14% y 2% del máximo de la concentración de OH, que se obtienen, al igual que en el método de temperatura, buscando la posición axial y radial donde se dan estos valores.

```

%% 14% OH max

OHmax = max(OH);
xLOL2 = FOH.X(FOH.V >= 0.14*OHmax, 1);
yLOL2 = FOH.X(FOH.V >= 0.14*OHmax, 2);
ind2 = find(xLOL2==min(xLOL2)); %index of LoL
x2 = xLOL2(ind2);
y2 = yLOL2(ind2);

```

```

% 2% OH max
xLOL3 = FOH.X(FOH.V >= 0.02*OHmax, 1);
yLOL3 = FOH.X(FOH.V >= 0.02*OHmax, 2);
ind3 = find(xLOL3==min(xLOL3)); %index of LoL
x3 = xLOL3(ind3);
y3 = yLOL3(ind3);

```

Además se obtiene y dibuja la isolínea que corresponde a la concentración estequiométrica.

```

%% isolinea Zst
Zst = str2num(Zst);
vj = find(qZF(1,:)>Zst);
for j=1:length(vj)
    n = 1 + find(qZF(:,vj(j))>Zst, 1, 'last' );
    Phi(vj(j)) = Yq(n,vj(j));
end
Phi(end+1)=0;
[p,n]=size(Phi);
i = min(find(Phi>0));

```

Por otra parte, se necesitan los datos experimentales del LOL, obtenidos de la web de la ECN, que se han de cargar y, dependiendo del caso que se esté analizando, se selecciona el valor correspondiente.

```

%% Datos experimentales LOL
LOL750 = 46.03e-03;
LOL800 = 28.35e-03;
LOL850 = 22.5e-03;
LOL900 = 17.73e-03;

LOL100Pa = 15.92e-03;
LOL50Pa = 13.95e-03;

```

```

LOL7d6 = 69.35e-03;
LOL15d2 = 27.94e-03;
LOL22d8 = 17.73e-03;

LOL13O2 = 20.58e-3;
LOL21O2 = 12.61e-3;

```

Por último se realiza la gráfica del campo de temperaturas medias y se representan las distancias de LOL obtenidas con los métodos mediante símbolos y la experimental mediante una línea continua blanca. Para dibujar el campo de temperaturas se utiliza el comando surf. El método de la temperatura se dibuja como un diamante, el del 14% como un cuadrado y el del 2% como un hexágono.

```

f = figure('visible','off');
set(f,'renderer','painters');
surf(Xq,Yq,zeros(nr,nx),qT,'LineStyle','none','FaceColor','interp');
colormap jet;
colorbar;
view(0,90);
hold on
surf(Xq,-Yq,zeros(nr,nx),qT,'LineStyle','none','FaceColor','interp');
colormap jet;
colorbar;
view(0,90);
hold on
plot(Xq(1,i-1:n-1), Phi(i-1:end-1), 'w-','linewidth',0.5); %
Stoichiometric isoline
hold on
plot(Xq(1,i-1:n-1), -Phi(i-1:end-1), 'w-','linewidth',0.5); %
Stoichiometric isoline
hold on
line([LOL21O2 LOL21O2],[-0.02 0.02], 'linestyle','-','color','w',
'linewidth',1);
hold on
h1 =
plot(x1,y1,'diamond','markerEdgeColor','k','markerFaceColor','w');
hold on
h11 = plot(x1,-

```

```

y1, 'diamond', 'markerEdgeColor', 'k', 'markerFaceColor', 'w');
hold on
h2 = plot(x2,y2, 'square', 'markerEdgeColor', 'r', 'markerFaceColor', 'w');
hold on
h22 = plot(x2,-
y2, 'square', 'markerEdgeColor', 'r', 'markerFaceColor', 'w');
hold on
h3 =
plot(x3,y3, 'hexagram', 'markerEdgeColor', 'g', 'markerFaceColor', 'w');
hold on
h33 = plot(x3,-
y3, 'hexagram', 'markerEdgeColor', 'g', 'markerFaceColor', 'w');

xlim([0 0.1]);
ylim([-0.02 0.02]);
set(gca, 'Xtick', 0:0.02:0.1);
set(gca, 'Ytick', -0.02:0.01:0.02);
xlabel('x [m]', 'FontSize', 18);
ylabel('r [m]', 'FontSize', 18);
ley = [h1 h2 h3];
legend(ley, 'T+400', '14%OHmax', '2%OHmax', 'location', 'best');
set(legend, 'FontSize', 10);
set(gca, 'FontSize', 18, 'LineWidth', 2, 'TickDir', 'out', 'Box', 'off');
title(sprintf('LOL %s t=4ms', casename), 'FontSize', 10);
%title(sprintf('LOL %s t=%ssec', casename, t), 'FontSize', 10);
axis image
set(f, 'PaperPositionMode', 'auto');

saveas(f, OutputName, 'png');

```

Y se guarda la imagen en formato 'png' en el directorio de salida indicado.

### Ejemplo

El código mostrado es para obtener el LOL para el caso base de 900K.

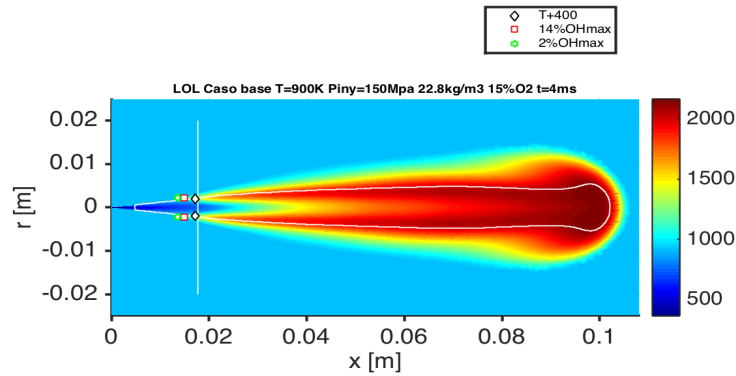


Fig. I.4 Ejemplo de LOL

## I.6 Programa para calcular el tiempo de retraso

El tiempo de retraso ha sido calculado con dos métodos distintos, como ya se ha explicado en la Memoria del presenta Trabajo Fin de Máster.

Como en los otros scripts, primero el usuario introduce los nombres de los casos a analizar para la leyenda y las rutas hacia los ficheros.

```

%% Datos iniciales
Caso1 = 'Base';
Caso2 = '21%';
Caso3 = '13%';
%Caso4 = '900K';

cas1 =
'/Volumes/irene/cmt/SprayA_900_rho22d8_150_Cchild8_TStep1_HDkEps_parabol_51_syncr_time_sigmal.4l_Zlim_1e3_NewMesh';

cas2 =
'/Volumes/irene/cmt/Estudio_O2/SprayA_900_rho22d8_150_21O2_Cchild8_TStep1_HDkEps_parabol_51_syncr_time_sigmal.4l_Zlim_1e3_NewMesh';

cas3 =
'/Volumes/irene/cmt/Estudio_O2/SprayA_900_rho22d8_150_13O2_Cchild8_TStep1_HDkEps_parabol_51_syncr_time_sigmal.4l_Zlim_1e3_NewMesh';

```

Posteriormente se cargan los ficheros mysummary.txt de cada caso y se toman las columnas correspondientes al tiempo y a la temperatura. Se crea un nuevo vector de tiempos que vaya de 0 a 4ms de 0.01 en 0.01ms para tener una buena resolución temporal pero tampoco demasiada como se tiene en el mysummary, y se interpolan los valores de temperatura en esos tiempos.

```
%% cargamos tiempo, temperatura max
cd (cas1)
a = dlmread('/mysummary.txt','\t', 1, 0);
tA = a(:,1)*1000; %ms
time = [0:0.01:4]; %ms
TmaxA = a(:,13);

cd(cas2)
a = dlmread('/mysummary.txt','\t', 1, 0);
tB = a(:,1)*1000;
TmaxB = a(:,13);

cd(cas3)
a = dlmread('/mysummary.txt','\t', 1, 0);
tC = a(:,1)*1000;
TmaxC = a(:,13);

for i =1:length(time)
    Tmax2A(i) = interp1(tA,TmaxA,time(i));
    Tmax2B(i) = interp1(tB,TmaxB,time(i));
    Tmax2C(i) = interp1(tC,TmaxC,time(i));
end
```

El primer método es el de  $T^a+400$ , en el que hay que tener en cuenta que la temperatura a introducir ha de ser la correspondiente a la ambiental del caso.

```
% tiempo de retraso: metodo T+400

T1 = find(TmaxA>=(900+400),1,'first');
```

```
T2 = find(TmaxB>= (900+400),1,'first');
T3 = find(TmaxC>= (900+400),1,'first');

trA2 = tA(T1); % tiempo de retraso
trB2 = tB(T2);
trC2 = tC(T3);
```

El otro método es el de la derivada de la temperatura máxima con respecto al tiempo. El código se muestra para un caso sólo puesto que para los otros es análogo. Primero se hace con el comando *diff* el diferencial de temperaturas y se buscan las posiciones mayores que cero y se toman esos valores del diferencial. Por otra parte, se hace el diferencial del tiempo y se cogen los valores donde el diferencia de temperatura es no nulo y se realiza el cociente entre ambos. Tras ello se obtiene el máximo del diferencial y se busca su posición para así saber a qué tiempo corresponde.

```
%% Derivada dT/dt y encontramos su maximo (tiempo de retraso)

m1 = diff(Tmax2A); %hacemos el diferencialde la temperatura
pos1 = find(m1>0); %encontramos la posicion de los valores positivos
m12 = m1(pos1); % cogemos esos valores del diferencial de TmaxA
n1 = diff(time); %diferencial del tiempo
n12 = n1(pos1); %cogemos los valores correspondientes a los valores
positivos de diffT
dTA = m12./n12; %hacemos la derivada (diffT/difft)
tA2 = time(pos1);%cogemos los valores del tiempo correspondientes a
los positivos del diferencial
dTAmx = max(dTA); %buscamos el maximo
pA = find(dTA==dTAmx,1,'first'); %posicion del maximo en el
diferencial de Temperatura
trA = tA2(pA); %cogemos el tiempo de esa posicion que sera el tiempo
de retraso
```

También se necesitarán los valores de tiempo de retraso experimentales obtenidos de la web de la ECN para cada caso.

```
%% datos experimentales tiempo de retraso
tr7d6 = 1.938; %densidad
tr15d2 = 0.701;
trBASE = 0.435;
```



```

tr750 = 2.342; %temperatura
tr800 = 0.994;
tr850 = 0.666;
trP50 = 0.528; % presion de inyeccion
trP100 = 0.484;
tr13o = 0.529; % %O2
tr21o = 0.316;

```

Y por último se realizan la gráfica donde los tiempos de retraso para cada método se dibujan en forma de círculo de diferentes colores y se unen por líneas del mismo color y se guarda en la ruta dada.

```

f = figure; % tiempo de retraso
set(f, 'visible', 'on');
x = [13 15 21];
exp2 = [tr13o trBASE tr21o];
trTemp = [trC2 trA2 trB2
trmysum = [trC trA trB
hold on
[h1] = plot(x, trTemp, 'o', 'markerSize', 6);
hold on
[h2] = plot(x, trTemp, 'linewidth', 1.5);
hold on
[h3] = plot(x, exp2, 'o', 'markerSize', 6);
hold on
[h4] = plot(x, exp2, 'linewidth', 1.5);
hold on
[h5] = plot(x, trmysum, 'o', 'markerSize', 6);
hold on
[h6] = plot(x, trmysum, 'linewidth', 1.5);
ylim([0.3 0.8]);
grid on
set(gca, 'XTick', [13 15 21]);
ley = [h2 h6 h4];
legend(ley, 'T+400', 'DTmax/dt', 'Exp');
ylabel('Tiempo de retraso [ms]', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 10);

```

```

xlabel('% de oxígeno');
set(h1,'color','b');
set(h2,'color','b');
set(h3,'color','k');
set(h4,'color','k');
set(h5,'color','r');
set(h6,'color','r');

set(f,'paperpositionmode','auto');

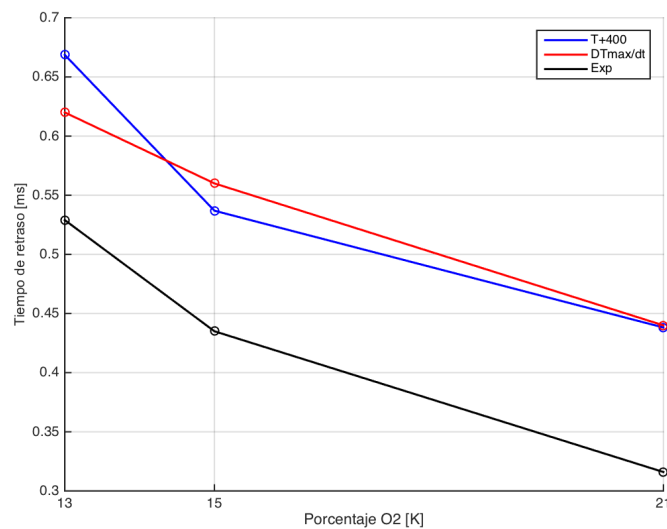
name =
'/Users/irene/Desktop/tfmirene/CASOS_reactivos/Est_O2/tiempoRetraso.png';

saveas(f,name,'png');

```

### Ejemplo

El código que se ha mostrado es para el estudio del % de O<sub>2</sub> en el ambiente dentro de la cámara.



*Fig. 1.5 Ejemplo de tiempo de retraso*

## I.7 Programa para obtener el ratio de penetraciones inerte-reactivo

Este script lo que calcula es el ratio entre la penetración del caso reactivo y la penetración del mismo caso pero en ambiente inerte así como para los casos experimentales. Primero el usuario introduce los nombres de los casos que se quieren obtener los ratios y las rutas en las que se encuentran los ficheros mysummary de cada uno y de los datos experimentales. Los datos experimentales se tienen en una estructura de Matlab .mat (una para el caso reactivo y otra para el caso inerte) y se cargan mediante el comando *load*.

```

%% Datos iniciales

Cas1 = 'CFD BASE';
Cas2 = 'Exp BASE';
Cas3 = 'CFD 15.2kg/m3';
Cas4 = 'Exp 15.2kg/m3';
Cas5 = 'CFD 7.6kg/m3';
Cas6 = 'Exp 7.6kg/m3';

ModeloRbase =
dlmread('/Volumes/irene/cmt/SprayA_900_rho22d8_150_Cchild8_TStep1_HDkE
ps_parabol_51_syncr_time_sigmal.4l_zlim_1e3_NewMesh/mysummary.txt', '\t
', 1, 0);

ModeloIbase =
dlmread('/Volumes/irene/cmt/evaporative/SprayA_900_rho22d8_150_divGamm
a_Tau50_Cchild8_rhorelax10_TasaLarga_HDkEps_MeshR_nViscousH_closed/mys
ummary.txt', '\t', 1, 0);

ModeloR1 =
dlmread('/Users/irene/Desktop/tfmirene/CASOS_Reactivos/Est_D/15.2/mysu
mmmary.txt', '\t', 1, 0);

ModeloI1 =
dlmread('/Users/irene/Desktop/tfmirene/INERTE/densidad_15d2/mysummary.
txt', '\t', 1, 0);

ModeloR2 =
dlmread('/Users/irene/Desktop/tfmirene/CASOS_Reactivos/Est_D/7.6/mysum
mary.txt', '\t', 1, 0);

```

```
ModeloI2 =  
dlmread('/Users/irene/Desktop/tfmirene/INERTE/SprayA_900_rho7d6_150_d  
vGamma_Tau50_Cchild8_rhorelax10_TasaLarga_HDkEps_MeshR_nViscousH_close  
d/mysummary.txt','\t', 1, 0);
```

```
ExpRbase =  
load('/Volumes/irene/cmt/SprayA_contour/PeneMichele_reacting.mat');  
ExpIbase =  
load('/Volumes/irene/cmt/SprayA_contour/PeneMichele_inert.mat');
```

Tras ello se cargan en las variables el tiempo y la penetración. Hay que llevar cuidado de seleccionar la columna correspondiente de tiempo y penetración del mysummary en cada caso.

```
tmodRbase = ModeloRbase(:,1)*1000; %ms  
smoRbase = ModeloRbase(:,8)*1000;
```

```
tmodIbase = ModeloIbase(1:132618,1)*1000;  
smoIbase = ModeloIbase(1:132618,8)*1000;
```

```
tmodR1 = ModeloR1(:,1)*1000;  
smoR1 = ModeloR1(:,8)*1000;
```

```
tmodI1 = ModeloI1(:,1)*1000;  
smoI1 = ModeloI1(:,8)*1000;
```

```
tmodR2 = ModeloR2(:,1)*1000;  
smoR2 = ModeloR2(:,8)*1000;
```

```
tmodI2 = ModeloI2(:,1)*1000;  
smoI2 = ModeloI2(:,8)*1000
```

Sin embargo, los vectores no tienen todos el mismo tamaño por lo que se hace un vector de tiempo de 0 a 4ms y se interpolan las penetraciones de todos los casos para esos tiempo e igualar las dimensiones.

```
tmodel = linspace(0, 4.0, 400); %no tienen la misma longitud por lo  
que interpolamos para que la tengan
```

```
SmodelbaseR = interp1(tmodRbase,smodRbase,tmodel);  
SmodelbaseI = interp1(tmodIbase,smodIbase,tmodel);  
Smodel1R = interp1(tmodR1,smodR1,tmodel);  
Smodel1I = interp1(tmodI1,smodI1,tmodel);  
Smodel2R = interp1(tmodR2,smodR2,tmodel);  
Smodel2I = interp1(tmodI2,smodI2,tmodel);
```

Tras ello se cargan los datos experimentales. Dentro de la estructura que los contienen hay que elegir la columna y variable que necesitamos, los cuales cambiarán con los parámetros del caso.

```
texpRbase = ExpRbase.RES_reacting(1,6).average.TimeAvg/1000;  
sexpRbase = ExpRbase.RES_reacting(1,6).average.PeneAvg;
```

```
texpR1 = ExpRbase.RES_reacting(1,18).average.TimeAvg/1000;  
sexpR1 = ExpRbase.RES_reacting(1,18).average.PeneAvg;
```

```
texpR2 = ExpRbase.RES_reacting(1,21).average.TimeAvg/1000;  
sexpR2 = ExpRbase.RES_reacting(1,21).average.PeneAvg;
```

```
texpIbase = ExpIbase.RES_inert(1,27).average.TimeAvg/1000;  
sexpIbase = ExpIbase.RES_inert(1,27).average.PeneAvg;
```

```
texpI1 = ExpIbase.RES_inert(1,18).average.TimeAvg/1000;  
sexpI1 = ExpIbase.RES_inert(1,18).average.PeneAvg;
```

Seguidamente se realiza el cálculo del ratio entre el caso reactivo y el caso inerte, tanto con los datos experimentales como los obtenidos con el cálculo CFD.

```
%% calculo ratios S  
RatioModbase = SmodelbaseR./SmodelbaseI;  
RatioModbase(isnan(RatioModbase))=0;  
  
RatioMod1 = Smodel1R./Smodel1I;  
RatioMod1(isnan(RatioMod1))=0;
```

```

RatioMod2 = Smodel2R./Smodel2I;
RatioMod2(isnan(RatioMod2))=0;

RatioExpbase = sexpRbase./sexpIbase;
RatioExpbase(isnan(RatioExpbase))=0;

RatioExp1 = sexpR1./sexpI1;
RatioExp1(isnan(RatioExp1))=0;

RatioExp2 = sexpR2./sexpI2;
RatioExp2(isnan(RatioExp2))=0;

```

Y por último se realiza la gráfica en la que se dibujan todos los casos para comparar, los experimentales con línea discontinua y los de CFD con línea continua y se guarda en la ruta deseada.

```

%% figura
f = figure;
set(f, 'visible', 'on');

h1 = plot(texpIbase(2:end),RatioExpbase(2:end), 'k--',
'LineWidth',1.5);
hold on
h2 = plot(tmodel(2:end-1),smooth(RatioModbase(2:end-
1)), 'k', 'LineWidth', 1.5);
hold on
h3 = plot(texpI1(2:end),RatioExp1(2:end), 'r--', 'LineWidth',1.5);
hold on
h4 = plot(tmodel(2:end-1),smooth(RatioMod1(2:end-
1)), 'r', 'LineWidth', 1.5);
hold on
h5 = plot(texpI2(2:end),RatioExp2(2:end), 'b--', 'LineWidth', 1.5);
hold on
h6 = plot(tmodel(2:end-1),smooth(RatioMod2(2:end-
1)), 'b', 'LineWidth', 1.5);
grid on

```

```

ley = [h1 h2 h3 h4 h5 h6];
legend(ley, sprintf('%s', Cas2), sprintf('%s', Cas1), sprintf('%s', Cas4), sp
rintf('%s', Cas3), sprintf('%s', Cas6), sprintf('%s', Cas5));
set(legend, 'location', 'southeast');
xlabel('tiempo [ms]');
ylabel('Sr/Si[-]');
xlim([0 4]);
ylim([0.9 1.2]);

set(f, 'paperpositionmode', 'auto');
name =
'/Users/irene/Desktop/tfmirene/Ratio_Penetraciones/EstudioD.png';
name2 =
'/Users/irene/Desktop/tfmirene/Ratio_Penetraciones/EstudioD.fig';
saveas(f, name, 'png');
saveas(f, name2, 'fig');

```

### Ejemplo

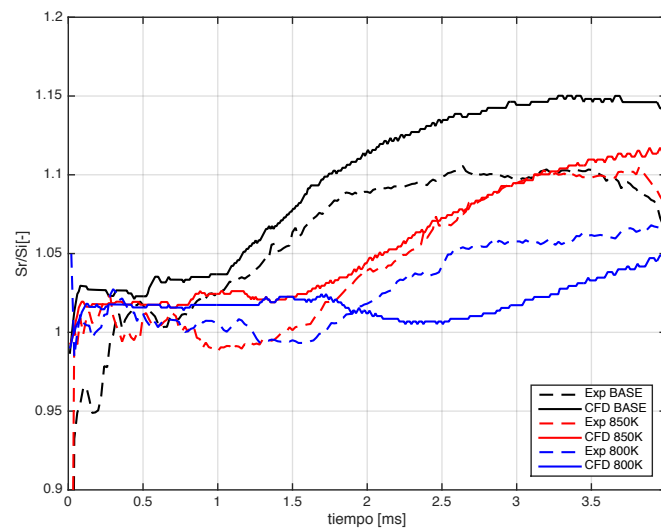


Fig. I.6 Ejemplo de ratio de penetraciones (estudio de temperaturas)



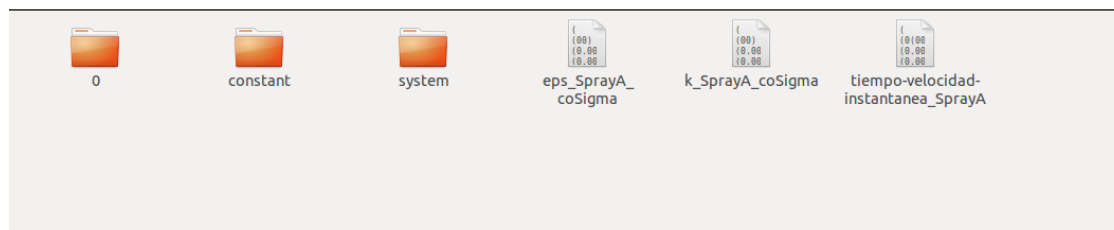


## II. Tutorial de OpenFOAM

### II.1 Introducción

En el presente tutorial se va hacer una explicación de cómo configurar y lanzar el caso de un chorro Diesel inerte y un chorro reactivo en OpenFOAM y cómo hacer el post-procesado para el tratamiento de los resultados.

En ambos casos, la carpeta principal del caso está compuesta de tres subcarpetas (mostradas en la Figura II.1): la carpeta “0” con las condiciones iniciales, como se ha comentado en el Capítulo 3, la carpeta “constant” y “system”; también se han de incluir los ficheros .txt de las condiciones de contorno de velocidad, energía cinética turbulenta y disipación turbulenta, como se explica en el Capítulo 3, en la sección de Condiciones de Contorno.



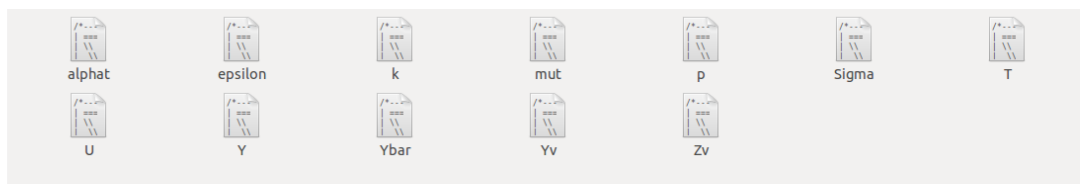
*Fig. II.1 Carpeta inicial*

### II.2 Configuración del caso inerte

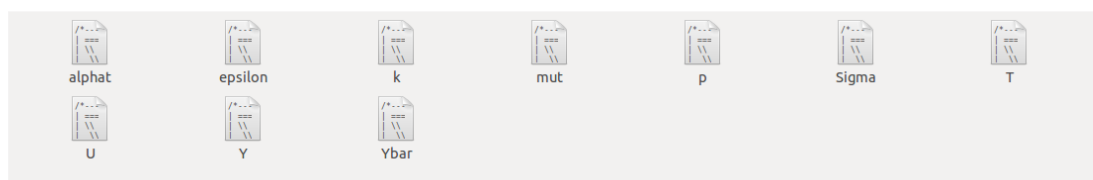
En esta sección se explica cómo se realiza la configuración de un caso inerte, en las que no se produce la reacción de combustión. Estos casos pueden con o sin evaporación.

## II.2.1 Condiciones iniciales

Como ya se ha comentado, las condiciones iniciales se encuentran en la carpeta 0. El aspecto de esta carpeta dependerá de si es un caso evaporativo o no evaporativo, puesto que en el primero se tendrán más ficheros, correspondientes a la parte del vapor ( $Y_v$  y  $Z_v$ ). Ambas se muestran en las Figuras II.2 y II.3.



**Fig. II.2** Carpeta 0 en el caso evaporativo



**Fig. II.3** Carpeta 0 en el caso no evaporativo

Para la configuración de los casos inertes, ya sean evaporativos o no, lo que nos interesan son los ficheros P, T, U, K y epsilon, que corresponden con la presión, temperatura, velocidad, energía cinética turbulenta y disipación, respectivamente.

Los ficheros P y T son muy importantes puesto que fijan las condiciones en la cámara de presión, temperatura y densidad, la cual se especifica ligada a las otras dos variables. En el fichero T hay que introducir la temperatura a la que se encuentra en ambiente en la cámara (en *internalField*) y la del combustible (en el contorno de la malla llamado como *Fuel*), y en el fichero P hay que introducir la presión a la que se encuentra el gas ambiental (en el campo *internalField*).

En los ficheros U, K y epsilon hay que introducir la ruta correspondiente a los ficheros en forma de texto que contienen las correspondientes condiciones de contorno a la entrada, esto es en la parte de la malla llamada como *Fuel*, lo cual ya se muestra a modo de ejemplo en la Figura II.4. Cómo se configuran los ficheros de U, K y epsilon ya ha sido explicado en la sección 3.5, Condiciones de Contorno.

```

/*----- C++ -----*/
=====
Field      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
Operation  | Version: 1.5-dev
And        | Revision: exported
Manipulation | Web: http://www.OpenFOAM.org
-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       k;
}
// ***** //

dimensions     [0 2 -2 0 0 0];
internalField  uniform 0.0148;
boundaryField
{
    fuel
    {
        type          timeVaryingUniformFixedValue;
        fileName      "$FOAM_CASE/k_SprayA_coSigma";
        outOfBounds   clamp;
        value         uniform 1261.5;
    }
    wall1
    {
        type          zeroGradient;
    }
    wall2
    {
        type          zeroGradient;
    }
    side1
    {
        type          wedge;
    }
    side2
    {
        type          wedge;
    }
    axis
    {
        type          empty;
    }
}

// ***** //

```

Fig. II.4 Ejemplo contornos de la malla en el fichero "blockMeshDict"

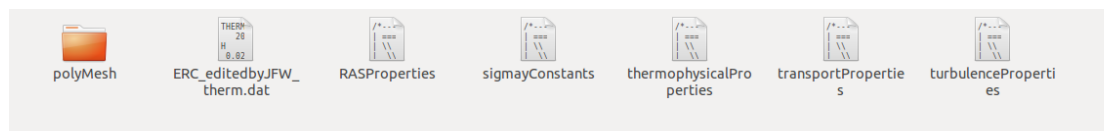
## II.2.2 Carpeta constant

En esta carpeta se encuentra otra subcarpeta llamada polymesh que contiene toda la información de la malla, y también se encuentran ficheros que contienen información acerca del modelo de turbulencia, del modelo de atomización...(Figura II.5)

En el fichero ERC\_editedbyJFW.dat contienen toda la información acerca de las especies de las tablas Janaf. Se debe de tener precaución de que al usar estas especies en lo sucesivo se nombren como aparecen aquí puesto que si no no serán encontradas y producirá errores.

El fichero RASProperties contiene la información acerca del modelo de turbulencia utilizado, High Density Ratio K-Epsilon,. En este se especifican todas sus constantes. Este modelo de turbulencia ya ha sido explicado en el Capítulo 3.

En cuanto al fichero SigmayConstant se especifican todas los parámetros necesarios para el modelo  $\Sigma$ -Y, como los coeficientes para la ecuación de  $\Sigma$  (C1 y C2) que se podrían modificar, compresibilidad, tensión superficial, temperatura crítica... y también las especies a resolver y las temperaturas del gas ambiental y del fuel. Hay que llevar cuidado puesto que si se cambian las condiciones de contorno de temperatura del combustible y del gas del ambiente hay que cambiarlos también en este fichero.



*Fig. II.5 Carpeta Constant*

### II.2.2.1 Malla

La malla es una parte principal del caso, ésta se encuentra dentro de la carpeta polymesh, en el fichero blockMeshDict.

En la Figura II.6 se muestra un ejemplo de la configuración de la malla. La primera línea corresponde a la selección de unidades, en este caso milímetros. El dominio a mallar se define mediante vértices y bloques. Para el caso no evaporativo la malla realizada es de 80mm en la dirección axial del chorro y 25 mm de radio, en cambio, para los casos evaporativos se ha utilizado una malla de 108mm en dirección axial.

En la Figura II.6 se observa que la malla está constituida por nueve vértices y dos bloques. Cada bloque está formado por un conjunto de vértices y se especifica también el número de divisiones (celdas) que se tendrá en dirección axial y radial, lo que lleva implícito el tamaño de celda en cada dirección, así como la progresión de crecimiento del tamaño.

Por ejemplo, el bloque 1 en este caso está constituido por los vértices 2-3-4-5-0-1-1-0, tiene 550 divisiones en dirección axial y 5 en la dirección radial, lo cual sabiendo que en dirección radial la malla mide 25 mm, se tiene un tamaño de celda de 5mm en esta dirección. El último vector corresponde a la progresión de crecimiento, las celdas en



```

edges
(
);

patches
(
  patch fuel
  (
    (2 0 0 5)
  )
  wall wall1
  (
    (6 2 5 9)
  )
  wall wall2
  (
    (3 1 1 4)
    (7 3 4 8)
    (6 7 8 9)
  )
  wedge side1
  (
    (2 3 1 0)
    (6 7 3 2)
  )
  wedge side2
  (
    (5 4 1 0)
    (9 8 4 5)
  )
  empty axis
  (
    (0 1 1 0)
  )
);

mergePatchPairs
(
);

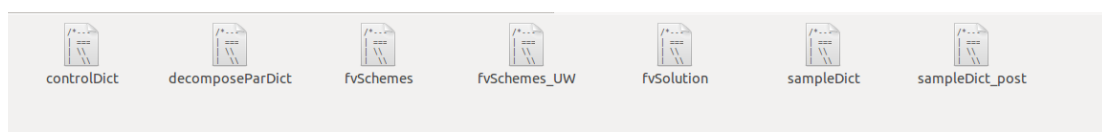
```

*Fig. II.7 Contornos de la malla*

Cabe decir, que si en el fichero de la malla se realizan cambios, se debe de nuevo ejecutar la orden “BlockMesh” para que estos cambios se hagan efectivos y se calcule con la malla modificada.

## II.2.4 Carpeta System

En esta carpeta se incluyen ficheros que configuran algunos parámetros del propio cálculo, los cuales se muestran en la Figura II.8.



*Fig. II.8 Carpeta system*

El primer fichero que nos encontramos el controlDict, en el cual se fijan parámetros de control de tiempo de cálculo y guardado. En la Figura II.9 se muestra una configuración típica. El campo startFrom corresponde al instante en el que queremos iniciar el cálculo, para el que OpenFoam tiene varios comandos para ello, puesto que los cálculos pueden pararse y quererlos reiniciar desde el último tiempo que se tiene. Lo típico es dar un valor a startTime, en el que se especifica el tiempo en el que queremos comenzar.

```

application    dieselFoam;
startFrom      latestTime;
startTime      0;
stopAt         endTime;
//stopAt      nextWrite;
//stopAt      writeNow;
endTime        0.00405;
deltaT         1.0e-09;
writeControl   adjustableRunTime;//timeStep;//
writeInterval  5e-5;//1;//
purgeWrite     0;
writeFormat    ascii;
writePrecision 6;
writeCompression uncompressed;
timeFormat     general;
timePrecision  6;
adjustTimeStep yes;
//maxCo        0.3;
maxCo         2;
maxAcousticCo 10000;
runTimeModifiable yes;

// ***** //

```

*Fig. II.9 ControlDict*

El siguiente campo es stopAt, que nos indica el tiempo en el que queremos que pare el cálculo, para el cual también se tienen varios comandos, como puede ser nextWrite (que está comentado en este ejemplo), el cual para el cálculo en el momento que se realiza

el siguiente guardado de datos. En este caso se tiene que se pare el cálculo en endTime que es un valor introducido por el usuario que puede ser modificado.

DeltaT corresponde al paso de tiempo y writeInterval corresponde al intervalo de tiempo cada cual se va a guardar la información, en este caso cada 50 $\mu$ s.

Para acabar con el fichero controlDict, aparecen los números de Courant y el Courant Acústico, los cuales también pueden ser modificados. Los valores de ambos lo que modificarán también será el paso de tiempo deltaT, lo harán más grande o más pequeño. Si queremos acelerar el código, se podrían aumentar los valores de ambos puesto que así, el deltaT se hará más grande, pero se debe tener cuidado puesto que esto puede provocar problemas de convergencia y de inestabilidades del cálculo, que puedan hacer hasta que se pare. Por otra parte, en los casos en los que la convergencia sea difícil, se pueden modificar los Courant a valores más pequeños, el cálculo se hará más lento pero será más estable.

En segundo lugar aparece el fichero decomposeParDict (Figura II.10), en el que se especifica en número de procesadores en los que se va a dividir el cálculo. Si no se va a lanzar con varios procesadores, no se tiene que modificar nada en este fichero.

```

numberOfSubdomains 8;

method            simple;

simpleCoeffs
{
    n              (8 1 1);
    delta          0.001;
}

hierarchicalCoeffs
{
    n              (1 1 1);
    delta          0.001;
    order          XYZ;
}

metisCoeffs
{
    processorWeights
    (
        1
        1
        1
        1
    );
}

manualCoeffs
{
    dataFile       "";
}

distributed       no;

roots
(
);

```

*Fig. II.10 DecomposeParDict*



En el campo correspondiente a `numberOfSubdomains` se tiene que introducir el número de procesadores que queremos utilizar para calcular, en este caso 8.

Los siguientes ficheros de `fvchemes` y `fvsolution` tienen los métodos y esquemas numéricos para resolver las ecuaciones y las variables ( $U, P, \Sigma \dots$ ), pero quedan fuera del propósito de este proyecto y por ello no se explican con detalle.

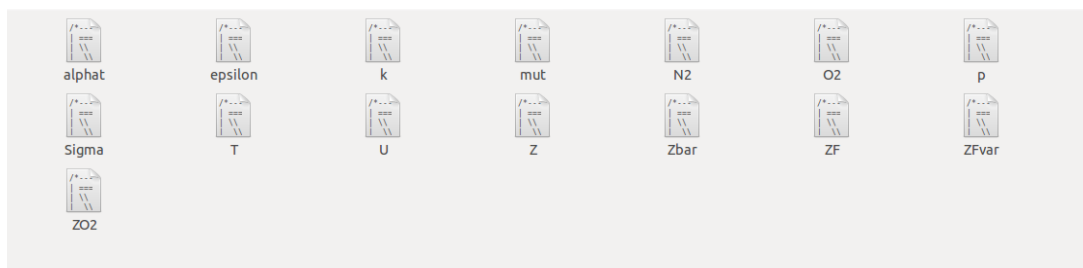
Por último, dentro de la carpeta `system` se tiene el fichero `sampleDict`. Este fichero es muy importante para el post-procesado de los resultados puesto que nos proporciona los datos sobre las variables que nos interesan, pero se comentará más detenidamente en el apartado de Post-procesado.

## II.3 Configuración del caso reactivo

En este apartado se va a explicar cómo es la configuración de los casos reactivos, estando las principales diferencias en la carpeta 0 de las condiciones de contorno y un fichero dentro de la carpeta `Constant`, puesto que la malla, las variables del modelo y los parámetros de cálculo son iguales a los comentados en el caso inerte. Por lo tanto sólo se va a comentar la carpeta de las condiciones de contorno y `Constant` y se explicará lo que hay que modificar para lanzar cada estudio paramétrico realizado.

### II.3.1 Condiciones iniciales

La carpeta 0 para los casos reactivos tiene el aspecto mostrado en la Figura II.11. En estos casos el ambiente está compuesto por nitrógeno y oxígeno por lo que ahora en las condiciones aparecen las variables relacionadas con éste último.



*Fig. II.11 Carpeta 0 en el caso reactivo*

Como en los casos inertes, los principales ficheros que hay que modificar son U,P,T, pero también, ahora, N2,O2 y ZO2.

En cuanto a los estudios paramétricos en los que se ha modificado la temperatura del gas ambiental, para su configuración se tiene que modificar dicha temperatura en el fichero T, así como en el fichero sigmaConstant que se encuentra dentro de la carpeta constant. Al cambiar la temperatura ambiental también cambiará la presión dentro de la cámara, por lo tanto, también se ha de especificar el valor de la presión, calculada como,

$$p = \frac{\rho RT}{PM}$$

Hay que prestar atención, que ahora el peso molecular del gas ambiental ha cambiado puesto que aparece también el oxígeno, y antes sólo había nitrógeno.

Para el estudio de presión de inyección, no se modifican las condiciones en la cámara, sino que se modifica la tasa de inyección, por lo que se han de modificar los ficheros de texto correspondientes a las condiciones de contorno en la entrada de fuel de U,K y épsilon.

En cuanto al estudio paramétrico de densidad, lo único que se ha de modificar es la presión con la ecuación anterior, la temperatura del gas ambiental será la misma (900k) y el peso molecular del aire también.

Por último, para el estudio de composición, en el que se modifica el porcentaje de oxígeno en el ambiente de la cámara, se ha de modificar la presión del interior de la cámara puesto que el peso molecular del aire cambia con el porcentaje de oxígeno y en los ficheros de N2, O2 y ZO2 se han de introducir las fracciones másicas de nitrógeno y oxígeno normalizadas (se tiene un fichero Excel en los que se calculan según las condiciones).

Con todo ello quedarían configuradas las condiciones de contorno para los diferentes estudios paramétricos en los casos reactivos.

## II.3.2 Carpeta constant

Dentro de esta carpeta el único fichero diferente al de los casos inertes es `jrjProperties`, en el que se especifica el tipo de modelo de combustión tabulado en la primera línea (AI, HAI o ADF). Los casos analizados han sido con el modelo ADF, puesto que se AI y HAI están desactivados, como se ve en la Figura II.12.

```
// * * * * * //

HAI      0; // 1 for HAI model
AI       0; // 1 for AI model

Zs      0.325844; // mixture fraction at saturation
numberOfTabulated_c_values 51; // number of c values in table
expC    2.0; // exponent of distribution of c values (default: 1 => linear)
timeStepRatio 1; //Timestep ratio for chemistry against CFD time step

tableInfos
{
    pathChemistryTable "/data/combustion/foam/combustion-3.0/900K_59.6bar_0.1502_rho22.8/lim_completa_exp_2/
    tablas_integradas_amin_10_N51_parabol/
    C12H26_NARAYANASWAMY_59.6_900_363_0.15a_min_10_amax_10000_syncr_time_sigma_1.41/";
    pathChiTransfTable "/data/combustion/foam/combustion-3.0/900K_59.6bar_0.1502_rho22.8";
    nameCTT "J_C12H26_NARAYANASWAMY_59.6_900_363_0.15.ctt"; // File name of J matrix
}

tableLimits // limits of the chemistry table (set to -1 for automatically detected values)
{
    Zm_lowerLimit -1;
    Zm_upperLimit -1;
    S_lowerLimit -1;
    S_upperLimit -1;
    xSt_lowerLimit -1;
    xSt_upperLimit -1;
    Zlim 0.001;
}

// Threshold of OH determining LOL (ECN definition default: 0.02*max(OH)) [-]
thresholdOH 0.02;

// Selection of the source term column (1 if wdot / 2 if Yc_dot) [default: 2]
columnNumberSourceTerm 2;

// Flag to activate info of the combustion model (0=no info)
debug 0;

cPushEQI 1;
```

*Fig. II.12 jrjProperties*

Por otra parte, para cada caso de estudio hay que especificar el correspondiente valor de fracción de mezcla saturado, y la ruta en la que se encuentren las tablas para la combustión en la máquina en la que se esté calculando, esto hay que llevar cuidado de que se especifique bien porque si no el solver no encontrará las tablas y no se podrá simular el caso. Para cada caso, con cada condición de contorno se tiene una tabla específica.

## II.4 Cálculo del caso

Tras la configuración se procede a lanzar los casos. Este proceso es el mismo ya sea un caso inerte o reactivo, lo único que cambiará será el nombre del solver.

Para calcular los casos lo primero que hay que hacer es ejecutar OpenFOAM en la máquina y posteriormente el comando BlockMeshDict si se ha realizado alguna modificación en la malla y que surja efecto. Si el caso va a ser lanzando a varios procesadores, se tienen que descomponer éstos mediante el comando decomposePar, lo que hará será crear unas carpetas llamadas Processor\* que van desde 0 hasta el número de procesadores indicados. En estas carpetas Processor\* se crean copias de las condiciones iniciales y de la carpeta constant que necesita cada procesador para calcular.

Tras la descomposición en procesadores, queda lanzar el caso mediante el comando:

$$mpirun -np n solver\_name -parallel > log \mathcal{E}$$

Donde n corresponde al número de procesadores en los que se va a calcular el caso y solver\_name es el nombre del solver que se va a emplear en cada caso. Cuando el caso no se lanza a varios procesadores, entonces el comando para lanzarlo se simplifica a:

$$Solver\_name > log \mathcal{E}$$

Una vez hecho esto el caso estará corriendo en un segundo plano. Para poder verlo se puede lanzar el comando `-tail -f log` que nos muestra la última parte del fichero log o también se puede ver la parte fina del fichero mysummary.

Si por algún caso se tuviese que parar la ejecución se haría ejecutando el comando top e identificando los procesos correspondientes al solver que estamos utilizando y utilizar kill seguido del identificador del proceso para pararlos.

## II.5 Post-Procesado

Cuando el cálculo haya finalizado, se tiene que hacer primero una reconstrucción de los datos de los diferentes procesadores, mediante el comando reconstructPar. Se crearán las carpetas correspondientes a cada tiempo guardado con la información de todas las variables que se había especificado en el código que resolviese. Posteriormente, las carpetas processor\* se pueden eliminar de la carpeta general del caso.

Se tendrán, además, dos ficheros de texto log y mysummary que contienen también información sobre el cálculo. El fichero mysummary es muy útil y tiene una gran importancia en el post-procesado. Este fichero guarda la información que se le haya indicado en filas y columnas y en la cabecera aparecen todos los nombres de todas las variables que ha guardado. El ejemplo mostrado en la Figura II.13 muestra el tiempo, la penetración, longitud líquida, la temperatura máxima, entre otras.

```
Tiempo(s):1      PL Z>0.01(m):2 PL Z>0.005(m):3 PL Z>0.001(m):4 PL Zbar>0.0015(m):5 PL Zbar>0.001(m):6 PV ZF>0.005(m):7 PV ZF>0.001(m):8 PV Y[rfuel[0]]>0.001(m):9 p[bar]:10
T_vol[K]:11     T_mass[K]:12 T_max[K]:13 T_min[K]:14 rho[kg/m3]:15 LOL(2%0m) [m]:16 HRR [J/s]:17 Mfu:18 Mfl:19 Mfz:20 Niny:21
1.19999e-09     4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  0  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06  0  0
5.49793e-15     5.49793e-15  2.71051e-20  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  0  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06  0
2.63997e-09     4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  0  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06  0
1.09784e-16     5.44571e-15  5.55549e-15  9.83913e-18  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
4.36788e-09     4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
0  2.18456e-16  5.39635e-15  5.61481e-15  3.58058e-17  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
6.44136e-09     4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
0  3.26045e-16  5.37162e-15  5.69766e-15  6.73596e-17  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
8.92947e-09     4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
4.33004e-16     5.38925e-15  5.82226e-15  1.78568e-16  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
1.19151e-08     4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
0  5.48123e-16  5.47214e-15  6.01226e-15  3.38302e-16  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  4.47025e-06  59.6  900  900  900  363  22.8445 4.47025e-06
```

Fig. II.13 mysummary

Otro aspecto importante para el post-procsado es, el fichero sampleDict, que se ha mencionado antes, que nos permite especificar qué variables nos interesan. Este fichero se muestra en la Figura II.14. En la primera línea se indica el método de interpolación y en setFormat se especifica el formato en el que se quieren que salgan los archivos.

```

interpolationScheme cellPoint;
//interpolationScheme cell;

setFormat      raw;
surfaceFormat  raw;
sets
(
  axis
  {
    type      uniform;
    axis      x;
    start     ( 0.0 1e-8 0.00 );
    end       ( 0.108 1e-8 0.00 );
    nPoints   300;
  }

  rad-0.001069
  {
    type      uniform;
    axis      y;
    start     (0.001069 0.0 0.0 );
    end       (0.001069 0.015 0.0);
    nPoints   300;
  }

  rad-0.002139
  {
    type      uniform;
    axis      y;
    start     (0.002139 0.0 0.0 );
    end       (0.002139 0.015 0.0);
    nPoints   300;
  }
}

```

Fig. II.14 SampleDict

El campo sets proporciona la información de las variables en un corte que se le indica. En el ejemplo, aparece primero el bloque axis, en el que se especifica el eje en el que se va a realizar el corte, el x que es el de la inyección, las coordenadas de comienzo y finalización del barrido axial y por último el número de puntos que se quiere. Cuantos más puntos se le dé, mayor resolución.

Lo siguiente que aparecen son los bloques radiales, en el que el nombre especifica la distancia axial a la que se realiza el corte radial. También se indica el inicio y final, el eje y el número de puntos que se quieren.

Tras los sets, está el campo surfaces que crea información de toda la malla al completo con la información que se haya decidido que obtenga, como se muestra en la Figura II.15.

```

surfaces (
  axisymm2Dplane000
  {
    interpolate      true;
    type plane;
    basePoint (0 0 0);
    normalVector (0 0 1);
  }
);

```

Fig. II.15 Surfaces

Y por último, para finalizar con el fichero `sampleDict`, se tienen que indicar el nombre correspondiente a las variables que se quiere que `sample` obtenga. Estas variables ya dependerán de si el caso es inerte evaporativo o no evaporativo o reactivo.

Para ejecutar este fichero sólo hay que escribir `sample` y se crearán las carpetas `sets` y `surfaces` que contendrán la información anteriormente explicada. Este comando sacará todos los `set` y `surfaces` para todos los tiempos en los que se han guardado resultados, pero si lo que nos interesa son los resultados para un cierto tiempo o para el último tiempo, se puede hacer escribiendo el comando `sample` seguido de `-times` y el tiempo o tiempos que nos interesen o `sample` seguido de `latestime` lo que nos proporciona los `sets` y `surfaces` del último tiempo guardado.





# III. Estudio del englobamiento de aire y del coeficiente de englobamiento del chorro Diesel

## III.1 Introducción

En este capítulo se analizan varios métodos para calcular el englobamiento y coeficiente de englobamiento puesto que en el interior del chorro la densidad sufre importantes variaciones, lo que hace muy difícil que con métodos como PIV se puedan tener datos experimentales para calcular el coeficiente de englobamiento dentro de éste, como si es posible con CFD. Por lo tanto se buscan otros métodos en los que la densidad se pueda mantener constante al valor del gas ambiental para simplificar. Se realizarán comparaciones con los resultados obtenidos del coeficiente de englobamiento integrando en el dominio interior del chorro para, así, verificar y validar la robustez de los métodos.

## III.2 Definición de los métodos

En general, el coeficiente de englobamiento se define como:

$$C_{eng} = \frac{\Delta \dot{m}}{\Delta x} \cdot \frac{d_{eq}}{\dot{m}_0} \quad \text{Ec. III.1}$$

Donde  $\Delta \dot{m}$  es el incremento del gasto másico para cada  $\Delta x$ ,  $\dot{m}_0$  es el gasto másico de referencia y  $d_{eq}$  es el diámetro equivalente, el cual se calcula como:

$$d_{eq} = d_0 \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_a}} \quad \text{Ec. III.2}$$

Donde  $\rho_f$  es la densidad del combustible,  $\rho_a$  es la densidad del aire y  $d_0$  es el diámetro de la tobera, en este caso la utilizada es la 675.

El método considerado como método de referencia para calcular el englobamiento de aire por parte del chorro y el posterior coeficiente de englobamiento, es el que lo obtiene mediante la integración en el dominio interior del chorro, matemáticamente expresado en la Ec.III.3

$$\dot{m}_{ref}(x) = \int \rho u dA \quad \text{Ec. III.3}$$

El cual para nuestro caso se simplifica a:

$$\dot{m}_{ref}(r) = \int_0^R \rho u 2\pi r dr \quad \text{Ec. III.4}$$

Donde la integral se realiza desde el eje hasta el límite del radio de composición, es decir del 1% de la fracción de mezcla en el eje. Gráficamente se muestra en la Figura III.1.

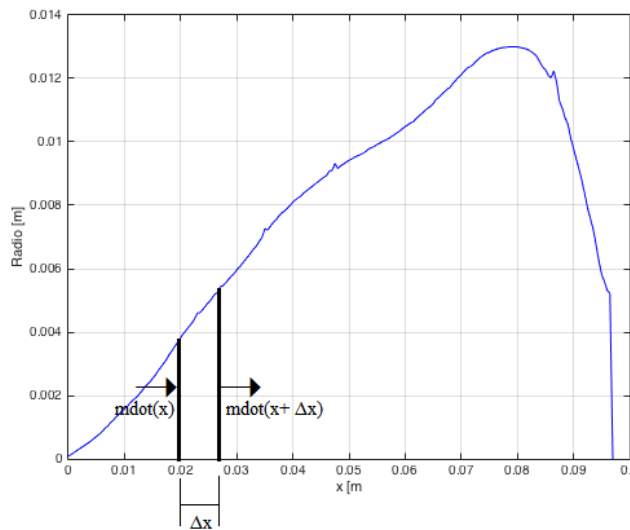


Fig. III.1 Método de referencia para el cálculo del englobamiento y coeficiente de englobamiento

Y el coeficiente de englobamiento de referencia se obtiene según la Ec.III.5.

$$C_{engRef} = \frac{\dot{m}_{i+1} - \dot{m}_i}{\Delta x} \frac{d_{eq}}{\dot{m}_0} \quad \text{Ec. III.5}$$

Por lo tanto, se obtiene como el incremento del gasto másico para cada sección dentro del eje, dividido por el incremento axial de cada sección considerada y multiplicada por el diámetro equivalente y  $1/\dot{m}_0$ .

El siguiente método utilizado es el denominado como **método del radio**, en el que el coeficiente de englobamiento se calcula en los puntos que conforman el límite del radio de composición, es decir, se calcula directamente en el límite de éste, sin tener en cuenta lo que sucede en su interior (gráficamente mostrado en la Figura III.2). Se calcula aquí puesto que se supone que la densidad es la del aire ambiental, o muy similar a ésta, por lo tanto, es conocida.

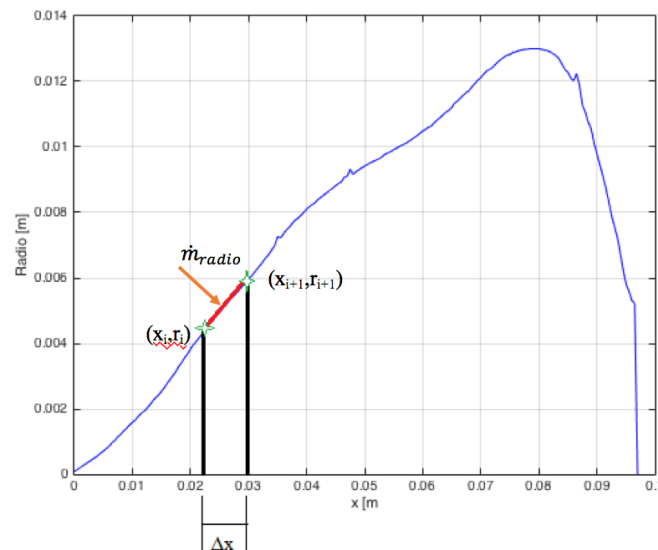


Fig. III.2 Método del radio

Con este método el englobamiento de aire en cada punto de la superficie límite del chorro se calcula como:

$$\dot{m}_{radius} = \rho_a 2\pi r V_n \cdot \Delta l = \rho_a 2\pi \bar{r} \bar{v} \cdot \Delta l \quad \text{Ec. III.6}$$

Donde  $\rho_a$  es la densidad del aire ambiental. La Ec.III.6 es equivalente a:

$$\dot{m}_{radius}(i) = 2\pi 0.5\rho \cdot (r_i v_i + r_{i+1} v_{i+1}) \cdot width(i) \quad \text{Ec. III.7}$$

Donde  $r_i$  y  $r_{i+1}$  son las coordenadas radiales consecutivas del radio (reflejadas en la Figura III.2),  $v_i$  y  $v_{i+1}$  son las correspondientes velocidades en esos puntos, y  $width(i)$  es la distancia que hay entre ambos puntos, calculada según la Ec.III.8.

$$width(i) = \sqrt{(r_i - r_{i+1})^2 + (x_i - x_{i+1})^2} \quad \text{Ec. III.8}$$

Con ello, el coeficiente de englobamiento para el método del radio se obtiene como:

$$C_{engRadius} = \frac{\dot{m}_{radius}}{\Delta x} \frac{d_{eq}}{\dot{m}_0} = \frac{\rho_a 2\pi V_n \cdot \Delta l}{\Delta x} \frac{d_{eq}}{\dot{m}_0} \quad \text{Ec. III.9}$$

Donde  $\Delta x$  es la distancia axial que hay entre los puntos consecutivos considerados del radio.

El tercer método empleado para calcular el coeficiente de englobamiento es el **método de las streamlines** o líneas de corriente. En este método el englobamiento de aire por parte del chorro se calcula en el extremo superior de las streamlines llamado como inlet, donde la densidad es conocida y constante, puesto que es la del aire ambiental, y se supone que en un tubo de corriente (formado por dos líneas de corriente consecutivas) ésta permanece constante hasta el límite con el radio. Con este método se quiere estimar el coeficiente de englobamiento desde fuera del chorro, donde la densidad se supone constante a la del ambiente y no sufre importantes variaciones.

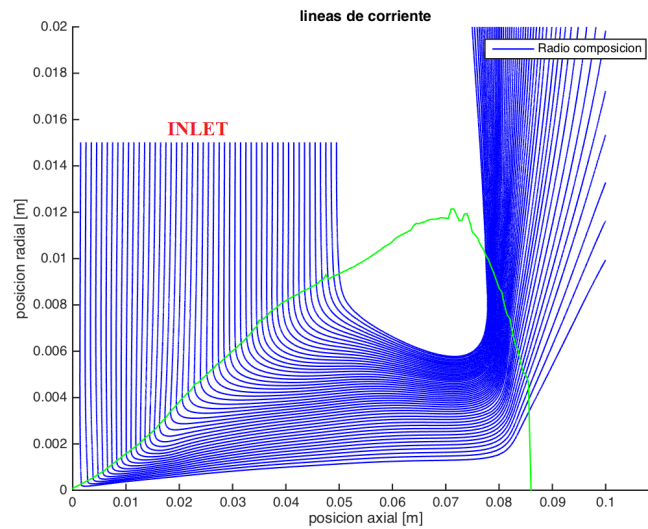


Fig. III.3 Método líneas de corriente

El englobamiento con este método calculado en el inlet (llamado como inlet\_  $\dot{m}$ ) se calcula de forma análoga a las Ecuaciones III.6 y III.7, con la salvedad de que en este caso  $r_i$  es la coordenada radial del punto inicial de la línea de corriente i (llamado como inlet\_x,inlet\_r) y  $r_{i+1}$  se calcula lanzando una perpendicular al vector velocidad en el punto (inlet\_x,inlet\_r) y se toma el punto donde ésta corte a la línea de corriente i+1, (inlet\_xnext,inlet\_rnext).  $v_i$  y  $v_{i+1}$  son las velocidades en dichos puntos y  $\Delta l$  o width es el ancho que hay entre ambas líneas de corriente. Gráficamente se muestran en las Figuras III.3 y III.4.

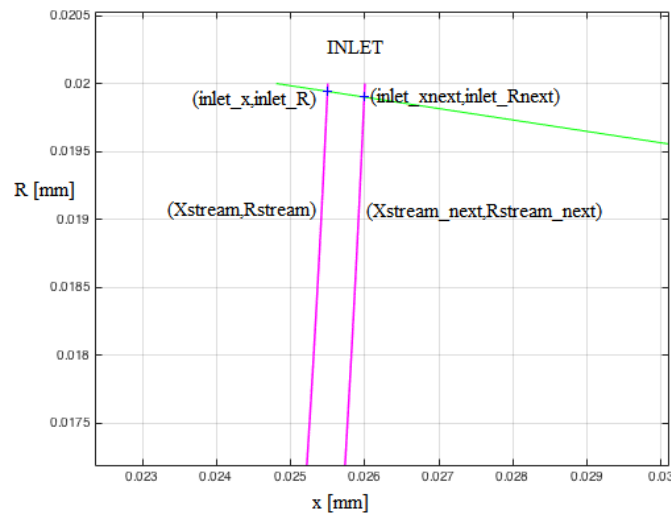


Fig. III.4 Detalle del método de las líneas de corriente para obtener los puntos iniciales

El coeficiente de englobamiento con el método de las líneas de corriente se obtiene según la Ec.III.10.

$$C_{engSL} = \frac{inlet \dot{m} \cos(\theta - \varphi) d_{eq}}{\Delta x \dot{m}_0} \quad \text{Ec. III.10}$$

Donde el gasto másico en el inlet tiene que ser proyectado en el chorro según la horizontal con el coseno de la diferencia entre el ángulo del chorro ( $\theta$ ) y  $\varphi$ . El  $\Delta x$  es la diferencia axial entre los puntos donde las líneas de corriente consideradas intersectan con el límite del radio, conocidas como outlet\_x y outlet\_xnext.

### III.3 Casos estudiados

Para la comprobación y validación de los métodos se han analizado diversos casos, inertes y reactivos, tanto con malla abierta como con malla cerrada, los cuales se resumen en la Tabla III.1.

Casos	Inerte		Reactivo	
	Malla Abierta	Malla Cerrada	Malla Abierta	Malla Cerrada
900K	<b>x</b>	<b>x</b>	<b>x</b>	<b>x</b>
800K			<b>x</b>	<b>x</b>
750K			<b>x</b>	<b>x</b>

Tabla III.1. Casos estudiados

### III.4 Análisis del método

Con los casos mencionados en el apartado III.3, se han realizado diferentes pruebas con los métodos explicados para obtener el coeficiente de englobamiento, tanto con el método del radio como con el método de las líneas de corriente.

#### III.4.1 Método del radio

Para el estudio del método del radio se ha analizado la influencia que tiene en los resultados de coeficiente de englobamiento el utilizar la densidad constante a la del gas ambiental, es decir  $22.8\text{kg/m}^3$  o utilizar la densidad local en cada punto del límite del radio, pues con CFD se obtiene todo el campo de densidades y es posible obtener la densidad local en el punto que se quiere mediante interpolaciones.

Esta comprobación se ha hecho con los casos abiertos de 900K (inerte y reactivo) y de 750K (reactivo), cuyos resultados se muestran en la Figura III.5.

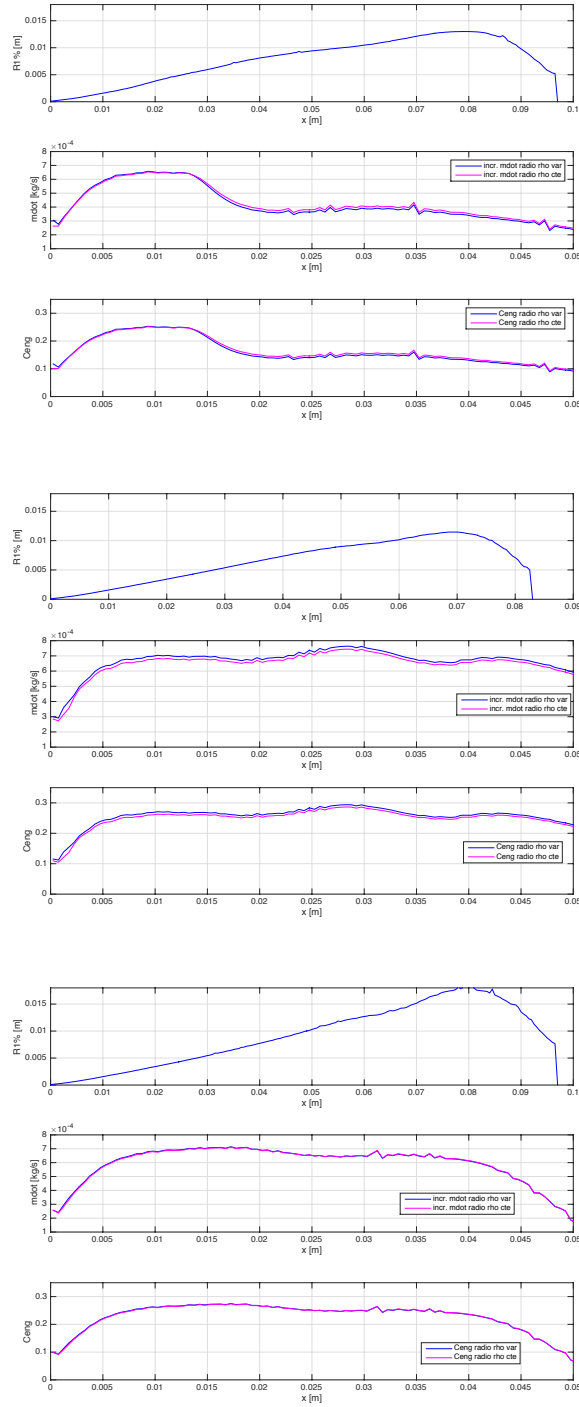


Fig. III.5. Comparación englobamiento y coeficiente de englobamiento en el caso de 900K reactivo (superior), 900K inerte (central) y 750K reactivo (inferior), todo para 3ms

Como se puede observar en las tres imágenes de la Figura III.5, el mantener la densidad a un valor constante (representado en magenta) y utilizar la densidad local (en azul) en cada punto no supone una gran influencia. Si se muestran los contornos de

densidad (Figura III.6), por ejemplo para el caso de 750K, se observa que en el borde del chorro la densidad es muy similar a la del ambiente.

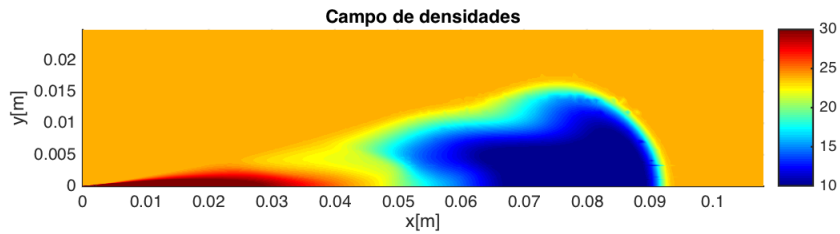


Fig. III.6. Campo de densidades para el caso de 750K abierto

### III.4.2 Método de las líneas de corriente

En el método de las líneas de corriente se han hecho varios análisis para comprobar su viabilidad. Primero se ha hecho un estudio de cómo afecta el punto de inicio donde empiezan éstas y posteriormente un estudio de cómo es el gasto másico en un tubo de corriente, es decir entre dos líneas de corriente.

#### III.4.2.1 Estudio del punto inicial de las líneas de corriente

Para realizar este estudio se ha utilizado el caso de 900K tanto inerte como reactivo, con malla abierta. Se han estudiado cuatro posiciones radiales, 12mm, 14mm, 17mm y 20mm. En la Figura III.7 se muestra una sucesión de cómo varían las líneas de corriente para el caso reactivo de 900K a modo de ejemplo (todos ellos a 3ms tras el comienzo de la inyección).



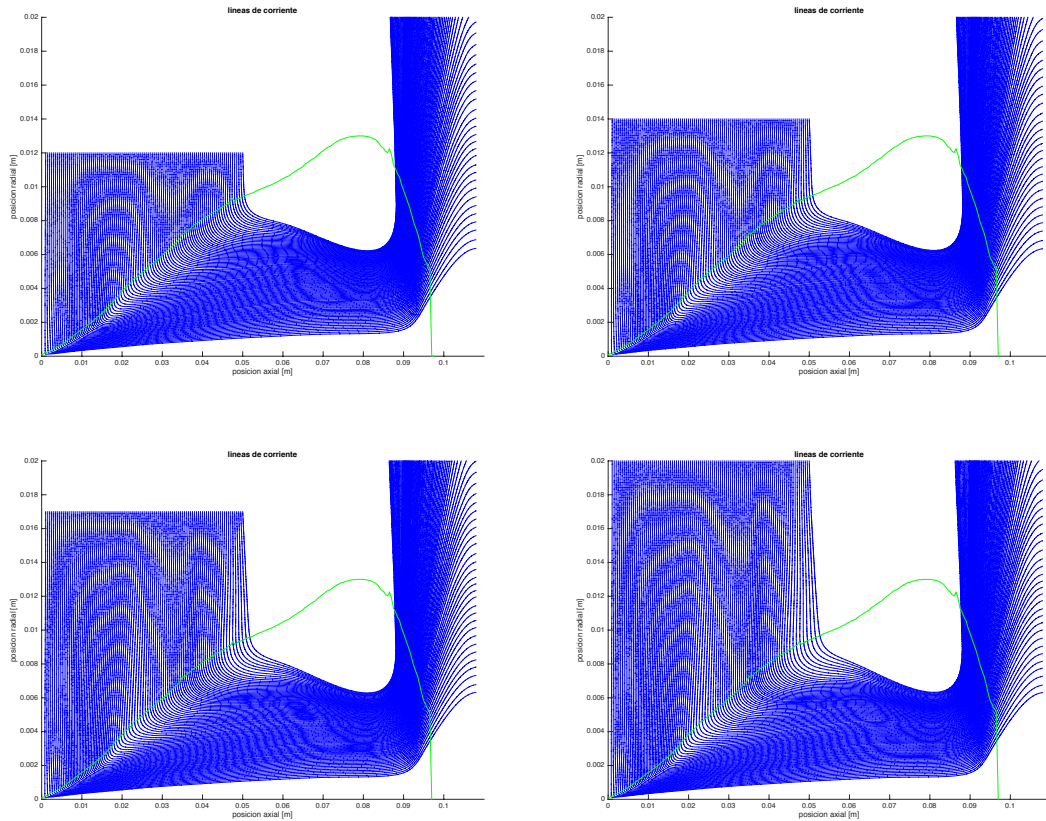


Fig. III.7. sucesión de líneas de corriente según el punto inicial

Con ello los resultados obtenidos de coeficiente de englobamiento con los diferentes puntos de comienzo de las líneas de corriente (Figura III.8 caso inerte y Figura III.9 caso reactivo), muestran que conforme se va cogiendo un punto radial de inicio más bajo, es decir, más cercano al límite del radio de composición, el englobamiento y el coeficiente de englobamiento obtenido con las streamlines (en azul) va asemejándose más al obtenido con el método considerado de referencia (en rojo).

Anexo III: Estudio del englobamiento de aire y coeficiente de englobamiento del chorro

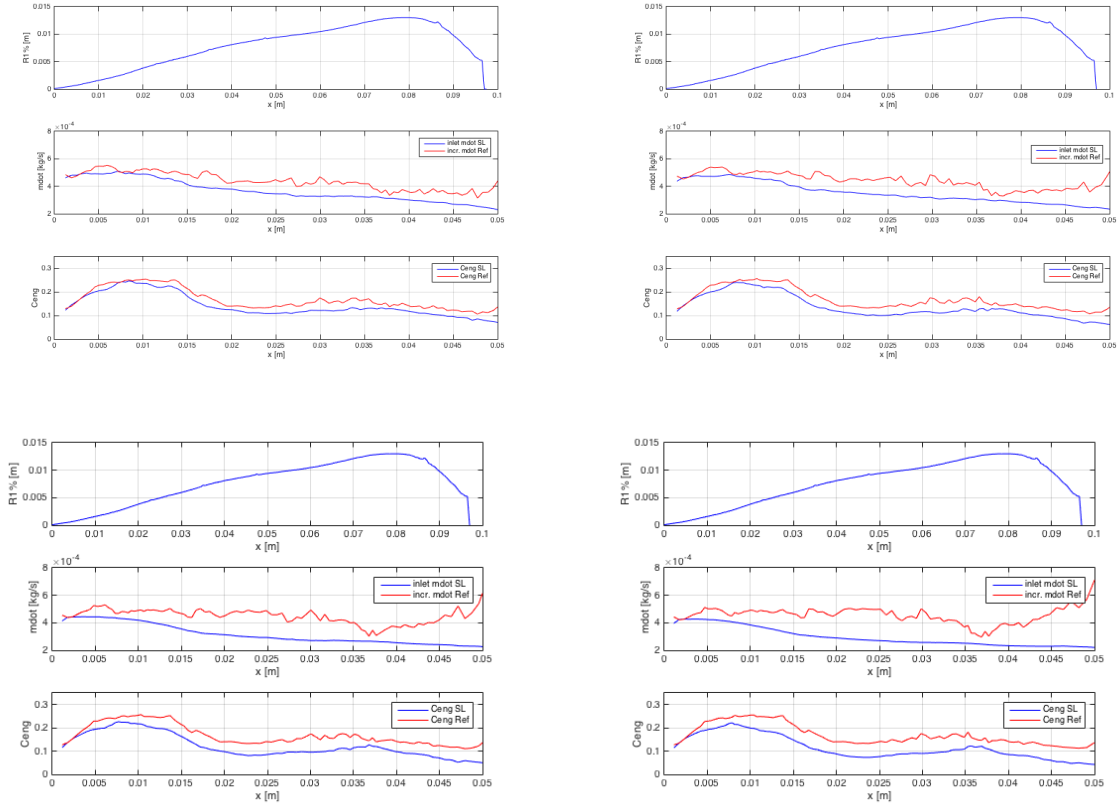
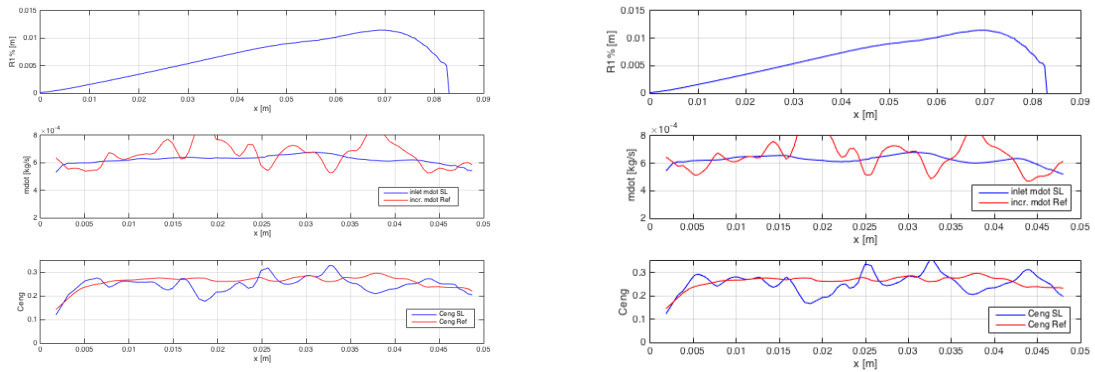
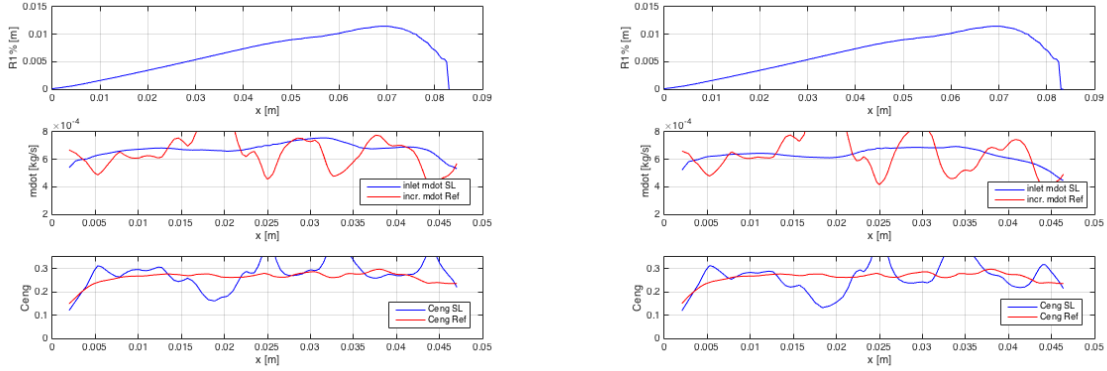


Fig. III.8 Comparación de englobamiento y coeficiente de englobamiento en el caso de 900K reactivo para diferentes puntos de inicio de las streamlines. 12mm(superior izq.), 14mm (superior dcha.), 17mm (inferior izq.) y 20mm (inferior dcha.), (3ms)





**Fig. III.9** Comparación de englobamiento y coeficiente de englobamiento en el caso de 900K inerte para diferentes puntos de inicio de las streamlines. 12mm (superior izq.), 14mm (superior dcha.), 17mm (inferior izq.) y 20mm (inferior dcha.), (3ms)

En el caso inerte lo que se observa, también, es que al ir disminuyendo la posición radial de inicio de las líneas de corriente, el ruido en los resultados se va atenuando.

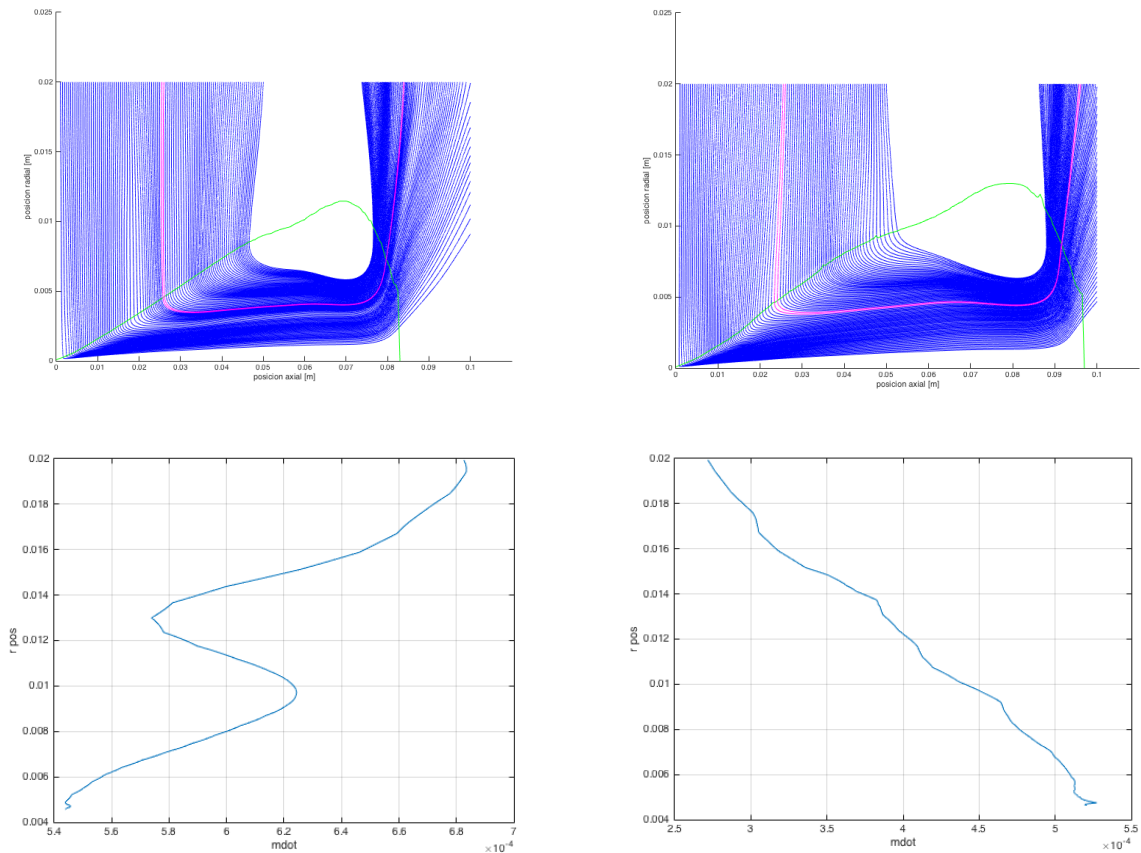
Este hecho muestra ya una debilidad del método de las líneas de corriente para obtener el coeficiente de englobamiento, puesto que si los resultados dependen del punto en el que se inicia el cálculo es que los parámetros de los que depende el englobamiento no se mantienen constantes a lo largo de los tubos de corriente, lo cual se comprueba en el capítulo siguiente.

### III.4.2.2 Estudio del gasto másico a lo largo de un tubo de corriente

Con este estudio se pretende comprobar lo que se espera priori, que el gasto másico a lo largo de un tubo de corriente se mantenga constante hasta el límite del radio. Para ello se ha utilizado el caso de 900K abierto tanto inerte como reactivo.

Se escogen dos líneas de corriente y se calcula a lo largo de ellas el gasto másico, en sentido radial descendiente hasta el límite del radio.

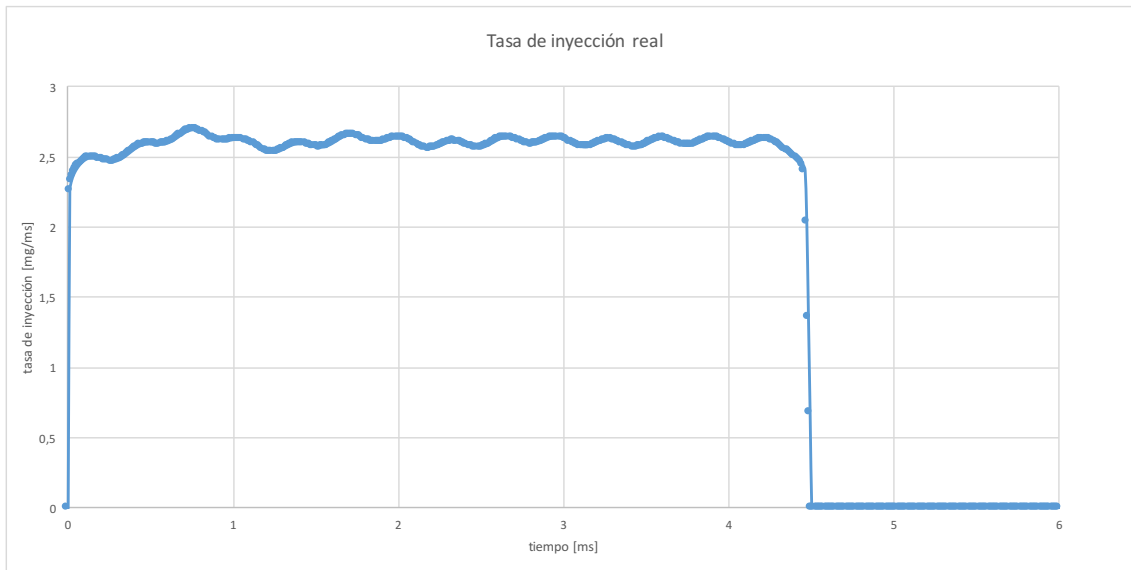
Los resultados que se obtienen no son los esperados (mostrados en la Figura III.10), a lo largo del tubo de corriente se observa que el gasto másico no se conserva, va variando hasta el límite del radio, lo que hace que este método no sea válido para la estimación del coeficiente de englobamiento. Se ha observado que la densidad, la velocidad y la distancia entre las líneas de corriente que conforman los tubos de corriente no se mantienen constantes a lo largo de éstos, lo que hace que el gasto másico varíe.



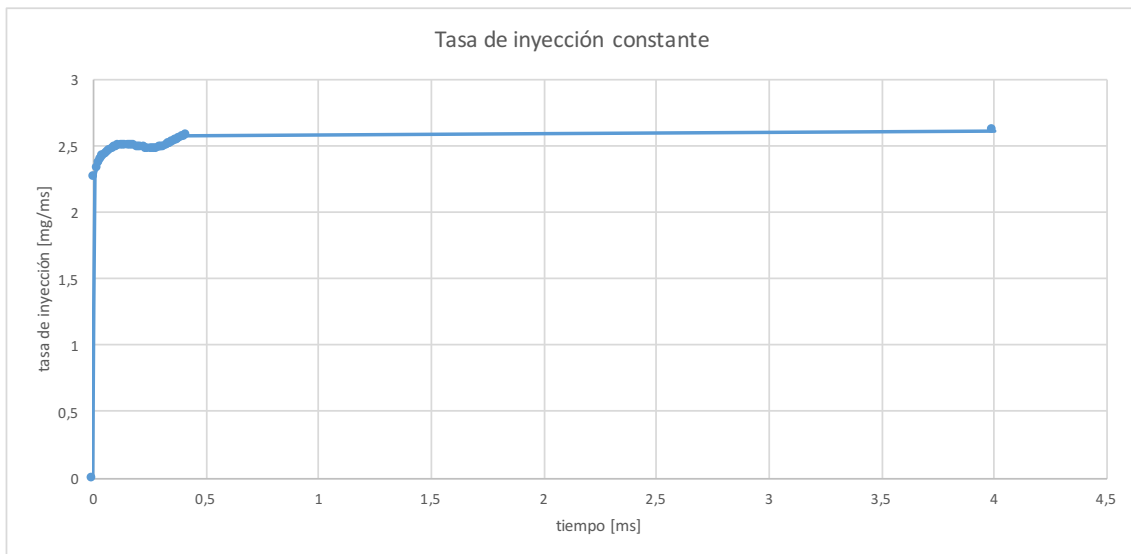
**Fig. III.10** Gasto másico a lo largo de un tubo de corriente. Líneas de corriente para el caso inerte (superior izq.), resultado del gasto másico para el caso inerte a lo largo del tubo de corriente magenta (inferior izq.), líneas de corriente para el caso reactivo (superior dcha.) y gasto másico para el caso reactivo a lo largo del tubo de corriente magenta (inferior dcha.) todo para 3ms

### III.4.2.3 Estudio con tasa constante

Puesto que se ha observado que las líneas de corriente no se mantienen constantes con el paso del tiempo, ni mantienen la distancia entre ellas, se ha decidido probar con una tasa de inyección constante, puesto que la que se estaba usando antes tiene una serie de oscilaciones que podrían ser el causante de este “baile” de las líneas de corriente (Figura III.11). La nueva tasa de inyección se representa en la Figura III.12.

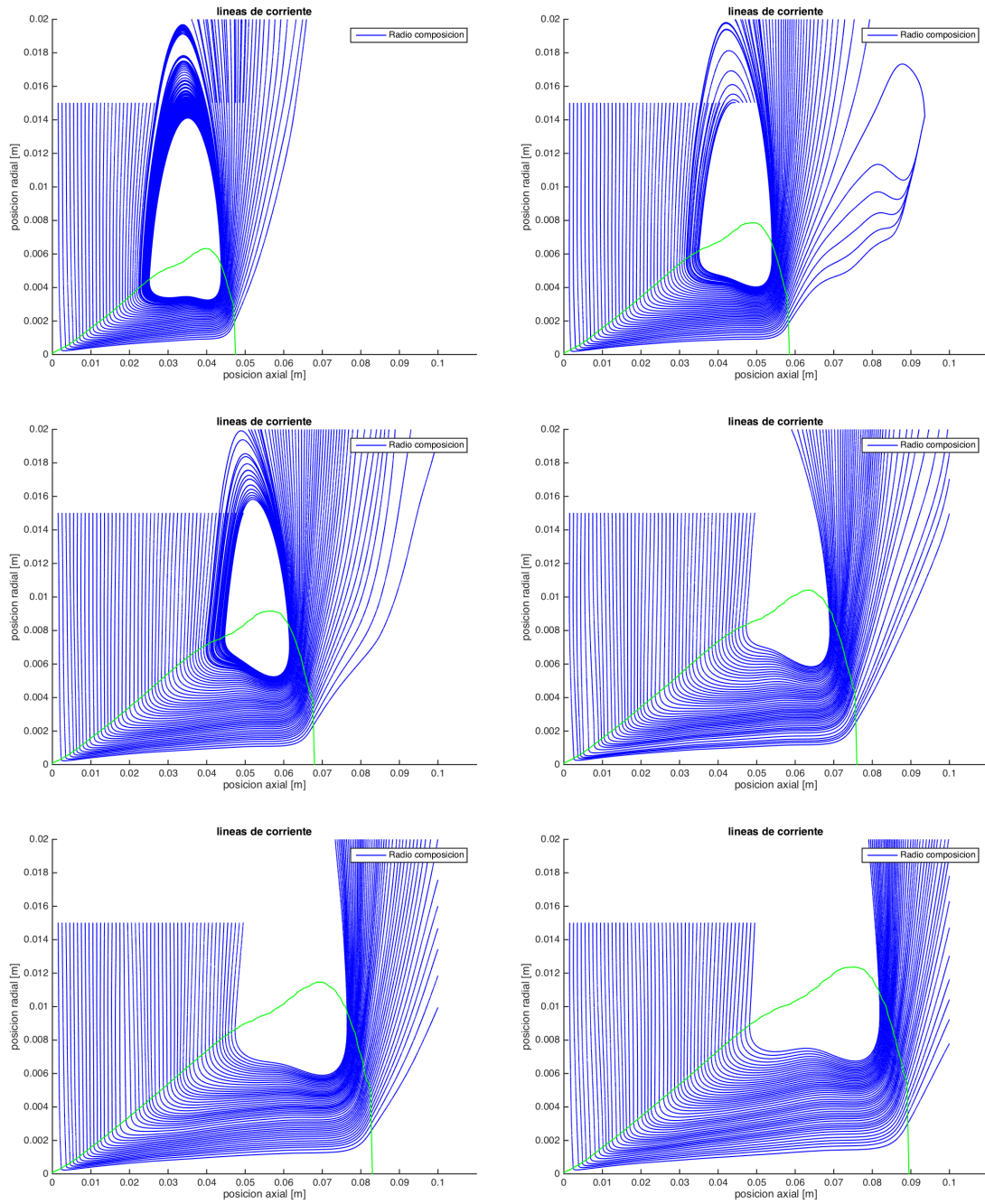


**Fig. III.11 Tasa de inyección real**



**Fig. III.12 Tasa de inyección constante**

Con ello, se ha graficado un paso temporal de las líneas de corriente (Figura III.13) para el caso de 900K reactivo con la malla abierta, para analizar si éstas se siguen moviendo o se mantienen constantes.



**Fig. III.13** Sucesión de líneas de corriente con respecto al tiempo con la tasa constante en el caso 900K reactivo con malla abierta. Se tiene 1ms (superior izq.), 1.5ms (superior dcha.), 2ms (central izq.), 2.5ms (central dcha.), 3ms (inferior izq.) y 3.5ms (inferior dcha.)

Lo que se ha observado (aunque en la Figura III.13 no es del todo visible) en la sucesión temporal es que, a pesar de ser una tasa constante, las líneas de corriente siguen moviéndose con el tiempo, no se mantienen estacionarias, lo que afecta a que el gasto

másico a lo largo de los tubos de corriente no se mantenga constante y el método siga siendo no válido para estimar el coeficiente de englobamiento.

### III.5 Resultados

Tras ver que el método de las streamlines no mantiene a lo largo de un tubo de corriente el gasto másico lo que hace que el método no sea válido para la estimación del coeficiente de englobamiento del chorro, puesto que, como se observa en las Figuras III.8 y III.9, las discrepancias con el método de referencia son elevadas, se considera como valido el método del radio. Por lo tanto se compararán los resultados de este método con el de referencia.

Primero se han comparado los resultados entre el método de referencia y el método del radio de forma inerte vs reactivo.

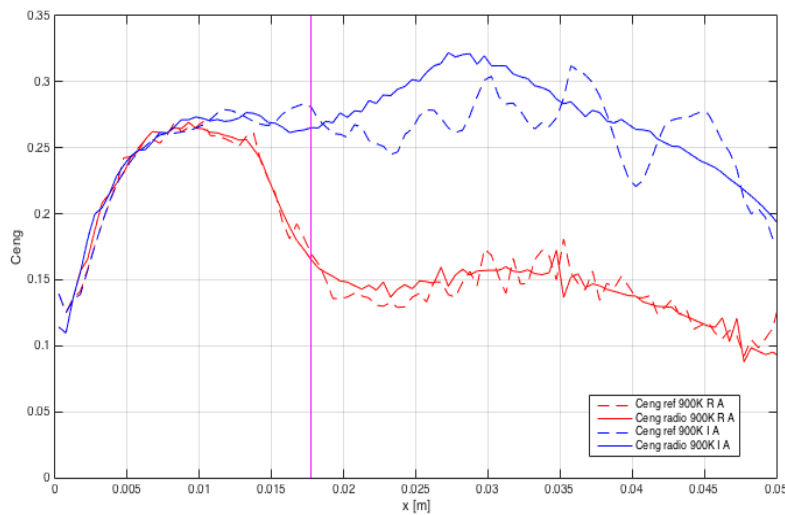


Fig. III.14 Comparación entre inerte y reactivo del caso de 900K con malla abierta (3ms)

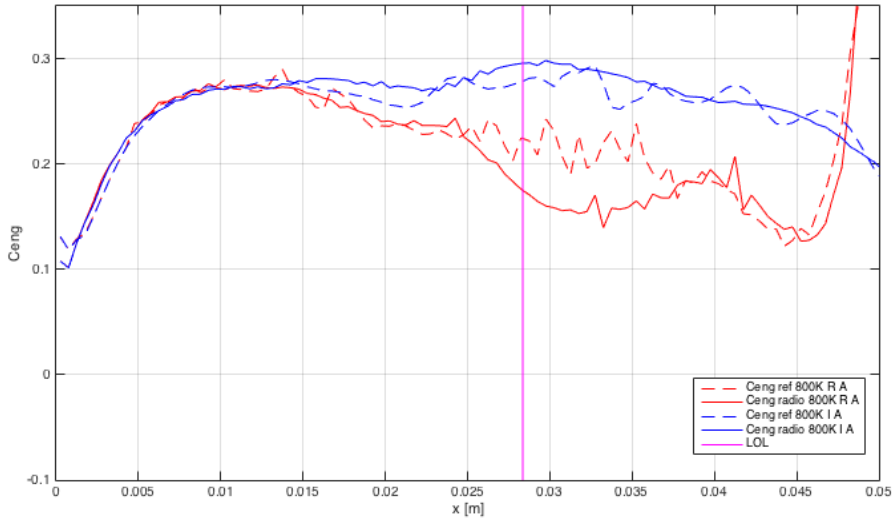


Fig. III.15 Comparación entre inerte y reactivo del caso de 800K con malla abierta (3ms)

En la comparación entre inerte y reactivo se ha añadido la distancia de Lift-Off. Hasta ese punto ambos casos deberían de tener el mismo coeficiente de englobamiento puesto que el caso reactivo en esa zona se comporta como si fuese inerte. Se observa que ambos obtienen el mismo valor pero el reactivo empieza a decaer antes del punto del LOL.

Por otra parte, se puede ver que el método del radio (líneas continuas) predice bien el comportamiento del coeficiente de englobamiento con respecto al caso de referencia y con poco ruido. Además, el comportamiento tras el punto de LOL de los casos reactivos está bien estimado por ambos métodos, es decir tras este punto el coeficiente de englobamiento decae.

También se ha realizado una comparación entre los resultados de coeficiente de englobamiento obtenidos con malla abierta o cerrada para los casos inertes de 750K, 800K y 900K, que se muestran en las Figuras III.16-19, y así analizar la influencia que tiene el uso de una u otra malla en el coeficiente de englobamiento.

Lo que se observa es que con la malla cerrada el coeficiente de englobamiento cae antes y a valores más bajos que si se usa la malla abierta. Este hecho puede deberse a que las líneas de corriente en los casos cerrados presentan una recirculación al chocar con la malla, lo cual podría estar afectando al cálculo, en la Figura III.20 se muestran las líneas de corriente del caso 900K a modo de ejemplo para observar esta recirculación.



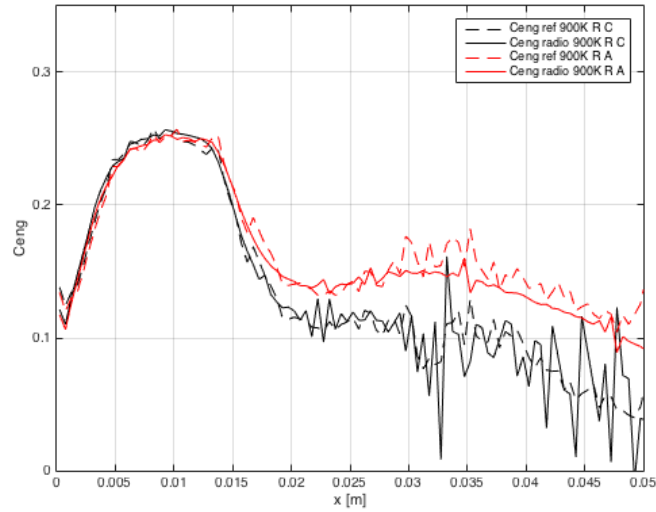


Fig. III.16 Coeficiente de englobamiento malla abierta vs cerrada caso 900K reactivo (3ms)

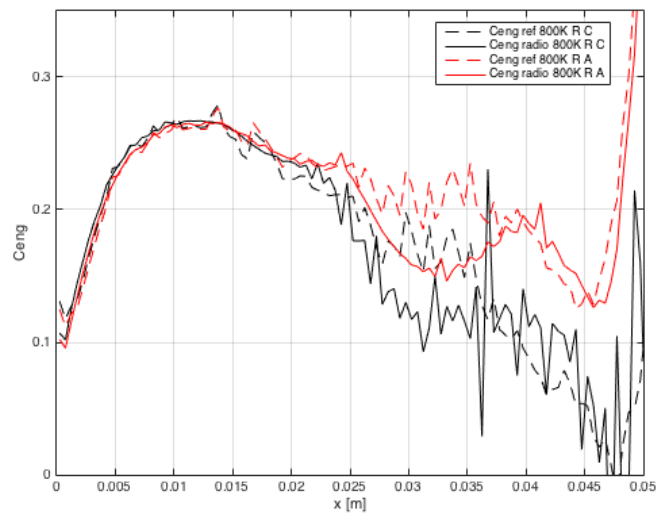


Fig. III.17 Coeficiente de englobamiento malla abierta vs cerrada caso 800K reactivo (3ms)

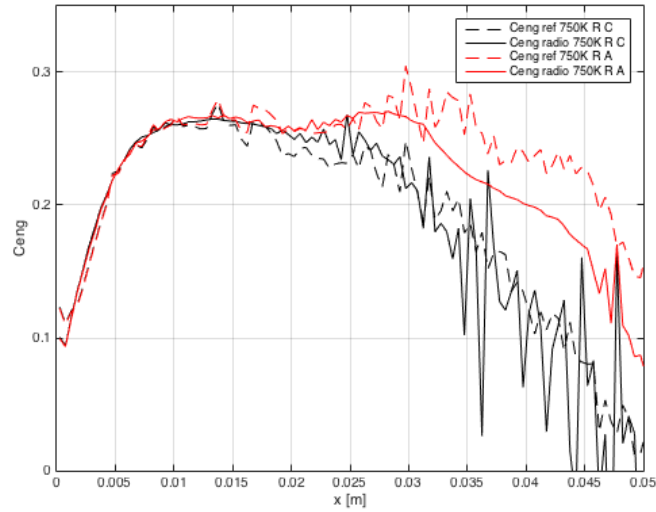


Fig. III.18 Coeficiente de englobamiento malla abierta vs cerrada caso 750K reactivo (3ms)

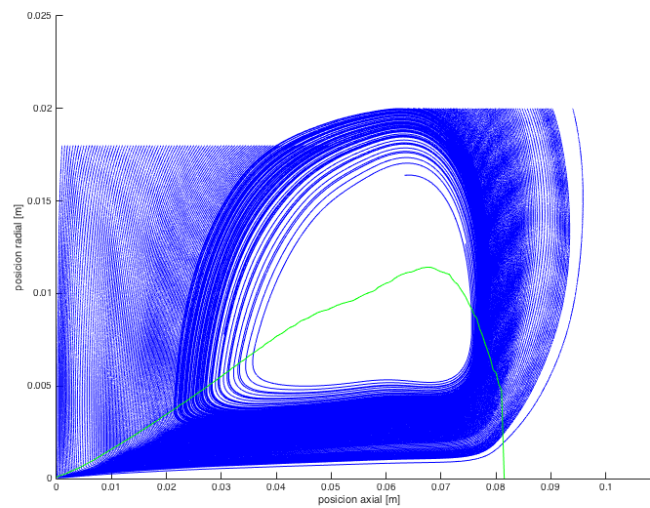


Fig. III.19 Líneas de corriente para el caso de 900K reactivo con malla cerrada a 3ms

## III.6 Scripts Matlab

### III.6.1 Script streamlines

Este script calcula el englobamiento de aire por parte del chorro y el coeficiente de englobamiento. Como resultado muestra una gráfica en la que se muestran tres figuras, el radio de composición del caso estudiado, el englobamiento de aire en la figura intermedia y en la última figura se muestra el coeficiente de englobamiento. En las gráficas se muestran tanto los resultados con este método como con el caso de referencia.

En primer lugar se han de cargar los datos referentes al caso. En este script se utiliza la carpeta surfaces obtenidas con el sample en OpenFOAM, por lo que se ha de indicar la ruta en la que se encuentra.

Se entra en la carpeta surfaces y en la carpeta del tiempo en el que queremos obtener los resultados, y se cargan, en las correspondientes variables, la velocidad, la densidad y la fracción de mezcla y se realiza una interpolación de estas variables y una posterior evaluación en una malla regular.

```
%% cargar datos y malla regular
rho_f    = 713.13;
d        = 0.089e-3;
deq     = d*sqrt(rho_f/23.27);
cd('/Users/irene/Desktop/tfmirene/CASOS_Reactivos/EstTemp/800_closed')
;
cd surfaces
cd 0.003

ficheroU = dlmread('/U_axisymm2Dplane000.raw',' ', 2, 0);
ficheroRho = dlmread('/rho_axisymm2Dplane000.raw',' ', 2, 0);
ficheroYtotal = dlmread('/Ztotal_axisymm2Dplane000.raw',' ', 2, 0);
x = ficheroU(:,1);
r = ficheroU(:,2);
u = ficheroU(:,4);
v = ficheroU(:,5);
w = ficheroU(:,6);
y = ficheroYtotal(:,4);
rho = ficheroRho(:,4);
```

```
%interpolacion
Fx = TriScatteredInterp(x,r,x);
Fr = TriScatteredInterp(x,r,r);
Fu = TriScatteredInterp(x,r,u);
Fv = TriScatteredInterp(x,r,v);
Fw = TriScatteredInterp(x,r,w);
Frho = TriScatteredInterp(x,r,rho);
Fy = TriScatteredInterp(x,r,y);

%mallla regular
stepx = 0.0005;
stepr = 0.00002;
[q1,q2] = meshgrid(0:stepx:0.100,0:stepr:0.02);
qx = Fx(q1,q2);
qr = Fr(q1,q2);
qu = Fu(q1,q2);
qw = Fw(q1,q2);
qv = Fv(q1,q2);
qrho = Frho(q1,q2);
qy = Fy(q1,q2);

x_vec = qx(1,:);
r_vec = qr(:,1);
lims = 0.001;
limr = 0.01;

[m,nr] = size(qr);
```

Tras ello se calcula el radio de composición y el englobamiento de aire con el método de referencia, es decir integrando en el dominio interior del chorro.

```
%calcula radio composicion

ns = find(qy(1,:)>lims);
for k = 1:length(ns)
```

```
PN = qy(:,ns(k))./qy(1,ns(k));
n = 1+find(PN>limr,1,'last');
Rly(ns(k)) = qr(n,ns(k));
%Rly(ns(k)) = interp1(PN,r_vec2,limr);%qr(n,ns(k));
xr(ns(k)) = qx(n,ns(k));
end
Rly = [Rly 0];
xr =[xr xr(1,length(xr))+stepx];

%% calculo del mdot con los datos del CFD
mdot = zeros(1,length(Rly));
for j = 1:length(Rly)
    k=1;
    while (qr(k+1,j) <= Rly(j))
        mdot(j) = mdot(j) +
0.5*(qrho(k,j)*qu(k,j)+qrho(k+1,j)*qu(k+1,j))*pi*(qr(k+1,j)^2-
qr(k,j)^2);
        k=k+1;
        if k>=m
            break
        end
    end
end
mdot = smooth(mdot);
m0ref = 0.00256;
```

### Cálculo de las streamlines

Para comenzar con el método de las líneas de corriente, primero se han de obtener éstas.

Se fija un punto de inicio axial, el cual corresponde con una posición cercana a 0, y un punto de finalización axial de las líneas de corriente, el cual corresponderá a la zona donde comienza la parte no estacionaria del chorro, alrededor de 0.05m. También se fija un punto de inicio radial, que puede o no corresponder con el límite de la malla, y el cual ha sido modificado para hacer el estudio de influencia de la posición de comienzo de las

streamlines. Con ello se crean un par de vectores que especifican las posiciones axiales y radiales en las que se posicionarán las líneas de corriente.

Las líneas de corriente se obtienen con el comando *streamline* en el que se indica la matriz de posiciones axiales, la de posiciones radiales, la velocidad axial y radial y los puntos de axiales y radiales.

```
%% streamlines

stx = find(x_vec==0.0075); %encontrar la position de comienzo axial
f = find(x_vec==0.05); %el fin axial
str = find(r_vec>=0.015,1,'first'); %encontrar la position del
comienzo radial

istartx = 4:1:f;
startx = x_vec(istartx); %vector posiciones axiales
istartr = str*ones(1,length(istartx));
startr = r_vec(istartr);%vector posiciones radiales

f1 = figure;
hold on
SL = streamline(qx,qr,qu,qv,startx,startr,[0.1,100000]); %lineas de
corriente
hold on
%h1 = plot(Xrad,Rlu,'r');
%hold on
h2 = plot(xr,Rly,'g');

xlim([0 0.11]);
ylim([0 0.02]);
xlabel('posicion axial [m]');
ylabel('posicion radial [m]');
title('lineas de corriente');
%ley = [h1 h2];
legend('Radio composicion');
```

### Cálculo del englobamiento con el método de las streamlines

Para comenzar el cálculo se han de asignar las variables que van a tener papel en él e inicializar las variables que se van a ir obteniendo como resultados. Lo que significa cada variable se muestra en el comentario al lado de cada una de ellas en el fragmento de código.

```
%% Calculos englobamiento
% Variables
SLent = SL;      %streamlines de entrada
x_ent = qx;     %matriz de posicion axial
r_ent = qr;     %matriz posicion radial
velx_ent = qu;  %velocidad axial de entrada
velr_ent = qv;  %velocidad radial de entrada
x_radius = xr;  %posiciones axiales del radio de composicion
r_radius = Rly; %posiciones radiales del radio de composicion

% inicializar las variables
inlet_ang = zeros(1,length(SLent)-1); % angulo del inlet
inlet_x = inlet_ang; % posicion axial del inlet (linea de corriente i)
inlet_r = inlet_ang; % posicion radial del inlet (linea de corriente i)
inlet_xnext = inlet_ang; %posicion axial de la linea de corriente i+1
inlet_rnext = inlet_ang;%posicion radial de la linea de corriente i+1
inlet_vel = inlet_ang; %velocidad a la entrada (linea de corriente i)
inlet_vel_next = inlet_ang; %velocidad a la entrada en la línea de corriente i+1
inlet_width = inlet_ang; %distancia entre las líneas de corriente consecutivas
inlet_mdot = inlet_ang; % gasto masico a la entrada

outlet_x = inlet_ang;      % posicion axial de la salida de la linea de corriente i
outlet_r = inlet_ang;     % posicion axial de la salida de la linea de corriente i
outlet_xnext = inlet_ang; % posicion axial de la salida de la linea de corriente i+1
outlet_rnext = inlet_ang; % posicion axial de la salida de la linea de corriente i+1
```

```
outlet_vel = inlet_ang; %velocidad a la salida, linea de corriente i
outlet_velnext = inlet_ang;%velocidad a la salida, linea de corriente
i+1
outlet_width = inlet_ang; %distancia a la salida entre las lineas de
corriente consecutivas
outlet_ang = inlet_ang; %angulo a la salida
outlet_angnext = inlet_ang;
radius_ang = inlet_ang; %angulo del chorro
outlet_mdotCFD = inlet_ang; %englobamiento metodo de referencia en el
chorro, punto i
outlet_mdotnextCFD = inlet_ang; %englobamiento metodo de referencia en
el chorro, punto i+1
cengCFD = inlet_ang; %coeficiente de englobamiento de referencia
CengSL = inlet_ang; %coeficiente de englobamiento metodo streamlines
```

## Inlet

Se considera como inlet la parte en la que comienzan las líneas de corriente, tal y como se muestra en la Figura III.3.

Se comienza con un bucle en el que se leen todas las líneas de corriente y se asignan a las variables xstream, rstream, xstream\_next y rstream\_next las coordenadas axiales y radiales de las líneas de corriente (i) e (i+1) respectivamente.

El punto de comienzo del cálculo corresponde a inlet\_x e inlet\_r, que representan la posición axial y radial del primer punto de la línea de corriente (i). La velocidad axial y radial se obtiene interpolando en ese punto y con ello se puede calcular el ángulo a la entrada y el módulo de la velocidad. De la misma forma que la velocidad se puede obtener la densidad en ese punto.

```
for i = 1:(length(SLent)-1)
    %inlet
    xstream = SLent(i).XData; %coordenadas x de la LC i
    rstream = SLent(i).YData; %coordenadas r de la LC i

    xstream_next = SLent(i+1).XData; %coordenadas x de la LC i+1
    rstream_next = SLent(i+1).YData; %coordenadas r de la LC i+1

    inlet_index= 50;
```



```
inlet_x(i) = xstream(inlet_index);
inlet_r(i) = rstream(inlet_index);
%inlet_velx = velx_ent(istarttr(i),istartx(i));
%inlet_velr = velr_ent(istarttr(i),istartx(i));
inlet_velx = interp2(x_vec,r_vec,qu,inlet_x(i),inlet_r(i));
inlet_velr = interp2(x_vec,r_vec,qv,inlet_x(i),inlet_r(i));
inlet_ang(i) = 90+atan2d(inlet_velr,inlet_velx);
inlet_rho(i) = interp2(x_vec,r_vec,qrho,inlet_x(i),inlet_r(i));
inlet_vel(i) = sqrt(inlet_velx^2+inlet_velr^2);
```

Tras quedar definido el primer punto de la línea de corriente (i), se define el punto de la línea de corriente (i+1) lanzando una perpendicular al vector velocidad desde el punto (inlet\_x,inlet\_r) y se busca el punto de corte de esta recta con la siguiente línea de corriente mediante una interpolación, tal y como se muestra en la Figura III.4. Este punto se define como (inlet\_xnext,inlet\_rnext).

```
xstream_recta = xstream(inlet_index) + (rstream_next-
rstream(inlet_index))/tand(inlet_ang(i)); %recta perpendicular al
vector velocidad para encontrar el siguiente punto

%siguiente LC del inlet

inlet_rnext(i) = interp1(xstream_next(1:1000)-
xstream_recta(1:1000),rstream_next(1:1000),0); %quiero r donde corta
la recta con la siguiente SL

inlet_xnext(i) = xstream(inlet_index) + (inlet_rnext(i)-
rstream(inlet_index))/tand(inlet_ang(i));
```

La velocidad y densidad en este punto se obtiene de forma análoga al punto anterior.

```
inlet_velx_next =
interp2(x_vec,r_vec,qu,inlet_xnext(i),inlet_rnext(i));

inlet_velr_next =
interp2(x_vec,r_vec,qv,inlet_xnext(i),inlet_rnext(i));

inlet_vel_next(i) = sqrt(inlet_velx_next^2+inlet_velr_next^2);

inlet_rhonext(i) =
interp2(x_vec,r_vec,qrho,inlet_xnext(i),inlet_rnext(i));
```

Se calcula también la distancia entre el par de líneas de corriente, llamado como width y tras ello el englobamiento, siguiendo la Ecuación III.7

```
inlet_width(i) = sqrt((inlet_x(i)-inlet_xnext(i))^2+(inlet_r(i)-
inlet_rnext(i))^2); %el modulo

    inlet_mdot(i) =
2*pi*0.5*(inlet_rho(i)*inlet_r(i)*inlet_vel(i)+inlet_rhnext(i)*inlet_
rnext(i)*inlet_vel_next(i))*inlet_width(i);
```

## Outlet

Tras obtener el englobamiento en el inlet, se ha de obtener los parámetros relativos al outlet. Se define como outlet la zona donde las líneas de corriente se intersectan con el radio de composición.

Para encontrar los puntos donde las streamlines cortan al radio primero se busca la posición radial que es mayor que la de la streamline, lo que significa que la ésta ya ha pasado al chorro. Posteriormente se crean dos auxiliares que representan:

- Aux =  $r_{\text{spray}} - r_{\text{streamline}}$  donde  $x = X_{\text{stream}}$
- Aux2 =  $r_{\text{spray}} - r_{\text{streamline}}$  donde  $x = X_{\text{stream}} - 1$

Y con ello se busca la posición axial y la radial del punto de corte de la línea de corriente (i), interpolando. Este punto se denomina como (outlet\_x,outlet\_r).

```
%outlet

jstream = 2;

while interp1(x_radius,r_radius,xstream(jstream))<rstream(jstream)

    jstream = jstream +1;

end

aux = interp1(x_radius,r_radius,xstream(jstream))-
rstream(jstream); %r del spray - r SL en x=xSL

aux2 = interp1(x_radius,r_radius,xstream (jstream-1))-
rstream(jstream-1); %r del spray - r SL en x del SL anterior

    outlet_x(i) = interp1([aux aux2],[xstream(jstream)
xstream(jstream-1)],0);

    outlet_r(i) = interp1(x_radius,r_radius,outlet_x(i));
```

La velocidad y densidad en ese punto, así como el ángulo, se obtienen de forma análoga a las del inlet.

```
outlet_velx = interp2(x_vec,r_vec,qu,outlet_x(i),outlet_r(i)); %con  
las SL  
    outlet_velr = interp2(x_vec,r_vec,qv,outlet_x(i),outlet_r(i));  
    outlet_rho(i) =  
interp2(x_vec,r_vec,qrho,outlet_x(i),outlet_r(i));  
    outlet_vel(i) = sqrt(outlet_velx^2+outlet_velr^2);  
    outlet_ang(i) = 90+atan2d(outlet_velr,outlet_velx);
```

El mismo procedimiento que el explicado se hace para obtener el punto de corte de la línea de corriente (i+1) con el radio, siendo este punto denominado como (outlet\_xnext,outlet\_rnext).

Se obtiene el ángulo del chorro utilizando estos puntos, como:

```
radius_ang(i) = atan2d(outlet_rnext(i)-outlet_r(i),outlet_xnext(i)-  
outlet_x(i));
```

Y con ello ya se tiene todo lo necesario para calcular el coeficiente de englobamiento mediante el método de las streamlines, siguiendo la Ecuación III.10.

```
CengSL(i) = inlet_mdot(i)*cosd(radius_ang(i)-  
0.5*(outlet_angnext(i)+outlet_ang(i)));  
    CengSL(i) = CengSL(i)*deq/((outlet_xnext(i)-outlet_x(i))*m0ref);
```

Para calcular el coeficiente de englobamiento de referencia lo que se hace es utilizar estos puntos donde corta las líneas de corriente al chorro e interpolar en ello el valor del englobamiento de referencia obtenido en líneas anteriores. El coeficiente de englobamiento se calcula siguiendo la Ecuación III.5.

```
    outlet_mdotCFD(i) = interp1(xr,mdot,outlet_x(i)); % esta es la  
obtenida tras los calculos con los datos del CFD  
  
    outlet_mdotnextCFD(i) = interp1(xr,mdot,outlet_xnext(i)); % esta  
es la obtenida tras los calculos con los datos del CFD
```

```
cengCFD(i) = (outlet_mdotnextCFD(i)-  
outlet_mdotCFD(i))*deq/((outlet_xnext(i)-outlet_x(i))*m0ref);
```

### III.6.2 Script método radio

El fin de este script es obtener una estimación del coeficiente de englobamiento utilizando el método del radio, es decir basándose en los puntos que forma el límite del chorro. Como resultado se proporciona una gráfica compuesta por tres figuras como las del script del método de las streamlines.

Como en el código anterior se han de cargar los datos y el fichero superficies del caso que se quiere estudiar, interpolar y evaluar en la malla regular las variables, así como calcular el radio de composición el englobamiento de referencia. Como el código que se ha utilizado para obtener estos resultados es el mismo que el anterior no se va a exponer aquí.

#### Método del radio

En este método se calculan las magnitudes directamente en los puntos que conforman el límite del radio. Se comienza con un bucle que recorre todos los puntos de este límite y se carga la posición axial y radial de los puntos (i) e (i+1) en las variables Xcoord, Rcoord, Xcoord\_nex y Rcoord\_next.

La densidad en esos puntos se obtiene interpolando, así como la velocidad axial y radial, pero en este caso hay que proyectarlas según la perpendicular al chorro y el módulo de la velocidad será la suma de ambas componentes. Se muestra la parte del código que obtiene los parámetros para el punto (i), para el punto (i+1) sería análogo.

```
for i = 1:(length(Rly)-1)  
  
    Xcoord(i) = xr(i);  
    Rcoord(i) = Rly(i);  
  
    Xcoord_next(i) = xr(i+1);
```

```
Rcoord_next(i) = Rly(i+1);

rho1(i) = interp2(x_vec,r_vec,qrho,Xcoord(i),Rcoord(i));
rho_next(i) =
interp2(x_vec,r_vec,qrho,Xcoord_next(i),Rcoord_next(i));
radius_ang2(i) = atan2d(Rcoord_next(i)-Rcoord(i),Xcoord_next(i)-
Xcoord(i));

velx2 =
interp2(x_vec,r_vec,qu,Xcoord(i),Rcoord(i))*sind(radius_ang2(i));
velr2 = -
interp2(x_vec,r_vec,qv,Xcoord(i),Rcoord(i))*cosd(radius_ang2(i));
vel2(i) = velx2+velr2;
```

Tras tener los puntos del radio, así como la densidad y velocidad en ellos se calcula la distancia horizontal entre ambos:

```
width(i) = sqrt((Rcoord(i)-Rcoord_next(i))^2+(Xcoord(i)-
Xcoord_next(i))^2);
```

Y con ello se tienen todo lo necesario para obtener el englobamiento y coeficiente de englobamiento:

```
mdotradio(i) =
2*pi*0.5*(rho1(i)*Rcoord(i)*vel2(i)+rho_next(i)*Rcoord_next(i)*vel2_
xt(i))*width(i);
cengradio(i) = mdotradio(i)*deq/((Xcoord_next(i)-Xcoord(i))
```



---

Documento 2:

Pliego de condiciones

---

## **TABLA DE CONTENIDOS**

<b>A</b>	<b>INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>- 177 -</b>
<b>B</b>	<b>CONDICIONES GENERALES .....</b>	<b>- 177 -</b>
	B.1 CONDICIONES GENERALES FACULTATIVAS .....	- 177 -
<b>C</b>	<b>CONDICIONES PARTICULARES .....</b>	<b>- 178 -</b>
	C.1 CONDICIONES DE SOFTWARE.....	- 178 -
	<i>C.1.1 Software de simulación del chorro .....</i>	<i>- 178 -</i>
	<i>C.1.2 Sistema operativo .....</i>	<i>- 179 -</i>
	<i>C.1.3 Software para post-procesado de datos.....</i>	<i>- 179 -</i>
	C.2 CONDICIONES DEL HARDWARE .....	- 179 -



## A Introducción

En el Pliego de Condiciones se indica cómo y con qué hay que hacer realidad el proyecto, señalando los derechos, obligaciones y responsabilidades de las partes que lo componen, indicando también cómo se desarrollará el trabajo y cómo se resolverán los conflictos que puedan surgir. Por otro lado, tiene como misión fijar las condiciones del proyecto en temas relativos a aspectos legales, condiciones generales y aspectos técnicos que puedan ocurrir en el transcurso del mismo.

## B Condiciones generales

Se definirá el trabajo asignado a cada parte que ha intervenido en el proyecto. Además, se especificarán las relaciones, derechos y obligaciones que tienen cada uno los participantes de este Trabajo Fin de Máster.

En el desarrollo del Trabajo Fin de Máster hay que definir tres figuras principales: el alumno (de aquí en adelante Ingeniero de Proyecto), el tutor y el director del proyecto. Este pliego de condiciones se dedicará especialmente al Ingeniero de Proyecto por recaer sobre él casi la totalidad del trabajo. El director del proyecto asume la labor de supervisión y orientación, la resolución de problemas de gran magnitud y marcar la línea de investigación que se debe seguir, y por otra parte, el tutor del proyecto se encarga de llevar a cabo un seguimiento diario, resolviendo los problemas de carácter técnico de poca magnitud que se presentan, así como orientar al alumno acerca de las pruebas que se deben realizar.

### B.1 Condiciones generales facultativas

En este apartado se exponen una serie de puntos que definen el contexto y condiciones del trabajo desarrollado por el Ingeniero de Proyecto. Los trabajos a realizar son los siguientes:

- Se seguirá una estrategia bien planificada, junto con el director, durante la realización del proyecto, definiéndose la duración de cada una de las etapas del mismo.
- Se hará una reunión semanal con el director y tutor del proyecto para realizar un seguimiento del proyecto y ver el estado de desarrollo del mismo, con el objetivo de planificar tareas a realizar. Así se tendrá un mayor control del mismo por parte del director y tutor y el Ingeniero de Proyecto podrá organizarse mejor.
- Se asegurará, junto al tutor, de que todos los datos utilizados provienen de fuentes fiables.
- Se tratará de cumplir estrictamente los objetivos marcados, extrayendo las conclusiones pertinentes en el análisis de los resultados obtenidos.

## C Condiciones particulares

En este apartado se explican las condiciones del software y hardware que se han utilizado en el desarrollo del proyecto.

### C.1 Condiciones de software

#### C.1.1 Software de simulación del chorro

El software utilizado en las simulaciones realizadas del chorro de combustible es un software libre, OpenFOAM. Se trata de un software que emplea un lenguaje orientado a objetos derivado de C++.

Es un código libre y abierto bajo la licencia GNU, General Public License. Es dirigido, mantenido y distribuido por la Fundación OpenFOAM, la cual se mantiene gracias a colaboradores voluntarios.

La licencia GNU se caracteriza por dos cosas, la primera es que todo software que contenga código con licencia GNU hereda la licencia GNU y por otro lado, es que

cualquier software con GNU al ser distribuido, también se debe proporcionar el código fuente de éste.

## C.1.2 Sistema operativo

OpenFOAM sólo está disponible para el sistema operativo Linux, por lo que el equipo utilizado tiene Ubuntu, que es un sistema operativo basado en Linux. Es de código abierto y también está protegido por la licencia GNU.

## C.1.3 Software para post-procesado de datos

El software utilizado para el tratamiento y post-procesado de los resultados obtenidos tras las simulaciones ha sido Matlab. Se trata de un lenguaje de alto nivel y un entorno interactivo para el cálculo numérico, la visualización y programación.

Esta herramienta está protegida por una licencia comercial, por lo tanto, no se permite su copia o distribución. La licencia utilizada para el desarrollo del presente Trabajo Fin de Máster ha sido la de estudiante proporcionada por Maltab a la Universidad Politécnica de Valencia.

## C.2 Condiciones del Hardware

El hardware necesario para la realización del Trabajo Fin de Máster ha sido:

- Estaciones de cálculo para realizar las ejecuciones con el código. Se utilizan estaciones de cálculo puesto que los cálculos realizados implican una gran cantidad de iteraciones, por lo que los tiempo de cálculo son muy largos (alrededor de 4 días aproximadamente) y con un equipo normal tardarían mucho más. Las características principales del servidor de cálculo empleado son:

Procesador: AMD Opteron <sup>TM</sup> model 6272, 1.4 Ghz, 32 cores

Memoria RAM: 165GB

Memoria caché: 57.5GB

Tarjeta Gráfica: No instalada

- Un ordenador personal para la configuración de los casos y el posterior tratamiento de los resultados obtenidos tras los cálculos. Características del ordenador personal:
  - Pentium 4 2.8GHz
  - Sistema operativo: Ubuntu
  - Disco duro: 40GB
  - Memoria RAM: 256MB
- Un almacenamiento externo para poseer una copia de seguridad de los cálculos y resultados.

---

Documento 3:  
Presupuesto

---

## **TABLA DE CONTENIDO**

<b>A INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>- 181 -</b>
<b>B COSTES.....</b>	<b>- 181 -</b>
B.1 COSTE DE LA MANO DE OBRA.....	- 181 -
B.2 COSTE DE LOS EQUIPOS INFORMÁTICOS Y LICENCIAS .....	- 182 -
B.3 COSTE DE LA ENERGÍA .....	- 183 -
<b>C CUADRO DE PRECIOS DESCOMPUESTOS.....</b>	<b>- 184 -</b>
C.1 INGENIERO DE PROYECTO .....	- 184 -
C.2 INGENIERO DIRECTOR DEL PROYECTO .....	- 185 -
<b>D CUADRO DE MEDICIONES .....</b>	<b>- 185 -</b>
<b>E RESUMEN DEL PRESUPUESTO.....</b>	<b>- 186 -</b>

# A Introducción

En este documento se presenta el presupuesto detallado para la realización del proyecto. Cabe decir, que las especificaciones del presente proyecto son especiales puesto que su objetivo no es la realización de un producto material, si no que consiste en una investigación.

Las unidades de obra se reducen al trabajo desarrollado por el ingeniero que desarrolla el proyecto. Se reflejará también el coste de ejecución, de los materiales empleados y los gastos derivados de la utilización de las instalaciones necesarias para su desarrollo.

## B Costes

### B.1 Coste de la mano de obra

En este apartado se detalla el coste del personal implicado en el desarrollo del proyecto, que, como se ha explicado en el Pliego de Condiciones, se reduce al Ingeniero de Proyecto encargado de la realización del mismo, al Ingeniero Director del Proyecto encargado de la revisión del trabajo y marcar la línea de investigación y al Ingeniero Tutor encargado de la supervisión.

Para calcular el coste del Ingeniero Director, se consultan las bases salariales según la categoría profesional del año en el que se realiza el proyecto (2015-2016). Esta información se obtiene de la web: [http://www.seg-social.es/Internet\\_1/Trabajadores/CotizacionRecaudaci10777/Basesytiposdecotiza36537/index.htm#36538](http://www.seg-social.es/Internet_1/Trabajadores/CotizacionRecaudaci10777/Basesytiposdecotiza36537/index.htm#36538).

Como se trata de un ingeniero titulado, la categoría profesional correspondiente es la 1. El sueldo base máximo es de 3642€, por lo que se elige un sueldo base equivalente al 90% de ese máximo, es decir, de 3277.8€/mes. Se han de tener en cuenta también las contribuciones a la seguridad social en materia de contingencias comunes, formación profesional y fondo de garantía salarial, así como, las contribuciones que se han de realizar en materia de ayuda al desempleo a la Seguridad Social. Todo ello se encuentra en la web mencionada.

El coste de un ingeniero titulado se calcula a partir del salario bruto mensual con la aplicación de los porcentajes de pagos a la seguridad social, desempleo... lo cual se muestra en la Tabla B.1.

Salario bruto mensual	3277.8€
Salario (12 pagas)	39333.6€
Salario (2 pagas extra)	6555.6€
Seg. Social (23.6%)	9282,73 €
Desempleo (5.5%)	2163.35€
Form. Profesional (0.6%)	236€
Form. Gar. Salarial (0.2%)	78,67 €
Coste anual empresa	57649.95€

*Tabla B.1 Tabla resumen de los costes anuales del ingeniero director del proyecto para la empresa*

El pago se divide en 12 meses de 22 días laborables y una jornada de 8 horas laborables al día. Queda un coste de 27.29€/h para el ingeniero Director del proyecto. En el caso del ingeniero del proyecto, no titulado, se supone un coste del 70%, por lo tanto, el coste horario es de 19.1€/h.

## B.2 Coste de los equipos informáticos y licencias

El coste de las herramientas utilizadas viene definido por la amortización del ordenador, de la estación de cálculo, y del coste de las licencias, en esta caso Matlab, reflejado en la Tabla 2.2.

La estación de cálculo no ha sido de uso exclusiva para el Trabajo, puesto que es una herramienta disponible para otros proyectos en el CMT, por lo que se le hará una corrección de uso en el proyecto a la amortización.



Equipo/licencia	Coste (€)	Vida útil (años)	Amortización (meses)	Dedicación (%)	Coste total (€)
Ordenador	600	3	5	100	83.33
Estación de calculo	50000	5	5	50	2083.33
Matlab	2000	1	5	100	833.33

*Tabla B.2 Cálculo del coste total de amortización de equipos y licencias*

Con lo que el precio total de los equipos y licencias es de 2999.96€ en 5 meses, lo que se traduce en 9,09€/hora.

### B.3 Coste de la energía

En este apartado se incluyen los costes de energía asociados al uso del ordenador, y las instalaciones, climatización e iluminación.

Los rendimientos se calculan en función de la potencia y el tiempo que se han empleado por hora de trabajo, mostrado en la Tabla B.3.

Sistema	Potencia (kW)	Rto
Ordenador	0.5	0.5
Climatización	50	5
Iluminación	0.2	0.2

*Tabla B.3 Rendimientos estimados para el calculo del coste energético*

En total se tiene un consumo medio de 5.7kW, tal y como se muestra en la Tabla 2.3.

## C Cuadro de precios descompuestos

En el cuadro de precios descompuestos se incluirán los tres tipos de unidades de obra comentados anteriormente. En este cálculo no hay datos para poder calcular el valor porcentual de costes indirectos, por tanto se añadirá al concepto “trabajo alumno(h)” el coste de dichos elementos.

El director del proyecto tendrá los mismos costes de energía y de amortización del ordenador, pero sin usar licencias ni estación de cálculo.

### C.1 Ingeniero de proyecto

Concepto	Unidades	Descripción	Rto (ud/h)	Precio unitario (€/ud)	Importe (€/h)
<b>Ing. proyecto</b>	h	Hora trabajada del ing. De proyecto	1	19.1	19.1
<b>Equipos y licencias</b>	h	Amortización de equipo y uso de licencias	1	9.09	9.09
<b>Energía</b>	kWh	Energía consumida en climatización, ordenador e iluminación durante una hora	5.7	0.15	0.855
<b>Coste total (€/h)</b>					<b>29.045</b>

*Tabla C.1 Coste por hora del ingeniero de proyecto*

## C.2 Ingeniero director del proyecto

Concepto	Unidades	Descripción	Rto (ud/h)	Precio unitario (€/ud)	Importe (€/h)
<b>Ing. Director</b>	h	Hora trabajada del ing. De proyecto	1	27.29	27.29
<b>Ordenador</b>	h	Amortización del ordenador	1	0.0315	0.0315
<b>Energía</b>	kWh	Energía consumida en climatización, ordenador e iluminación durante una hora	5.7	0.15	0.855
<b>Coste total (€/h)</b>					<b>28.176</b>

*Tabla C.2 Coste por hora del ingeniero director*

## D Cuadro de mediciones

Nº Orden	Descripción	Medición (h)	Precio (€/h)	Importe (€)
<b>01.</b>	<b>Ingeniero de proyecto.</b> Coste del ingeniero y de los equipos asociados a su trabajo	600	29.045	17427
<b>02.</b>	<b>Ingeniero director.</b> Coste del ingeniero y de los equipos asociados a su trabajo	100	28.176	2817.6
<b>Total</b>				<b>20244.6</b>

*Tabla D.1 Cuadro de mediciones*

## E Resumen del presupuesto

<b>Total Presupuesto de Ejecución Material</b>	20244.6 e
<b>6% Beneficio Industrial</b>	1214.67 €
<b>Total Presupuesto de Inversión</b>	21459.27 €
<b>21% IVA</b>	4506.44 €
<b>TOTAL PRESUPUESTO BASE DE LICITACIÓN</b>	<b>25965.71 €</b>

*Tabla E.1 Resumen del presupuesto*

El presupuesto base de licitación asciende a la cantidad de **veinticinco mil novecientos sesenta y cinco euros con setenta y un céntimos**.

