



UNIVERSIDAD
POLITECNICA
DE VALENCIA



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Validación y análisis comparativo de dos
métodos de modelización CFD
de chorros diesel no evaporativos

Realizado por: Palma González García
Dirigido por: José María García Oliver

Valencia, marzo de 2011

Máster en
Motores de Combustión Interna Alternativos

DEPARTAMENTO DE MÁQUINAS Y MOTORES TÉRMICOS



UNIVERSIDAD
POLITECNICA
DE VALENCIA



El ingenio es el talento que nos lleva a inventar,
y desde el ingenio se encuentran soluciones a los problemas que se nos presentan.

ÍNDICE DE CONTENIDOS:

1. Memoria	4
1.1 Justificación del estudio	6
1.2 Introducción a los fenómenos físicos del chorro diesel	9
1.3 Metodología empleada	12
1.4 Desarrollo y resultados.....	14
1.4.1. Estudio paramétrico I: método Lagrangiano.....	14
1.4.1.1 Caso inicial.....	15
1.4.1.2 Mallas.....	15
1.4.1.3 Sub-modelos del chorro	21
1.4.1.4 Modelado de la turbulencia	25
1.4.1.5 Conclusiones	27
1.4.2 Estudio paramétrico II: modelo ELSA	29
1.4.2.1 Caso de partida	31
1.4.2.2 Mallas.....	31
1.4.2.3 Modelado del chorro. Condiciones de contorno.	33
1.4.2.4 Modelos de difusión.....	34
1.4.2.5 Modelado de la turbulencia	34
1.4.2.6 Resultados.....	35
1.5 Conclusiones finales	39
2. Bibliografía	40
3. Anexo	42

1. Memoria

En el período de formación del programa de Máster de Motores de Combustión Interna Alternativos, las actividades de la investigadora se han orientado al estudio de las características del chorro diesel mediante el cálculo multidimensional con la Mecánica de Fluidos Computacional CFD. Los resultados obtenidos se explicarán en el desarrollo del presente trabajo completándose con la justificación de participación de la investigadora en el artículo que se adjunta en el anexo, en la cual llevó a cabo toda la parte de modelado del chorro diesel.

De manera general, la metodología de trabajo se ha basado en la evaluación de los modelos de cálculo Euleriano-Lagrangianos que se encuentran incorporados en el código CFD open-source OpenFOAM, con la finalidad de estimar su capacidad de predicción del comportamiento del chorro diesel bajo diferentes condiciones físicas y numéricas. Desde el punto de vista físico, se han estudiado diferentes condiciones de inyección y ambientales en la cámara de combustión y diferentes geometrías del inyector y, numéricamente, se han analizado la influencia de parámetros de configuración del modelo y topologías de malla en la solución obtenida y además se han probado dos diferentes metodologías de modelado de los chorros. Así mismo, por las deficiencias de estos modelos de reproducir con exactitud los fenómenos reales y multidimensionales que tienen lugar en el chorro, tales como inyección, atomización, mezcla con el aire e interacción entre gotas, se realizaron modificaciones conceptuales y paramétricas dentro del código que permitieron obtener una mejor estimación de las características del chorro tales como penetración, distribución de velocidades, perfiles normalizados de velocidad, todo ello comparado con la base de datos experimental y teórica disponible dentro de la CMT. El objetivo principal que se ha buscado a través de la metodología empleada ha sido realizar la validación y la ejecución de un estudio comparativo de dos diferentes modelos de la fase líquida de los chorros Diesel.

1.1 Justificación del estudio

En los motores diesel, la eficiencia de la combustión y el control de emisiones dentro del cilindro están fuertemente ligados a la efectividad de una buena inyección del combustible, de la duración y espacio entre las mismas y además, del desarrollo e interacción del chorro de combustible inyectado con el gas de la cámara de combustión. Por todo esto, en la actualidad sigue siendo un reto a alcanzar conseguir nuevos y más efectivos modos de inyección y combustión dentro de un amplio rango de condiciones de operación del motor.

Bien es sabido que la interacción de los procesos de desarrollo y evolución del chorro, de los que se proporciona una descripción breve en la siguiente parte de este estudio, y el proceso de combustión forma un complejo sistema de fenómenos físicos cuyas escalas de tiempo y longitud abarcan un amplio espectro. La descripción numérica de estos sistemas se basa en procedimientos de discretización y mediado tanto espacial como temporalmente de las ecuaciones diferenciales más importantes. Esta aproximación implica una pérdida de información física que intenta recuperarse mediante la aplicación de modelos apropiados en cada caso. Dichos modelos normalmente tienen un rango de validez y suelen requerir resoluciones espaciales y físicas finas para obtener resultados lo suficientemente precisos y aceptables. Por otro lado, la capacidad limitada de las estaciones de cálculo actuales restringe en gran parte la resolución que, para geometrías complejas, implica el uso de estructuras de mallado no todo lo finas que se desearían, aparte de problemas de estabilidad y precisión y que hace llevar a los modelos empleados a los límites de su aplicabilidad.

Uno de los métodos más utilizados actualmente, a parte de los tradicionales métodos experimentales, es el modelado multi-dimensional que proporciona descripciones bastante precisas de los fenómenos físicos y químicos que tienen lugar en un motor diesel. Para explicar este tipo de modelado diremos que la fluidodinámica puede dividirse en tres partes: una rama teórica, una experimental y una rama numérica. La más reciente y joven de las tres es la rama numérica, denominada fluidodinámica computacional, del inglés “computational fluid dynamics”, o lo que es lo mismo, CFD. En CFD los diferentes problemas de flujos se solucionan numéricamente resolviendo las ecuaciones de transporte discretizándolas en tiempo y espacio. En los primeros años del CFD, a principios del pasado siglo, la investigación se concentraba en los métodos numéricos, pero el campo de actuación de esta disciplina científica ha aumentado conforme a la evolución de los ordenadores. En los años 60 con el gran desarrollo de la informática y el nacimiento de los ordenadores de alta velocidad, hubo un fuerte crecimiento del CFD. Al ritmo que los ordenadores van mejorando con el tiempo, el rango de actuación del CFD sobre flujos cada vez más diversos va haciéndose más y más grande.

En cuanto al CFD aplicado en el ámbito de los chorros diesel, diremos que se parte de una malla que no es otra cosa que la suma de una serie de volúmenes de control denominados celdas y que conforman una aproximación finita al dominio espacial. Generalmente, la manera de resolver el chorro más común es describir y “resolver” el aire de la cámara de combustión de manera euleriana, y el líquido es discretizado en “parcels” o grupos de gotas con las mismas propiedades, que se resuelven dentro de un marco Lagrangiano, es decir, se inyecta un número finito de parcels y se sigue su posición en el tiempo. Entonces se le aplican a estas parcels los diferentes modelos y sub-modelos de atomización primaria y secundaria, colisión, turbulencia, etc.

Este tipo de simulaciones Euleriano-Lagrangianas de chorros con códigos CFD se ha realizado principalmente en industrias de automoción, química o empresas de investigación. Los modelos de chorros polidispersos se han basado, como se ha dicho anteriormente, en una discretización del campo de flujo de la fase dispersa en grupos de gotas con las mismas propiedades (como en los modelos DDM (discrete droplet model) en cuyo caso estas gotas son seguidas en el espacio dentro de un marco Lagrangiano) resolviendo las ecuaciones de transporte Eulerianas con funciones de densidad de probabilidad de determinadas variables de las gotas. Este método de resolución es el más aplicado hasta el momento proporcionando buenos resultados con tiempos de computación aceptables y bajo la mayoría de condiciones de operación de interés.

Pese a que los modelos Euleriano-Lagrangianos de chorros dan buen resultado, en la zona cercana al orificio del inyector donde empieza a tener lugar el proceso de atomización primaria no es así, puesto que en esta zona sería necesario conseguir una alta densidad de número de partículas para conseguir una precisión suficiente de resolución, lo que implicaría un alto coste computacional puesto que se requerirían mallas con celdas de tamaño de las escalas de longitud típicas del proceso de atomización para resolver las estructuras de superficie del chorro, lo cual hace su aplicación inviable en modelado de motores, incluso con la potencia computacional disponible actualmente. Además, estos métodos se basan en un mecanismo de rotura del ligamento líquido o breakup que considera la evolución de las ondas de superficie de un núcleo intacto de líquido. Así, se puede afirmar que en esta zona se hace evidente una complejidad muy alta a nivel físico y todo ello deriva en una gran dificultad a la hora de ser modelada e incluso visualizada experimentalmente.

En referencia a la turbulencia se pueden hablar de varios métodos de resolución. En primer lugar, y por ser con diferencia las ecuaciones más utilizadas, hablaremos las ecuaciones RANS, "Reynolds-averaged Navier-Stokes", donde se asume que las propiedades de un flujo turbulento son soluciones promediadas en el tiempo de las ecuaciones de Navier-Stokes. Además, hemos de añadir que el promediado realizado es el de Reynolds, donde una cantidad instantánea se descompone en su media temporal más una fluctuación y de ahí su nombre.

Por otra parte, existe la simulación numérica directa ("direct numerical simulation", DNS) cuya aplicación, actualmente, es prácticamente inviable debido al alto requerimiento computacional que dicha simulación necesita puesto que se resuelven directamente las ecuaciones que gobiernan el flujo, aunque sí que se han resuelto pequeños problemas como flamelets estabilizadas, de mucha menor complejidad que los chorros diesel. Por otro lado, se han desarrollado métodos "large eddy simulation", LES, en los que se aplican unos filtros espaciales, en cuyas ecuaciones filtradas se mantiene la forma de un término filtrado medio más un término fluctuante, a las ecuaciones de Navier-Stokes y donde los remolinos grandes del flujo son dependientes de la geometría del flujo mientras que los remolinos más pequeños tienen un carácter universal y son autosimilares, según la teoría de Kolmogorov. Con este tipo de modelos de la turbulencia, se obtienen mejores resultados en flujos transitorios y que se aproximan más a la simulación directa y proporcionan una solución más precisa de esta zona aunque el coste computacional es muy alto. Tanto la técnica DNS como los modelos LES son utilizados en entornos académicos y de investigación y su aplicación industrial está muy limitada debido a, como se ha dicho anteriormente, el alto requerimiento computacional que ámbos precisan. En este estudio el método de modelado de la turbulencia utilizado en ambos modelos de la fase líquida es el RANS.

Por último, presentaremos el modelo de atomización denominado Eulerian Lagrangian Spray Atomization, ELSA, donde el chorro es considerado como una única fase continua en la que están mezclados el líquido y el gas. El método se emplea cuando hay flujos turbulentos con altos números tanto de Weber como de Reynolds, como es el caso de un chorro diesel. En este método, las características de atomización del líquido se basan en el transporte del combustible líquido dentro del dominio computacional siguiendo su progreso a través de la fracción másica o volumétrica de líquido y la densidad de área de superficie líquida. Además, la fracción másica de líquido y la densidad de área de superficie líquida se inicializan a la salida del inyector y se transportan en el dominio computacional.

En el presente trabajo de final de máster, se comenzó realizando una serie de estudios paramétricos de un chorro no reactivo ni evaporativo con un software CFD cuyo modelado es lagrangiano para la fase líquida y euleriano para la gaseosa, método comentado anteriormente, y finalmente, se terminó pasando a un modelo ELSA estudiando el mismo caso de referencia estudiado en la parte de los casos lagrangianos realizando una comparación final para comprobar la precisión en los resultados y el tiempo de cálculo empleado por cada uno de los códigos.

1.2 Introducción a los fenómenos físicos del chorro diesel

A continuación y antes de profundizar en el principal objeto de este trabajo, se realizará una introducción a los fenómenos físicos observados durante la evolución del chorro diesel inyectado en la cámara de combustión. La explicación aquí dada será una descripción general de dichos fenómenos. Un conocimiento previo conceptual facilitará la interpretación de los resultados producto de la simulación CFD de cada caso particular.

Así pues, diremos que tras el inicio del proceso de inyección, el chorro diesel penetra en una atmósfera con la que debe mezclarse para que se pueda producir la combustión, que es la finalidad última. Este proceso de mezcla es puramente físico, siendo en el presente trabajo estudiado en condiciones de atmósfera inerte en una cámara de geometría sencilla. De este modo, será más fácil aislar los fenómenos físicos y no considerar los procesos químicos.

La dinámica del chorro diesel viene determinada por una serie de factores como son las características del flujo de combustible en el interior del inyector, principalmente en el orificio de la tobera; la interacción de las gotas del combustible, es decir, atomización y coalescencia; la interacción del chorro con el aire, evaporación y mezcla, etc. Estos procesos no son independientes unos de los otros, y su interacción determina el comportamiento global del chorro diesel.

En cuanto al flujo interno, en el interior de la tobera, viene determinado por la geometría de los orificios (tanto de entrada como de salida) de la tobera de inyección, y afecta directamente a las características del chorro y, consecuentemente, al proceso de mezcla. Actualmente, las condiciones de operación del sistema de inyección llegan a alcanzar presiones de alrededor de 200MPa siendo los diámetros de las toberas del orden de micras, y, en consecuencia, el flujo de combustible está sometido a fuertes gradientes de presión alcanzando altísimas velocidades que provocan la aparición de fenómenos muy complejos como es el fenómeno de cavitación.

La cavitación se define como la formación rápida de bolsas de vapor en un fluido en movimiento en zonas de muy baja presión. Este fenómeno produce una modificación de la sección de paso del fluido así como un cambio en la densidad del combustible, afectando a características del líquido tales como flujo másico, velocidad de salida de la tobera, etc.

La cavitación depende fundamentalmente de la geometría interna de la tobera de inyección y del salto de presión entre el interior y el exterior del inyector. La tecnología actual permite la fabricación de toberas con diferentes geometrías internas como convergente, divergente o cilíndrica afectando directamente estas geometrías al proceso de cavitación y, por tanto, a la morfología del chorro diesel. Mediante la aplicación de técnicas ópticas de visualización es posible observar cómo afecta la geometría de la tobera a los chorros inyectados.

Pasando ya a los procesos de atomización y coalescencia, diremos que, justamente tras la descarga del líquido a través de la tobera de inyección, tiene lugar la atomización de la vena líquida, rompiéndose ésta en gotas y ligamentos de diverso tamaño. La superficie de contacto existente entre el aire y el combustible aumenta, favoreciendo pues los fenómenos físicos que condicionarán el proceso de englobamiento de aire y la evaporación, esto es, la formación de la mezcla. Así, cuanto menor sea el tamaño de las gotas, mayor será la superficie de interacción aire-combustible, y aumentará la tasa de evaporación conque la eficiencia de la combustión será mayor.

En los chorros líquidos de régimen turbulento, chorros del presente estudio, la atomización se considera completa cuando ha desaparecido al completo el ligamento líquido en el interior del chorro y únicamente hay en el aire gotas de combustible. La atomización tiene lugar a cierta distancia del orificio de la tobera conocida como longitud de la vena líquida. Esta longitud depende de las condiciones operativas del motor, de las características del sistema de inyección, etc., siendo dependiente de la geometría del orificio de la tobera, de si existe o no el fenómeno de cavitación y de la relación de densidades líquido-ambiente.

A día de hoy, no se conocen al completo los mecanismos que gobiernan la atomización siendo, por tanto, un campo de investigación en pleno desarrollo a todos los niveles, desde el experimental al modelado del fenómeno. Posteriormente, se dará una visión de lo general a lo concreto del modelo Euleriano-Lagrangiano de la atomización de chorros, conocido como modelo ELSA (Eulerian-Lagrangian Spray Atomization) que es la parte más interesante y relevante de este trabajo final de máster.

Para concluir esta breve explicación del proceso de atomización, diremos que este proceso mejora al incrementar la velocidad relativa de las gotas respecto al aire de la cámara.

Por otro lado, la coalescencia es el fenómeno de formación de nuevas gotas a partir de aquéllas cuyo origen ha sido la disgregación del líquido. Este fenómeno es frecuente en chorros diesel debido a la presencia de gran cantidad de gotas y a la gran dispersión de velocidades que favorecen la interacción. Por otra parte, las gotas atomizadas pueden interactuar con el aire de la cámara dando lugar a la atomización secundaria, controlada por las fuerzas aerodinámicas y de tensión superficial. La cuantificación de todos estos procesos es extremadamente compleja puesto que determinar el grado de coalescencia o estimar las probabilidades de choque entre las gotas y sus velocidades sería necesario.

Por último, hablaremos del proceso de formación de la mezcla. Una vez que el chorro se encuentra atomizado, las gotas avanzan en la cámara, donde comienza a cobrar importancia el proceso de interacción de las gotas con el aire, determinando esta interacción la formación de la mezcla que influirá directamente sobre el proceso de combustión. El flujo de aire es de carácter no estacionario, es turbulento y tiene fuerte dependencia con las condiciones de funcionamiento del motor así como de la geometría de éste. En este estudio, mediante las técnicas CFD se resuelven las ecuaciones de conservación que rigen el comportamiento del fluido y se utilizan modelos de turbulencia para completar estos sistemas de ecuaciones para obtener resultados de caracterización de todos estos fenómenos.

Para asegurar una buena mezcla aire-combustible, el chorro ha de penetrar en la cámara de combustión y abrirse, englobando aire tanto por los lados como por el frente. La descripción macroscópica del chorro diesel considera de forma generalizada la interacción que éste tiene con el aire presente en la cámara de combustión. Existen varios parámetros que caracterizan el chorro diesel de manera macroscópica y que, obtenidos a partir de datos experimentales, serán datos de entrada para nuestros análisis fluido-computacionales del chorro como por ejemplo es el ángulo de apertura del chorro. Otro de estos parámetros macroscópicos es la penetración del chorro que, en este caso no es de entrada, sino uno de los parámetros de estudio de este trabajo. La penetración depende de la cantidad de movimiento instantánea del chorro a la salida del inyector y del ángulo de apertura. Además, determina en gran medida el proceso de mezcla así como si el chorro chocará contra las paredes de la cámara de combustión o no.

Referente a la dinámica interna o microscópica del chorro, los parámetros que la caracterizan son la distribución de los tamaños de las gotas (determinada por los mecanismos de atomización y coalescencia), en concreto de sus diámetros y también la distribución de velocidades.

En referencia al tamaño del diámetro de las gotas, el diámetro medio que tiene la misma relación volumen-superficie de todas las gotas es el denominado diámetro medio de Sauter, SMD, interpretado como el diámetro de las gotas de un chorro monodisperso que tuviera la misma relación volumen-superficie que uno polidisperso.

Por último, la distribución de velocidades proporciona información sobre la ley de frenado de las gotas relacionada con las fuerzas de inercia y las fuerzas aerodinámicas.

Y finalmente, después de todos estos fenómenos, atomización, mezcla y evaporación de las gotas, tendría lugar la combustión del chorro diesel, que no se trata en este estudio.

1.3 Metodología empleada

Pasaremos a hablar de la metodología general empleada para desarrollar este trabajo que, como se comentó en la parte introductoria, se ha basado en la evaluación de los modelos de cálculo del código CFD open-source OpenFOAM [1], con la finalidad de estimar su capacidad de predicción del comportamiento del chorro diesel bajo diferentes condiciones físicas y numéricas. En cuanto a las condiciones físicas, se han realizado una serie de estudios paramétricos variando las condiciones de inyección y ambientales en la cámara de combustión, simulando además diferentes geometrías del inyector y, en cuanto al estudio de las condiciones numéricas del código, se han analizado la influencia de parámetros de configuración de los modelos tales como el valor de las diferentes constantes de los propios modelos así como diferentes topologías de malla en la solución obtenida y además se simularon los mismos chorros bajo diferentes metodologías de análisis: Euleriano-Lagrangiana y mediante el modelo ELSA de atomización. Asimismo, se introdujeron ciertos cambios conceptuales en los modelos y operadores del propio código para así obtener una mejor y más apropiada estimación de las características del chorro como la penetración, la distribución de velocidad axial tanto de las gotas como del gas de la cámara de combustión, perfiles de velocidad, todo ello cotejado con la base de datos disponible en el instituto CMT[2].

La herramienta principal utilizada para realizar todos los estudios, OpenFOAM es, en esencia, un conjunto de librerías de C++, las cuales vienen en su mayoría ya incluidas en el código. El método de resolución comúnmente utilizado es el de volúmenes finitos en cualquier malla compuesta por un determinado número de celdas. Las ecuaciones en cuestión se implementan en el código. Todos estos puntos hacen que OpenFOAM tenga una serie de ventajas frente a otros códigos comerciales. La primera de ellas es que el usuario de OpenFOAM posee total libertad para crear o modificar un solver, o código de resolución específico. Otra ventaja es que al estar OpenFOAM programado en C++, este lenguaje de programación está altamente extendido y es un lenguaje, además, robusto lo que proporciona a OpenFOAM gran flexibilidad para ser editado y que su desarrollo sea muy rápido. Por otra parte cabe destacar la rapidez de cálculo de este código frente a otros y además, se pueden lanzar procesos para ser resueltos en paralelo con un determinado número de procesadores, lo cual aumenta aún más la rapidez de cálculos, sin la limitación de licencias ya que al ser un código libre no las requiere. En varios de los casos estudiados en el presente trabajo final de máster se probó la paralelización del proceso en diversos subdominios y se pudo comprobar una reducción muy considerable de tiempo de cálculo comparado con el tiempo normal de resolución sin paralelización con los mismos resultados en un caso y otro.

En la primera parte de la investigación se trabajó con un solver llamado dieselFoam. DieselFoam es un solver RANS Euleriano-Lagrangiano que resuelve, de manera global, flujos reactivos con partículas Lagrangianas evaporativas en un dominio tridimensional. Está basado en la aproximación de corrección de presión PISO y opera para flujos incompresibles con bajos números de Mach. En todo este estudio, la consideración impuesta al chorro ha sido configurarlo como no reactivo ni evaporativo, dejándose ambas opciones para estudios posteriores.

Posteriormente y en el última parte de este trabajo, se comenzó a usar un solver que tenía implementado como modelo de atomización el modelo ELSA. Se procedieron a realizar los ajustes pertinentes y necesarios para adaptar dicho código, basado también en OpenFOAM, a simulaciones con condiciones coherentes, en principio, para chorros diesel y posteriormente un ajuste más fino y preciso para comparar los resultados que este código proporcionaba a los ya obtenidos con el anterior solver Euleriano-Lagrangiano, dieselFoam, y, evidentemente, con la base de datos tanto teórica como experimental perteneciente a CMT, de la que se dispuso durante todo el período de estudio. El estudio concluyó dejándose abierto un camino para la continuación del perfeccionamiento del modelo ELSA y su aplicación para el estudio de la zona cercana al orificio de los chorros diesel, lo cual es un tema aún ciertamente desconocido y del que no se tienen todavía muy claros los fenómenos que tienen lugar y se desarrollan en tal zona.

1.4 Desarrollo y resultados

La etapa inicial de la investigación se dedicó a la evaluación del solver dieselFoam mediante la comparación de resultados de unos casos preliminares de ajuste con el ya validado código comercial Star-CD®. Una vez se obtuvieron resultados lo suficientemente precisos a Star-CD® y los datos experimentales disponibles de estos casos iniciales, se pasó ya a un estudio exhaustivo de este solver junto con la base de datos disponible en CMT como medio de validación. En la última etapa, se realizaron simulaciones con un nuevo código de OpenFOAM desarrollado por investigadores de la universidad de Massachusetts con simulaciones mediante el modelo ELSA de atomización obteniéndose resultados prometedores.

1.4.1. Estudio paramétrico I: método Lagrangiano

En la primera etapa de cálculos y simulaciones se evaluó la capacidad de los modelos presentes en el solver dieselFOAM para predecir las características del chorro diesel en condiciones no evaporativas. Para evaluar dicha capacidad, se tomó como referencia inicial un caso, ya validado por otra investigadora del grupo, del código comercial Star-CD® del que se disponía además de información experimental para comparar resultados.

Durante esta etapa inicial, y de manera general, se definieron las mejores estrategias de postprocesado numérico de los parámetros del chorro, programándose posteriormente en el propio código instrucciones para la extracción de datos para el postprocesado de los mismos en paraView, la herramienta de postprocesado utilizada en esta tesina. Además se configuraron mallas cartesianas basadas en una malla realizada con el software de preprocesado de Star-CD® con distinta densidad de celdas y relaciones de aspecto para analizar su influencia en la solución, escogiéndose la más adecuada para el posterior cálculo de los puntos de operación. A su vez, se probaron diferentes configuraciones numéricas referentes a resolución temporal, número de parcels inyectadas y sus efectos, unidos a la resolución espacial, en el tiempo de cálculo y se estudiaron las consecuencias de modificar las constantes de los modelos de turbulencia disponibles en el código.

Después de muchas configuraciones preliminares se llegó a una configuración más óptima que se ajustaba con precisión a las simulaciones de Star-CD® así como a los resultados experimentales de penetración líquida.

Finalmente, y antes de introducirnos en el análisis del estudio paramétrico Lagrangiano, en cuanto a la validación de los diferentes modelos que se verán a continuación, los resultados de las simulaciones tanto para penetración como para distribución de velocidades, se compararon todos con la base de datos experimental de CMT, en concreto, de resultados experimentales obtenidos de la tesis de J. Gimeno [2].

1.4.1.1 Caso inicial

El caso de partida fue un caso en el que se inyectaban 40 mg de combustible tri-decano con coeficiente de descarga igual a la unidad a través de un inyector de siete orificios de 135 μm de diámetro cada uno. El ángulo de apertura del chorro inicial fue de 17° y la tasa de inyección se introdujo a partir de la base de datos experimental para este caso inicial. En la cámara de combustión, el único gas presente era nitrógeno en reposo a una temperatura de 302K y una presión ambiente de 4.9MPa. El tiempo de inyección era de 1.2 ms. A partir de estos datos de partida, se fueron realizando modificaciones en las mallas y sub-modelos para así llegar a la configuración final más adecuada, entendiendo por adecuada la configuración que más se acercaba a los resultados obtenidos con el software comercial así como a los datos experimentales de lo que se disponía.

1.4.1.2 Mallas

En este estudio, los cálculos se realizaron utilizando una serie de mallas 2D y 3D para comprobar la dependencia de malla de cada uno de los casos estudiados. La primera de las mallas que se utilizó fue una malla cartesiana 3D convertida desde el formato de Star-CD® al formato requerido por OpenFOAM. Esta malla, así como todas las que se ha utilizado en este trabajo, era de geometría sencilla: un hexaedro cuya densidad de celdas era variable.

A medida que se fue avanzando en el trabajo y tras el estudio de ajuste inicial del solver se realizó un estudio de malla. Este estudio se llevó a cabo con siete mallas realizadas con la utilidad de mallado de OpenFOAM, incluyendo además la del estudio inicial y de todas ellas, se eligió la que mejor se adaptó a los resultados de la base de datos experimental de CMT. Así pues, se fijaron los sub-modelos, el modelo de turbulencia modificándose únicamente la malla en cada caso. Las mallas utilizadas junto con sus diferentes configuraciones se recogen en la siguiente tabla, teniendo todas en común (a parte de lo que ya se dijo anteriormente, los sub-modelos y el modelo de turbulencia) la presión de inyección, la contrapresión (o presión en la cámara), la densidad ambiente, el coeficiente de área, la temperatura del combustible inyectado, la masa de combustible inyectado y el ángulo del chorro.

Software de mallado	Longitud axial*	Tipo de simulación	Nº axial celdas
Star-CD	50 mm	3D	70
OpenFOAM	50 mm	2D	70
OpenFOAM	50 mm	3D con 2 planos de simetría	70
OpenFOAM	80 mm	3D	70
OpenFOAM	80 mm	3D	112
OpenFOAM	80 mm	3D, con 1 plano de simetría	112
OpenFOAM	80 mm	3D	50
OpenFOAM	80 mm	3D	150

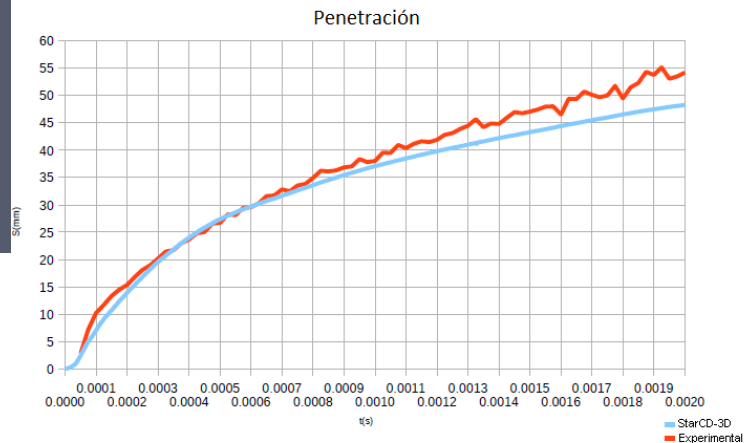
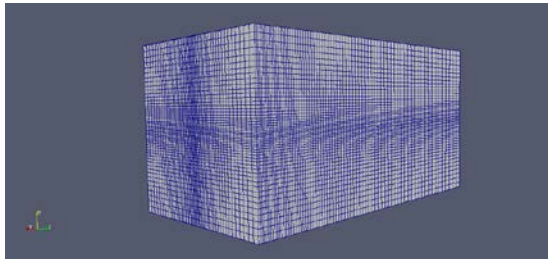
*entendiendo por axial el eje de dirección principal de inyección del chorro.

Seguidamente se mostrará una serie de comparaciones de penetración consideradas más relevantes entre las mallas.

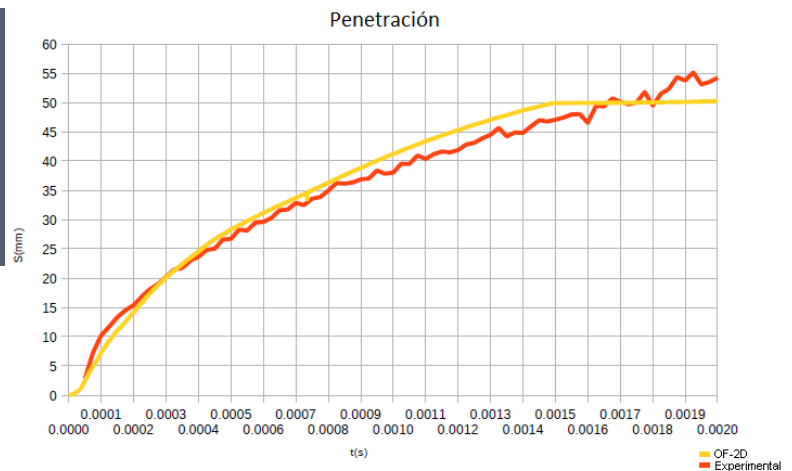
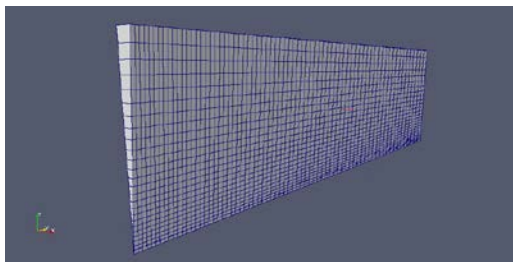
En primer lugar, mostramos una comparación de tres mallas: la 3D de StarCD, la 2D y la 3D con dos planos de simetría de OpenFOAM. Se comparan las penetraciones de las mallas 3D de StarCD y la 2D en dos gráficas diferentes con la penetración experimental (no se comparó la

penetración de la malla con dos planos de simetría con la penetración experimental porque al observar la evolución del cálculo, se apreció un rápido avance del chorro y un muy rápido impacto con la pared del fondo de la malla) y finalmente se muestra una misma gráfica en la que se comparan las penetraciones de las tres mallas:

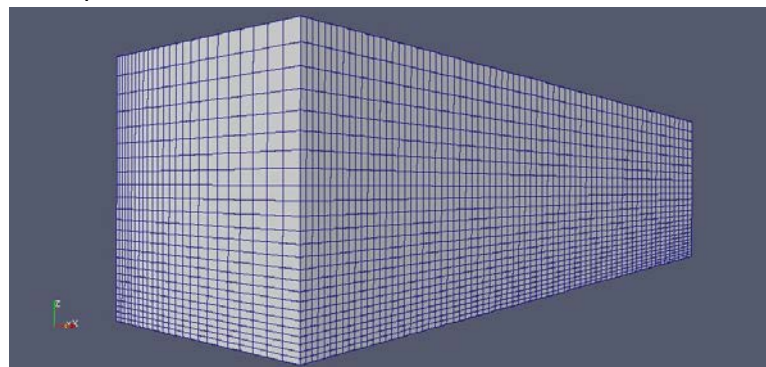
1- Malla de StarCD con su gráfica de penetración



2- Malla 2D de OpenFOAM con su gráfica de penetración

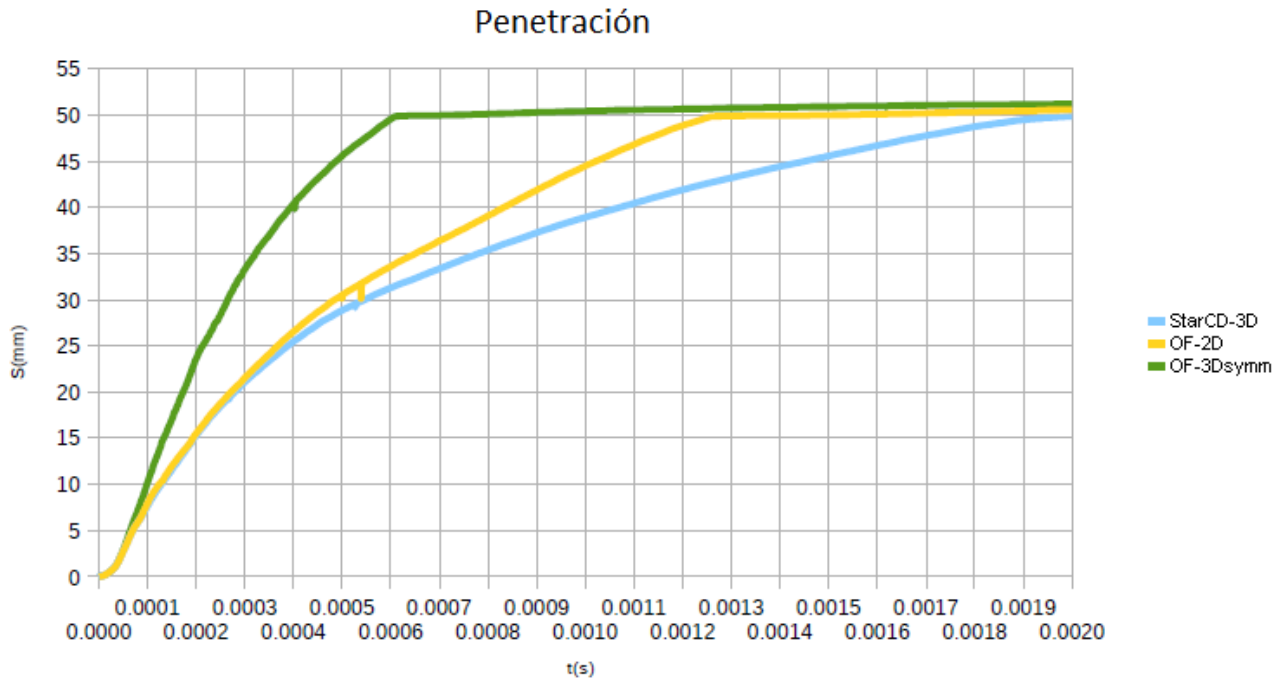


3- Malla 3D con dos planos de simetría*,



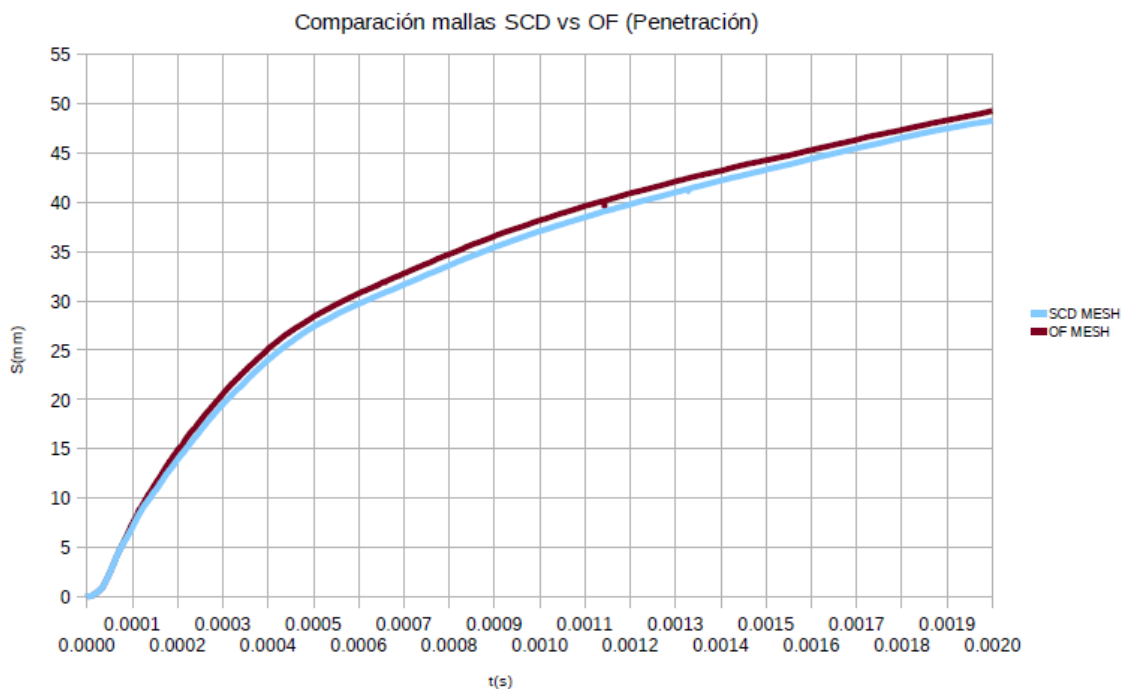
*Los dos planos de simetría de la malla se cortan en el punto que hace las veces de inyector en la malla 3D completa; en la figura la esquina inferior izquierda del cuadrado.

La gráfica de penetración de las tres mallas mostradas es,



Como se puede observar, en las mallas 2D y 3D con dos planos de simetría el chorro impactaba contra la pared opuesta a la entrada de la malla a 50 mm de longitud muy rápidamente, sobre todo con la malla 3D con dos ejes de simetría y por ello estas mallas se descartaron para el estudio.

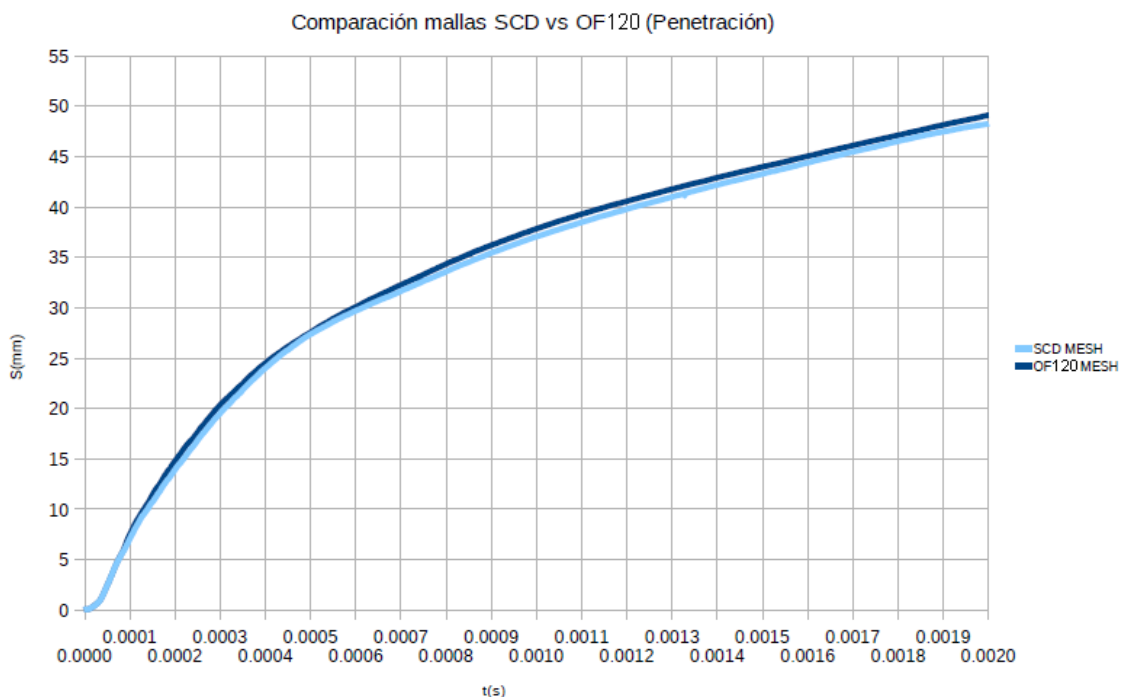
A continuación se comparó la malla de StarCD con una malla de OpenFOAM de 80 mm de longitud axial y 70 celdas en la misma dirección. La malla inicial como ya se dijo tenía 50 mm de longitud en el eje de inyección, pero se aumentó a 80 mm porque la cámara de inyección real donde se realizaron los experimentos tenía esta longitud. Se muestra una gráfica de comparación de penetración de estas dos mallas,



Como se puede ver, la penetración con la malla de OpenFOAM es ligeramente más rápida que con la malla de StarCD.

Siempre buscando más precisión y para mantener la relación en la dirección axial entre celdas, se realizó una segunda malla de 80 mm con 112 celdas en la dirección axial. Con la malla de 80 mm anterior, se mantuvieron las 70 celdas con lo cual esta relación axial no se mantuvo igual a la de la malla de StarCD y por ello se confeccionó esta nueva malla de 80 mm. Se compara entonces la penetración de la malla de StarCD con la nueva malla de OpenFOAM y ambas mallas de OpenFOAM para claramente y por separado las diferencias que existen. Además, por considerar esta malla la definitiva, la que se utilizará a lo largo del resto del estudio euleriano-lagrangiano, se mostrarán el perfil de velocidad axial normalizado en un instante en el que se consideró que el chorro estaba completamente desarrollado y a una distancia axial al orificio de inyección de 40 mm.

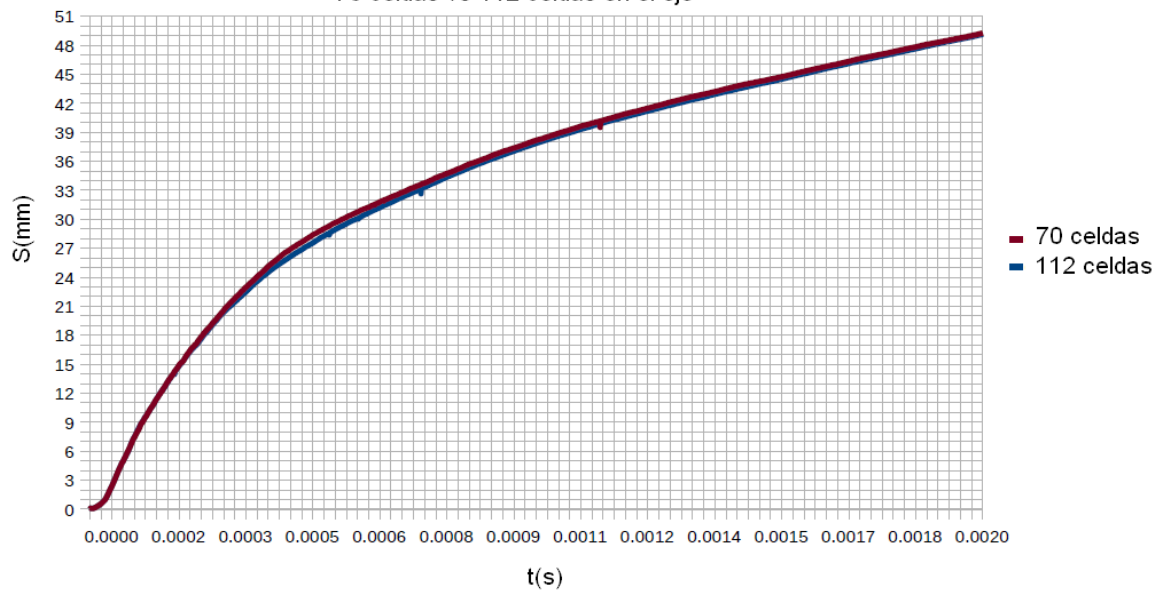
La gráfica de penetración de la malla de StarCD con la segunda malla de OpenFOAM es



Como se ve en la gráfica, en esta ocasión la penetración del chorro en los dos casos se acerca bastante más que con la malla anterior de 70 celdas en dirección axial y se comenzó a usar esta malla como la de referencia para el resto de los casos estudiados por comodidad y por evaluar el funcionamiento de la misma al ser parte del software que se utilizó en todo momento para simular los casos, OpenFOAM.

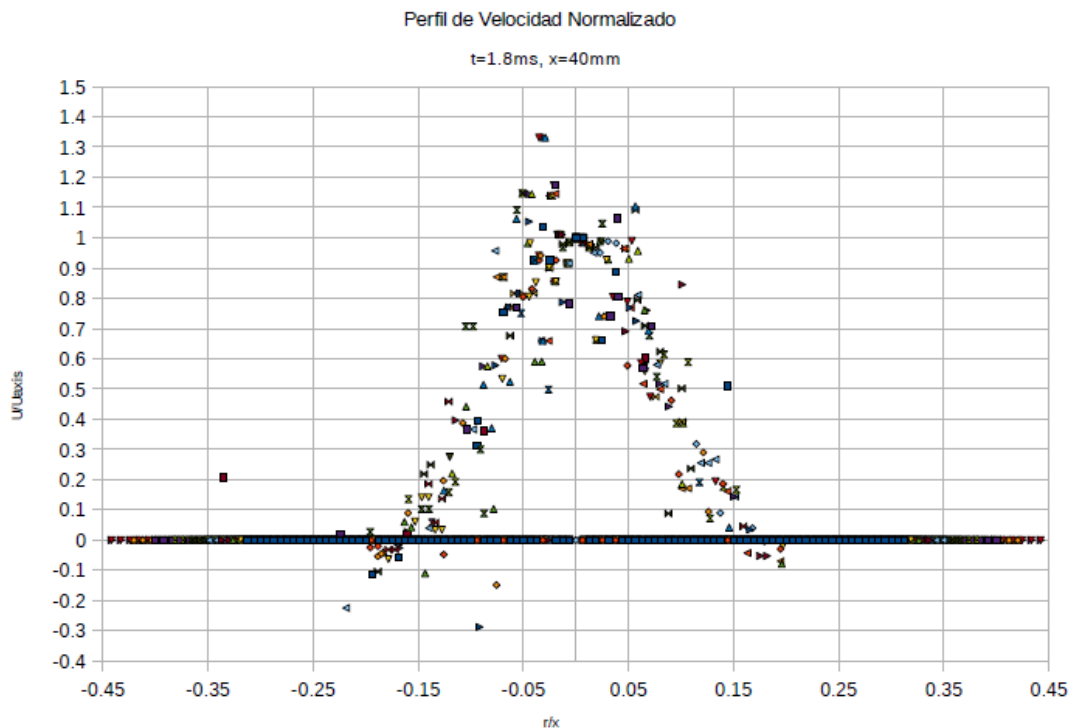
Y la de penetración de la malla de OpenFOAM de 70 celdas en el eje y la de 112 es, (ir a página siguiente)

Comparación Penetración Mallas de OpenFOAM
70 celdas vs 112 celdas en el eje



Y se observa que la diferencia entre una curva y otra es muy pequeña.

Por último, el perfil normalizado de velocidad del caso con la malla de OpenFOAM de 112 celdas en dirección axial de 80 mm de longitud a 40 mm del inyector y en el instante 1.8 ms es la siguiente,

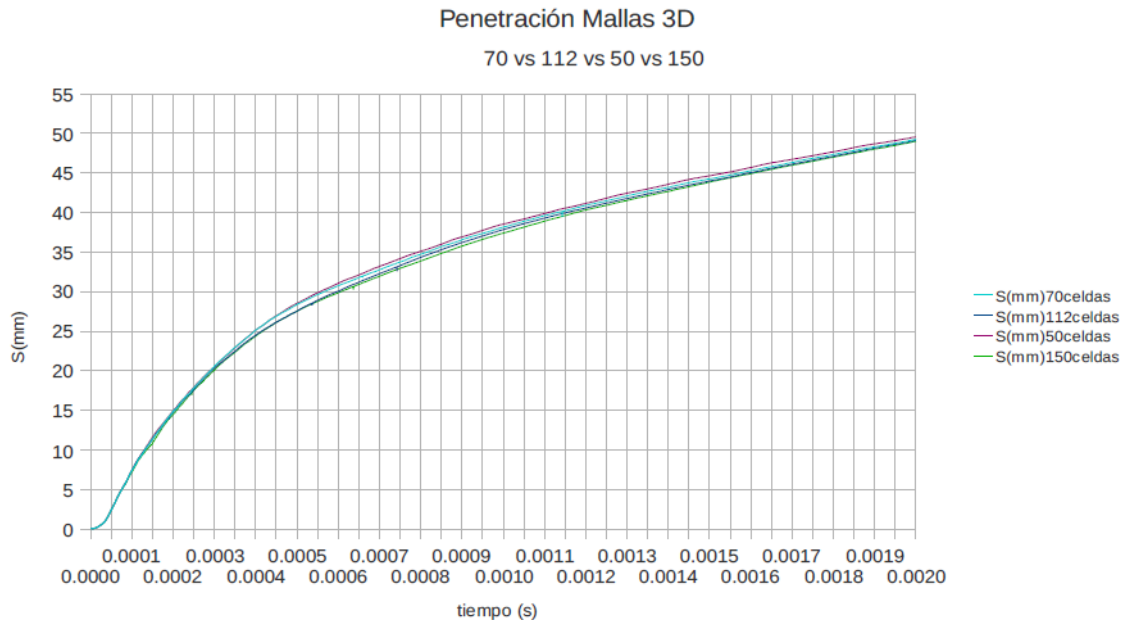


Y se aprecia claramente que es un perfil gaussiano.

Por último, hemos de añadir que antes de decidir de manera definitiva que la malla de 80 mm de longitud con 112 celdas axiales, se probaron otras dos configuraciones diferentes de malla. La primera de ellas es una malla con, en vez de 112, 50 celdas en el eje. Se decidió reducir el número de celdas en esta dirección para ver si se perdía mucha precisión en el cálculo; y, la

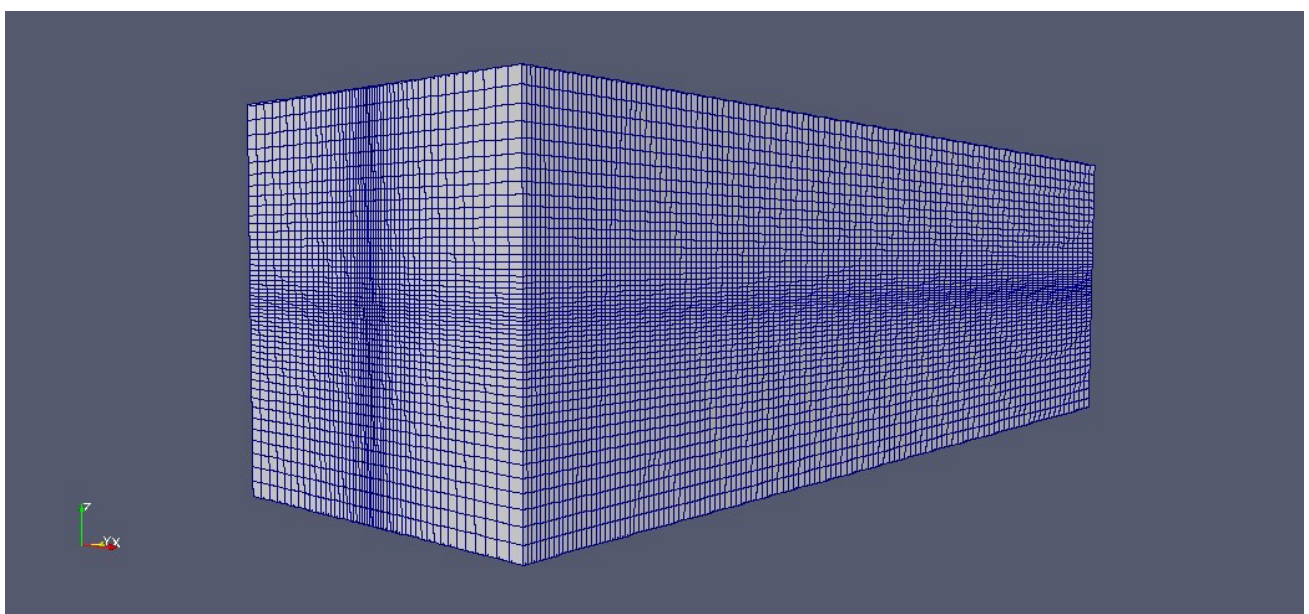
segunda configuración fue una malla con 150 celdas para, por el contrario, ver cuánta precisión se ganaba y si merecía la pena aumentar este número de celdas que aumentó, como es lógico, el tiempo de computación de los casos.

Así pues, mostramos una gráfica en la que se representan las cuatro diferentes mallas 3D de OpenFOAM que se estudiaron en esta parte del trabajo en las que se varió únicamente el número de celdas axiales, esto es, la de 70 celdas, “hermana gemela” a la malla inicial de StarCD, la de 112 celdas, y la de 50 y 150 celdas, respectivamente,



Y se puede observar que, con la malla de 50 celdas se obtiene una penetración más rápida que con ninguna de las otras tres mallas y con la de 150 celdas se apreció un aumento considerable del tiempo de computación y por ello se descartó, porque se observó un aumento no significativo del grado de precisión del cálculo.

Se concluyó que la malla con la que mejores resultados se obtenían fue la malla de OpenFOAM de 80 mm de longitud, 3D y con 112 celdas en su dirección axial, mostrada en la siguiente figura,

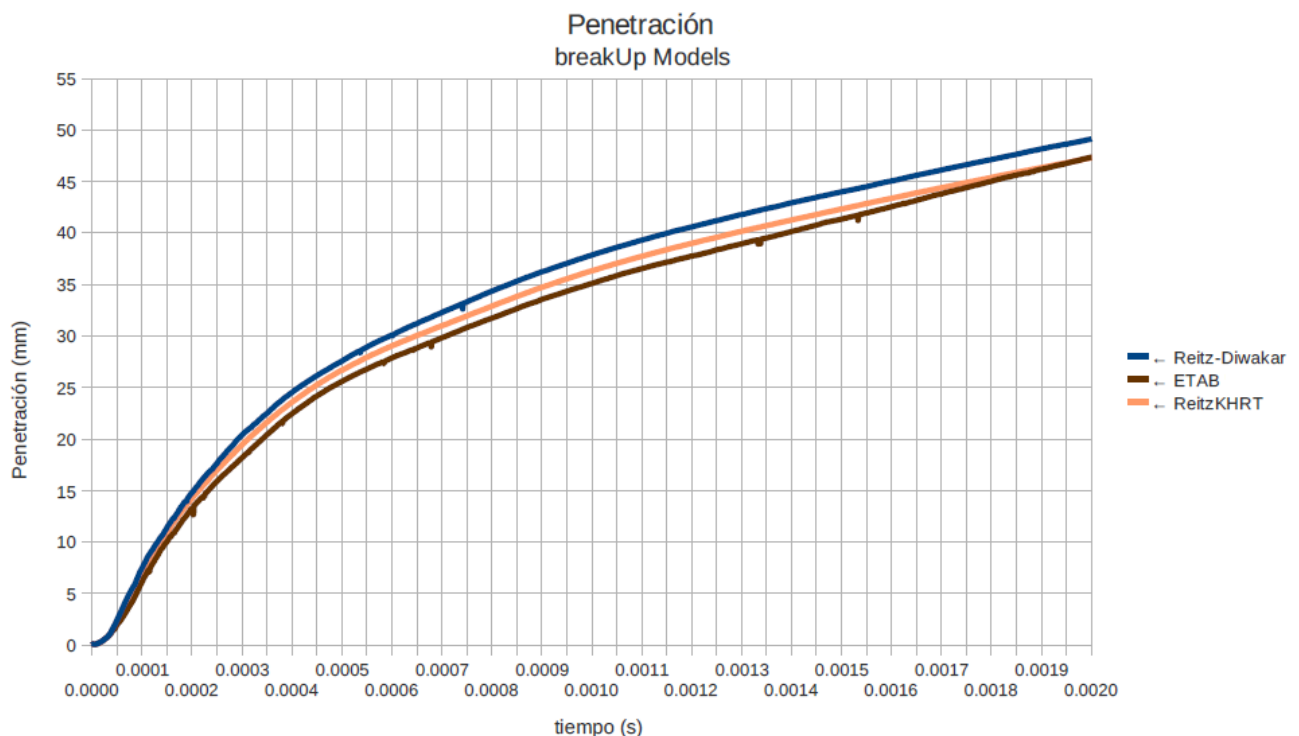


1.4.1.3 Sub-modelos del chorro

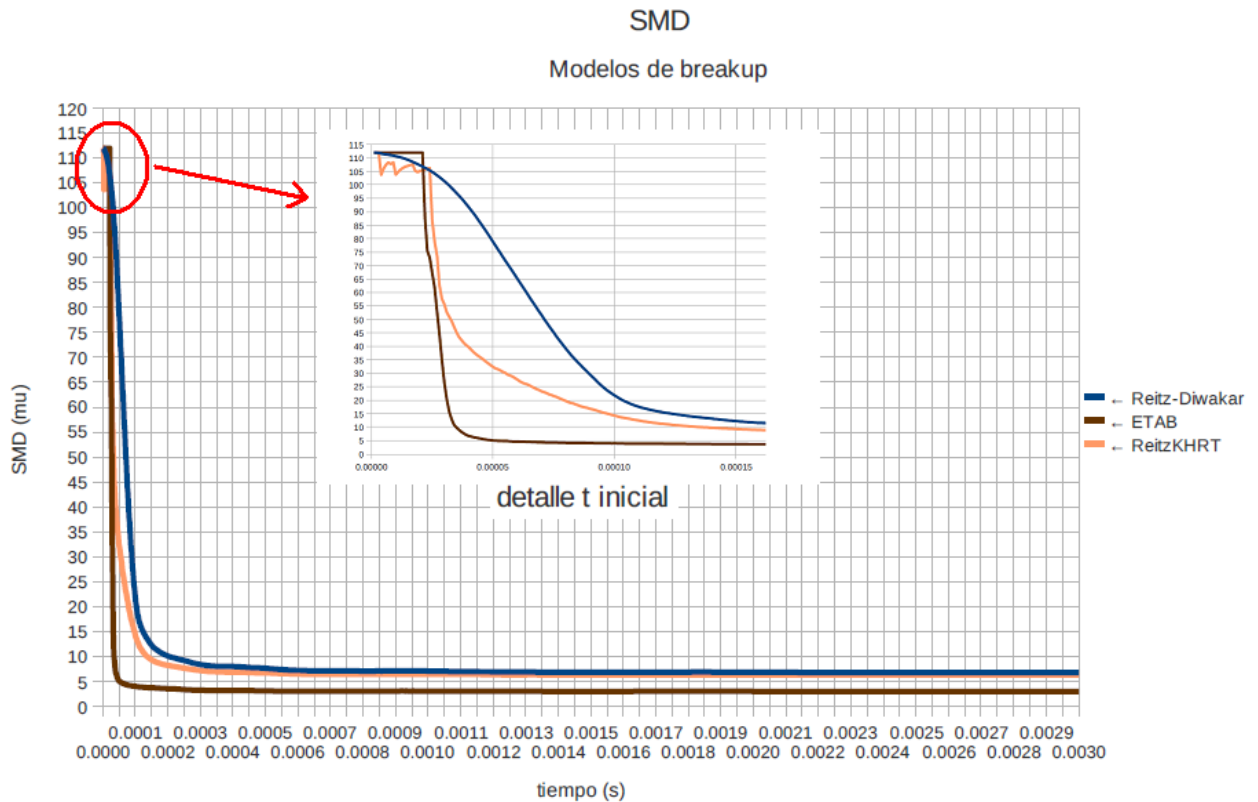
Como ya se mencionó en el apartado 1.2, el proceso de atomización consiste en la rotura del líquido en gotas muy pequeñas y, junto con el proceso de atomización secundaria, son de los procesos más complejos que tienen lugar en el desarrollo de los chorros diesel. A su vez, la atomización está relacionada con otra serie de procesos tales como la penetración tanto líquida como gaseosa, con la mezcla aire-combustible y la combustión.

Para representar la atomización secundaria, se realizó también un estudio de los modelos de breakup de que dispone el solver dieselFoam. En esta parte, se estudió la influencia de los distintos modelos en la penetración, en la distribución del tamaño de las gotas y de la velocidad axial de cada caso. Se partió de un caso de referencia de una tobera dada que se obtuvo de la base de datos experimental de CMT y se fueron variando los modelos de breakup, que son: el modelo Enhanced Taylor Analogy Breakup, ETAB, [3], uno de los más utilizados en las simulaciones lagrangianas de chorros; el modelo Taylor Analogy Breakup Model, TAB, [4] (el cual se considera importante mencionarlo pero no se simuló en este estudio inicial), el modelo Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylor, KH-RT, [5], otro modelo muy utilizado en simulaciones de chorros; y el modelo de Reitz-Diwakar, [6], modelo seleccionado por defecto. De todos ellos, se eligió al final del estudio lagrangiano el modelo KH-RT, que consiste en una aproximación donde se sigue la trayectoria de las gotas y, sin embargo, la fase continua, es decir, la gaseosa, no se resuelve. Es un modelo donde las propiedades físicas que se obtienen quedan bien definidas.

Recordamos que el caso de referencia es el de la tobera de 112 micras de diámetro con presión de inyección de 800 bar y una densidad ambiente de 40 kg/m³. La malla es la realizada en OpenFOAM de 80 mm de longitud y 112 celdas en la dirección de inyección del chorro. Vemos a continuación las gráficas de penetración del modelo de Reitz y Diwakar comparada con el modelo ETAB y el modelo de Kelvin-Helmholtz Rayleigh Taylor.

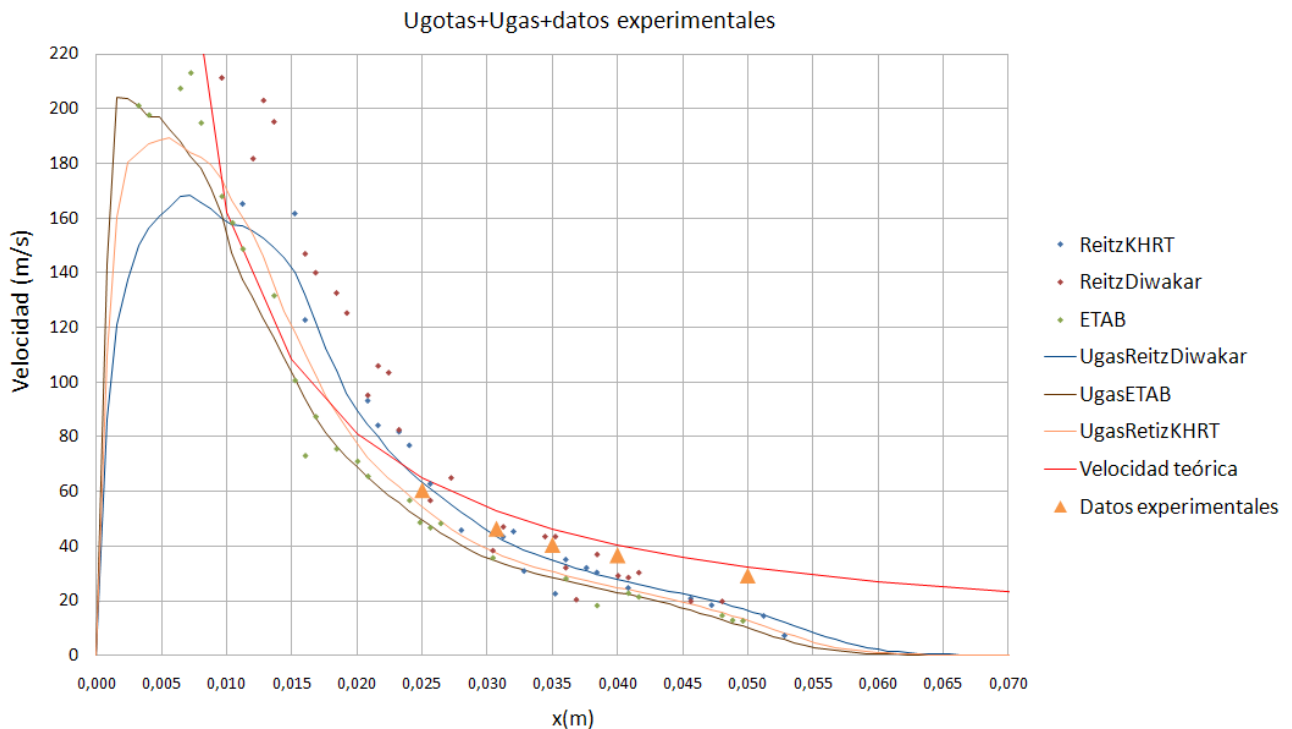


Y la distribución de tamaños de gotas es la siguiente,



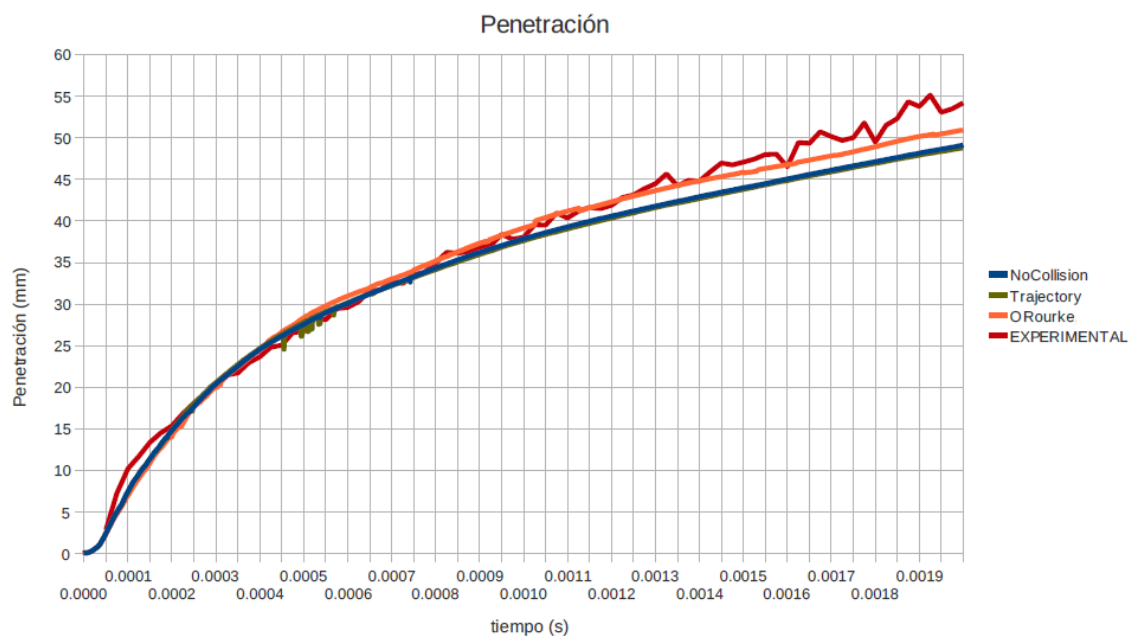
Donde se muestra un detalle del tiempo inicial, y como ya se mencionó anteriormente, se observa el comportamiento diferenciado de cada uno de los modelos en la zona inicial cercana al orificio del inyector.

Por último se muestra la gráfica de velocidades en el eje tanto del gas como de las gotas del chorro inyectado en el instante de tiempo 3 ms junto a los datos experimentales y un modelo teórico,

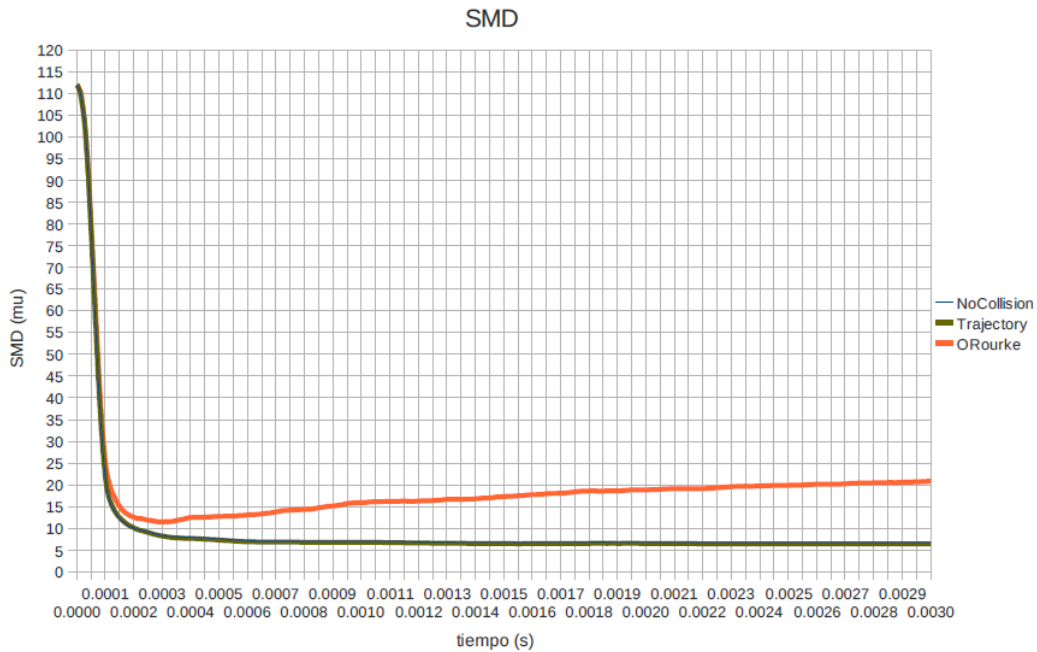


Como se puede ver en esta última gráfica, el modelo Reitz Diwakar es el que proporciona una velocidad de gotas y gas más suave y cercana a una distancia de entre 30 y 40 mm del inyector, aunque sobreestima la velocidad a una distancia de entre 10 y 15 mm. Por el contrario, el modelo ETAB produce una rápida aceleración inicial y una fuerte caída a continuación. El modelo Reitz KHRT es un modelo intermedio y por ello se tomó como modelo de atomización secundaria para posteriores simulaciones.

En cuanto a los sub-modelos de colisión de gotas y coalescencia y dispersión turbulenta, se realizó también un pequeño estudio para comprobar sus efectos sobre el caso de referencia. En dieselFOAM existen dos diferentes modelos de colisión de gotas. El primero de ellos es el modelo de O'Rourke, [7], implementado en el código como lo está en el código KIVA; y por otro lado, el otro modelo se denomina trajectory, que es el de O'Rourke con la diferencia de que se activa la coalescencia. Se observó una penetración más ajustada al caso experimental en el caso en el que se seleccionó el modelo de O'Rourke. La gráfica de penetración y de SMD es la siguiente con los modelos de colisión, sin él activado y la penetración experimental todos ellos comparados,



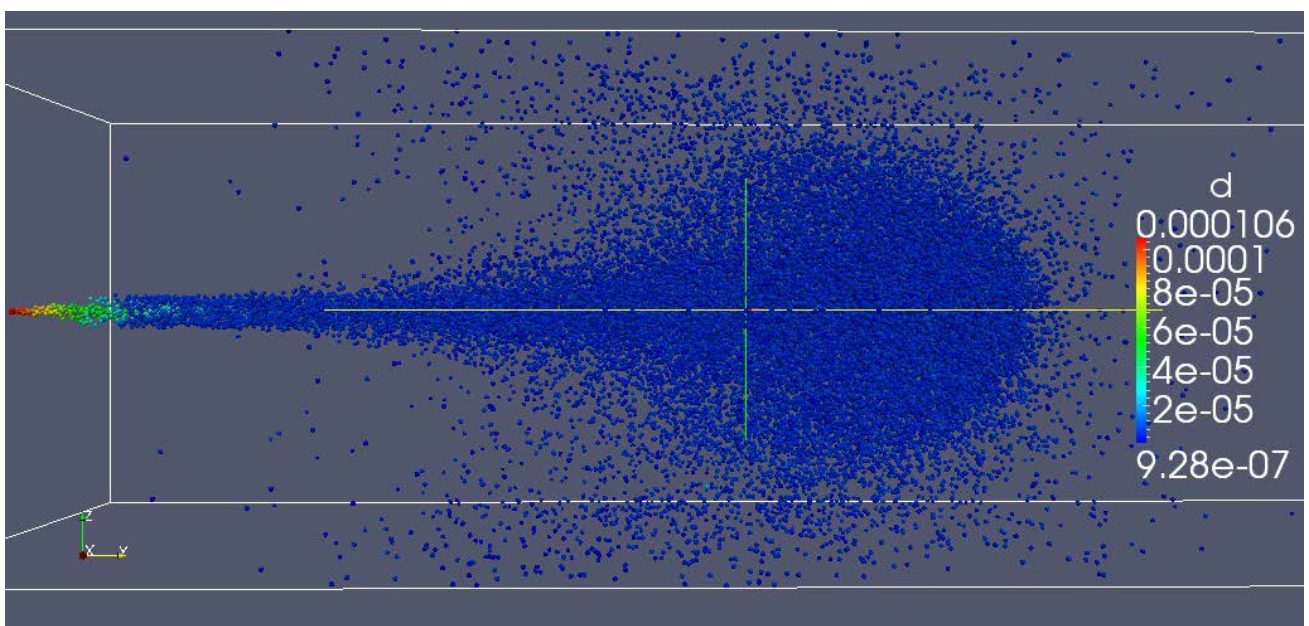
En la que se aprecia que la penetración con el modelado con coalescencia según O'Rourke se acerca más a la penetración experimental. Y la gráfica de SMD, (ir a página siguiente)



Donde figuran el diámetro SMD en micras y el tiempo en segundos en los ejes Y y X, respectivamente y donde se observa claramente cómo con el modelo de O'Rourke de colisión, el diámetro primeramente desciende y a medida que el chorro evoluciona, las gotas van chocando y se unen formando otras de mayor tamaño.

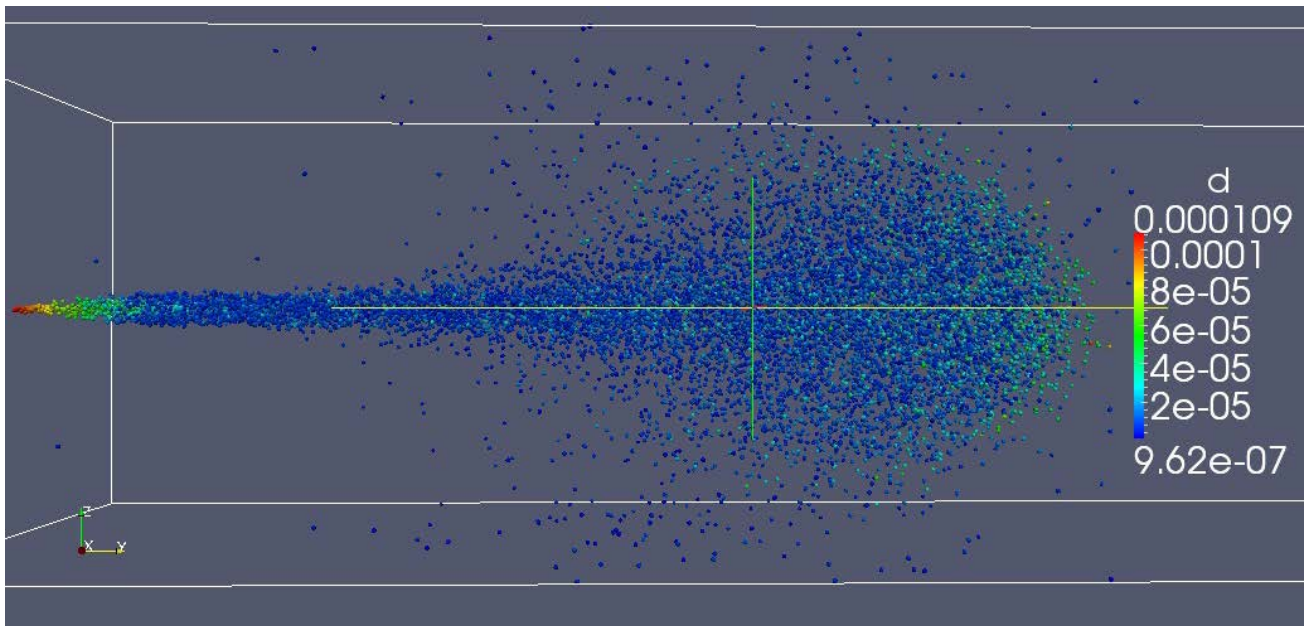
A continuación se muestran las figuras que representan al chorro a los 3 ms con el modelo de colisión y sin él, pudiendo interpretarse fijándose en los colores de la leyenda cómo con el modelo de O'Rourke, las gotas al colisionar se unen nuevamente formando gotas más grandes.

1- Chorro sin modelo de colisión activado.



En esta figura se observa cómo el diámetro de las gotas va disminuyendo axialmente.

2- Chorro con el modelo de colisión de O'Rourke



En esta figura se observa el efecto de la coalescencia muy claramente, sobre todo en el frente del chorro.

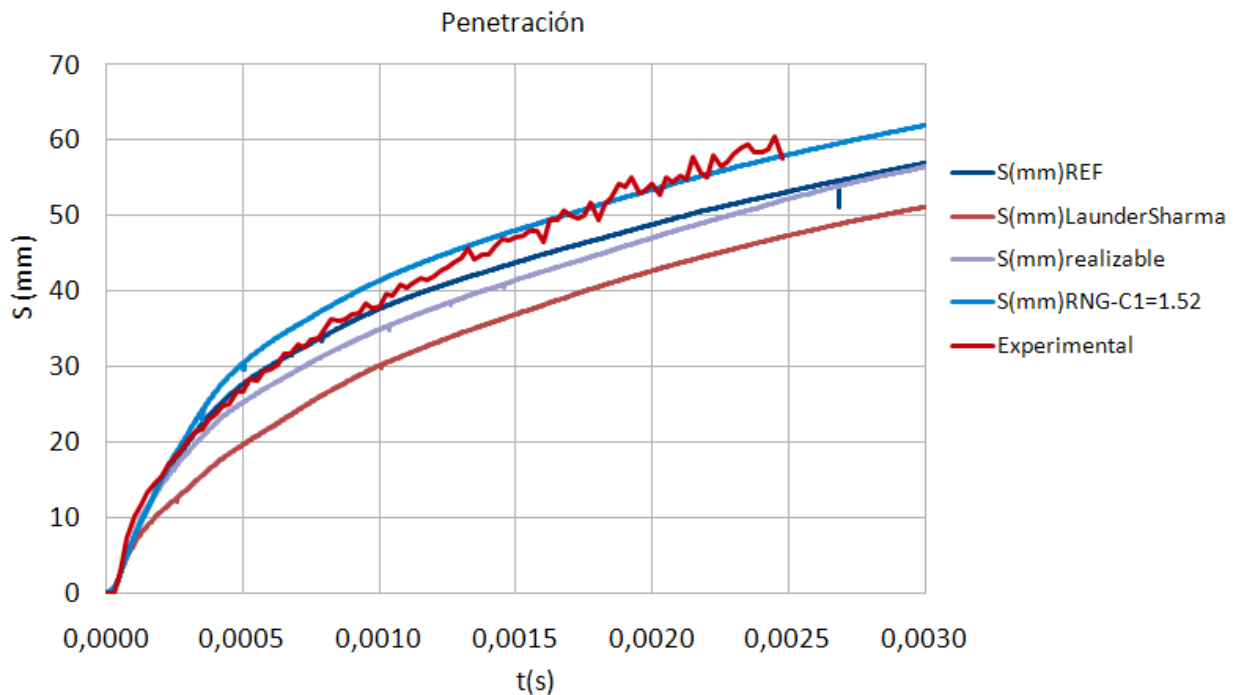
En cuanto al modelo de evaporación, ya se mencionó que este estudio, no se consideró tal efecto, es decir, el chorro se consideró en todo momento no evaporativo y tampoco se consideró reactivo, así que tampoco se dispuso de un modelo de combustión.

1.4.1.4 Modelado de la turbulencia

En el solver dieselFOAM, y como ya se mencionó anteriormente, la turbulencia se modela a través de la técnica RANS, una versión mediada en el tiempo de las ecuaciones de Navier-Stokes. En las ecuaciones de la turbulencia no hay término fuente y por tanto la fase lagrangiana solamente es influenciada por la transferencia de momento y la generación de gradientes de velocidad.

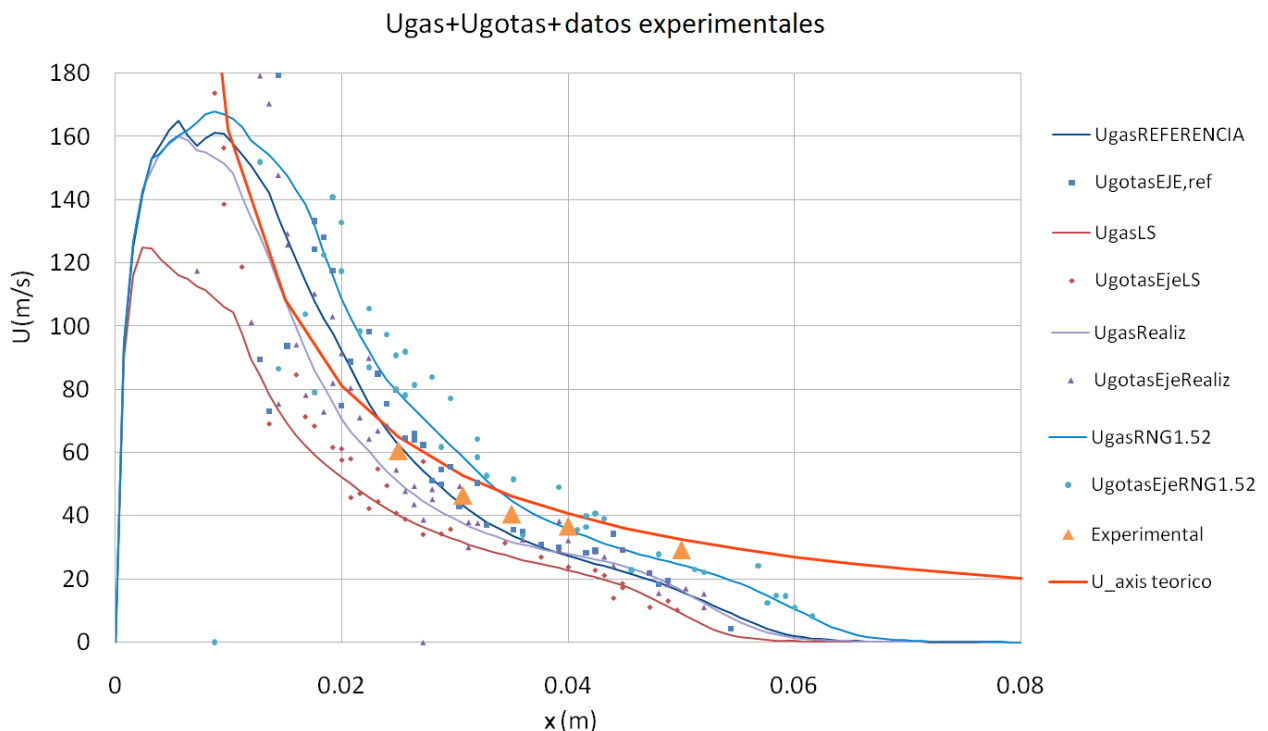
En el código existen una serie de modelos de turbulencia y en este estudio se estudiaron los efectos principalmente de cuatro de ellos: el modelo $k-\epsilon$ estándar, [8], el RNG $k-\epsilon$, [9], que se adoptó como el modelo de referencia para los casos estudiados en este trabajo, el modelo de Launder y Sharma, [10], y el modelo denominado realizable $k-\epsilon$, [11]. Como en apartados anteriores, se partió de un caso de referencia y se modificaron los modelos de turbulencia para evaluar su efecto en penetración y velocidades axiales. Además, estos modelos tienen una serie de constantes de las que se estudió el efecto de la modificación de alguna de ellas y por qué se adopta ese valor, como se verá con mayor profundidad en la parte del modelado ELSA de esta tesina.

Seguidamente vemos la gráfica de penetración de los casos con los diferentes modelos de turbulencia que se simularon: el caso de referencia con el modelo RNG $k-\epsilon$ con la constante $C1$ por defecto con valor 1.44, el modelo Launder Sharma, el modelo realizable, el modelo RNG $k-\epsilon$ con la constante $C1$ con el valor de 1.52, junto con la penetración experimental,



Como se observa claramente en la figura, el modelo RNG con la constante igual a 1.52 se aproxima más a la curva experimental cuando el chorro comienza a estar desarrollado a la vez que el resto de modelos de turbulencia subestiman la penetración en la mayoría del tiempo del proceso de inyección.

Por último, la gráfica de velocidades de gas y gotas en el eje de inyección junto con los datos experimentales y el modelo teórico también se realizó y es la siguiente,



Lógicamente, de nuevo el caso calculado con el modelo de Launder Sharma (cuya nomenclatura en la gráfica es LS) es en el que el chorro adquiere menor velocidad y se observa

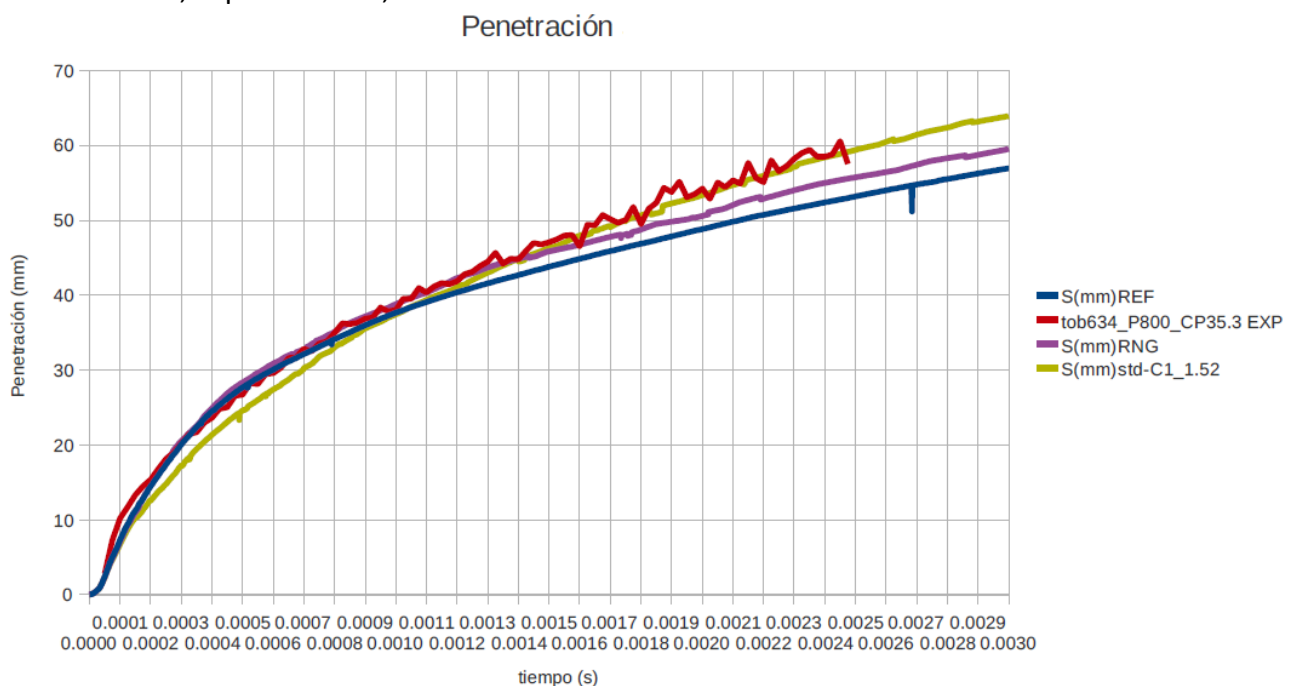
también muy claramente cómo el modelo RNG con la constante C1 modificada es el que adquiere mayor velocidad en el inicio de la inyección.

1.4.1.5 Conclusiones

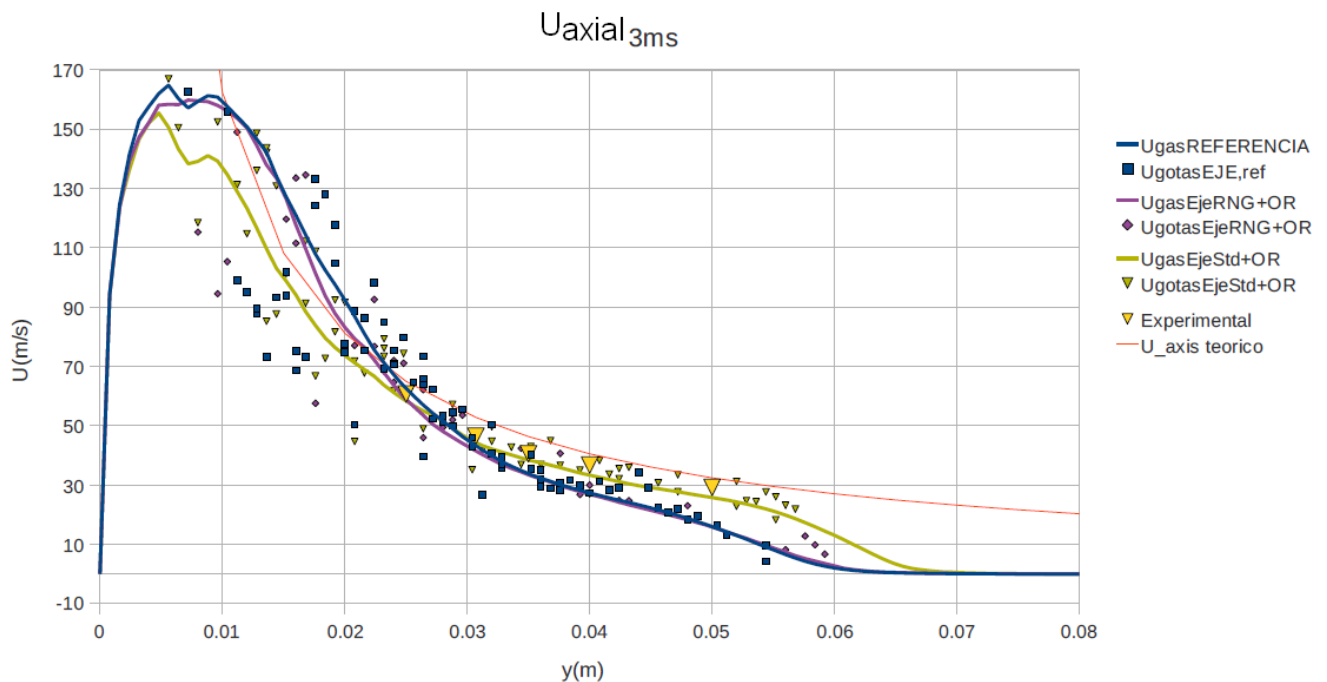
De toda esta serie de estudios, se extrajo una configuración final en la que los resultados obtenidos se asemejaban de manera excelente a los datos experimentales, [12], [2], con los que se fue comparando en todos y cada uno de los casos simulados, así que se dio por concluido y validado el estudio Euleriano-Lagrangiano con OpenFOAM para resolver chorros diesel.

Dicha configuración final es para una tobera de 112 μm de diámetro y un tiempo total de inyección de 3 ms con la malla 3D de 80 mm axiales, con un modelo de breakup Kelvin-Helmholtz, con el modelo de colisión de O'Rourke y el modelo de turbulencia k- ϵ estándar con la constante C1 igual a 1.52. En las siguientes gráficas se comparan este caso final con el caso denominado de referencia en el que el modelo de turbulencia es el RNG k- ϵ y no tiene colisión de las gotas en cuenta y el denominado como únicamente RNG sí que tiene el modelo de O'Rourke de coalescencia. Todos ellos se comparan con el caso experimental. Se representan la penetración y la velocidad axial tanto del líquido como del gas, como se indica en las leyendas de las gráficas, y para mejor aclaración, el caso representado en verde caqui es el caso final de mayor interés y concluyente para esta parte del estudio.

Primeramente, la penetración,



La siguiente, la gráfica de velocidades en el eje principal de inyección a los 3 ms que es cuando se consideró que el chorro estaba lo suficientemente desarrollado.



Por ello, en nuestro caso, se puede afirmar que el objetivo se consiguió de forma satisfactoria puesto que, tras un alto número de cálculos y variaciones de los parámetros de entrada, los resultados no sólo se han asemejado a la base de datos CMT, sino que además se mejoró en cuanto a tiempo de computación, y a la precisión de la curva de penetración y velocidades axiales.

En cuanto al comportamiento de los chorros, se observaron una serie de conclusiones. Una de ellas es que, y relativo a penetración, ésta tiene inicialmente una zona lineal dependiente de la presión de inyección y que tiene otra zona en la que el chorro ya está desarrollado donde es proporcional a la raíz cuadrada del tiempo. Además en esta última zona, se observaron diferencias de penetración dependiendo del ángulo de apertura y de la densidad de la cámara, además del efecto de los diferentes sub-modelos de atomización secundaria, colisión, coalescencia, etc. y modelos de turbulencia que se configurasen.

Finalmente, se considera que se ha de añadir este pequeño apunte y es que todo el ajuste del solver y del código depende de la base de datos experimental de la que se disponga para comparar los resultados obtenidos en las simulaciones, aunque ha quedado demostrado que las simulaciones CFD de chorros diesel son una herramienta muy útil en el campo de la investigación extendible a marcos de estudio como puede ser el uso industrial y, en concreto, que OpenFOAM es una herramienta CFD en pleno despunte y desarrollo con un altísimo potencial.

Antes de dar por concluida esta parte del estudio paramétrico RANS, diremos que, como punto de partida para la siguiente parte, el estudio del modelo ELSA, muchos de los estudios que se realizan en la actualidad, se centran en la parte desarrollada del chorro, siendo un reto aún hoy en día el descifrar qué es lo que sucede exactamente en la zona inicial transitoria del chorro, dada la complejidad tanto física como el acceso óptico a esta zona aún muy desconocida.

1.4.2 Estudio paramétrico II: modelo ELSA

En este segundo estudio ya se introdujo anteriormente que se ha utilizado un modelo de atomización primaria denominado Eulerian Lagrangian Atomization Spray, ELSA, soportado por el mismo software de computación, OpenFOAM.

Bien es sabido que la atomización de un chorro líquido puede dividirse en dos regiones. La primera, es la región cercana al orificio de salida de la tobera, donde el chorro es muy denso y seguidamente, existe una segunda región donde el chorro se diluye y se mezcla con el aire que lo engloba. En la región cercana al orificio de la tobera, las interacciones líquido-líquido y líquido-gas son muy fuertes, e incluso con las técnicas experimentales más avanzadas hasta el día de hoy no se ha conseguido información lo suficientemente precisa sobre las características de la atomización primaria del chorro, tales como el tamaño de las gotas y su distribución. En los modelos clásicos Lagrangianos basados en inestabilidades lineales y efectos aerodinámicos, la extensión de la hipótesis de las gotas a la región inicial más densa del chorro se hizo necesaria debido a la falta de datos experimentales en dicha zona, siendo la suposición inicial utilizada que las gotas iniciales del chorro poseen el tamaño del diámetro de salida del inyector.

El método Euleriano-Lagrangiano ELSA denominado Σ -Y fue propuesto por Vallet et al. en 2001 [13] y desde entonces se ha ido desarrollando, [14], [15], [16]. Combina la aproximación Euleriana en la región cercana al orificio con la región aguas abajo del orificio donde se aplica (puede aplicarse o no, y resolverse el chorro al completo dentro del marco Euleriano) la aproximación clásica Lagrangiana.

En este modelo, se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes para la mezcla aire-combustible y se utilizan una serie de técnicas para corregir los efectos de compresibilidad para chorros de alta velocidad. Para describir la dispersión de la fase líquida en un medio gaseoso se monitoriza una ecuación de transporte para la fracción másica de líquido, en la que el flujo de difusión turbulenta se modela de manera similar al clásicamente definido flujo de difusión turbulenta para flujos monofásicos. La producción y destrucción de área de superficie debida a la coalescencia y colisión se tienen en cuenta en los términos fuente en la ecuación de transporte, como se verá más adelante.

Las ecuaciones de transporte se resuelven para la fracción másica de líquido, Y , y para la densidad de superficie líquida (área de superficie líquida por unidad de volumen) cuya nomenclatura es la letra griega Σ , de ahí el nombre del modelo. Tres de las suposiciones más importantes del modelo ELSA son: primero que la atomización sólo depende del transporte de la fase líquida, es decir, de la fracción másica líquida local y de la densidad de área de superficie líquida; segundo que este método no requiere de la existencia de núcleo intacto de líquido; tercero, el chorro se considera como una única fase de flujo turbulento, donde la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación, k y ϵ , no se distinguen de entre los componentes fluido líquido y fluido gaseoso y por ello el modelado de la turbulencia juega un importantísimo papel en este método. Además se asume que las escalas grandes tales como la longitud líquida o la penetración y el ángulo del chorro son independientes de la viscosidad y de la tensión superficial del líquido, mientras que las escalas más pequeñas como los tamaños de gota así como el número de gotas, dependen de las propiedades físicas, incluyendo la viscosidad líquida y la tensión superficial. Es entonces, cuando se supone que el chorro ha superado la zona cercana al orificio, cuando se realiza un switch o cambio de la aproximación Euleriana a la aproximación Lagrangiana, obteniendo así las ventajas de la metodología tradicional del rastreo (tracking) de gotas

Lagrangiano. Sin embargo, puede resolverse todo el desarrollo del chorro de manera Euleriana si así se deseara. En este trabajo, así ha sido, dejando el desarrollo del switch al marco Lagrangiano para futuros trabajos.

En esta parte del trabajo, mediante el método ELSA adoptado, el chorro se considera como una única fase efectiva constituida por la mezcla aire-combustible, como ya se ha comentado anteriormente. El método se emplea para simulaciones de chorros turbulentos con un alto número de Reynolds y un alto número de Weber, como es el caso de los chorros diesel. Como se comentó brevemente en la introducción, en este método las características de atomización del líquido se basan en el transporte del combustible líquido dentro del dominio computacional monitorizando las ya comentadas fracción másica líquida y la densidad de área de superficie líquida inicializadas ambas a salida de la tobera o en la entrada (inflow boundary) y entonces, ambos parámetros son transportados por el dominio computacional.

El modelo implementado en el código de trabajo es el denominado Σ - Y , propuesto originalmente por Vallet. Las ecuaciones de este modelo se encuentran en el trabajo final de tesis de Trask [17], en el que se exponen todas las hipótesis realizadas y la aproximación para casos con compresibilidad considerada y los diferentes cierres de las ecuaciones de transporte, así como el cierre en concreto del flujo de difusión turbulenta del que ya se comentó anteriormente en el que se consideran dos leyes diferentes de difusividad, la clásica ley de Fick y el modelo propuesto por Demoulin.

Las ecuaciones se determinan mediante la descomposición clásica de Reynolds. La ecuación de transporte para la fracción másica de líquido se obtiene haciendo la media másica de la ecuación de transporte de las especies y toma la forma,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{Y}'}{\partial x_i}$$

De manera similar, si se asumen que los efectos viscosos sólo contribuyen a las escalas pequeñas de movimientos del flujo, la ecuación del momento es,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{u}_j'}{\partial x_i}$$

Para obtener el cierre del flujo de difusión turbulento en la ecuación de transporte en ambas ecuaciones se necesitan modelos.

La densidad de cada fase se determina asumiendo que el gas se comporta de manera ideal y que el líquido mantiene una compresibilidad lineal y que ambas fases están sometidas a la misma presión.

Para cerrar el sistema de ecuaciones, es necesario definir una temperatura. Cuando estamos en el caso de bajos números de Mach, se puede suponer que el flujo es isoterma; si no, es necesario resolver una ecuación de entalpía para la mezcla, [17].

Por otra parte, la ecuación de transporte para la Σ , teniendo en cuenta los términos que recogen los efectos de convección, difusión y encogimiento superficial y coalescencia toma la forma [13],

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_j \bar{\Sigma}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{\Sigma} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{\tau_{prod}} \bar{\Sigma} - \frac{1}{\tau_{destr}} \bar{\Sigma}^2$$

Donde τ_{prod} es una escala de tiempo en la que se representa la producción de superficie debida a la turbulencia y τ_{destr} es la escala de velocidad en la que se refleja la tasa de destrucción de superficie debido a la colisión y a la coalescencia.

Como el objeto de este trabajo no es el desarrollo del modelo, sino más bien su aplicación y validación, únicamente se muestran las ecuaciones de transporte de la fracción másica de líquido y de la densidad de área de superficie líquida, pudiendo encontrarse los cierres de las ecuaciones en [17].

El código solver utilizado en el que se ha implementado este modelo, toma el nombre coSigma y así nos referiremos en las sucesivas partes de este estudio ELSA para explicar cada uno de los casos estudiados.

1.4.2.1 Caso de partida

El caso de partida en este caso fue un caso basado en un solver del software OpenFOAM denominado reactingFoam que se intentó ajustar al código coSigma de partida. Las condiciones de estudio se tomaron de los casos de referencia finales de la parte RANS de este trabajo, puesto que el objetivo de esta parte es el ajuste y validación de coSigma para chorros diesel. El caso de partida, por tanto, fue un caso en el que se inyectaba combustible tri-decano a través de un inyector 112 μm de diámetro, datos tomados de la base de datos de CMT. El estudio es lo que se denomina inerte, o sea, no reactivo, siendo el gas presente en la cámara únicamente nitrógeno y además es no evaporativo. El tiempo de inyección serán 3 ms, para permitir el completo desarrollo del chorro. A partir de estos datos de partida, se fueron realizando modificaciones en las mallas y sub-modelos para así llegar a la configuración final más adecuada, entendiendo por adecuada la configuración que más se acercaba a los resultados obtenidos con el software utilizado en la parte RANS así como a los datos experimentales de los que se disponía.

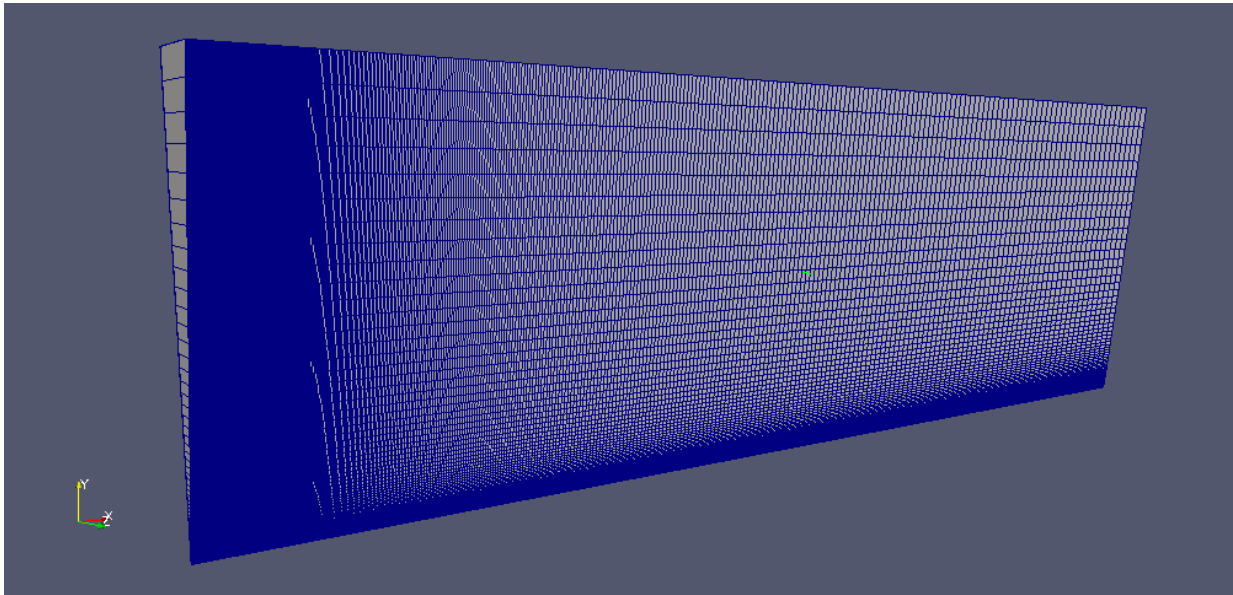
Por otra parte, a partir de la tasa de inyección experimental, se calculó inicialmente una velocidad media que se impuso como constante en toda la entrada a la cámara. Posteriormente se calcula el perfil real de velocidades a la entrada del inyector y así se introducirá el combustible de la misma manera que en los experimentos obteniendo mejores resultados.

1.4.2.2 Mallas

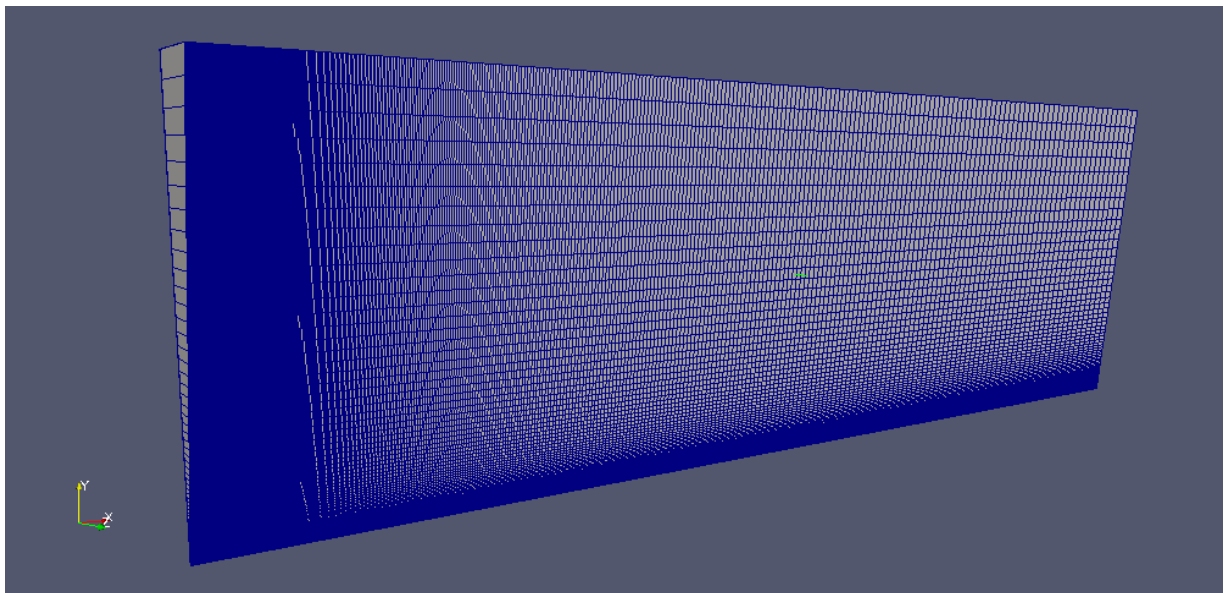
Las mallas utilizadas para este estudio, fueron dos mallas 2D axisimétricas. En la parte de la malla donde se localiza el orificio de salida de la tobera, el tamaño de celda es una décima parte del diámetro o del radio de la tobera teniendo 10 o 20 celdas diametrales respectivamente según el caso, para obtener resultados fiables y lo suficientemente precisos. Mantendremos el tamaño de la última celda y en función de este criterio se calculó el tamaño del resto de celdas.

El tamaño de la malla se mantendrá en todos casos, teniendo ésta 80 mm en su longitud axial y 25 mm en dirección radial, variando únicamente el tamaño de celda en dirección axial y/o radial para realizar un estudio de dependencia de malla sobre todo en las celdas que competen a la región del inyector.

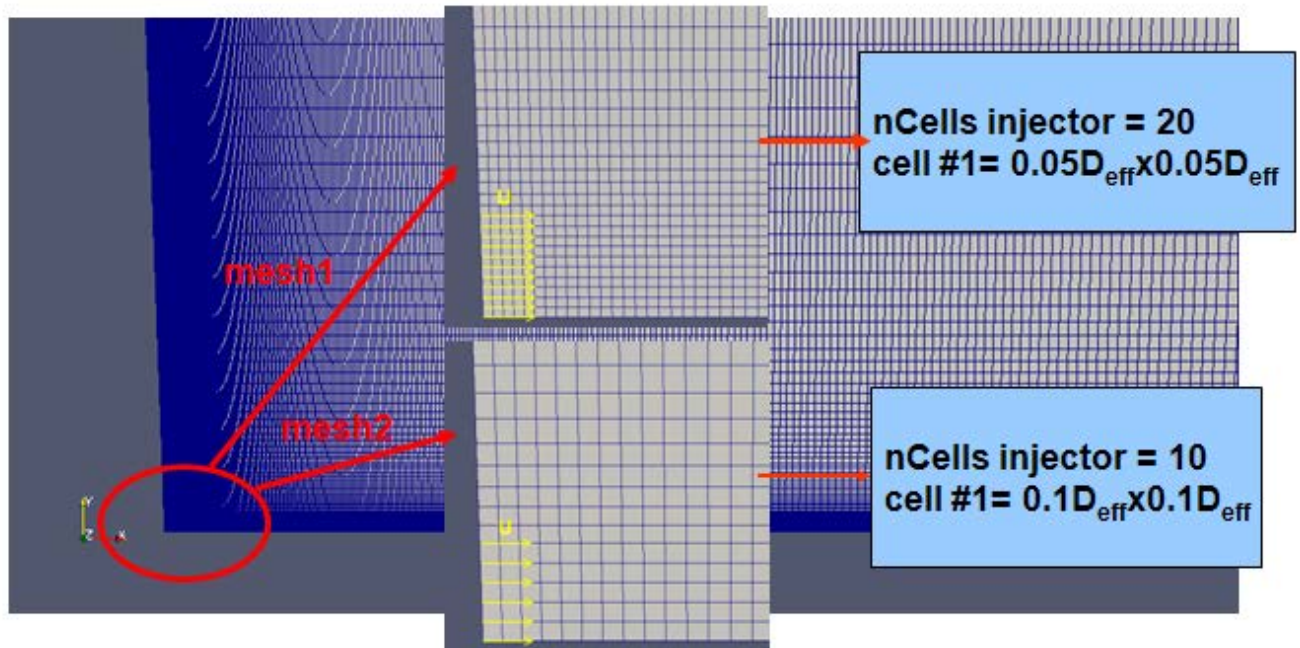
La primera de las dos mallas, con 500 celdas en dirección axial y 95 celdas en dirección radial posee 10 celdas en el orificio del inyector, se muestra en la siguiente figura,



La segunda malla, con 435 celdas en dirección axial y 90 en dirección radial, consta de 10 celdas diametrales en la entrada de combustible a la cámara de combustión y tiene el siguiente aspecto,



Como apenas se aprecia diferencia a la escala a la que se muestran las dos mallas, en la siguiente se muestra una imagen con el detalle de la salida de la tobera de ambas mallas,

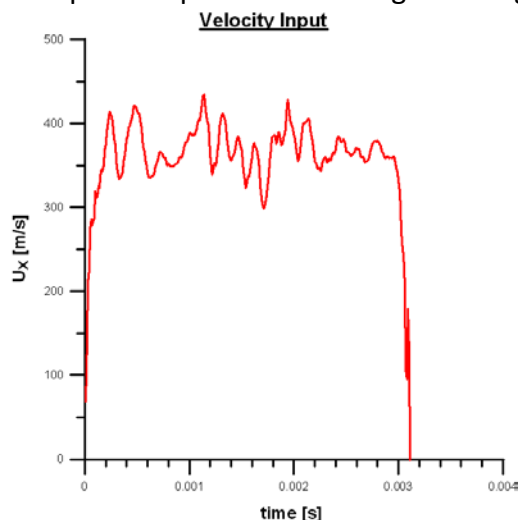


Entiéndase por mesh1 la primera malla con 20 celdas en el inyector y mesh2 la segunda con 10 celdas y por cell #1 la primera celda de la malla en dirección radial con su tamaño expresado en función del diámetro efectivo de la tobera, es decir, del diámetro real aplicando el coeficiente pertinente. En las ampliaciones de cada una de las mallas, se ha representado con las flechas amarillas las celdas que corresponden al inyector con una velocidad de entrada U .

1.4.2.3 Modelado del chorro. Condiciones de contorno.

En esta parte, hablaremos de la configuración de las condiciones de contorno que se utilizó en los casos principales de estudio.

La velocidad a la entrada se consideró primeramente constante con un valor tomado de la base de datos experimental de CMT, siendo este valor de 373.51 m/s. Posteriormente y como ya se ha comentado con anterioridad, se introdujo un perfil de velocidad variable obtenido a partir de la tasa de inyección experimental que se representa en la siguiente figura:



En todos los casos, la velocidad radial se consideró constante.

En cuanto a las entalpías iniciales, se calcularon a partir de las entalpías de formación del nitrógeno gas y del combustible líquido y de las temperaturas iniciales de ambas fases, todo ello conocido y por tanto, configurables como datos de entrada, así como las diferentes densidades (en los que no se tuvieron en cuenta los efectos de compresibilidad) y presión de la cámara de combustión.

1.4.2.4 Modelos de difusión

El código ofrece dos posibilidades de modelos de difusión de las que ya se habló con anterioridad: ley de Fick o modelo de Demoulin, [18].

La capacidad del modelo Σ -Y para predecir la estructura de la película de líquido de manera efectiva, está dominada por el cierre del flujo de difusión en la ecuación de transporte de la fracción másica de líquido, \tilde{Y} . [14] Si se supone que la difusión está gobernada por la difusión turbulenta de las fluctuaciones másicas, entonces el coeficiente de difusión viene proporcionado por la ley de Fick, donde dicho coeficiente es de la forma,

$$D_{coeff}]_{Fick'sLaw} = \frac{\mu_t}{Sc}$$

Siendo μ_t la viscosidad turbulenta y Sc el número de Schmidt.

Si, además de esta suposición, se persigue una mejora de resultados en los que a crecimiento de inestabilidades debidas a un gran gradiente de densidades se refiere, Demoulin [18] propuso un modelo en el que el coeficiente de difusión es diferente al de la ley de Fick y que se corresponde con la siguiente expresión,

$$D_{coeff}]_{DemoulinModel} = \bar{\rho} \left[\frac{\nu_t}{Pt} + C_p \frac{k^2}{\varepsilon} \bar{\rho} \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right) \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}) \right]$$

Donde ν_t es la viscosidad cinemática turbulenta, Pt se corresponde con el número de Schmidt nuevamente aunque tenga diferente nomenclatura, k y ε son la energía cinética turbulenta y tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, respectivamente; las ρ son las densidades media (con la barra típica encima), del gas (con el subíndice g) y del líquido (con el subíndice l) y por último \tilde{Y} la fracción másica de líquido mediada (media de Favre).

En nuestros casos, estudiamos a ley de Fick versus el modelo de difusión de Demoulin con un Schmidt fijo y dos casos con el modelo de Demoulin con dos número de Schmidt, como veremos más adelante en la sección final de resultados y conclusiones de los casos más importantes.

1.4.2.5 Modelado de la turbulencia

En esta parte de modelado, aunque también se simulan casos con el modelo k- ε estándar, centraremos el estudio en el modelo estándar k- ε con la modificación incluida en el código referente a la presencia de la relación y efecto de la presión y los gradientes de densidad, los efectos de los ratios de densidad entre dos fluidos cuando son del orden de 10^3 , [18], [19]. Variaremos los coeficientes del código del mismo modo que se llevó a cabo en la parte RANS para comprobar el efecto. En la siguiente tabla se recogen los diferentes casos estudiados,

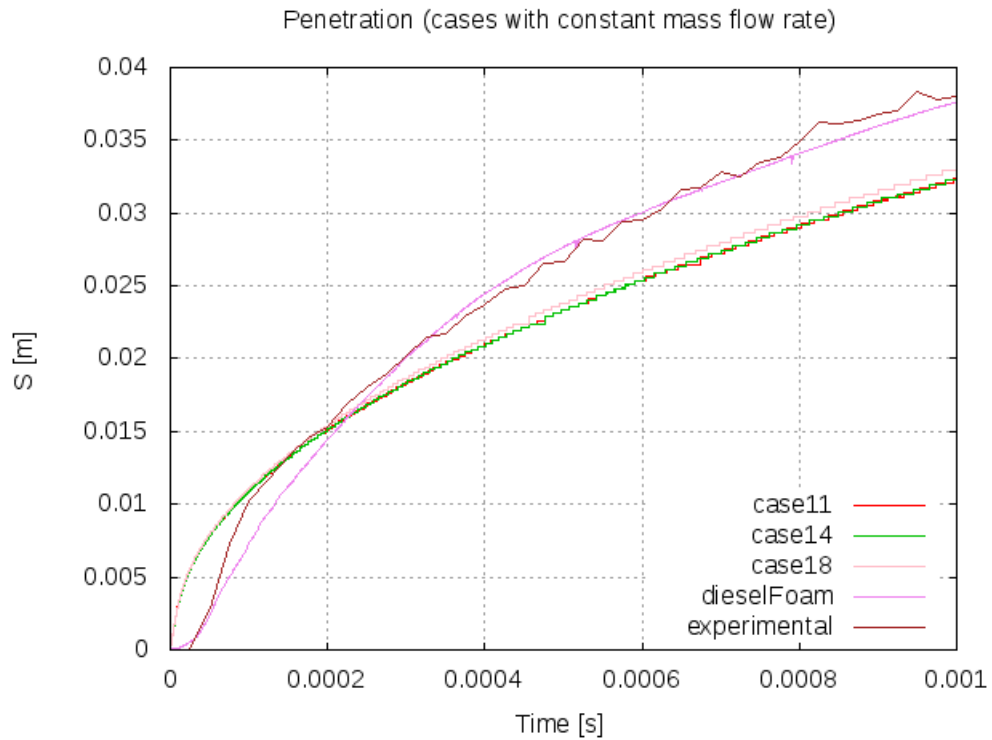
	C1	C2	C3	Cmu
KE	1.44	1.93	-0.33	0.09
highDensityRatio KEpsilon	1.44	1.93	-0.33	0.09
highDensityRatio KEpsilon (1)	1.52	1.93	-0.33	0.09
highDensityRatio KEpsilon (2)	1.60	1.93	-0.33	0.09

1.4.2.6 Resultados

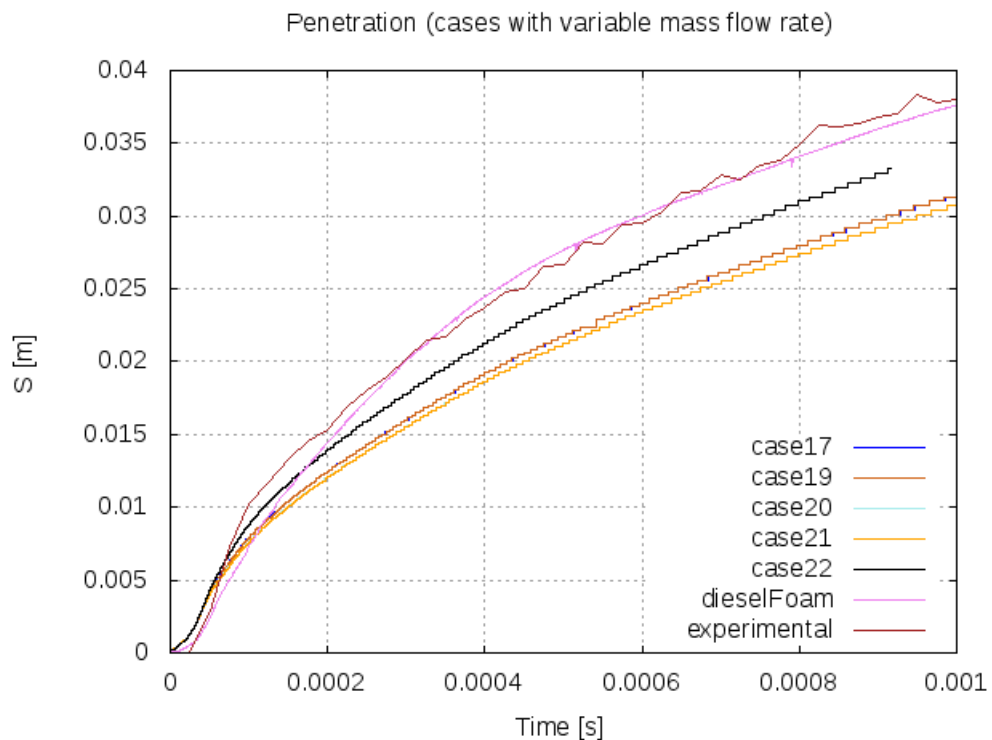
En este penúltimo apartado, se recogen las gráficas más relevantes de todos los casos estudiados. En la siguiente tabla se recogen los considerados más importantes cada uno con sus condiciones y modelos y posteriormente se presentan las figuras donde se comparan diversos casos con, además, el caso RANS de referencia y los datos experimentales,

Caso	Malla	Velocidad a la entrada	Modelo de difusión	Modelo de turbulencia
11	2D/2	Constante	Fick's Law	KE
12	2D/1	Constante	Fick's Law	KE
13	2D/1	Constante	Demoulin	KE
14	2D/1	Constante	Demoulin	kEpsilon
17	2D/1	Variable	Fick's Law	kEpsilon
18	2D/1	Constante	Fick's Law	highDensityRatioKE psilon
19	2D/1	Variable	Fick's Law	highDensityRatioKE psilon
20	2D/1	Variable	Demoulin	KE
21	2D/1	Variable	Demoulin	highDensityRatioKE psilon
22	2D/1	Variable	Fick's Law	highDensityRatioKE psilon, C1=1.52
23	2D/1	Variable	Fick's Law	highDensityRatioKE psilon, C1=1.60

Primeramente, representamos la penetración de los casos con tasa de inyección constante, que es lo mismo que decir que la velocidad a la entrada se mantiene constante durante todo el tiempo de inyección.

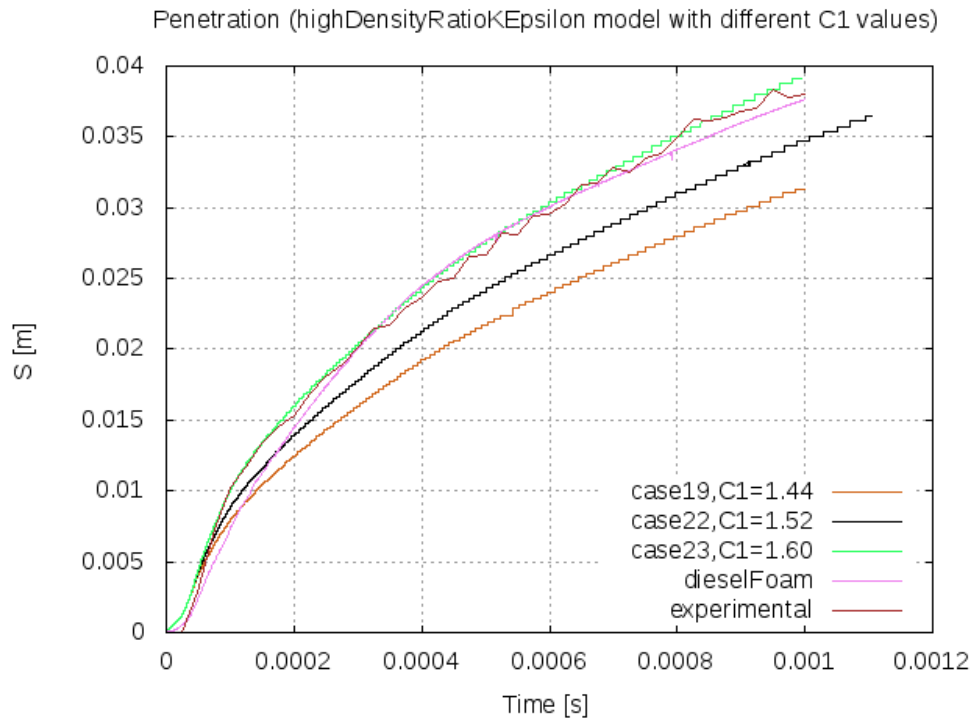


A continuación se comparan los resultados de penetración de los casos con tasa de inyección variable o real,



En estas dos gráficas anteriores, se observa que la penetración del líquido está subestimada, que puede interpretarse como que el chorro penetra más lentamente, frenado.

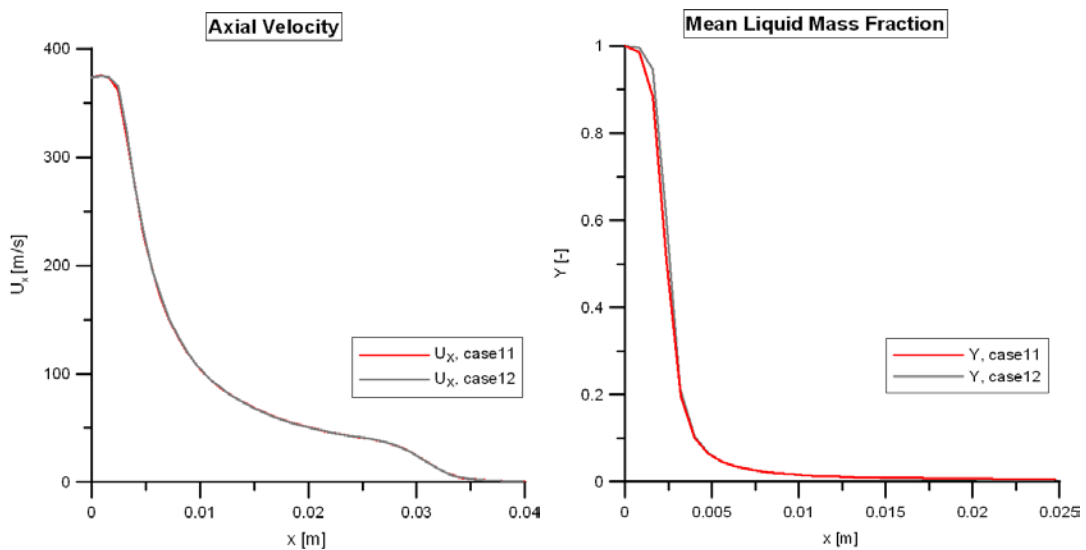
Finalmente, se muestran los resultados de penetración de los casos con el modelo de turbulencia de alto ratio de densidades con diferentes coeficientes en el modelo (que tienen además tasa de inyección variable)



En esta última figura, se observa la buena precisión de los resultados del caso 23, caso en el que el modelo de turbulencia es de alto ratio de densidades con un coeficiente C1 con el valor 1.60.

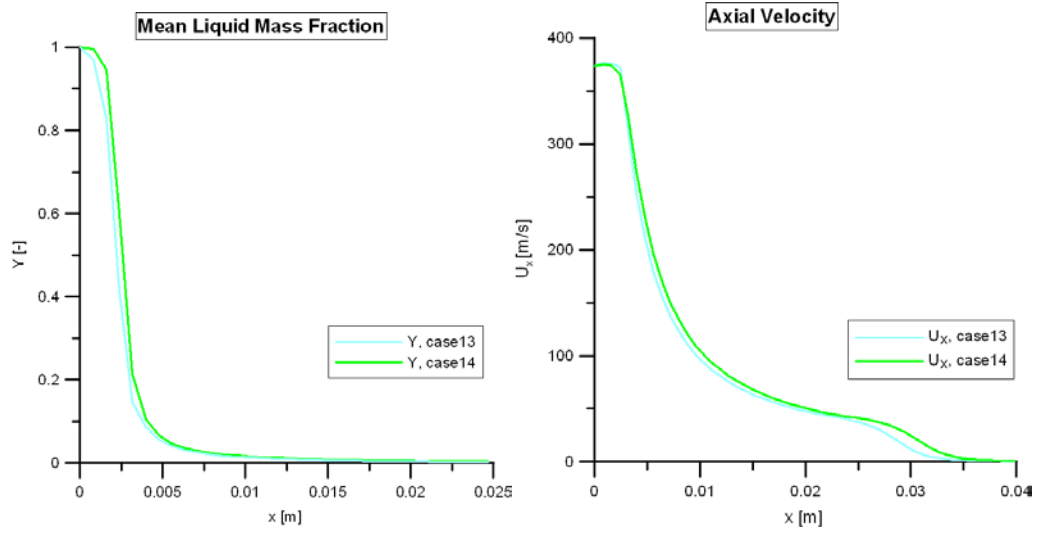
Para terminar se presentan las gráficas de comparación de velocidades axiales y la fracción másica media de líquido de los casos más interesantes a comparar.

1- Dependencia de malla,



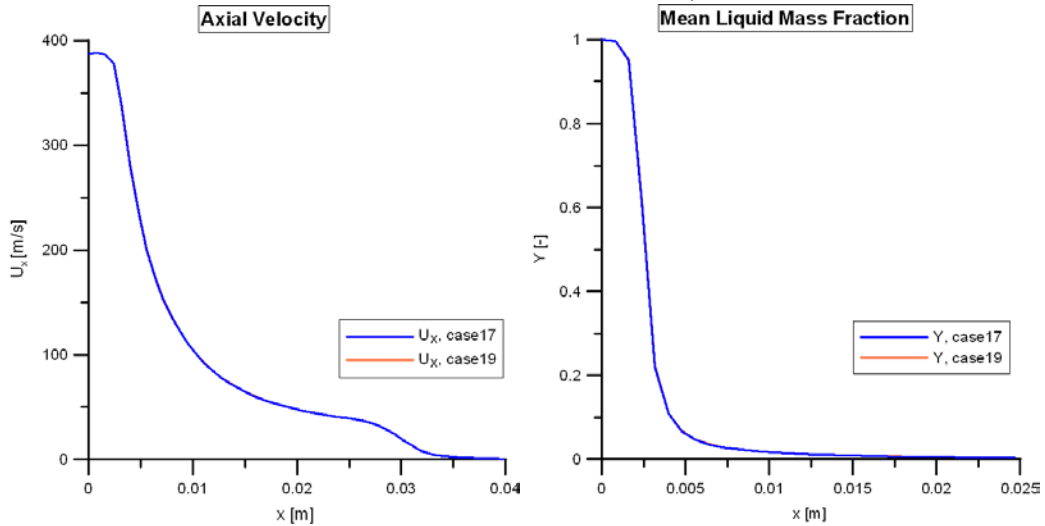
[**case11**: Mesh #1; **case12**: Mesh #2]

2- Efecto del número de Schmidt con el modelo de difusión de Demoulin,



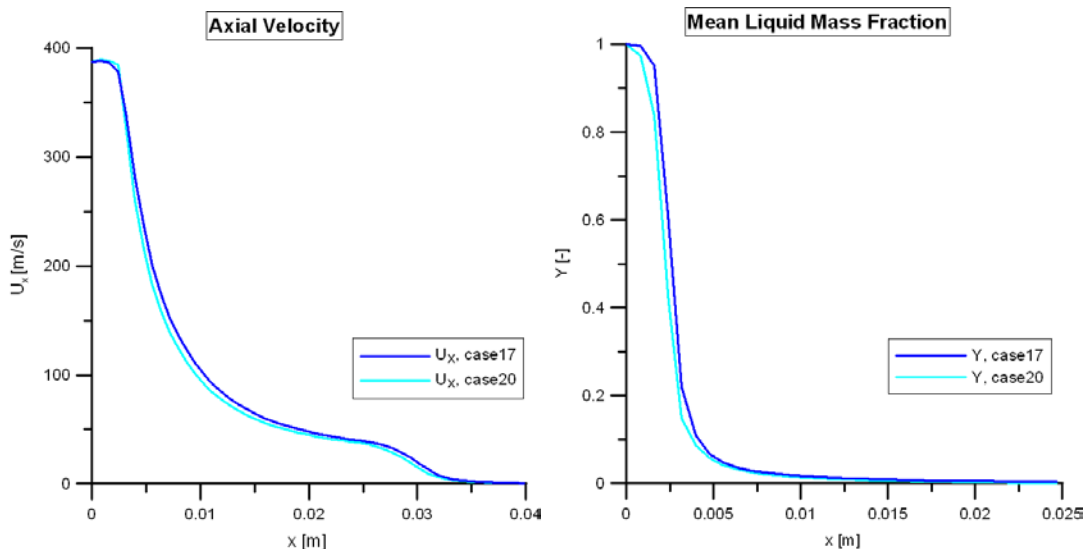
[**case13**: Pt=0.5; **case14**: Pt=0.9]

3- Modelo de turbulencia con velocidad de entrada variable,



[**case17**: kE; **case19**: highDensityRatioKE]

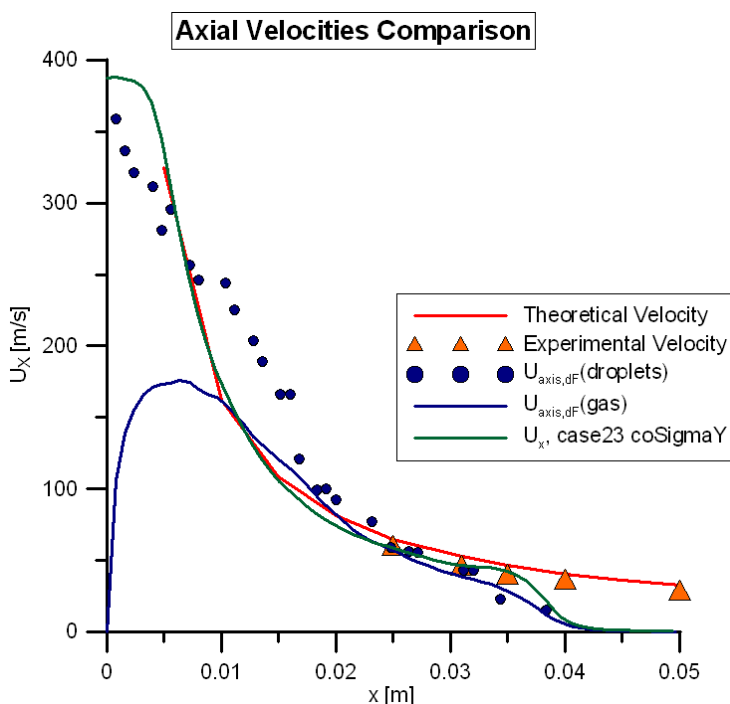
4- Modelo de difusión con velocidad variable



[**case17**: Fick's Law1; **case20**: Demoulin model]

1.5 Conclusiones finales

En este último apartado, en primer lugar, se comparan los resultados del código dieselFoam de la parte RANS del estudio con el código ELSA y los datos experimentales. En el apartado de resultados de la parte ELSA, en las gráficas de penetración del chorro, ya se comparan ambos códigos, apreciándose en los casos finales gran precisión en los resultados. Pero, aparte de la penetración, se realizó una comparación del caso 23 más relevante del estudio ELSA, (cuya configuración se resume al lado de la gráfica que se muestra a continuación) con el código RANS y los resultados experimentales de la base de datos CMT de velocidades axiales obteniéndose la siguiente figura



caso23:

- Malla número 1
- Velocidad de entrada variable
- Modelo de difusión: ley de Fick
- Modelo de turbulencia k- ϵ alto ratio de densidades con $C1=1.60$

En la que se aprecia que la velocidad axial del caso 23 se aproxima enormemente al modelo teórico (línea roja) y a la velocidad experimental en la zona más avanzada del chorro (triángulos naranjas), pudiendo concluirse una mayor y, me aventuro a decir, excelente precisión de este código ELSA frente al RANS.

Como broche personal, diré que se ha mostrado en este estudio que el modelo Σ -Y de atomización primaria proporciona resultados prometedores para la predicción de la atomización del chorro en condiciones de los motores diesel actuales.

Así, los resultados preliminares aquí recogidos deberían servir como motivación para los investigadores de chorros mediante modelado CFD como reto para seguir perfeccionando los métodos de estudio de la atomización primaria, algo impensable no hace tantos años. Dicho esto, damos por terminado este estudio, dejando un magnífico trampolín para continuar en el desarrollo y mejor ajuste si cabe del modelo de atomización primaria Euleriano-Lagrangiano en el código abierto OpenFOAM, comprobando una vez más su gran potencial para resolver chorros diesel.

2. Bibliografía

- [1] OpenFOAM[®] - The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) ToolBox, <http://www.openfoam.com/>
- [2] Gimeno, J., "Desarrollo y Aplicación de la Medida del Flujo de Cantidad de Movimiento de un Chorro Diesel", tesis doctoral UPV, 2008.
- [3] Tanner, F.X., "Liquid Jet Atomization and Droplet Breakup Modeling of Non-Evaporating Diesel Fuel Sprays", SAE 1997 Transactions: Journal of Engines, Vol. 106, Sec. 3, pp. 127-140, 1998.
- [4] O'Rourke, P.J., Amsden, A.A., "The TAB Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup", SAE Paper 872089, 1987.
- [5] Beale, J., Reitz, R.D., "Modeling Spray Atomization with the Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor Hybrid Model", Atomization and Sprays, Vol. 9, pp. 623-650, 1999.
- [6] Reitz, R.D, Diwakar, R., "Structure of High Pressure Fuel Sprays", SAE Paper 870598, 1987.
- [7] O'Rourke, P.J., Bracco, F.V., "Modeling of Drop Interactions in Thick Sprays and a Comparison with Experiment", Proc. Stratified Charge Automotive Engg. Conference, I.Mech.E., pp. 101-116 1980.
- [8] Jones, W. P., and Launder, B.E., "The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence", International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 15, 1972, pp. 301-314, 1972.
- [9] Yakhot, V., Orszag, S.A., Thangam, S., Gatski, T.B., Speziale, C.G., "Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique", Physics of Fluids A, Vol. 4, No. 7, pp. 1510-1520, 1992.
- [10] Launder, B. E., and Sharma, B. I., "Application of the Energy Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow Near a Spinning Disc", Letters in Heat and Mass Transfer, vol. 1, no. 2, pp. 131-138, 1974.
- [11] Shih, T.H., "An Improved k-epsilon Model for Near-Wall Turbulence and Comparison with Direct Numerical Simulation", NASA-TM-103221, 1990.
- [12] Payri, R., Tormos, B., Salvador, F.J., Araneo, L., "Spray Droplet Velocity Characterization for Convergent Nozzles with three Different Diameters", Fuel 87 (2008) 3176-3182.
- [13] Vallet, A., Burluka, A.A., Borghi, R., "Development of a Eulerian Model for the 'Atomization' of a Liquid Jet", Atomization and Sprays, Vol. 11, pp 619-642, 2001.
- [14] Blokeel, G., Barbeau, B., Borghi, R. "A 3D Eulerian Model to Improve the Primary Breakup of Atomizing Jet", SAE Technical Paper 2003-01-0005, 2003.
- [15] Blokeel, G., Silvani, X., Demoulin, F.X., Borghi, R., "An Eulerian Model to Improve the Primary Breakup of Atomizing Jet", ILASS-Europe 2002, Sept. 9-11, 2002, Zaragoza.
- [16] Lebas, R., Menard, T., Beau, P.A., Berlemont, A., Demoulin F.X., "Numerical Simulation of Primary Breakup and Atomization: DNS and modeling study", International Journal of Multiphase Flow", 35, pp 247-260, 2009.
- [17] Trask, N, "Implementation of an Eulerian Atomization Model to Characterize Primary Spray Formation", MSc Thesis in Mechanical Engineering, University of Massachusetts, 2010.
- [18] Demoulin, F., Beau, P., Blokeel, G., Mura, A., Borghi, R., "A New Model for Turbulent Flows with Large Density Fluctuations: Application to Liquid Atomization", Atomization and Sprays, Vol. 17, pp. 315-345, 2007.
- [19] Chassaing, P., Antonia R.A., Anselmet, F., Joly, L., Sarkar, S., "Variable Density Fluid Turbulence", Kluwer Academic Publishers, 2002.

3. Anexo

Publicaciones / Congresos

R. Novella, A. García, J.M. Pastor, P. González , “Evaluation of Integrating Detailed Chemical Kinetics into CFD for Diesel Spray Ignition and Combustion Analysis”. Mathematical Models of Addictive Behaviour, Medicine & Engineering, Valencia, September 8th-10th, 2010