



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIERÍA
INDUSTRIAL VALENCIA

TRABAJO FIN DE MASTER EN INGENIERÍA INDUSTRIAL

ANÁLISIS DE LA EVOLUCIÓN DE CHORROS DE COMBUSTIBLES RENOVABLES EN MOTORES DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN MEDIANTE LA APLICACIÓN DEL MODELADO CFD

AUTOR: ANDRÉS RECUBENIS SANCHIS

TUTOR: JOSÉ MARÍA GARCÍA OLIVER

Curso Académico: 2020-21

Mil gracias a Daiana y a José María por estar aquí cerquita para echar un cable en todo momento a pesar de la distancia.

Gracias a mi familia.

Sin duda este trabajo va dedicado a mis amigos que tienen las mismas o más ganas que yo de que acabe.

Contenido

DOCUMENTO I. MEMORIA

DOCUMENTO I. MEMORIA.....	I
Índice de Tablas.....	III
Índice de Figuras	IV
1. Introducción	1
1.1 Contexto	1
1.2 Acerca de los OME _n	1
1.3 Objetivo del trabajo	2
1.4 Estructura del trabajo.....	3
2. Conceptos previos sobre la combustión en motores de encendido por compresión ..	4
2.1 Atomización.....	4
2.2 Evaporación.....	6
2.3 Retraso al autoencendido	8
2.4 Combustión premezclada.....	10
2.5 Combustión por difusión.....	10
2.6 Formación de hollín.....	11
3. Conceptos previos al modelado de la combustión	13
3.1 Introducción	13
3.2 Modelado del spray.....	13
3.3 Modelado de la combustión	15
4. Metodología para el modelado.....	19
4.1 Propiedades generales de los oximetiléteres	19
Vaporización.....	19
Estequiometría.....	20
Densidad	20
Número de cetano	20
Viscosidad	21
4.2 Propiedades termodinámicas de los OMEx	21
4.3 Lanzamiento de casos en Converge	23
4.4 Postprocesado en Matlab	24
5. Presentación y análisis de resultados	27
5.1 Introducción a los casos	27

5.2	Casos inertes	29
5.2.1	Penetración del spray y longitud líquida.....	29
5.3	Casos reactivos.....	32
5.3.1	Penetración de la punta del spray y longitud líquida.....	32
5.3.2	Retraso del encendido y distancia de despegue	36
5.3.3	Mapas de temperatura	40
5.3.4	Distribución de especies químicas relevantes.....	45
6.	Conclusiones.....	48
7.	BIBLIOGRAFÍA.....	50
	DOCUMENTO II. PRESUPUESTO	1
1.	Precios unitarios.....	1
2.	Costes de las fases del proyecto	2
3.	Resumen.....	4

Índice de Tablas

Tabla 1. Propiedades termodinámicas del OME3, OME4 y C12	19
Tabla 2 Fuentes de datos experimentales empleadas en la obra de Kulkarni para ajustar el modelo molecular de los OME _n ,.....	22
Tabla 3. Propiedades críticas de los OME _n estimadas en (Aditya Kulkarni, 2020)	23
Tabla 4. Casos de estudio simulados en el presente trabajo, presión de inyección y densidad del aire se mantienen estables para todos los casos	27
Tabla 5. Condiciones base para el Spray A en condiciones reactivas propuestas por la ECN	28

Índice de Figuras

Figura 1. Esquema de la atomización del chorro de combustible (Jääskeläinen, Diesel Spray Formation and Mixing, 2021).....	5
Figura 2. Modos de atomización secundaria (P. Boggavarapu, 2013).....	6
Figura 3. Variación de masa, diámetro, temperatura, tasa de evaporación, tasa de transferencia de calor del aire y tasa de transferencia de calor al líquido como función del tiempo durante el proceso de evaporación de una gota Diesel en condiciones de motor (Heywood, 1988).....	7
Figura 4. (a) Retraso del encendido función de la inversa de la temperatura y presión del aire. (b) Retraso del encendido \times presión ² medido en un reactor de flujo constante. (Heywood, 1988).....	9
Figura 5. Estructura de la llama Diesel propuesta por Dec. (Dec, 1997).....	11
Figura 6. Penetración del spray (curva creciente) y longitud líquida (valor estable) OME3, OME4, OME inerte a 900K.....	29
Figura 7. Penetración del spray y longitud líquida OME inerte a 800K y 900K.....	30
Figura 8. Penetración del spray y longitud líquida para OME 800K de modelo y experimental.....	33
Figura 9. Penetración del spray y longitud líquida OME a 900K reactivo simulado y experimental.....	34
Figura 10. Penetración del spray y longitud líquida OME a 900K 21% oxígeno simulado y experimental.....	35
Figura 11. Penetración del spray y longitud líquida OME a 1000K reactivo simulado y experimental.....	36
Figura 12. Retraso del encendido para los casos de OME simulados, experimentales y para el dodecano simulado y experimental.....	38
Figura 13. Temperatura máxima en la cámara para las series simuladas de OME a distintas temperaturas ambiente y la serie de dodecano.....	39
Figura 14. Distancia de despegue para los casos de OME simulados, experimentales y para el dodecano.....	40
Figura 15. Campo de temperaturas para OME 900K a 0.7ms, 1.4ms y 4.5ms.....	41
Figura 16. Campo de temperaturas dodecano 0.39ms, 1.4ms y 4.5ms.....	42
Figura 17. Campo de temperaturas para OME a 800K a 1ms, 1.4ms y 4.5ms.....	43
Figura 18. Campo de temperaturas para OME a 1000K en los instantes 0.37ms, 1.4ms y 3.2ms.....	44
Figura 20. Campo de temperaturas para OME 900K con 21% de oxígeno en el instante 0.44ms, 1.4ms, 3.41ms.....	45
Figura 21. Distribución de la fracción molar de formaldehído en OME 800K a 4.5ms.....	46
Figura 22. Distribución de la fracción molar de formaldehído en OME 900K a 4.5ms.....	46
Figura 23. Distribución de la fracción molar de C ₂ H ₂ en OME 900K a 4.5ms.....	47
Figura 24. Distribución de la fracción molar de C ₂ H ₂ en dodecano a 4.5ms.....	47

1. Introducción

1.1 Contexto

Los productos petrolíferos representan la principal fuente de energía final consumida en el mundo. En el 2018, por ejemplo, sumaron un 40.8% del consumo total, seguida por la electricidad con un 19.3% (International Energy Agency, 2020). De los productos petrolíferos finales consumidos, más del 60% fueron destinados al transporte por carretera, marítimo y aéreo en 2018. Por otra parte, la UE tiene como objetivo clave para 2030 reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en un 40% con respecto a 1990 para así satisfacer los compromisos del Acuerdo de París (Europea, 2020).

Teniendo en cuenta la alta contribución del transporte a la emisión de CO₂, la electrificación del sector parece una solución, y es que la electricidad es la forma más eficiente y barata de mover un vehículo. Sin embargo, hoy en día, sólo el transporte ferroviario podría ser totalmente electrificado, que en países como Alemania tan sólo representaba el 2.3% del transporte en el año 2012 (ICCT, 2012).

Aunque las ventas de coches eléctricos estén en aumento todavía son una pequeña parte del total (International Energy Agency, 2021), por lo que el parque móvil seguirá dominado por los vehículos de combustión durante los próximos años. En cuanto a los vehículos de transporte por carretera eléctricos, los que están disponibles en el mercado ofrecen autonomías en torno a 300km (Volvo Trucks, 2021), muy alejadas de las que ofrecen las versiones con motor de combustión, que, además, en la Unión Europea tienen una vida media que supera la década (European Automobile Manufacturers Association, 2021).

1.2 Acerca de los OME_n

En este contexto parece razonable el uso de combustibles renovables que ayuden a reducir las emisiones de sustancias nocivas. Algunas opciones como los alcoholes y los biocombustibles ya han sido estudiadas y ya se dispone de soluciones comerciales.

Por otro lado, los laboratorios de investigación se están centrando en el uso de combustibles sintéticos con una variedad de propiedades físicas y químicas. Entre ellos destacan los combustibles oxigenados por su posibilidad de suprimir los enlaces C-C, y, por tanto, los precursores de hollín con la consecuencia de reducir las emisiones nocivas de los motores de encendido por compresión.

En particular destacan los polioximetilen-dimetil éteres, OME_n en adelante. Estos oligómeros de estructura general H₃C-O-(CH₂O)_n-CH₃ han recibido mucha atención en los

últimos años por sus importantes aplicaciones como combustibles renovables absorbedores de dióxido de carbono. Las mezclas de OME_n con diferentes longitudes de cadena se pueden utilizar como remplazo al Diesel fósil y además presentan una gran ventaja frente a estos que es la reducción de emisiones de hollín y NO_x

Si bien la cantidad de publicaciones relacionadas con los OME_n , ha crecido en los últimos años, en cuanto a las vías de producción, viabilidad económica, emisiones en montaje experimental... es todavía necesario el desarrollo de una modelización adecuada de su comportamiento bajo condiciones reales de motor de encendido por compresión.

1.3 Objetivo del trabajo

En línea con el apartado anterior, este trabajo se centra en la aplicación del modelado mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) de la inyección de un chorro de OME_n en un cilindro bajo condiciones típicas de operación de los motores de encendido por compresión. El objetivo será cuantificar parámetros de interés para el diseño de cámaras de combustión como son el retraso del encendido, el despegue de la llama y la longitud líquida, que serán definidos más adelante.

Para conseguir estos resultados se ha empleado Converge (CONVERGE CFD Software, 2021) que es un programa de simulaciones de CFD orientado a la combustión. Las simulaciones han sido ejecutadas conjuntamente en el clúster RIGEL de uso para la comunidad de la UPV y el clúster propio del CMT. Los resultados de las simulaciones se han post procesado mediante códigos propios del CMT escritos en Matlab. Mediante el post procesado se obtiene el valor numérico de los parámetros anteriormente mencionados.

De toda la casuística posible, las simulaciones objeto de estudio son aquellas con combustible nombrado en adelante como OME_x , que es una mezcla propia de mono-componentes con $x=3$ y 4 . En los casos estudiados en este trabajo, que se detallan más adelante, se variará la temperatura de la cámara y el contenido de oxígeno.

Estos casos simulados se corresponden con casos experimentales realizados anteriormente en el CMT por lo que se comprobará la adaptabilidad de la simulación a los casos experimentales. A efectos comparativos también se utilizará un caso de dodecano simulado previamente en el CMT bajo la misma metodología. El dodecano es un combustible tipo Diesel que sirve de referencia en el campo de la investigación.

Aunque no forme parte del objetivo principal de este trabajo, también se analizará brevemente cómo la simulación predice la formación de acetileno, un precursor del hollín

Además de cuantificar los parámetros de interés de la combustión del OME_x , el otro gran objetivo de este trabajo es presentar con éxito el Trabajo de Fin de Máster, condición sine qua non para obtener el título de Máster Universitario en Ingeniería Industrial.

1.4 Estructura del trabajo

Este Trabajo de Fin de Máster, está formado por dos documentos, la Memoria y el Presupuesto. La memoria es el presente documento y contiene el análisis de los resultados además del conocimiento asociado para poder contextualizarlos. Sus capítulos son:

- 2º. Conceptos previos sobre la combustión en motores de encendido por compresión. En el que se explica la evolución de un spray genérico inyectado en un motor de encendido por compresión. Su objetivo es introducir conceptualmente los fenómenos que tienen lugar en la cámara de combustión.
- 3º. Conceptos previos al modelado de la combustión. Tras explicar los procesos que experimenta el chorro líquido tras ser inyectado, aquí se sigue con los modelos físico y químico empleados en este trabajo para modelar tales transformaciones.
- 4º. Metodología para el modelado. Se muestra el orden seguido para la obtención de los resultados presentados en este trabajo. Comenzando por la búsqueda de las propiedades necesarias de los OME_n hasta la obtención de los resultados gráficos, repasando las principales herramientas informáticas de trabajo: Converse y Matlab.
- 5º. Presentación y análisis de resultados. Contiene los resultados relativos a la parametrización de la llama en las diferentes condiciones modeladas pudiéndose comparar con aquéllos de origen experimental.
- 6º. Conclusiones. Resume los resultados y logros más relevantes del presente trabajo.
- 7º. Bibliografía

El segundo documento se trata de un presupuesto del coste de elaboración del trabajo de ingeniería tal y como es preceptivo según la normativa de la ETSII

DOCUMENTO II. PRESUPUESTO

1. Precios unitarios
2. Costes de las fases del proyecto
3. Resumen

2. Conceptos previos sobre la combustión en motores de encendido por compresión

En este capítulo se van a revisar algunos de los conceptos necesarios para analizar el comportamiento de los chorros de combustibles renovables cuando se inyectan en la cámara de combustión de un motor de encendido por compresión. En concreto, se van a describir los diferentes procesos que sufre el combustible desde el momento de la inyección hasta su reacción química y liberación de calor.

A lo largo de esta descripción temporal del chorro se enunciarán los parámetros clave de este trabajo para la caracterización de la combustión del OME_x como son la longitud líquida, el retraso del encendido y el despegue de la llama. Dichos parámetros serán obtenidos en el trabajo mediante la herramienta de modelado CFD, tal como se detallará en los diferentes capítulos de esta Memoria.

2.1 Atomización

El combustible es introducido en la cámara de combustión a través de uno o más orificios con una gran diferencia de presiones entre la línea de alimentación de combustible, de hasta 2000 bar, y el cilindro, entre 50 y 100 bar, según el punto de funcionamiento. Esta gran diferencia de presiones tiene como objetivo que el chorro líquido inyectado tenga una gran velocidad para atomizarse en pequeñas gotas y que el combustible atraviese por completo la cámara de combustión en el corto espacio temporal disponible.

Por tanto, el primer proceso físico que experimenta el chorro líquido inyectado en la cámara de combustión de un motor Diesel es el de atomización. Viene propiciada por el encuentro del chorro a alta velocidad con el aire denso y de alta temperatura del interior de la cámara. La importancia de este proceso recae en que, al partir el chorro en pequeñas gotas, aumenta la superficie de contacto entre el combustible y el aire de la cámara, que favorecerá el siguiente proceso físico, el de evaporación.

A pocos milímetros desde el punto de descarga, el flujo se vuelve completamente turbulento al mezclarse con el aire envolvente. Este encuentro hace que el perfil de velocidades del combustible pase de tener únicamente la dirección axial del inyector a incorporar velocidades en la dirección transversal, como se muestra en la Figura 1. Dos factores llevarán al descenso en la velocidad axial: la conservación del momento cuando el aire irrumpe en el chorro y el arrastre por fricción de las gotas de combustible. En la Figura 1 se muestra la distribución de velocidades en las dos direcciones. La velocidad del combustible es máxima en la línea central y disminuye hasta cero en la interfase entre la zona de desintegración y el aire ambiente.

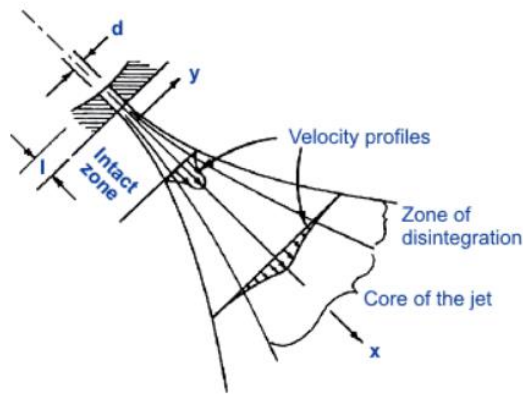


Figura 1. Esquema de la atomización del chorro de combustible (Jääskeläinen, Diesel Spray Formation and Mixing, 2021)

En el estudio de la atomización se distinguen dos fases:

- *Atomización primaria.* Se refiere a la rotura del chorro líquido en filamentos y pequeñas gotas producido a una distancia de unos pocos diámetros de inyector. En general, esta región es identificada como la zona de atomización primaria. La región de atomización primaria es objeto de numerosos estudios experimentales y computacionales para entender el proceso exacto de desintegración de la columna de líquido en gotas. Sin embargo, como esta área está compuesta por capas de alta densidad superpuestas, es muy difícil investigar la estructura interna de la zona de rotura primaria.

En esta primera etapa, con una alta velocidad del chorro, la rotura de la superficie exterior ocurre en el plano de salida del orificio. El diámetro medio de la gota es mucho menor que el diámetro del orificio y las interacciones aerodinámicas en la interfase líquido gas son el mayor componente del mecanismo de atomización en este régimen. Para la mayoría de los sistemas de inyección Diesel, la atomización del flujo ocurre cuando:

Ecuación 1

$$\sqrt{\frac{\rho_a}{\rho_f}} < \frac{18.3}{\sqrt{A}}$$

Donde ρ_a es la densidad del aire, ρ_f es la densidad del combustible, y A es función de la geometría del inyector.

- *Atomización secundaria.* Después de la desintegración inicial del flujo líquido y la formación de gotas, se produce la rotura de estas gotas en otras de tamaño inferior en tanto que penetran en el aire ambiente. Esta atomización secundaria se asume que es controlada por el número de Weber, que se define como la ratio entre la fuerza de inercia y la tensión superficial:

$$We = \frac{\rho_a D_d u_{rel}^2}{\sigma_f}$$

Donde ρ_a es la densidad del aire, D_d es el diámetro de la gota, u_{rel} es la velocidad relativa entre la gota y el gas envolvente, y σ_f es la tensión superficial. Dependiendo del valor que tome el número de Weber, la rotura de la gota es clasificada según los regímenes mostrados en la Figura 2. La rotura vibracional se da por la vibración de la gota en su frecuencia natural, las gotas resultantes tienen un tamaño similar a la gota original. En el modo de saco, la gota original se deforma por el centro adoptando una forma de vaso rodeado por un anillo toroidal. Al romper la fina capa ahondada se produce una gran cantidad de pequeñas gotas. El anillo rompe en gotas de mayor tamaño. El modo multimodal es similar al modo de saco con el añadido de una prolongación orientada de forma antiparalela a la dirección de la gota. En el modo de rotura laminar la gota original tiene una forma pelicular que es continuamente erosionada dando lugar a gotas de tamaño menor. En el modo de rotura catastrófica la superficie de la gota es interceptada por ondas de gran amplitud que dan lugar a un gran número de gotas de menor tamaño.

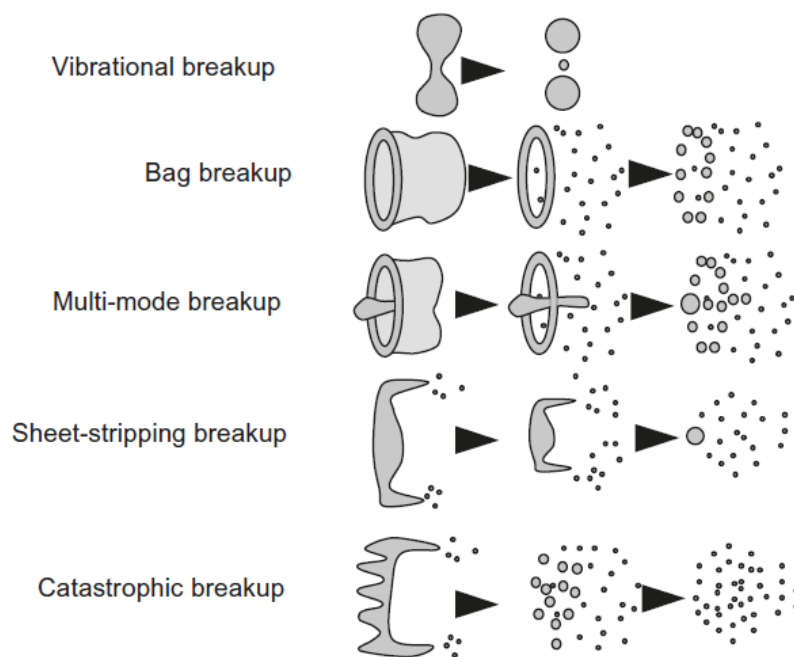


Figura 2. Modos de atomización secundaria (P. Boggavarapu, 2013)

2.2 Evaporación

Seguidamente del proceso de atomización se da la evaporación. Se da un intercambio de calor entre el aire a alta temperatura y las gotas atomizadas, cuya capa exterior aumentará de

temperatura, así como su presión de vapor por lo que la gota se irá evaporando y reduciendo su diámetro. Finalmente, ya no quedará fase líquida del combustible.

En este punto conviene introducir el concepto de la longitud líquida. Tras los instantes iniciales de la inyección, la fase líquida domina el espacio ocupado por el combustible, sin embargo, a partir de un cierto instante que depende de las condiciones ambientales de la cámara y del combustible, la fase líquida alcanza un límite en su penetración y se estabiliza. Más adelante sólo se da la fase vapor del combustible. Este fenómeno ha sido analizado experimentalmente en una variedad de publicaciones como (Martínez, 2003). También se debe comentar que la energía necesaria para la evaporación de la fase líquida surge del ambiente que engloba al chorro y no de la energía que se libera en la combustión, como se verá en el capítulo 5, la longitud líquida permanece invariable a la presencia de una cámara inerte o reactiva.

Considerando una gota atomizada de combustible a baja temperatura envuelta por aire a alta temperatura, tres fenómenos determinan la evaporación:

- La deceleración de la gota debido a la fricción aerodinámica
- La transferencia de calor del aire hacia la gota
- La transferencia de masa de fuel vaporizado de la gota al ambiente

A medida que la temperatura de la gota aumenta debido a la transferencia de calor, la presión de vapor del combustible y la tasa de evaporación aumenta. Conforme la tasa de transferencia de masa de vapor de la gota al ambiente aumenta, la fracción de calor transferido a la superficie de la gota que está disponible para aumentar aún más la temperatura de la gota disminuye. Debido a la disminución de la velocidad de la gota, el coeficiente de transferencia de calor convectiva entre el aire y la gota disminuye. La combinación de estos factores da el comportamiento mostrado en la Figura 3.

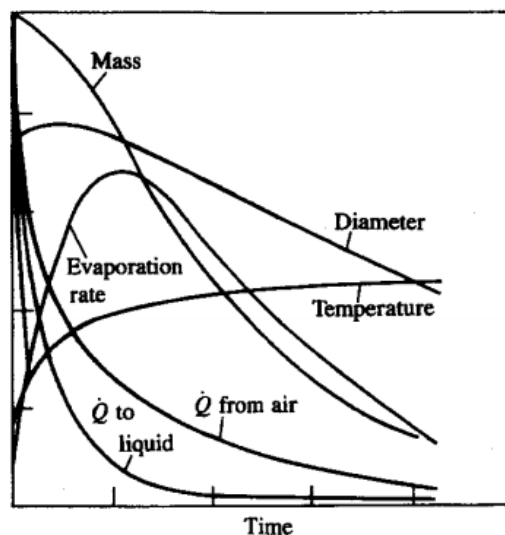


Figura 3. Variación de masa, diámetro, temperatura, tasa de evaporación, tasa de transferencia de calor del aire y tasa de transferencia de calor al líquido como función del tiempo durante el proceso de evaporación de una gota Diesel en condiciones de motor (Heywood, 1988)

Este análisis es válido para las gotas que están separadas entre sí, como las que se dan a las afueras del spray. En el núcleo del spray, donde las densidades de la gota son altas, el proceso de evaporación tiene un significativo efecto en la temperatura y la concentración de aire-combustible. Conforme el combustible se evapora, la temperatura local del aire descenderá y la presión de vapor local aumentará. Finalmente, el equilibrio termodinámico da lugar a la saturación adiabática.

2.3 Retraso al autoencendido

El retraso al autoencendido es definido como el tiempo que transcurre desde el inicio de la inyección hasta el comienzo de la combustión. Experimentalmente el tiempo de inicio de la inyección de combustible es fácil de determinar, sin embargo, el tiempo de inicio de la combustión no. Una manera de determinarlo es mediante la brusca variación de la pendiente en la curva de liberación de calor. Experimentalmente también se puede determinar a partir del pico de presión en el cilindro. Otro método es mediante la medición de la luminosidad de la llama. El estudio de este parámetro ha demostrado que, bajo condiciones normales, el punto de aparición de la llama es después que el punto de incremento de presión.

Ambos procesos físicos y químicos tienen lugar después de que una cierta cantidad de energía química del combustible es liberada. Los procesos físicos son los ya comentados anteriormente: la atomización del chorro líquido, la vaporización de las gotas de líquido, el mezclado del vapor de combustible con el aire. Los procesos químicos son las reacciones de precombustión que dependen del diseño del motor, el punto de operación y las características del combustible.

Debido a que el proceso de combustión en los motores de encendido por compresión es heterogéneo, su autoignición es todavía más compleja. Aunque la ignición ocurre en la fase vapor, ciertas reacciones de oxidación pueden darse lugar en la fase líquida también entre las moléculas de combustible y el oxígeno disuelto en las gotas de combustible. La rotura de las largas cadenas de hidrocarburo se da lugar. Estos procesos químicos dependen de la composición del combustible y la temperatura y presión de la cámara.

Puesto que las características de ignición del combustible afectan al retraso del encendido, esta propiedad es muy importante de determinar. La facilidad de un combustible al autoencendido es medida mediante el número de cetano. El número de cetano es determinado mediante la comparación del retraso del encendido del combustible con el de combustibles de referencia en tests estandarizados. Para combustibles con un bajo número de cetano se da que la combustión ocurre cuando la mayor parte del combustible ha sido inyectado en la cámara, lo que resulta en tasas de quemado muy rápidas una vez el combustible prende con altas tasas de crecimiento de la presión. En casos extremos, este pico de presión produce un sonido audible conocido como "knock del Diesel". Para los combustibles con un número de cetano elevado, con retrasos del encendido cortos, la combustión se da lugar mucho antes de que la mayoría del combustible haya sido inyectado. Las tasas de liberación de calor e incremento de la presión son

controladas en ese caso por la tasa de inyección y la mezcla, y da lugar a un funcionamiento más suave del motor.

Desde un punto de vista más químico, el conocimiento del autoencendido de los combustibles se sustenta en una amplia variedad de estudios debido a su importancia. Desde un enfoque básico, con una inyección de combustible en una cámara a presión y temperatura constante, se concluye que la temperatura y la presión del aire son las variables más importantes. A partir de esta conclusión, en el campo de estudio de la combustión se ofrece una ecuación de tipo Arrhenius para determinar el retraso del encendido:

Ecuación 3

$$\tau_{id} = Ap^{-n} \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right)$$

Donde τ_{id} es el retraso del encendido, E_A es la energía de activación para el combustible, R es la constante universal de los gases, y A y n son constantes dependientes del combustible y hasta cierto punto de la inyección y el flujo de aire.

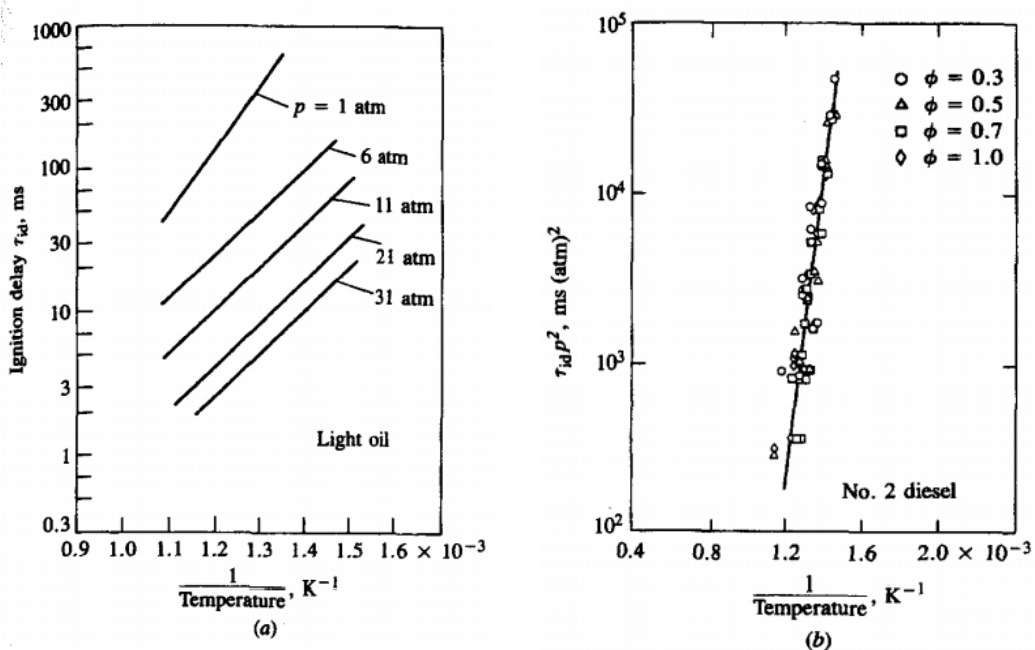


Figura 4. (a) Retraso del encendido función de la inversa de la temperatura y presión del aire. (b) Retraso del encendido x presión² medido en un reactor de flujo constante. (Heywood, 1988)

La Figura 4a muestra el retraso del encendido obtenido mediante la inyección de chorro líquido de combustible en una cámara a alta presión y volumen constante. La Figura 4b muestra el retraso del encendido de una cámara de flujo constante a alta presión donde el fuel en estado vapor se mezcló rápidamente con el flujo de aire caliente. La adaptación con la Ecuación 3 es clara.

El fenómeno de la autoignición de un spray de combustible depende de secuencias de procesos físicos y químicos de cierta complejidad. La relativa importancia de cada uno de

ellos depende de las condiciones ambiente, de las propiedades del combustible, y de cómo la mezcla de aire-combustible se prepara. Por ejemplo, los tiempos de evaporación del combustible son relevantes en motores fríos, pero no bajo condiciones de funcionamiento normales. Por ello la simplicidad de la Ecuación 3 sólo puede ajustarse a los experimentos bajo un cierto rango de condiciones. Las correlaciones de Spadaccini y TeVelde tienen una energía de activación mucho más elevada. Normalmente, valores bajos de E_A/R implican que los procesos físicos como la vaporización y el mezclado son relevantes para el encendido. Por ello, la preparación del combustible, la no homogeneidad de la mezcla, las pérdidas de calor, y la no uniformidad del flujo afectan al retraso del encendido.

En general, τ_{id} es una función de la temperatura de la mezcla, la presión y las propiedades del combustible. En los datos mostrados más arriba, el combustible fue inyectado en un ambiente uniforme donde la presión y la temperatura sólo cambiaron debido al descenso de la temperatura producido por la evaporación del combustible y calentamiento del combustible. En un motor, el cambio de la presión y la temperatura cambia durante el tiempo de retraso debido al movimiento del pistón. Para tener en cuenta las condiciones cambiantes en el retraso del encendido, se usa la siguiente relación:

Ecuación 4

$$\int_{t_{SOI}}^{t_{SOI}+\tau_{id}} (1/\tau) dt = 1$$

Donde t_{SOI} es el tiempo de inicio de la inyección, τ_{id} es el retraso del encendido, y τ es el retraso del encendido en las condiciones al instante t .

2.4 Combustión premezclada

La combustión premezclada es aquella que se da tras el retraso del encendido. Una de sus características es la repentina liberación de calor acompañada de fuertes gradientes de presión. Esto es debido a que de forma transitoria reacciona la mezcla dentro de los límites de la inflamabilidad originada durante el tiempo de retraso.

Desde esta tradicional definición de la combustión premezclada se deduce la importante relación entre ésta y el retraso del autoencendido. Conceptualmente se puede entender que la masa que se inyecta previa al retraso del encendido será la responsable de la brusca liberación de calor. También se suma en menor medida la masa que se está inyectando en el momento en el que se produce la combustión premezclada. Sin embargo, aunque experimentalmente sí se pueda cuantificar la cantidad de energía liberada en estos instantes y por tanto la masa que reacciona, no es posible diferenciar qué cantidad de masa corresponde a la previa al autoencendido y qué cantidad de masa está reaccionando al mismo tiempo que se inyecta.

2.5 Combustión por difusión

En la combustión por difusión el combustible y el comburente no han sido premezclados. La llama producida en una vela o mechero serían un ejemplo de combustión por difusión. El proceso de combustión se sustenta por la difusión del combustible y el oxidante hacia el frente de reacción, de ahí el nombre de estas llamas.

En motores Diesel, esta llama tiene lugar después de la combustión premezclada y se caracteriza por una estabilización de la reacción de combustión. Esto es porque esta fase se prolongará en el tiempo mientras haya suministro de combustible. Como consecuencia, el proceso de combustión en esta fase es controlado por la mezcla entre el combustible inyectado y el aire ambiente.

El modelo propuesto por Dec (Dec, 1997) para entender la complejidad de la llama Diesel es uno de los mayoritariamente extendidos, y de gran aplicación para la descripción de los chorros reactivos en condiciones de motores de encendido por compresión. Este modelo se representa en la

Figura 5. La zona granate corresponderá a la región predominantemente líquida o con combustible en evaporación. Seguido viene la zona de combustión premezclada con un tono beige. La franja naranja corresponde al frente de la llama de difusión, situado donde el combustible y el oxidante alcancen proporciones estequiométricas. El área azul está compuesta por hidrocarburos sin quemar, hollín y monóxido de carbono.

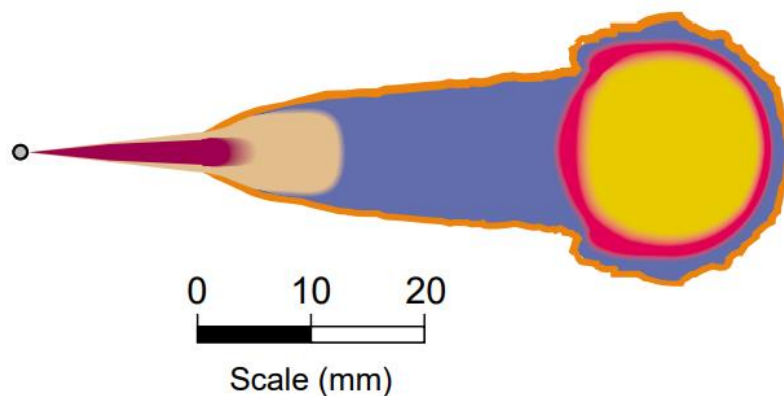


Figura 5. Estructura de la llama Diesel propuesta por Dec. (Dec, 1997)

2.6 Formación de hollín

La reacción completa de combustible y comburente en proporciones estequiométricas sólo produce vapor de agua y dióxido de carbono. Sin embargo, esto supone unas condiciones ideales que no se dan en el funcionamiento real de un motor. Y es que, en los gases de escape, además de vapor de agua y dióxido de carbono se hallan productos de una combustión incompleta como el monóxido de carbono y partículas sólidas. Estas últimas proceden de la evolución del llamado hollín formado en la llama. En el esquema de Dec (Figura 5), el hollín aparece fundamentalmente situado en el frente del chorro (zona amarilla del dibujo).

El hollín es una sustancia sólida carbonosa originada por la pirólisis del combustible a alta temperatura. Está principalmente compuesto por carbono. Aunque su producción es compleja de entender por la superposición de procesos químicos y físicos que intervienen, sí hay consenso en que la presencia de determinados compuestos intermedios llevará a la formación de hollín. Son los llamados precursores del hollín.

Estos precursores del hollín, que son hidrocarburos insaturados, se producen bajo condiciones de dosado rico. Entre ellos destaca el acetileno. A partir del acetileno se forman los hidrocarburos policíclicos aromáticos, que luego dan lugar a las primeras partículas por nucleación. Estas partículas crecerán de tamaño hasta dar lugar a lo que se conoce como hollín. Precisamente será el acetileno el producto que se analizará en las simulaciones CFD para evaluar la formación de hollín en unas condiciones determinadas.

3. Conceptos previos al modelado de la combustión

3.1 Introducción

Uno de los objetivos de este proyecto es modelar computacionalmente los procesos anteriormente explicados en el apartado 2.

Para la resolución de un caso se atiende por una parte al modelado del spray, en el que entran en juego los procesos físicos mencionados anteriormente en el apartado 2 desde la atomización a la evaporación. Por otra parte, si el chorro se inyecta en un ambiente reactivo, se atiende al modelado de la combustión, donde se consideran las reacciones químicas que tienen lugar.

Ambos aspectos del caso son solventados bajo la herramienta computacional Converge (CONVERGE CFD Software, 2021), utilizada para la resolución de problemas del ámbito de la dinámica de fluidos, con un enfoque a casos de combustión, y que ha sido utilizada en este trabajo como se verá en el apartado 4.3.

A continuación, se dará una explicación sobre los modelos para la predicción de la combustión de chorros líquidos que han sido utilizados por Converge.

3.2 Modelado del spray

Debido a la complejidad del proceso de atomización, Converge aborda el problema desde un enfoque euleriano-lagrangiano según la zona del spray. De esta forma se hace uso de un enfoque euleriano para la descripción de la fase gaseosa, esto es, el aire, los productos de combustión y el combustible evaporado. Y el enfoque lagrangiano se deja para la descripción de la fase líquida. Aquí el objeto de estudio es una determinada parcela de fluido que evoluciona en el espacio-tiempo.

Converge resuelve las ecuaciones de Navier Stokes para la fase gaseosa y además añade un modelo de turbulencia con el que se promediarán ciertos componentes de las ecuaciones de Navier-Stokes. Todo ello recibe el nombre de modelo de Reynolds Averaged Navier Stokes, RANS.

Por una parte, se resuelven las ecuaciones de conservación de la masa y el momento, dadas por:

Ecuación 5

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S$$

y

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

respectivamente, donde σ_{ij} representa el tensor a esfuerzo de la viscosidad, y viene dado por:

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

Donde u es la velocidad, ρ es la densidad, S es el término fuente, P es la presión, μ es la viscosidad, μ' es la viscosidad de dilatación y δ_{ij} es el delta de Kronecker. La Ecuación 5 y Ecuación 6 pueden contener el término fuente. En el caso de la ecuación del momento, el término fuente puede proceder de la aceleración de la gravedad, fuentes de masa o acoplamientos en el spray. Para la ecuación de la masa, el término fuente puede provenir de la evaporación u otros submodelos.

Las ecuaciones del momento y la masa se pueden resolver para flujos compresibles e incompresibles. En este caso se trata de un flujo compresible, por lo que se requiere de una ecuación de estado que relacione densidad, presión y temperatura.

La ley de los gases ideales viene definida por:

$$\frac{P}{\rho} = \left(\frac{R}{W} \right) T$$

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

La forma de la ecuación de la energía para fluidos compresibles es la siguiente:

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

donde ρ es la densidad, Y_m es la fracción másica de las especies m , D es el coeficiente de difusión másico, S es el término fuente, P es la presión, e es la energía interna específica, K es la conductividad, h_m es la entalpía de las especies, σ_{ij} es el tensor a esfuerzo de la viscosidad y T es la temperatura. Si se tiene en cuenta la turbulencia, la conductividad es remplazada por la conductividad turbulenta, dada por:

$$K_t = K + c_p \frac{\mu_t}{Pr_t}$$

donde Pr_t es el número de Prandtl turbulento y μ_t es la viscosidad turbulenta.

Además de los términos de conducción y difusión, la ecuación de la energía contiene otros cuatro términos. Primero, el término fuente es añadido para tener en cuenta fuentes de energía

definidas por el usuario y disipaciones turbulentas. El término del trabajo de la presión, $-P \frac{\partial u_j}{\partial x_j}$, tiene en cuenta la expansión y compresión. El término de disipación de la viscosidad, $\sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, tiene en cuenta la disipación de la viscosidad en calor. Finalmente, el término de difusión de las especies, $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right)$, tiene en cuenta el transporte de la energía debido a la difusión de las especies.

La ecuación del transporte de las especies se resuelve para la fracción másica de todas las especies en el dominio. La fracción másica de las especies se define como:

Ecuación 11

$$Y_m = \frac{M_m}{M_{tot}} = \frac{\rho_m}{\rho_{tot}}$$

donde M_m es la masa de la especie m en la celda de resolución, M_{tot} es la masa total en la celda, ρ_m es la densidad de la especie m , y ρ_{tot} es la densidad de la celda. La ecuación de las especies puede ser resuelta por separado o junto con otra ecuación del transporte. La forma compresible de la ecuación de la conservación de las especies es dada por:

Ecuación 12

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_t \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_m$$

donde $\rho_m = Y_m \rho$ y donde u es la velocidad, ρ es la densidad, ρ_m es la densidad de las especies, Y_m es la fracción másica de la especie m , D_t es el coeficiente de difusión turbulenta de la masa, y S_m es el término fuente. El coeficiente de difusión molecular turbulento de la masa es calculado por:

$$D_t = \frac{v_t}{Sc_t}$$

Donde Sc_t es el número de Schmidt turbulento. El término fuente en la ecuación de las especies tiene en cuenta la evaporación, las reacciones químicas en caso de combustión y otros submodelos.

3.3 Modelado de la combustión

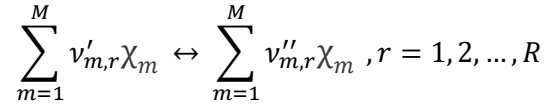
Para la parte química del problema, dentro de los modelos disponibles en el código de Converge, se hace uso de un modelo detallado de la química conocido como modelo SAGE asumiendo condiciones well-mixed (WM), esto es, que en cada celda en la que se resolverán las reacciones químicas, se asume que las especies se han mezclado adecuadamente de forma previa la reacción, de manera que sólo la temperatura influye en la reacción.

Un mecanismo de reacciones químicas es un conjunto de reacciones básicas que recoge de manera global una reacción química. La combustión de un combustible se modela haciendo uso de su mecanismo específico. En este trabajo el mecanismo empleado es el propuesto por Cai

(Cai, 2020). El modelo SAGE calculará las tasas de reacción para cada reacción elemental del mecanismo mientras que el modelo físico resuelve las ecuaciones del transporte. Dado un preciso mecanismo, el modelo SAGE puede ser usado para modelar diferentes regímenes de combustión (encendido, premezclado, difusión) (CONVERGE CFD Software, 2021).

El mecanismo de una reacción química puede ser escrito de la forma:

Ecuación 13



Donde $v'_{m,r}$ y $v''_{m,r}$ son los coeficientes estequiométricos para reactivos y productos, respectivamente, para las especies m y la reacción r ; R es el número total de reacciones, y χ_m es el símbolo químico para la especie m .

La tasa de producción neta de especies m viene dada por:

Ecuación 14

$$\dot{\omega}_m = \sum_{r=1}^R v_{m,r} q_r, \quad m = 1, 2, \dots, M$$

Donde M es el número total de especies y $v_{m,r}$:

Ecuación 15

$$v_{m,r} = v''_{m,r} - v'_{m,r}$$

La variable de la tasa de progreso para la reacción r -ésima es:

$$q_r = k_{fr} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v'_{m,r}} - k_{rr} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v''_{m,r}},$$

Donde $[X_m]$ es la concentración molar de la especie m , k_{fr} y k_{rr} son coeficientes de avance y de velocidad inversa de la reacción r .

En el modelo SAGE, el coeficiente de avance es expresado por una función tipo Arrhenius:

$$k_{fr} = A_r T^{b_r} e^{\frac{-E_r}{R_u T}},$$

Donde A_r es un factor, b_r es el exponente de la temperatura, E_r es la energía de activación, y R_u es la constante de los gases ideales.

Además, el coeficiente de velocidad inversa puede ser especificado de forma similar al coeficiente de avance o calculado a partir del coeficiente de equilibrio K_{cr} como:

Ecuación 16

$$k_{rr} = \frac{k_{fr}}{K_{cr}},$$

Donde K_{cr} es determinado por las propiedades termodinámicas y es dado por:

$$K_{cr} = K_{pr} \left(\frac{p_{atm}}{R_u T} \right)^{\sum_{m=1}^M \nu_{m,r}}$$

Donde p_{atm} es la presión atmosférica. La constante de equilibrio K_{pr} es obtenida mediante:

$$K_{pr} = \exp \left(\frac{\Delta S_r^0}{R_u} - \frac{\Delta H_r^0}{R_u T} \right)$$

Donde ΔS se refiere al cambio que ocurre en pasar de reactivos a productos en la r -ésima reacción, específicamente:

$$\frac{\Delta S_r^0}{R_u} = \sum_{m=1}^M \nu_{m,r} \frac{S_m^0}{R_u}$$

Y

$$\frac{\Delta H_r^0}{R_u T} = \sum_{m=1}^M \nu_{m,r} \frac{H_m^0}{R_u}$$

Donde S y H se refieren a la entropía y entalpía respectivamente.

Con la información anterior, las ecuaciones que gobiernan para la masa y la energía pueden ser resueltas para una celda dada. La ecuación que gobierna la de conservación de la masa es:

$$\frac{d[X_m]}{dt} = \dot{\omega}_m$$

Y para la conservación de la energía la ecuación es la siguiente:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{V \frac{dp}{dt} - \sum_m (\bar{h}_m \dot{\omega}_m)}{\sum_m ([X_m] \bar{c}_{p,m})}$$

Donde V es el volumen, T es la temperatura, p es la presión, $\dot{\omega}_m$ es determinado por Ecuación 14 y con \bar{h}_m y $\bar{c}_{p,m}$ siendo la entalpía específica molar y el calor específico molar a presión constante para la especie m .

La Ecuación 22 es para la combustión a volumen constante. Las ecuaciones anteriores son resueltas para cada instante y las especies son actualizadas adecuadamente. Es importante remarcar que la temperatura obtenida de Ecuación 22 se usa sólo para actualizar los coeficientes de tasas ya que el modelo SAGE resuelve el sistema de ecuaciones de las tasas y no se usa para

actualizar la temperatura de celda de Converge. La temperatura de la celda se actualiza después de que el cálculo de la química haya convergido.

4. Metodología para el modelado

Previo a la obtención y análisis de los resultados en forma de gráficas que se verá en el apartado 5, se ha llevado a cabo un trabajo de búsqueda de información, acondicionamiento, preparación, lanzamiento y tratamiento de resultados CFD que ha consumido buena parte del tiempo empleado en el desarrollo de este trabajo.

En los siguientes subapartados se detalla el proceso seguido desde la búsqueda de información sobre las propiedades termodinámicas de los OME_n hasta el postprocesado de los resultados del CFD para calcular los parámetros de interés.

4.1 Propiedades generales de los oximetiléteres

A modo de resumen, en la Tabla 1 se recogen las propiedades que son de interés para un combustible. En este caso para el OME₃, OME₄ y el dodecano. El dodecano sirve como referencia ya que es un *surrogate* del combustible Diesel. Sus propiedades se pueden encontrar en (National Library of Medicine, 2021).

	OME3	OME4	C12
Densidad a 15°C (kg/m ³)	1021	1059	749
Número de cetano	70	90	87
Viscosidad a 40°C (mm ² /s)	1.05	1.75	1.36
Temperatura de ebullición (°C)	429.05	474.15	489.45
Entalpía de vaporización (kJ/kg)	304.7	282.9	256
Poder Calorífico Inferior (MJ/kg)	19.65	18.9	44.6
(A/F) _{st} a 15%O ₂	6.12	5.85	20.7

Tabla 1. Propiedades termodinámicas del OME3, OME4 y C12

Vaporización

El comportamiento ante la evaporación es un factor decisivo para la calidad de la mezcla entre el combustible y el aire. En la cámara de combustión, el combustible debería de vaporizarse tan rápido como fuera posible. Este proceso se ve favorecido ante una tensión superficial y viscosidades bajas de las gotas.

El rango de ebullición juega un importante papel en el caso de los combustibles fósiles, ya que, a diferencia de los renovables empleados en este estudio, los primeros son una mezcla de una gran cantidad de compuestos, por lo que no tienen un punto de ebullición definido. Es decir, cuando se habla de un combustible renovable, como los OME_n se puede conocer de antemano su punto de ebullición. Este factor es beneficioso en los motores de encendido por compresión ya que mejora el rendimiento de la combustión y reduce las emisiones contaminantes. En condiciones de operación, sin embargo, el rango de ebullición se ve limitado por otros factores como la viscosidad, densidad, rendimiento del encendido y el flash point.

El punto de ebullición o rango de ebullición tiene una influencia considerable en la formación de una mezcla homogénea aire-combustible y por ello en la combustión. De acuerdo con la norma DIN EN 590 (Asociación Española de Normalización, 2021) sobre los estándares del combustible tipo Diesel, el 65% del combustible se evaporará a 250° y el 85% a 350°C, al máximo de 360° se habrá evaporado el 95%. Un punto inicial de ebullición demasiado alto causará una atomización más pobre.

Para las cadenas más largas de los OME_n presentan puntos de ebullición lo suficientemente elevados como para que su almacenaje en depósitos a presión atmosférica sea seguro. Las curvas de vaporización de mezclas de OME_n con n = 2-6 son más planas que aquellas de un combustible Diesel convencional. Esto supone una aceleración del proceso de vaporización y la posibilidad de diseñar sistemas de inyección más específicos, con el consecuente aumento en la eficiencia (Jialin Liu, 2016).

Estequiometría

La cantidad de aire requerida para la combustión completa depende del ratio C/H/O. Para los OME_n, debido a la presencia de oxígeno en su composición, la cantidad de aire necesaria para quemar será menor que en los combustibles convencionales. Esto lleva a que aunque el poder calorífico de los OME_n sea inferior al del resto de combustibles, el poder calorífico de la mezcla no es muy inferior que el que se da en mezclas con Diesel convencional. Por otra parte, como el poder calorífico de los OME_n es inferior, se esperará un mayor consumo por kilómetro en su uso como combustible en vehículos.

Densidad

La densidad del combustible tiene una influencia directa en la atomización e indirecta en la combustión, y por ello, en las emisiones. Según la DIN EN 590, el mayor factor detrás de la densidad del combustible es la emisión de partículas. La mayor densidad de los OME_n respecto a los alcanos se debe a los enlaces C-O, que son más cortos que los C-C. Las densidades de OME₃ y OME₄ se quedan por encima del rango que establece la norma DIN EN 590 aunque esto no sería un gran problema ya que el contenido de carbono de los OME_n no es tan elevado como en los combustibles fósiles (Ludger Lautenschütz D. O., 2017).

Número de cetano

El número de cetano describe la capacidad de auto encendido de un combustible tipo Diesel. Para garantizar una autoignición controlada y un desarrollo de la combustión óptimo, el número de cetano de los combustibles Diesel interesa que sea lo más alto posible. En caso de tener un índice de cetano bajo, la ignición se retrasa. Lo que da lugar a peores inicios en frío del motor y mayores emisiones.

En lo que a los OME_n respecta, tal y como muestra la Tabla 1, el número de cetano aumenta con la longitud de cadena. Para las longitudes de cadena n=3 y n=4 toma un valor por encima del mínimo marcado por la norma DIN EN 590 y se sitúa próximo al del dodecano.

Viscosidad

La viscosidad de una sustancia es la medida de su resistencia a fuerzas cortantes y depende de las fuerzas intramoleculares de atracción. A temperatura y presiones constantes, la viscosidad crece con el tamaño de la molécula. En líquidos crece a temperaturas bajas y presiones altas. En los motores Diesel, la viscosidad influye en el rendimiento del bombeo del fluido hacia la cámara y la atomización. Una viscosidad elevada dificulta una atomización uniforme y lleva a diámetros altos, lo que provocará una mala combustión con las consiguientes emisiones. Por otra parte, una viscosidad demasiado baja empeora la lubricación del motor que terminará desgastando las paredes interiores. Por tanto, la viscosidad se ve limitada a un determinado rango (Anton Paar, 2021).

De la Tabla 1 se desprende que, aunque la viscosidad de los OME_n aumente con la longitud de cadena, no alcanza el rango propuesto por la norma DIN EN 590, que sitúa esta propiedad entre 2 - 4.5 mm²/s. Teniendo en cuenta el crecimiento exponencial de la viscosidad con la longitud de cadena (Ludger Lautenschütz, 2016), es a partir de n=5 que se sitúa dentro del rango de la norma. Para garantizar buena lubricación, sin embargo, se pueden añadir aditivos que aumentan la viscosidad.

4.2 Propiedades termodinámicas de los OME_x

Antes del lanzamiento del cálculo CFD de la combustión del OME_x es necesario determinar sus características termodinámicas. Como al inicio de este trabajo no estaban disponibles en el CMT, se comenzó por hacer una búsqueda bibliográfica tanto en artículos como en bases de datos. El objetivo de la búsqueda era, o bien encontrar las propiedades tabuladas para un amplio rango de temperaturas, o bien encontrar las propiedades críticas: presión, temperatura y densidad críticas; a través de las cuales es posible crear tablas de las propiedades para un rango de temperaturas mediante el uso de una herramienta de cálculo desarrollada en CMT que emplea una ecuación cúbica de estado (Jose V. Pastor, 2020).

En las bases de datos consultadas (U.S. Department of Commerce, 2020) y (Aspentech, 2020) no se encontró información relevante. De los artículos revisados destacan (BOYD, 1961) y (Aditya Kulkarni, 2020). El primero por ser la primera obra publicada con datos experimentales y que es citada por gran cantidad de publicaciones sobre los OME_n. El segundo por publicar un modelo molecular de los OME_n que lleva a la estimación de las propiedades críticas.

Boyd mide la presión de vapor, los puntos de fusión y las densidades de líquido para los OME_n con n=2-5. En el momento de la publicación, sin embargo, ya se disponía de estas medidas para el dimetil-éter (n=0) y metilal, (n=1). Las presiones de vapor sirven para establecer puntos de ebullición atmosféricos y los calores de vaporización. Con esto último se pudo dar el incremento en el calor de vaporización por cada grupo CH₂O que se añada a la cadena. Los

compuestos fueron preparados por el autor consiguiendo unas impurezas menores al 0.1% en análisis de cromatografía de gases.

Con los datos experimentales ajusta tres constantes A , B y C para cada $n=2-5$ en la función:

$$\ln P = A + \frac{B}{T} + C * \ln T$$

Ecuación 23. Logaritmo neperiano de la presión de vapor de los OME_n presentado por Boyd (BOYD, 1961)

Que dará el logaritmo neperiano de la presión de vapor en mmHg para una temperatura en K. A partir de la Ecuación 23 se calcula el calor de vaporización, asumiendo que el vapor es un gas perfecto y que el volumen del líquido es muy inferior al del gas. Bajo esas suposiciones el calor de vaporización se da por:

$$\Delta H_V^T = R(-B + CT)$$

Ecuación 24. Calor de vaporización de los OME_n presentado por Boyd (BOYD, 1961)

Donde R es la constante de los gases ideales. Aquí el autor concluyó que existe una relación proporcional entre el aumento del calor de evaporación y el de la longitud de cadena de OME_n.

(Aditya Kulkarni, 2020) es una de las obras de reciente publicación en el campo de la investigación de las propiedades de los OME_x que ha sido un pilar fundamental para la elaboración de este trabajo.

Esta obra utiliza la simulación molecular para predecir las propiedades termodinámicas de estos fluidos. Para ello primero es necesario conocer de forma exacta el campo de fuerzas, sin embargo, los autores no hallan tal información disponible en el momento de la publicación, así que su investigación comenzó por desarrollar un campo de fuerzas para los OME_n, desde $n=1$ hasta $n=4$.

Los modelos moleculares se desarrollan normalmente para ajustarse a datos experimentales conocidos de antemano. A raíz de esto los autores se han topado con dos desafíos: la falta de publicaciones de datos experimentales y segundo las presiones de vapor, especialmente para cadenas largas de OME_x son muy bajas a las temperaturas a las que esta información está disponible. Teniendo en cuenta las limitaciones, los autores han empleado las fuentes que se muestran en la Tabla 2.

Combustible	Propiedad	Obra
OME1	Presión de vapor	(Pan, Wu, & Liu, 2006)
	Densidad líquida	(Wang, Pan, Wu, & Liu, 2006)
OME2,3,4	Presión de vapor	(BOYD, 1961)
	Densidad líquida	(Burger, Ströfer, & Hasse, 2013)

Tabla 2 Fuentes de datos experimentales empleadas en la obra de Kulkarni para ajustar el modelo molecular de los OME_n

Los resultados del equilibrio líquido vapor obtenido mediante el estudio del campo de fuerzas se determinan que son buenos ya que la desviación media es menor al 1.5% para las densidades del líquido a 1bar e inferior al 5% a las presiones de vapor de OME_{1,2,3}. Para OME₄,

la desviación es mayor porque los autores decidieron priorizar sus esfuerzos en los resultados de OME₃. Por enmarcar estas desviaciones, los autores aclaran que los valores son comparables a los que se obtienen para cadenas largas de alcanos utilizando otros métodos de campo de fuerzas.

Algo muy interesante de esta obra para el presente trabajo es que también extrapolan las correlaciones de datos experimentales vistas en la Tabla 2 y las comparan con sus predicciones obtenidas del estudio del campo de fuerzas a altas temperaturas. Para las densidades del líquido no se observa ninguna tendencia sistemática y los resultados se dan por buenos teniendo en cuenta que se extrapolan resultados en un rango de 200K, a excepción de un punto para el OME₄ a alta temperatura. Para las curvas de presión de vapor, sin embargo, se observan comportamientos diferenciados entre la extrapolación de los puntos experimentales y la simulación molecular.

A partir de la simulación molecular estiman las propiedades críticas de los OME_n, que se muestran en la Tabla 3.

Componente	T _c (K)	ρ _c (kg/m ³)	p _c (bar)
OME ₃	621.5	322.1	30.2
OME ₄	679.3	318.8	25

Tabla 3. Propiedades críticas de los OME_n estimadas en (Aditya Kulkarni, 2020)

Llegados a este punto ya se estaba en condiciones de generar las tablas de propiedades termodinámicas tabuladas. Las propiedades que fueron tomadas de los artículos fueron pasadas a una hoja de cálculo. Después, para cada OME_n se ejecutó un archivo ejecutable que lee de la hoja de cálculo anterior y rellena un polinomio. Como resultado se genera un archivo .dat que contiene las propiedades termodinámicas del equilibrio líquido vapor desde T=200K hasta la T_c.

4.3 Lanzamiento de casos en Converge

Converge es el software utilizado para resolver los casos de CFD. Antes de ejecutar una simulación de Converge, se necesita preparar un conjunto de ficheros de entrada:

- Ficheros de entrada .dat. Son los ficheros que contienen las propiedades termodinámicas de la fase líquida y vapor del combustible (gas.dat, liquid.dat) que se rellenan con las tablas de propiedades termodinámicas generadas en el apartado anterior. Para dar información del mecanismo químico se rellena el fichero mech.dat. En él se listan los elementos y especies usadas en la simulación. Como para resolver las reacciones químicas del problema se hará uso del módulo especializado que integra Converge, también se incluyen los datos de la reacción. El fichero surface.dat contiene las coordenadas de los vértices que definen la

superficie de trabajo, un cilindro de 102mm de altura y 100mm de diámetro. El último fichero .dat necesario es el therm.dat, en el que para cada especie incluida en mech.dat se dan unas constantes para rellenar un polinomio que define sus propiedades termodinámicas en la fase gas (composición, capacidad calórica a presión constante y entalpía de formación).

- Ficheros de entrada .in. Los ficheros de .in contienen parámetros del modelo, condiciones iniciales y de contorno. Aquellos que son necesarios son: inputs.in, solver.in, boundary.in, initialize.in. En estos ficheros se declara el nombre de los archivos .dat anteriormente mencionados. También se hallan aquí las flags del problema que dan información a Converge sobre las ecuaciones que se han de resolver, número máximo de iteraciones, valores iniciales. Como Converge funciona a prueba de interrupciones inesperadas, en caso de sufrir una y volver a relanzar el cálculo desde donde se interrumpió, en el fichero init.in se indica el número de restart para que se cree un nuevo fichero de salida numerado. Otro fichero relevante es post.in en el que se indican qué parámetros se desea que sean escritos en los ficheros de salida.

Todos estos ficheros se guardan en lo que Converge llama una Case Directory. Cuando los ficheros de entrada han sido convenientemente completados se lanza el caso. Para este trabajo se ha hecho uso del clúster RIGEL (Universidad Politécnica de València, 2021) y del clúster propio del CMT.

De entre los ficheros de salida .out que se generan, los que son de interés para la obtención de resultados finales son los *post<output number>_<output time>.out*. Se obtiene uno para cada instante de la simulación y en su interior se guarda para cada celda en las que se divide el dominio los valores individuales de los parámetros que se especificaron en post.in. Estos ficheros se guardan en formato binario por lo que se requerirá de una rutina de post procesado que los devuelva a formato ASCII.

4.4 Postprocesado en Matlab

Los resultados que genera Converge no son interpretables de primera mano. Por ello el CMT dispone de rutinas de post procesado escritas en Matlab. Su objetivo será crear ficheros con extensión .mat con los que Matlab puede trabajar. Finalmente calculará los parámetros de interés para la caracterización de la llama como se verá en este apartado.

A grandes rasgos, primero se declaran variables que conviene revisar cada vez que se quiere lanzar a postprocesar un caso nuevo, pues se determina la fracción de oxígeno, el dosado, el modelo de combustión. Otras variables que se declaran tienen que ver con los límites que se sirven para delimitar las cantidades máximas y mínimas de determinadas sustancias o temperaturas. También son usados en la creación de las gráficas que se generarán más adelante con el objetivo de que presenten un mismo estilo.

A continuación, se hacen diversas llamadas para que se ejecute un programa de tratamiento de archivos en formato .out, los de salida de Converge. Como resultado se generan ficheros en formato .col y .par. Estos últimos son eliminados pues sólo se trabajará con los .col.

Es ahora cuando Matlab es capaz de interpretar los archivos .col para poder crear los tipo .mat. En esta parte se hace un paso que consume mucho tiempo de computación. Los archivos .col contienen la información en el espacio tridimensional pero las gráficas que contiene este documento para representar información sobre la estructura de la llama son bidimensionales. Por ello se divide el espacio tridimensional que representa el cilindro en el que se inyecta combustible con una serie de planos cuyo eje de intersección es el inyector. Sobre estos planos se interpola la información del espacio tridimensional. Finalmente se abaten los planos obteniendo un promediado azimutal de todos los planos.

En este momento el volumen de control se ha reducido a un único plano del que se conoce la distribución de especies, temperatura, fracciones másicas de combustible para su dominio. Ya se está en condiciones de calcular los parámetros de la longitud líquida, penetración del spray, despegue de la llama, retraso del encendido que fueron descritos conceptualmente en el apartado 2.:

- Penetración del spray. Se calcula para cada instante y se consigue mediante la búsqueda del punto más alejado del inyector en el que la fracción de mezcla supera un valor de 0.001.
- Penetración del líquido. También se calcula para cada instante, aunque su valor se estabiliza. Se calcula mediante la búsqueda del punto más alejado del orificio para el que la fracción másica de líquido supera un valor de 0.97.
- Retraso del encendido. Es el instante para el que $\frac{dT_{MAX}}{dt}$ es máximo, siendo T_{MAX} la temperatura máxima en el dominio de cálculo en un instante. Además, para descartar casos en los que la mezcla no se autoenciende por completo, se fija un valor mínimo que $\frac{dT_{MAX}}{dt}$ debe superar para considerar que el retraso del encendido se produce.
- Despegue de la llama. Para el cálculo de las coordenadas de la distancia de despegue se ha utilizado el criterio de la fracción másica del radical hidroxilo (OH). Se utiliza el OH por ser un trazador de las altas temperaturas. Una vez se ha producido el retraso del encendido, se busca el valor máximo de la fracción de OH en cada instante y se calcula su 14%. Después se busca el punto más cercano al orificio para el que la fracción másica de OH sea igual o mayor que el 14% del máximo de la fracción de OH. Se guardan sus coordenadas. Como es un valor estable lo que se representará en este trabajo es el valor medio.

- Cálculo de la longitud de llama. Siguiendo el criterio anterior para el 14% del máximo de la fracción másica de OH, será el punto más alejado del inyector para el que la fracción másica de OH es mayor o igual que el límite del 14%.

5. Presentación y análisis de resultados

5.1 Introducción a los casos

En este apartado se presentan los resultados de las simulaciones llevadas a cabo en el ámbito de este trabajo. Para el desarrollo de esta memoria se han simulado los casos de estudio mostrados en la Tabla 4. Para el OME3 y OME4 se trata de sustancias puras y se denomina OME_x a una mezcla propia del CMT de las sustancias OME3 y OME4 en fracciones máxicas de 0.5914 y 0.4086 respectivamente. Estos casos fueron resueltos con la herramienta Converge como ya se ha comentado en el apartado 4.3 y utilizando los modelos del apartado 3.

	COMBUSTIBLE	TEMPERATURA (K)	XO ₂ (%)
INERTE	OME3	900	0
	OME4	900	0
	OME _x	900/800	0
REACTIVO	OME _x	1000/900/800	15
	OME _x	900	21

Tabla 4. Casos de estudio simulados en el presente trabajo, presión de inyección y densidad del aire se mantienen estables para todos los casos

Los casos de la Tabla 4 parten de unas condiciones base, mostradas en la Tabla 5, que propone la Engine Combustion Network, ECN (Engine Combustion Network, 2021). La ECN se trata de una organización internacional de investigadores en el campo de los motores de combustión. Entre sus objetivos está el disponer de unos estándares para la modelización de experimentos y simulaciones de los chorros de combustible en cámaras de combustión. Dentro de sus estándares se establecen una serie de especificaciones entre ellas: el tipo de inyector, número de agujeros, diámetro de estos, presión de inyección, temperatura de inyección. También las condiciones de la cámara a nivel de geometría, temperatura del aire, composición del aire, densidad. Para casos resueltos computacionalmente la ECN también recomienda unos tamaños mínimos de celda y time steps que han sido tomados en cuenta. Dentro de los estándares que la ECN propone para llevar a cabo los experimentos se va a hacer uso del Spray A.

Las condiciones del Spray A son propias de un motor en condiciones de media carga que hace un uso moderado del EGR. Las especificaciones del inyector corresponden a los sistemas modernos de inyección con capacidad de trabajo a altas presiones. En este trabajo, en vez de usar dodecano como combustible se van a emplear diferentes OME₃, OME₄ y OME_x. Sin embargo, como se va a modelar bajo las condiciones de Spray A, se podrá comparar los resultados con un modelo CFD en las mismas condiciones con el dodecano. Los resultados del dodecano son proporcionados por el CMT.

Respecto a las especificaciones de la Tabla 5, se debe comentar que en el planteamiento de los casos se toman las condiciones de Spray A como base, pero las características utilizadas difieren de las de la tabla anterior. En todos los casos modelados la duración de la inyección será de 5ms. El parámetro de la temperatura del gas ambiente, de contenido de oxígeno y del combustible dependerá del caso según Tabla 4.

Temperatura del gas ambiente	900K
Presión del gas ambiente	Cercana a 6MPa
Densidad del gas ambiente	22.8 kg/m ³
Fracción volumétrica de oxígeno en el ambiente	15% en casos reactivos, 0% casos no reactivos
Velocidad del gas ambiente	Menor a 1 m/s
Diámetro nominal del inyector	0.09mm
Número de agujeros	1
Orientación del orificio	Axial
Presión de inyección	150MPa
Combustible	n-dodecano
Temperatura del combustible	363K (90°C)
Duración de la inyección	1.5 ms
Masa inyectada	3.5 – 3.7 mg

Tabla 5. Condiciones base para el Spray A en condiciones reactivas propuestas por la ECN

Puesto que el presente trabajo se encuentra enmarcado en un amplio proyecto del CMT, también se dispone de datos experimentales del OME_x en ambientes reactivos basados en las técnicas ópticas de Schlieren y quimioluminiscencia de radicales excitados del grupo hidroxilo (OH^{*}) (Pastor, García-Oliver, Micó, García-Carrero, & Gómez, 2020). Estos casos reactivos también están sujetos a las condiciones estandarizadas del Spray A, disponibles en la Tabla 5, con las variaciones de temperatura y contenido de oxígeno mostrados en la Tabla 4.

Debido a la amplia variedad de parámetros que son capaces de resolverse mediante las simulaciones CFD, a diferencia de los casos experimentales, los casos reactivos simulados también presentan resultados de interés como el campo de temperaturas y distribución de especies de interés. Para poder compararlos se emplea una simulación CFD de dodecano en condiciones de Spray A facilitado por el CMT. Esta simulación emplea el mismo modelo físico y químico que el utilizado en este trabajo.

El volumen de control en el que el spray es inyectado consiste en un cilindro de 50mm de radio y 102mm de largo. Para subdividir este dominio en las celdas en las que se resolverá el problema, Converge creará un mallado de tamaño variable según los gradientes de temperatura, velocidad, fracción de masa. El programa también es capaz de regular el paso temporal para ofrecer una mayor resolución en los instantes con mayores variaciones.

5.2 Casos inertes

Si bien el objetivo final de un motor es quemar el combustible, en las fases de investigación es común el empleo de casos inertes, es decir casos en los que el combustible es inyectado en una cámara con gas inerte, es decir, sin oxígeno o en una muy baja concentración. Estos casos inertes son de interés porque permiten analizar el chorro desde la perspectiva de los procesos físicos de mezcla que intervienen sin verse afectados por los procesos químicos que se dan en la combustión.

Además, a diferencia de los casos reactivos, que tienen un tiempo de computación de varias semanas de acuerdo con los medios disponibles en la UPV, los inertes se consiguen resolver en pocos días, y esto permite detectar errores accidentales en el modelo preventivamente.

5.2.1 Penetración del spray y longitud líquida

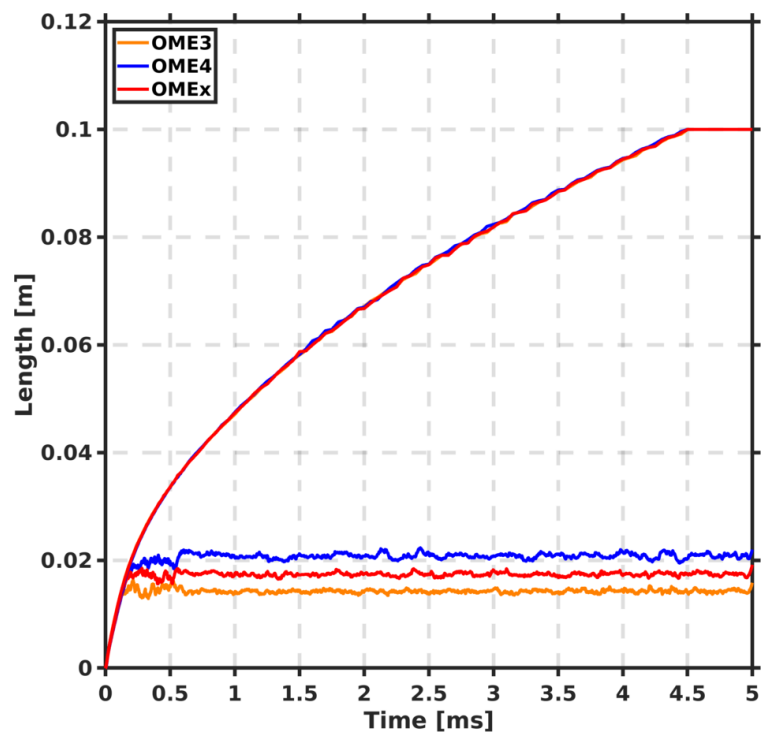


Figura 6. Penetración del spray (curva creciente) y longitud líquida (valor estable) OME3, OME4, OMEX inerte a 900K

En la Figura 6 se muestra la penetración del spray y la longitud líquida de un spray inyectado en un ambiente inerte con las condiciones normalizadas del Spray A mencionadas anteriormente en la Tabla 5. El cálculo para obtener estos dos parámetros ya fue indicado en el apartado 4.4. Como las series mostradas han sido modeladas bajo las mismas condiciones ambientales y de inyección, se puede asumir que las variaciones entre ellas se deben únicamente a las características del combustible. Para la longitud líquida se observa un

crecimiento de este parámetro hasta el instante 0.5ms, donde se aprecia una estabilización con ligeras fluctuaciones en 0.014m para el OME3, 0.017m para el OME_x y 0.02m para el OME4.

Este crecimiento de la longitud líquida en función del tamaño de la cadena se ajusta a lo esperado, pues para los OME_x una mayor longitud de cadena implica menor volatilidad y mayor densidad como se muestra en Tabla 1. Ello hace que para cadenas más largas la distancia recorrida por el spray en fase líquida será mayor hasta ser totalmente evaporado.

En cuanto a la penetración de vapor del spray se observa una tendencia similar entre las series que incluso se solapan. Todas ellas avanzan exactamente de la misma manera, y alcanzan el límite del volumen de control en el instante 4.5ms. De este similar comportamiento entre las series se deduce, como era de esperar, que la velocidad de la punta del chorro disminuye a medida que avanzan a lo largo de la cámara. Este resultado es debido a que, a pesar de que al aumentar la longitud de la cadena lo hace también la densidad, el flujo de cantidad de movimiento, que únicamente depende de la diferencia entre la presión de inyección y la de la cámara, se mantiene constante. Este flujo de cantidad de movimiento es el parámetro que controla la penetración del chorro, de ahí que no se modifique esta última.

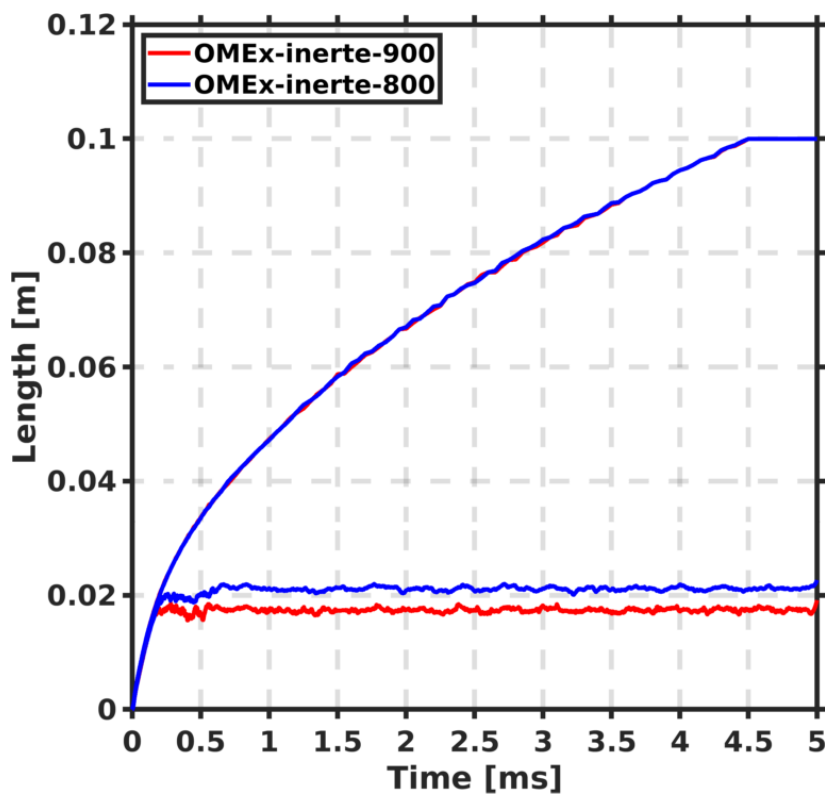


Figura 7. Penetración del spray y longitud líquida OME_x inerte a 800K y 900K

En la Figura 7 se muestran dos series de OME_x cuya única diferencia entre ambas es la temperatura del aire de la cámara, manteniendo una densidad ambiente constante. Como era de esperar, cuando la temperatura de la cámara disminuye, en este caso 100K, la longitud líquida aumenta apreciablemente y sobrepasa la barrera de los 0.02m. En el caso de la penetración del

spray no se producen diferencias ya que hay un acople entre ambas series casi exacto. En breve, la penetración de la punta del chorro depende solamente de:

- Flujo de cantidad de movimiento en el orificio, controla la capacidad de mezcla con la que inyectamos el chorro.
- Densidad en el ambiente, controla el englobamiento de aire en el chorro.

En este estudio, los dos parámetros son constantes, por eso ni la temperatura ni el combustible influyen en la penetración.

De este análisis de casos inertes se han obtenido unos resultados que se consideran normales dadas las circunstancias. Así el modelo físico se da por válido y se puede continuar con los casos reactivos.

5.3 Casos reactivos

A continuación, se muestran los resultados de los casos reactivos. Para los parámetros de penetración de la punta del spray, longitud líquida, retraso del encendido y distancia de despegue se dispone de datos experimentales para el conjunto de casos reactivos simulados por lo que se podrán comparar y determinar el ajuste del modelo.

En otros parámetros estudiados como el campo temperaturas o la presencia de determinadas especies químicas relevantes se comparará con resultados de una simulación de dodecano con el mismo modelo que el utilizado en los OME_x y condiciones de Spray A.

5.3.1 Penetración de la punta del spray y longitud líquida

En este apartado se presentan las penetraciones de spray y longitudes líquidas para cada caso simulado acompañado de su homólogo experimental. Como en los casos experimentales había una falta de resolución en comparación con los simulados, en ocasiones se ha sustituido la serie de la longitud líquida experimental por una línea horizontal con su valor medio. Esto es posible porque el valor de la longitud líquida interesa una vez se haya estabilizado. Con el objetivo de mantener un orden que facilite la interpretación de los resultados, las series de datos experimentales se representan en color negro.

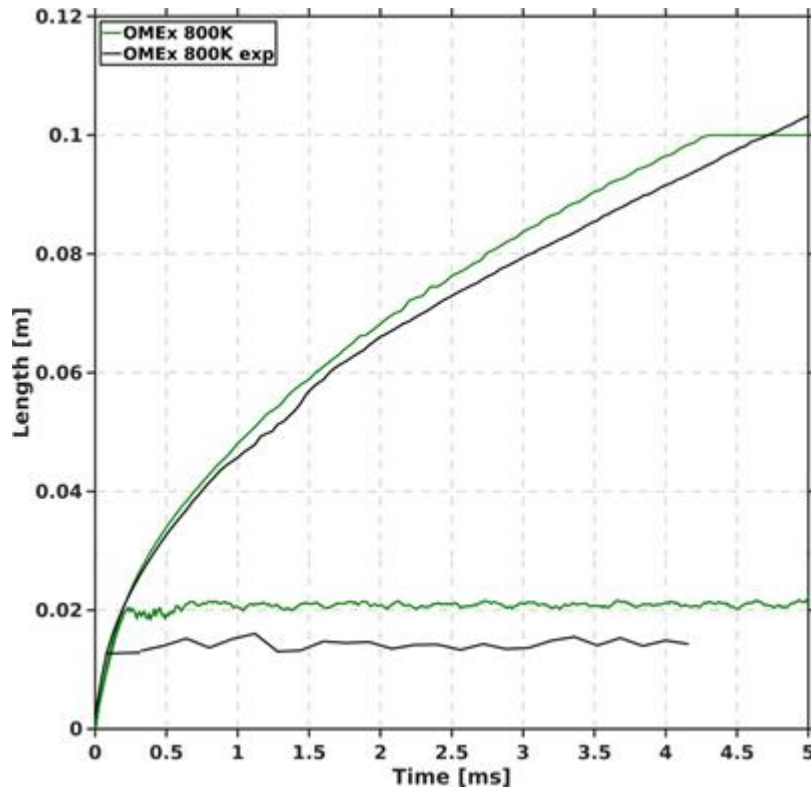


Figura 8. Penetración del spray y longitud líquida para OMEx 800K de modelo y experimental

En las figuras: Figura 8, Figura 9, Figura 10 y Figura 11 se muestran las evoluciones de las longitudes líquidas y penetraciones del spray para los casos reactivos mostrados en la Tabla 4. En general, el parámetro de la longitud líquida simulada no se ajusta al experimental, quedando el valor simulado por encima del experimental en todos los casos. La serie de datos de la penetración del spray se ajusta mejor pero también son visibles ciertas discrepancias en los resultados.

Para el caso a 800K, Figura 8, se han obtenido las mayores discrepancias entre los resultados de modelo y los experimentales. El parámetro de la longitud líquida media experimental se estabiliza en 0.014m y para el simulado en 0.021m. Lo que supone una diferencia de en torno al 50%. También para el parámetro de la penetración del spray se observan las mayores discrepancias. Si bien en los primeros instantes el ajuste es satisfactorio, a partir de 1ms los datos experimentales recogen un avance de la penetración más lento de lo que predice el modelo.

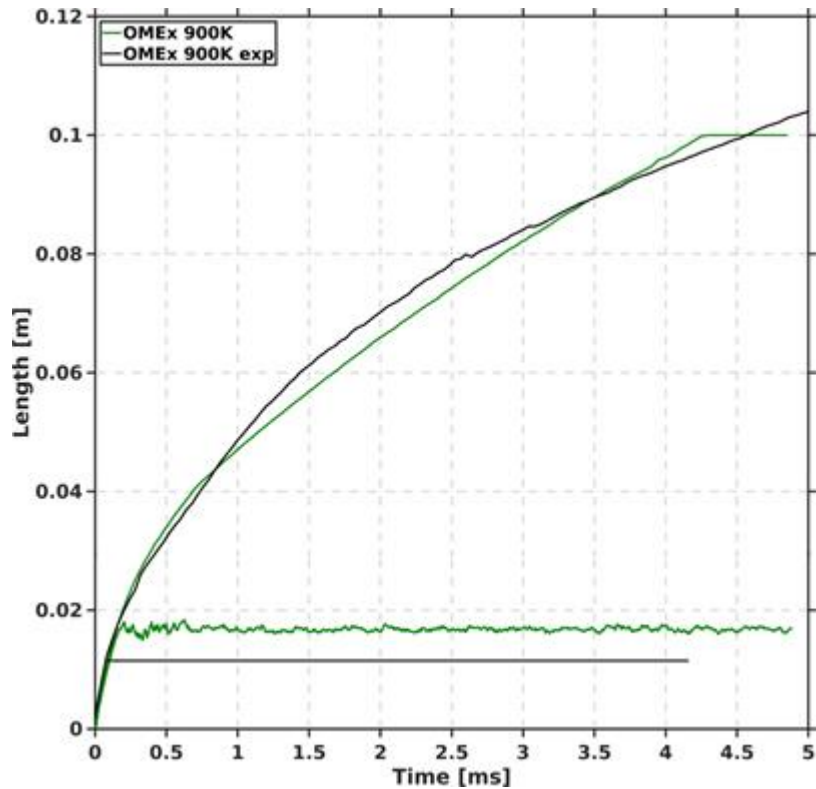


Figura 9. Penetración del spray y longitud líquida OMEx a 900K reactivo simulado y experimental

Para el caso a 900K, Figura 9, el modelo predice una estabilización de la longitud líquida a 0.0167m mientras que los datos experimentales dan un valor medio de 0.0115m. Aquí la diferencia entre resultados también es muy grande ya que el valor de modelo es un 45% mayor que el valor experimental. Igual en el caso de 800K, la penetración del spray se ajusta correctamente hasta el entorno de 1ms. A partir de aquí se da un intervalo en el que el experimental da un avance más rápido entre el instante 1ms y 2.5ms. Después, mientras que la serie de modelo mantiene su velocidad constante, la serie experimental se ralentiza. Por lo que en torno al instante 3.7ms la penetración del modelo supera a la experimental.

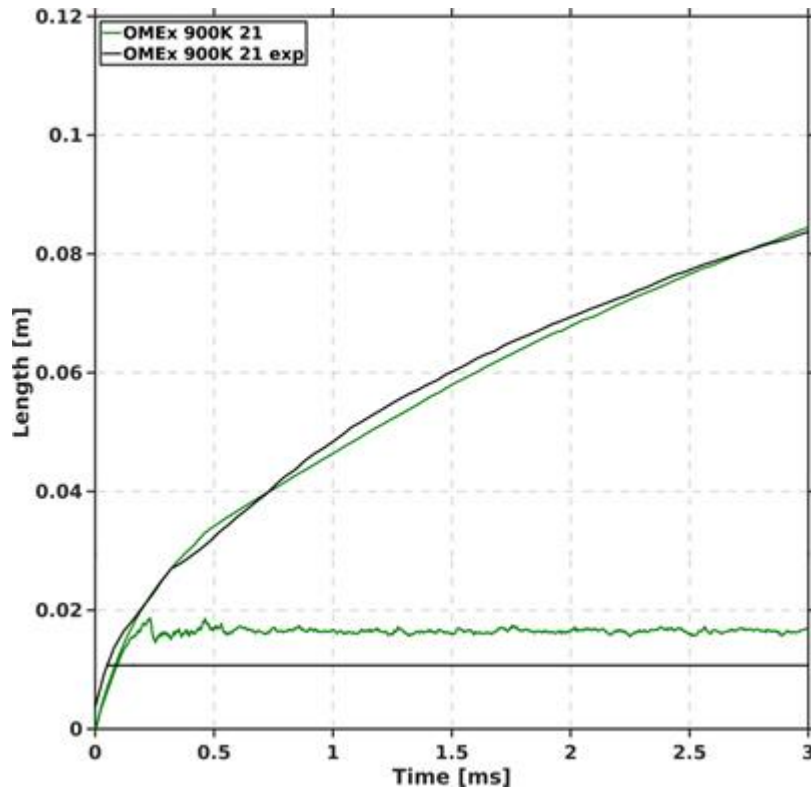


Figura 10. Penetración del spray y longitud líquida OMEx a 900K 21% oxígeno simulado y experimental

En la variante de 900K a 21% de fracción molar de oxígeno en el ambiente se muestran los datos esta vez hasta 3ms. La longitud líquida modelada se estabiliza a 0.0165m y la experimental a 0.0107m, siendo valores muy cercanos al caso anterior. Las tendencias en la penetración del spray son semejantes al caso de 900K con 15% como era de esperar.

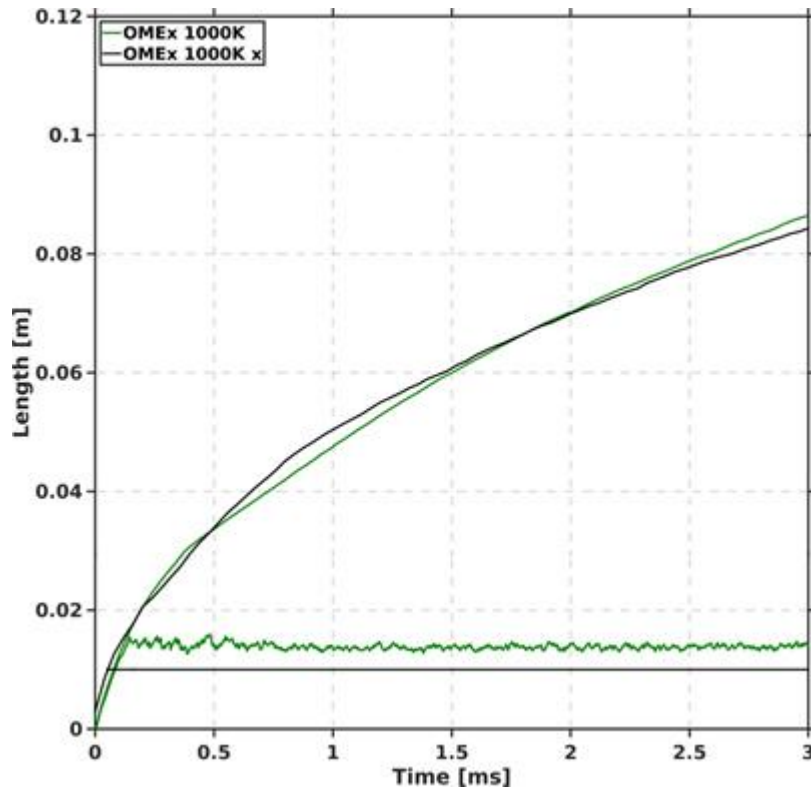


Figura 11. Penetración del spray y longitud líquida OME_x a 1000K reactivo simulado y experimental

Por último, el caso a 1000K, Figura 11. Debido al aumento de la temperatura el líquido evaporará antes y por tanto la longitud líquida decrecerá respecto a los casos anteriores. Se sigue observando la sobreestimación del modelo respecto al caso experimental para la longitud líquida. Ahora el modelo se queda estabilizado a 0.0140m mientras que el valor medio de los datos experimentales vale 0.010m. Aquí para la penetración del spray se ven tres fases. Una primera cercana al inyector en la que se puede hablar de un acople entre las series. A continuación, el modelo prevé una desaceleración más acusada que el caso experimental. Finalmente, a partir de 1.5ms el experimental tiene un avance ligeramente más lento que el modelo.

En resumen, en cuanto a la longitud líquida el modelo y las series experimentales muestran una diferencia tal que el modelo es alrededor de un 45% mayor que los datos experimentales para todos los casos de estudio. Para la penetración del spray, aunque se observen intervalos con desacople entre curvas, en general la adaptación es correcta.

5.3.2 Retraso del encendido y distancia de despegue

Los siguientes parámetros de interés para caracterizar la llama son el retraso del encendido y la distancia de despegue, que ya fueron definidos en el apartado 4.4. También el modo de cálculo seguido en este trabajo fue desarrollado en el apartado 4.4. A continuación, se revisarán

los resultados simulados junto con los experimentales. En este apartado también se añaden los resultados de dodecano.

En la Figura 14 se muestra la distancia de despegue media en metros y en la Figura 12 el retraso del encendido medido en milisegundos. La importancia del estudio de estos parámetros recae en que son fundamentales para entender cuán favorable ha sido el proceso previo de mezcla y qué facilidad tiene dicha mezcla para auto encenderse. Estos parámetros están relacionados de manera que retrasos del encendido cortos llevan a distancias de despegue cortas (Lyle M. Pickett, 2005).

Para ambos parámetros se presentan las mismas series de datos. La ausencia de la serie de OME_x a 800K se debe a que tal y como se definen estos parámetros el modelo predice que en estas condiciones no se dará el autoencendido. Sin embargo, experimentalmente sí se produjo el encendido. De las series presentes se confirma la relación entre el retraso del encendido y el despegue de la llama.

Empezando por el retraso del encendido, Figura 12, las discrepancias entre los resultados simulados y los experimentales descienden de manera acusada. Para este parámetro las diferencias entre series experimentales y modeladas son en torno al 15%. Por tanto, el modelado del retraso el encendido es el que más se ajusta a los datos experimentales.

Sin embargo, para los casos de 900K el modelo sigue estimando un descenso notable en el tiempo de retraso cuando aumenta la cantidad de oxígeno mientras que los datos experimentales no. Esto hace que en el caso de 900K a 21% de oxígeno el tiempo de retraso simulado sea menor al experimental. También el caso simulado a 1000K queda por debajo del experimental. Continuando con la serie de 900K a 15% de oxígeno, si se compara con la de dodecano, de la que sólo difiere en el combustible modelado, el tiempo de retraso queda por encima. Este hecho se podría esperar a priori ya que el número de cetano del dodecano es mayor y su entalpía de evaporación menor, como se muestra en la Tabla 1.

La ausencia del tiempo de retraso para el caso a 800K se debe a que tal y como se define el retraso del encendido en 4.4, éste no se produce. En un principio, se podría pensar que la falta de resultados para el caso simulado de 800K podría darse por un error en el postprocesado. Sin embargo, el análisis de la evolución de las temperaturas máximas, como ahora se verá, ha llevado a la conclusión de que no se da el autoencendido.

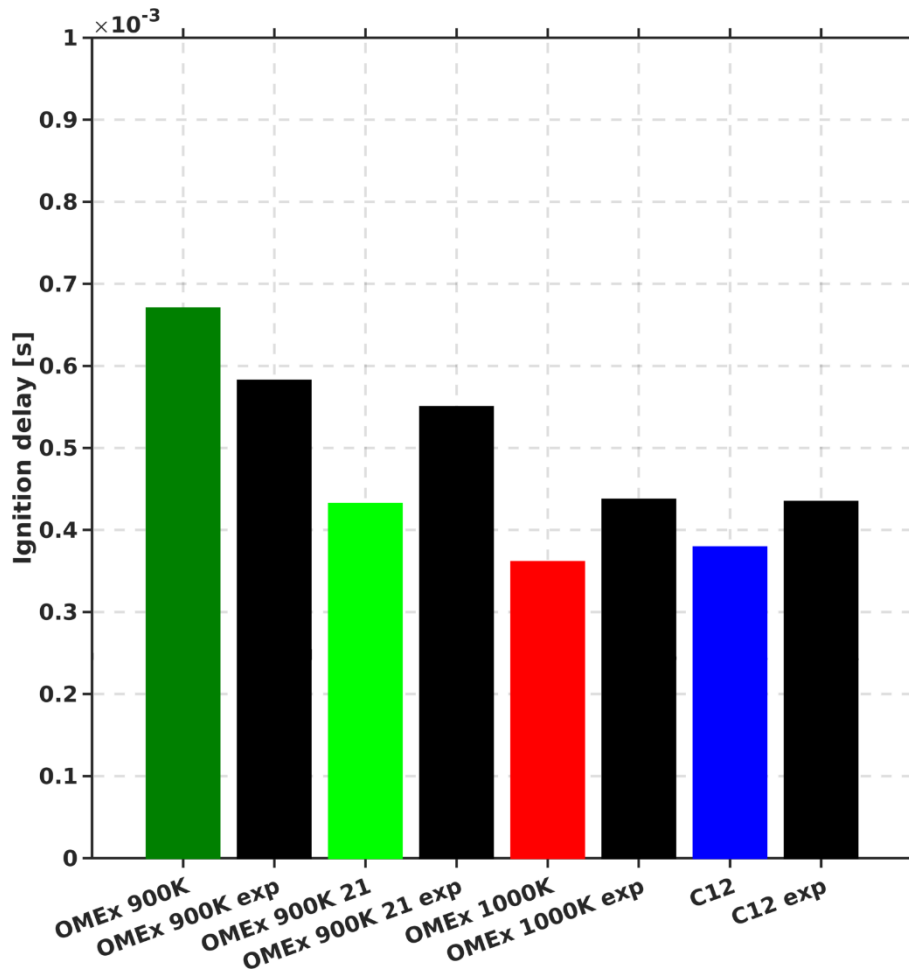


Figura 12. Retraso del encendido para los casos de OMEx simulados, experimentales y para el dodecano simulado y experimental

En la Figura 12 también se han representado los resultados experimentales y de modelo para el dodecano. De esta forma se refuerza la idea de que el retraso del encendido modelado ofrece unos resultados que se asemejan más a los experimentales.

La Figura 13 representa las temperaturas máximas de cámara para el OMEx a las distintas temperaturas ambiente objeto de estudio de este trabajo. Se añade después del retraso al encendido por su estrecha relación. También se añade la serie de dodecano en condiciones de Spray A a efectos comparativos. El símbolo circular sobre las series marca el retraso del encendido.

Aquí se evidencia que para una temperatura ambiente de 800K, el modelo predice que la mezcla aire combustible no se auto encenderá ya que no se produce el brusco gradiente de temperaturas que sí se da para 900K y 1000K. Es en base a este brusco gradiente de temperaturas que se define el retraso del encendido.

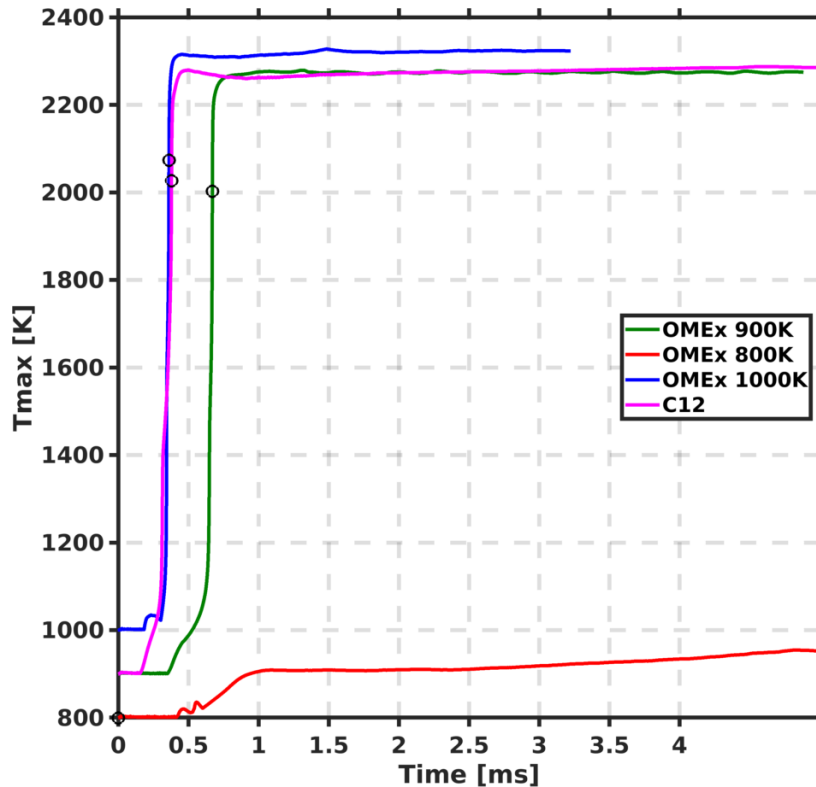


Figura 13. Temperatura máxima en la cámara para las series simuladas de OMEx a distintas temperaturas ambiente y la serie de dodecano

Sin embargo, para el caso de 800K, a pesar de no darse las condiciones para obtener mediante el post procesado de resultados un retraso del encendido, sí se observa un aumento de la temperatura máxima durante el tiempo de simulación, ya que se alcanzan los 950K. Este fenómeno se correspondería con el de la llama fría. Durante la fase del autoencendido se da una primera etapa del autoencendido a baja temperatura, donde se dan roturas de cadena junto con la presencia de determinados radicales como el CH. Como consecuencia se mide una radiación de baja intensidad, denominada quimiluminiscencia. La fuente de esta quimiluminiscencia durante esta etapa del autoencendido se debe al formaldehído (CH_2O) y al radical CH (Dec J. E., 1998). Así, el modelo predice en el caso de 800K se prolongará la fase de reactividad baja, sin alcanzar la transición al encendido a alta temperatura. Más adelante se verá la presencia de formaldehído en este caso.

Por último, queda la distancia de despegue, Figura 14. El caso a 900K es el que peor resultado ofrece en comparación con su homólogo experimental ya que la distancia de despegue simulada, 0.0378m, es cerca del doble de la experimental, 0.0192m. Para el de 900K con 21% de oxígeno y el de 1000K los valores se acercan un poco más a sus respectivos experimentales pero el desajuste sigue siendo muy llamativo.

Centrando la atención en los dos casos de 900K, mientras que experimentalmente el aumento de la cantidad de oxígeno tiene un efecto muy sutil en la reducción de la distancia de despegue, para la simulación tiene un efecto notable.

Para acabar, el último par de series representadas son las correspondientes al dodecano, que sirven de referencia. Teniendo en cuenta que la información sobre las propiedades termodinámicas del dodecano está más contrastada por ser el combustible tipo Diesel de referencia en investigación, se puede asumir que la diferencia entre la serie experimental y la de modelo se debe esencialmente al propio modelo y no a los datos de partida que toma el modelo. Con los resultados presentes se puede decir que, por defecto, el modelo SAGE con condiciones Well-Mixed sobreestima el parámetro de la distancia de despegue.

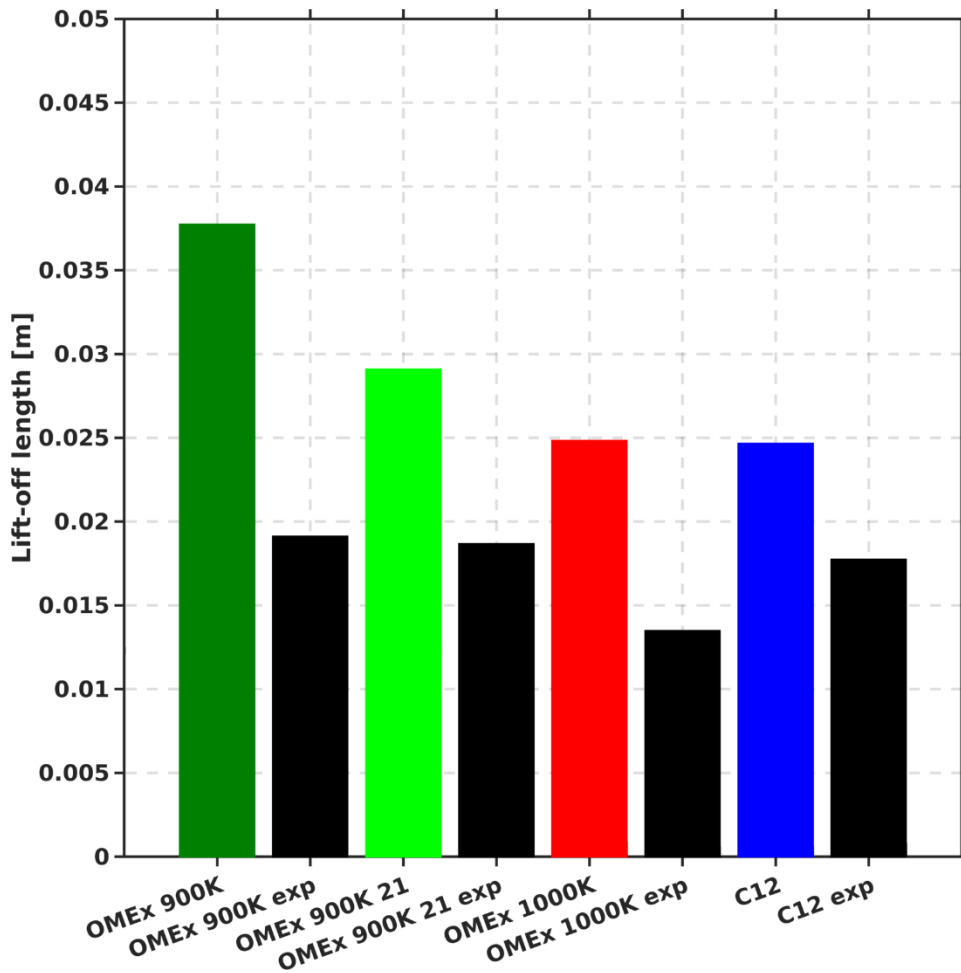


Figura 14. Distancia de despegue para los casos de OMEx simulados, experimentales y para el dodecano

5.3.3 Mapas de temperatura

En Figura 15, Figura 17, Figura 18 se presentan los mapas de temperaturas para los casos reactivos de OMEx en las diferentes condiciones que este trabajo abarca. También se muestra el mapa de temperaturas para el dodecano, Figura 16, como referencia. Se ofrece el mapa de

temperaturas en distintos instantes para poder valorar la evolución de la llama. Los tres instantes escogidos por caso se muestran en la leyenda y corresponden con el momento de retraso del encendido el primero, seguido de un instante de transición y por último un instante con la llama completamente estabilizada.

Además del mapa de colores para diferenciar la distribución de temperaturas en la cámara, en las figuras se ha representado un trazo negro continuo que marca la frontera radial del chorro a partir de la fracción de mezcla, definida como la zona donde se alcanza el 1% del valor en el eje. El trazo discontinuo negro reproduce la superficie en la que se dan las condiciones estequiométricas, conocida como radio estequiométrico, en el cual se debería estabilizar la llama de difusión. También se incluye la distancia de despegue cuyas coordenadas se representan con un asterisco negro.

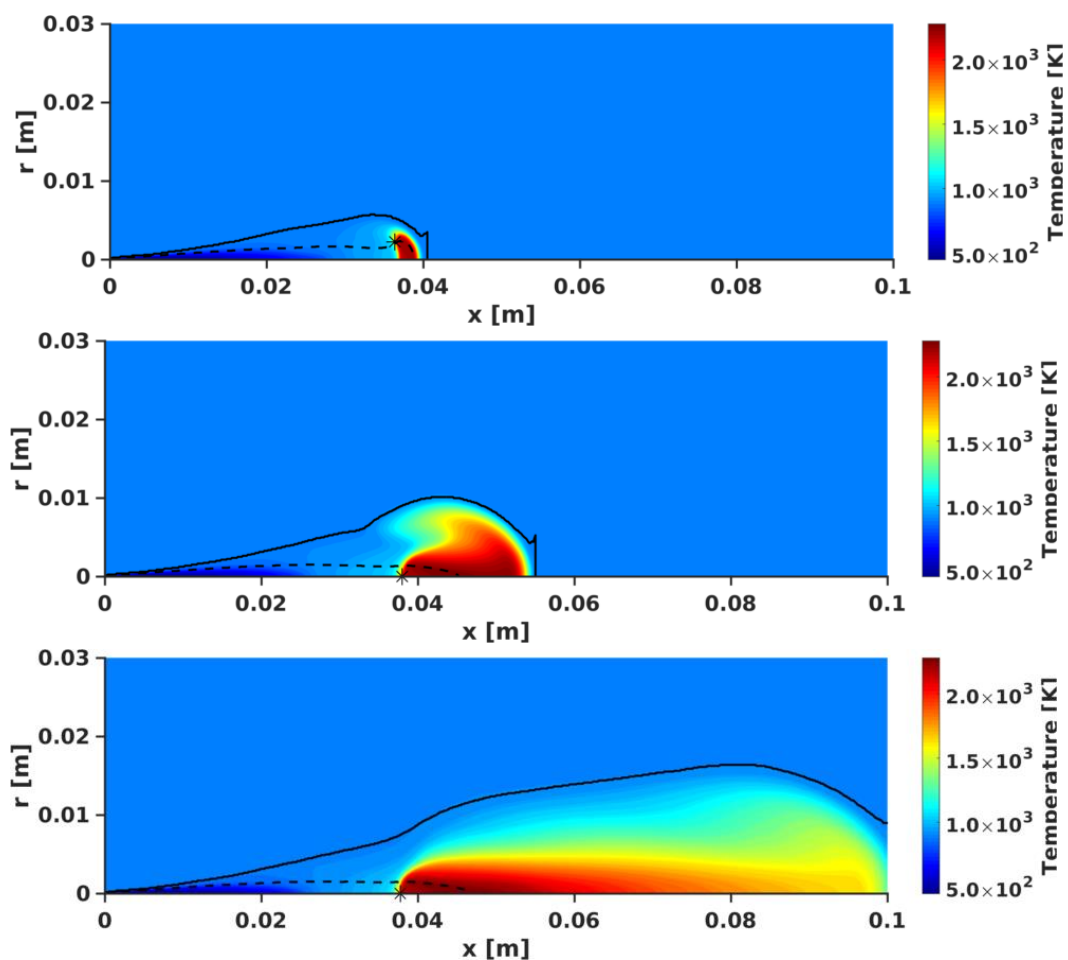


Figura 15. Campo de temperaturas para OME_x 900K a 0.7ms, 1.4ms y 4.5ms

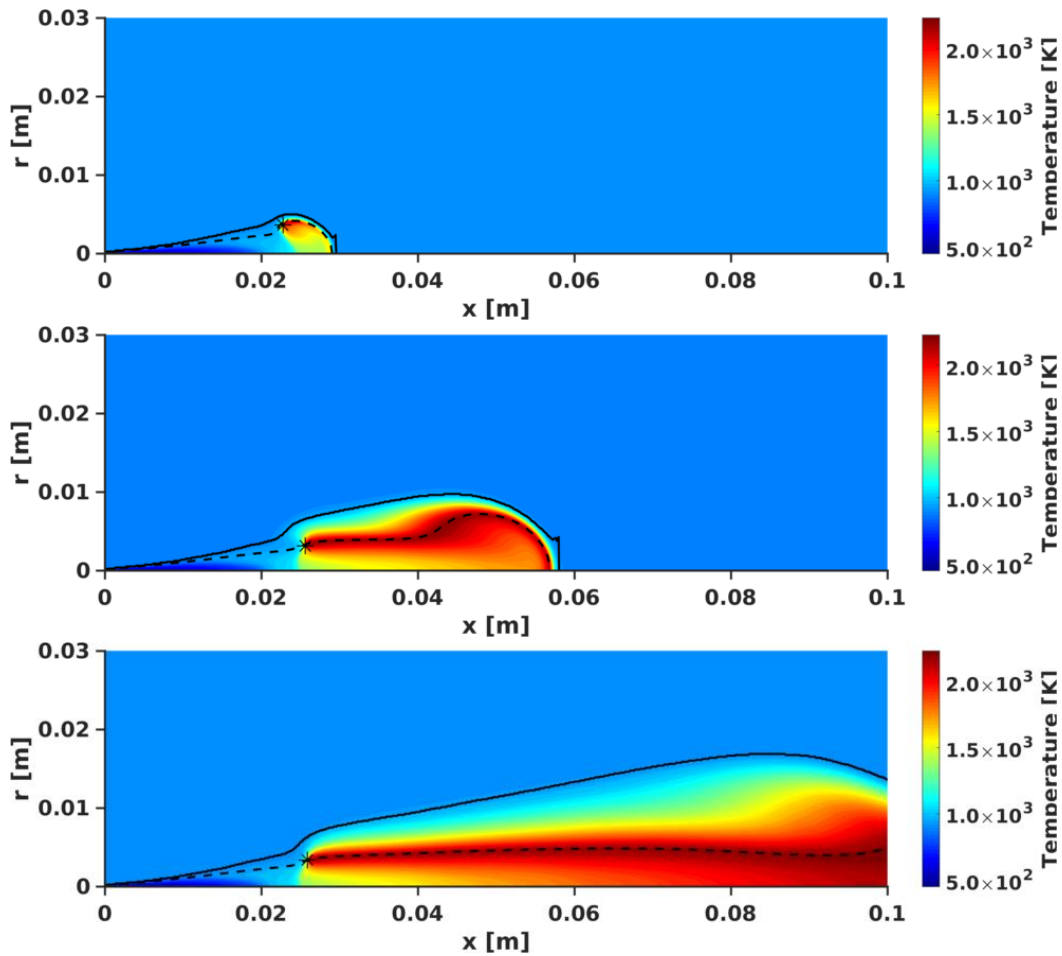


Figura 16. Campo de temperaturas dodecano 0.39ms, 1.4ms y 4.5ms

Un punto claro que caracteriza al caso de OMEx 900K, Figura 15, respecto al del dodecano, Figura 16, es que la zona con dosado estequiométrico (línea discontinua) se da mayoritariamente aguas abajo de la zona de combustión. Aunque en ambos casos el radio estequiométrico presenta una forma alargada, para el OMEx es mucho más estrecho ya que la presencia de oxígeno en el combustible hace que se requiera menos distancia para conseguir el oxígeno necesario para quemarlo. Si se observa la distribución de las temperaturas, para el OMEx 900K la zona de temperaturas máximas ocupa menor espacio que para el dodecano y también se sitúa más cerca del LoL. En otras palabras, se produce una liberación de calor más concentrada. Para el dodecano sin embargo la presencia de altas temperaturas es más alargada y coincide con el radio estequiométrico, lo que es un claro indicativo de una amplia zona de combustión por difusión.

El siguiente caso para analizar es el de OMEx a 800K, Figura 17. Como ya se ha comentado más arriba, para esta temperatura ambiental, la simulación prevé que no habrá encendido. Es por esto por lo que para los instantes que se muestran no se superan los 950K, incluso a 4.5ms. Sí se da una cierta reactividad de baja temperatura pues sí hay aumento de la temperatura respecto de la temperatura ambiente.

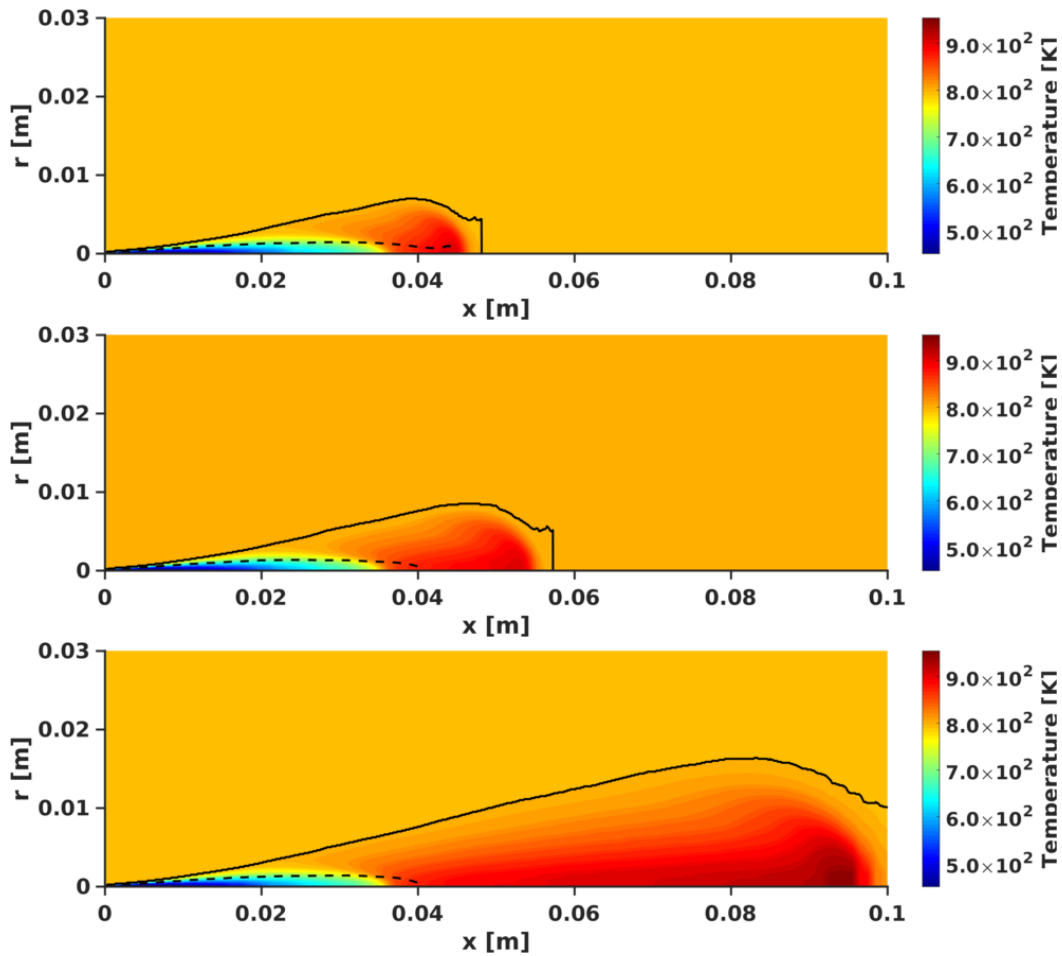
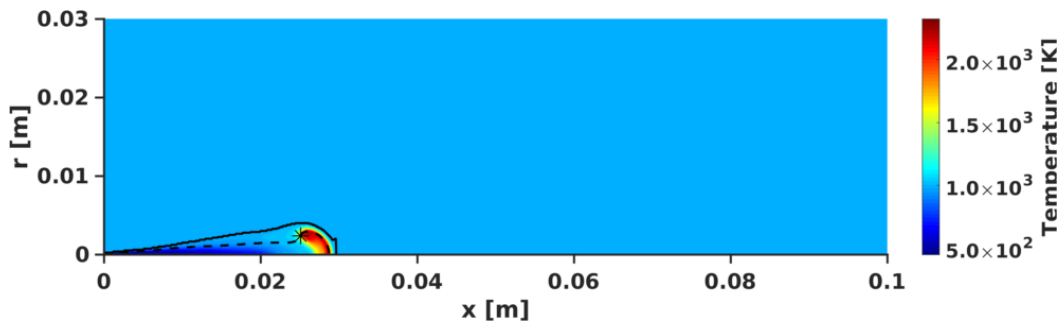


Figura 17. Campo de temperaturas para OME_x a 800K a 1ms, 1.4ms y 4.5ms

Si se aumenta la temperatura del ambiente a 1000K, Figura 18, la estructura de la llama varía notablemente con respecto a la llama con temperatura ambiente de 900K. En este caso la distribución de las zonas a alta temperatura aumenta su superficie

Debido al aumento de la temperatura ambiente respecto de las condiciones base del Spray A, el retraso del autoencendido se reduce, lo que se traduce en un despegue de la llama más corto. Una vez la llama se estabiliza, se da una estructura de llama por difusión alrededor del radio estequiométrico, que esta vez es más largo que en el caso de OME_x a 900K. Así, para una temperatura ambiente de 1000K, la estructura de llama de OME_x guarda más parecido con la estructura típica de llama Diesel representada en este caso por el dodecano como se vio más arriba.



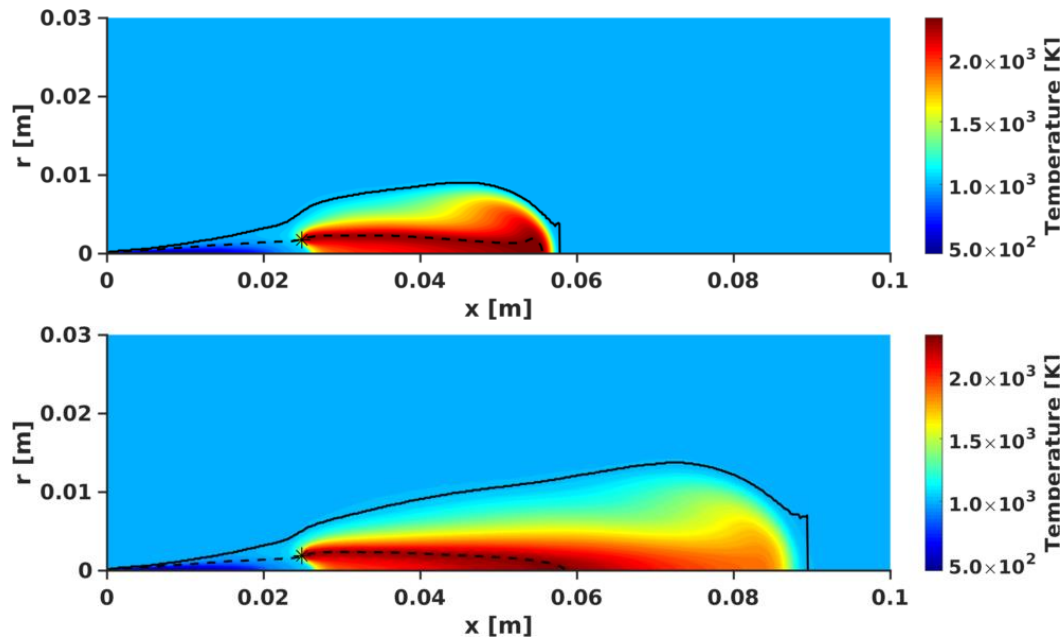
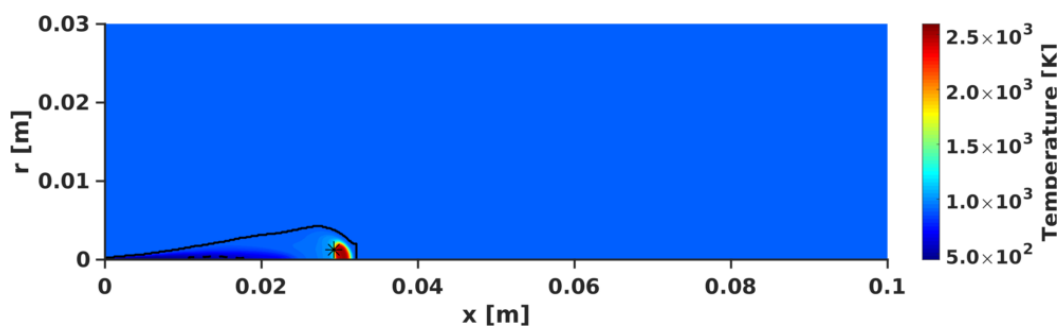


Figura 18. Campo de temperaturas para OMEx a 1000K en los instantes 0.37ms, 1.4ms y 3.2ms

Si en cambio se aumenta a 21% la fracción molar de oxígeno en el aire y se mantiene la temperatura del ambiente en 900K, Figura 19, el volumen encerrado bajo el radio estequiométrico disminuye enormemente, siendo el más pequeño de todos los casos presentes. Ello es debido a que, al aumentar la cantidad de oxígeno en el aire, el combustible necesita recorrer una distancia más corta para llegar a mezclarse en condiciones estequiométricas. El frente estequiométrico se da enteramente en la zona inerte del chorro temperatura y la llama se localiza desplazada aguas abajo del radio estequiométrico con un despegue de la llama situado en el eje. Este caso es muy interesante, porque implicaría que la llama está totalmente premezclada, quemando con un dosado pobre. Incluso teniendo en cuenta el valor de distancia de despegue experimental en torno a 19 mm, la mayor parte de la llama quemaría en dichas condiciones pobres.

En el espacio entre la penetración máxima del radio estequiométrico y el despegue de la llama aumentará la cantidad de aire en la mezcla por lo que la llama tendrá un dosado pobre. Al disminuir la cantidad de inertes en el aire ambiente, principalmente nitrógeno, aumenta la temperatura de la llama.



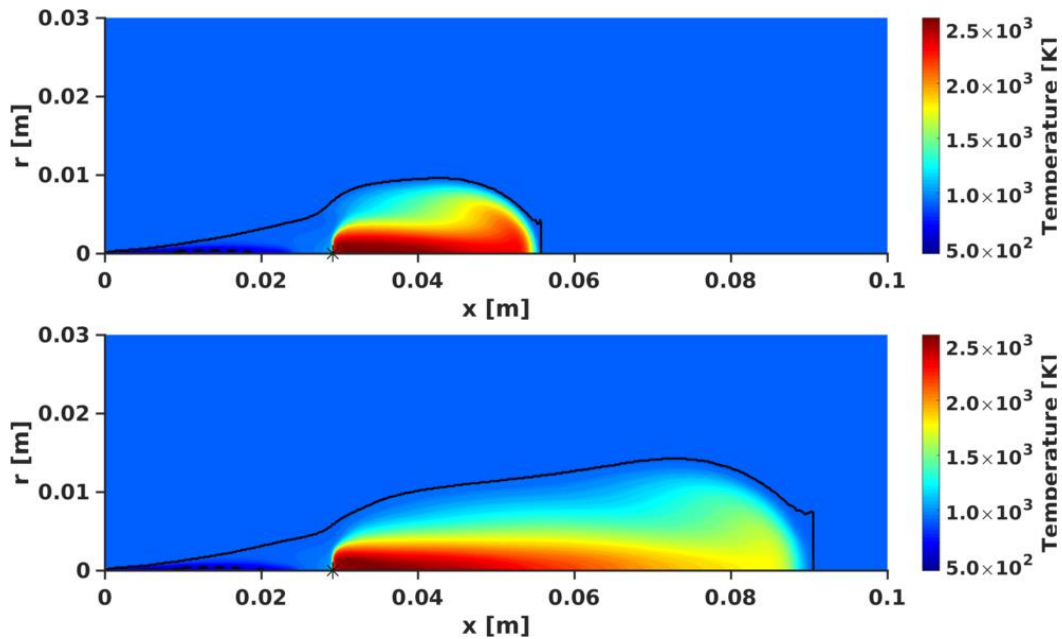


Figura 19. Campo de temperaturas para OMEx 900K con 21% de oxígeno en el instante 0.44ms, 1.4ms, 3.41ms

5.3.4 Distribución de especies químicas relevantes

En este apartado se llevará a cabo un breve análisis de la distribución de las especies relevantes para este trabajo. Se trata del formaldehído (CH_2O) y el acetileno (C_2H_2). La primera revela reacciones a baja temperatura y la segunda por ser una precursora del hollín como ya se vió en 2.6.

El CH_2O se ha escogido porque su presencia se da en las fases de la combustión de baja temperatura. En las combustiones en las que se da un retraso del encendido, tal y como ha sido definido previamente, las mayores concentraciones de CH_2O se verán antes de la distancia de despegue. Y, desaparecerá a partir de ésta. Mientras que, en las llamas frías, la presencia de CH_2O será global.

Las figuras Figura 20 y Figura 21 muestran la distribución de la fracción másica de formaldehído para el OMEx a 800K y 900K respectivamente en el instante 4.5ms. La distribución del CH_2O es completamente opuesta. Esto se debe a que en el caso de 800K la autoignición no avanza hasta la última fase, sino que se queda en la fase de baja reactividad que se caracteriza por la presencia del CH_2O , como ya se adelantó en Figura 17..

La amplia superficie ocupada por el CH_2O en el caso de 800K delata la existencia de la llama fría, que alcanza su máximo de presencia en el extremo del radio estequiométrico, a unos 0.04m del inyector, y después se diluye aguas abajo del radio estequiométrico. Si se compara esta figura con la Figura 17 para el instante de 4.5ms, se observa que la zona de mayor presencia de formaldehído se da en un determinado rango de temperaturas, entre los 850K y 900K, que no coincide con la zona de mayor temperatura, a unos 950K. Es decir, el formaldehído se dará para

un rango determinado de temperaturas bajas, y con el proceso de englobamiento de aire esta especie desaparecerá.

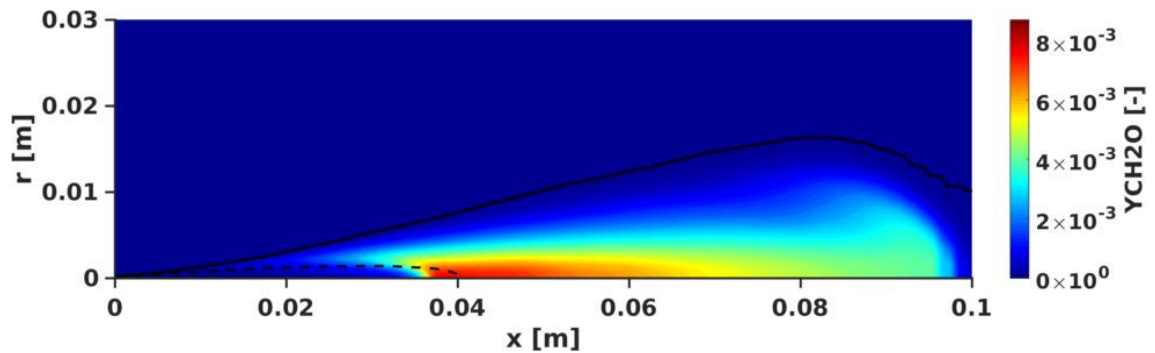


Figura 20. Distribución de la fracción molar de formaldehído en OME_x 800K a 4.5ms

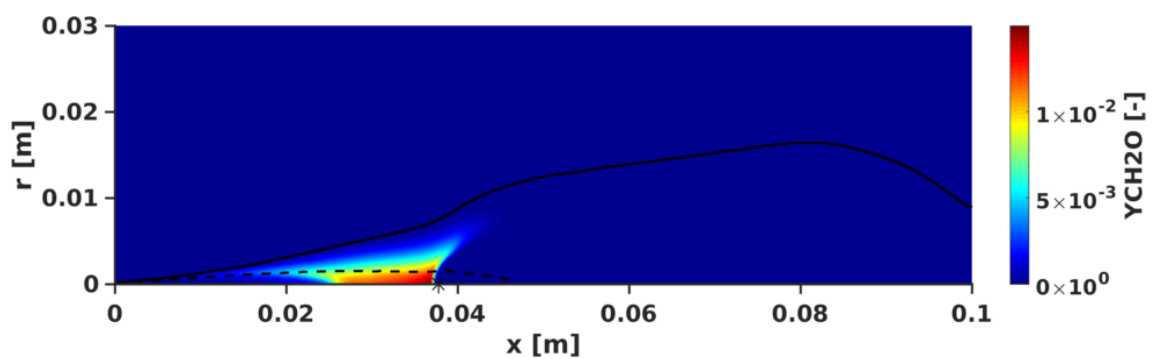


Figura 21. Distribución de la fracción molar de formaldehído en OME_x 900K a 4.5ms

La Figura 22 y Figura 23 muestran la distribución de acetileno para el caso simulado de OME_x reactivo a 900K y el caso de dodecano respectivamente. El instante mostrado es el 4.5ms por lo que la llama está sobradamente estabilizada. Como se indicó en el apartado 2.6 el acetileno es reconocido como un precursor del hollín.

Como representación de lo que les sucede a los combustibles fósiles en condiciones de motor de encendido por compresión, la llama de dodecano contiene una amplia zona de presencia del acetileno que como se puede ver en la Figura 19. estaría envuelta por la llama de difusión. Ello es indicativo de la propensión de este tipo de llama a la formación de hollín.

En cambio, para el OME_x, la presencia de acetileno es muy reducida y se sitúa en el punto de despegue de la llama adoptando una forma lenticular que precede a la zona de temperaturas máximas de la llama, Figura 15. Así pues, como ya se vió para el OME₁ en (Benajes, García-Oliver, Pastor, & De-León-Ceriani, 2020) se refuerza la adopción de los OME_n como sustitutos de los combustibles tipo Diesel por sus potencialmente mínimas emisiones de hollín.

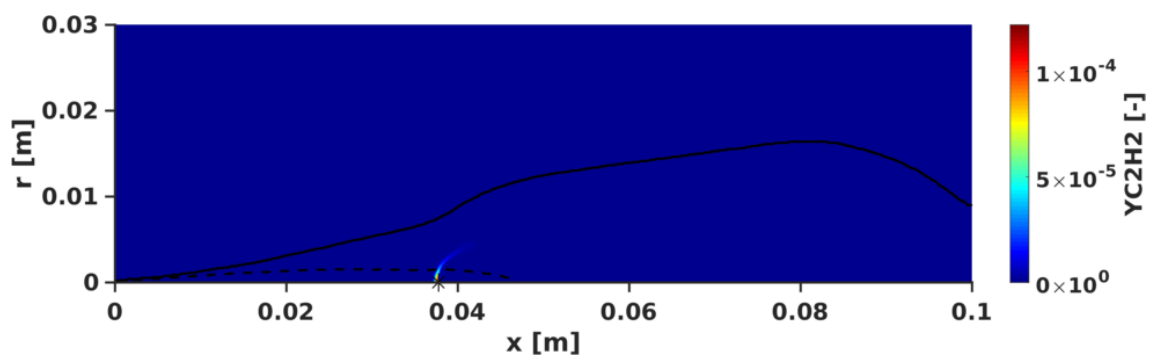


Figura 22. Distribución de la fracción molar de C2H2 en OMEx 900K a 4.5ms

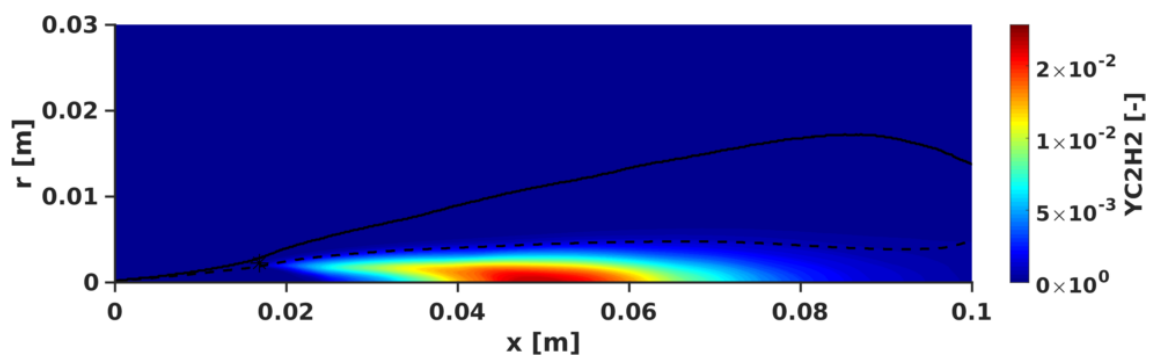


Figura 23. Distribución de la fracción molar de C2H2 en dodecano a 4.5ms

6. Conclusiones

En este trabajo se ha simulado mediante las técnicas de CFD la inyección de un chorro del combustible renovable OME_x bajo condiciones de operación típicas de un motor de encendido por compresión. Seguidamente se han obtenido los parámetros de interés para la caracterización de la llama: penetración del spray, longitud líquida, retraso del encendido y longitud de despegue de la llama. Para poder valorar estos resultados de modelo se han comparado los resultados con medidas experimentales del mismo combustible y bajo las mismas condiciones de operación. Además, para poner en valor determinados resultados del CFD también se han añadido los resultados del dodecano, un combustible de referencia tipo Diesel.

De los parámetros clave para la caracterización de la llama estudiados, la longitud líquida modelada tiene un valor en torno a un 45% mayor a la experimental para todos los casos. Por otro lado, la penetración del spray muestra un cierto acople entre las series experimentales y modeladas, especialmente en los primeros instantes. Por tanto, se podría decir que el modelo del spray es aceptable y las discrepancias en la longitud líquida podrían tener su origen en la escasez de datos disponibles sobre las propiedades termodinámicas de los OME_n.

También se dan ciertas discrepancias en el parámetro de la longitud de despegue de la llama, donde también quedan las series modeladas muy por encima de los valores experimentales. La serie con discrepancias más extremas, el caso de 900K, el modelado llega casi a doblar al valor experimental. Sin embargo, el parámetro de retraso del encendido, que va ligado al despegue de la llama, sí reporta unas diferencias asumibles entre valores modelados y experimentales.

En el caso de la distancia de despegue, es conocido del caso del dodecano que el modelo de combustión empleado tiende a sobrestimar la longitud de despegue. Todo ello a pesar de que los datos de partida sobre sus propiedades termodinámicas son más contrastados. Por tanto, las discrepancias en los resultados de los OME_x para la distancia de despegue también se deben, en menor parte, a los errores por defecto que reporta el modelo.

En cuanto a las diferencias entre los casos, se reflejan las tendencias que se podrían esperar al variar la temperatura y el contenido de oxígeno. Mayores temperaturas ambientales reducen la longitud líquida debido al aumento de la tasa de evaporación. Un aumento en el contenido de oxígeno en el ambiente aumenta la temperatura máxima debido a la reducción de inertes.

Como ya se ha apreciado en otros trabajos, los OME_n ofrecen un alto potencial de reducción de las emisiones de hollín en los motores de encendido por compresión. Así pues, se ha visto la casi nula presencia del acetileno, precursor del hollín, en el caso de OME_x a 900K cuando la llama ya estaba estabilizada, en comparación con el dodecano, que es el combustible tipo Diesel de referencia.

Puesto que estas técnicas de modelado ya han sido utilizadas por el CMT con unos resultados que se ajustan mejor al comportamiento experimental y, a que hay interés en seguir investigando en el campo de los OME_x como sustitutos de los combustibles fósiles, urge la necesidad de disponer de una mayor cantidad de datos disponibles sobre las propiedades

termodinámicas de los OME_x. Sólo de esta forma será posible obtener unos resultados de modelo más cercanos al comportamiento real.

7. BIBLIOGRAFÍA

- A. G. Gaydon, N. P. (20 de Diciembre de 1955). Spectra of Cool Flames and Pre-Ignition Glows. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, págs. 184-194.
- Aditya Kulkarni, E. J. (2020). A Force Field for Poly(oxymethylene) Dimethyl Ethers (OMEn). *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2517–2528.
- Anton Paar. (26 de 04 de 2021). *wiki.anton-paar.com*. Obtenido de <https://wiki.anton-paar.com/en/diesel-fuel/#:~:text=Viscosity%20is%20generally%20an%20important%20parameter%20for%20diesel,and%20the%20atomization%20of%20the%20fuel%20during%20injection>.
- Asociación Española de Normalización. (19 de 06 de 2021). *une.org*. Obtenido de <https://www.une.org/encuentra-tu-norma/busca-tu-norma/norma?c=N0058993>
- Aspentech. (13 de 10 de 2020). *aspentech*. Obtenido de <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspens-properties>
- B., E. (2008). *Handbook of fuels: energy sources for transportation*. Weinheim: Wiley-VCH.
- Benajes, J., García-Oliver, J. M., Pastor, J. M., & De-León-Ceriani, D. (2020). A computational study on OME1 spray combustion under ECN Spray A conditions. *ILASS-Asia*. Zhenjiang: CMT-Motores Térmicos.
- BOYD, R. H. (1961). Some Physical Properties of Polyoxymethylene Dimethyl Ethers. *JOURNAL OF POLYMER SCIENCE*, 133-141.
- Burger, J., Ströfer, E., & Hasse, H. (2013). Production process for diesel fuel components poly(oxymethylene) dimethyl ethers from methane-based products by hierarchical optimization with varying model depth. *Chemical Engineering Research and Design*, 2648-2662.
- Cai, L. J. (2020). Auto-ignition of oxymethylene ethers (OMEn, n = 2–4) as promising synthetic e-fuels from renewable electricity: shock tube experiments and automatic mechanism generation. *Fuel*, 264, 116711.
- Comission, E. (2011). *Energy Roadmap 2050*. Bruselas.
- Comité Europeo de la Estandarización. (4 de 10 de 2017). *une.org*. Obtenido de <https://www.une.org/encuentra-tu-norma/busca-tu-norma/norma?c=N0058993>
- CONVERGE CFD Software. (2021). *convergecf.com*. Obtenido de <https://convergecf.com>
- D. Connolly, B. M. (2014). A comparison between renewable transport fuels that can supplement or replace biofuels in a 100% renewable energy system. *Energy*, 110-125.
- Dec J. E., E. C. (1998). Chemiluminescence Imaging of Autoignition in a DI Diesel Engine. *SAE Paper 982685*.

- Dec, J. E. (24 de 2 de 1997). A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging. *SAE Technical Paper*.
- Engine Combustion Network. (18 de 4 de 2021). *Engine Combustion Network Website*. Obtenido de <https://ecn.sandia.gov/>
- Europea, W. O. (Diciembre de 2020). *europa.eu*. Obtenido de https://ec.europa.eu/clima/policies/strategies/2030_es
- European Automobile Manufacturers Association. (25 de 5 de 2021). *acea.be*. Obtenido de <https://www.acea.be/statistics/tag/category/average-vehicle-age#:~:text=The%20average%20age%20of%20light,old%20in%20the%20European%20Union.>
- Gruden, D. (2008). *Umweltschutz in der Automobilindustrie: motor, Kraftstoffe, recycling*. Wiesbaden: Springer.
- Heywood, J. B. (1988). *Internal Combustion Engine Fundamentals*. New York: McGraw-Hill.
- ICCT, T. I. (2012). *Global Transportation Energy and Climate ROADMAP*. Washington: International Council on Clean Transportation.
- International Energy Agency. (08 de 2020). *iea.org*. Obtenido de <https://www.iea.org/reports/key-world-energy-statistics-2020/final-consumption#abstract>
- International Energy Agency. (25 de 05 de 2021). *iea.org*. Obtenido de <https://www.iea.org/reports/global-ev-outlook-2020>
- Jääskeläinen, H. (s.f.).
- Jääskeläinen, H. (11 de 07 de 2021). *Diesel Spray Formation and Mixing*. Obtenido de https://dieselnet.com/tech/diesel_combustion_spray.php
- Jialin Liu, H. W. (1 de Agosto de 2016). Effects of diesel/PODE (polyoxymethylene dimethyl ethers) blends on combustion and emission characteristics in a heavy duty diesel engine. *FUEL*, págs. 206-216.
- Jose V. Pastor, J. M.-O.-T. (2020). ONE-DIMENSIONAL DIESEL SPRAY MODELING OF MULTICOMPONENT FUELS. *Atomization and Sprays*, 485-517.
- L., S. (2014). Wechselwirkungen zwischen Kraftstoffkomponenten in biodieselbasierten Mischkraftstoffen unter besonderer Berücksichtigung der Alterungsproducte von Fettsäuremethylestern Dissertation. TU Braunschweig.
- Ludger Lautenschütz, D. O. (1 de Junio de 2016). Physico-chemical properties and fuel characteristics of oxymethylene dialkyl ethers. *FUEL*, págs. 129-137.
- Ludger Lautenschütz, D. O. (2017). Physico-chemical properties and fuel characteristics of oxymethylene dialkyl ethers. *Fuel*, 129-137.
- Lyle M. Pickett, D. L. (2005). Relationship Between Ignition Processes and the Lift-Off Length of Diesel Fuel Jets. *Journal of Engines*, págs. 1714-1731.

- Martin Härtl, P. S. (18 de Marzo de 2015). Oxygenate screening on a heavy-duty diesel engine and emission characteristics of highly oxygenated oxymethylene ether fuel OME1. *FUEL*, págs. 328-335.
- Martínez, S. (2003). *Desarrollo de una instalación experimental para el estudio de chorros diesel evaporativos en atmósfera inerte y reactiva*. Valencia: Tesis Doctoral, Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad Politécnica de Valencia.
- National Library of Medicine. (19 de 06 de 2021). *PubChem*. Obtenido de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Dodecane#section=MeSH-Entry-Terms>
- Niklas Schmitz, J. B. (2016). From methanol to the oxygenated diesel fuel poly(oxymethylene) dimethyl ether: An assessment of the production costs. *Fuel*, 67-72.
- P. Boggavarapu, R. V. (13 de 4 de 2013). A Review on Atomization and Sprays of Biofuels for IC Engine Applications. *International journal of spray and combustion dynamics*, págs. 85-121.
- P. K. Senecal, E. P. (2003). Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flam Lift-off Length using CFD and Parallel Detailed Chemistry. *SAE Technical Paper*, 1331-1351.
- Pan, J., Wu, J., & Liu, Z. (2006). Vapor pressure of dimethoxymethane and 1, 1, 1, 3, 3-pentafluoropropane. *Journal of Chemical Engineering Data*, 186-189.
- Pastor, J. V., García-Oliver, J. M., Micó, C., García-Carrero, A., & Gómez, A. (7 de Agosto de 2020). Experimental Study of the Effect of Hydrotreated Vegetal Oil and Oxymethylene Ethers on Main Spray and Combustion Characteristics under Engine Combustion Network Spray A Conditions. *Applied Sciences*.
- Patrick F. Flynn, R. P. (1999). Diesel Combustion: An Integrated View Combining Laser Diagnostics, Chemical Kinetics, And Empirical Validation. *International Congress and Exposition*. Detroit, Michigan: SAE TECHNICAL PAPER SERIES.
- Perry RH, G. D. (2008). *Perry's chemical engineers handbook. 8th Edition*. New York: McGraw-Hill.
- Scott Skeen, J. M. (14 de 4 de 2015). Visualization of Ignition Processes in High-Pressure Sprays with Multiple . *SAE International Journal of Engines*, págs. 696-715.
- U.S. Department of Commerce. (5 de 10 de 2020). *National Institute of Standards and Technology*. Obtenido de <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
- Universidad Politécnica de València. (16 de 6 de 2021). *Clúster de Cálculo: Rigel*. Obtenido de <https://wiki.upv.es/confluence/pages/viewpage.action?pageId=263586212>
- Volvo Trucks. (25 de 05 de 2021). *volvotrucks.com*. Obtenido de <https://www.volvotrucks.com/en-en/trucks/trucks/volvo-fh/volvo-fh-electric.html>
- W.T., L. (1963). Study of Burning Rate and Nature of Combustion in Diesel. *9th Symposium (International) on Combustion*, (págs. 1069-1082).

Wang, X., Pan, J., Wu, J., & Liu, Z. (2006). Surface tension of dimethoxymethane and methyl tert-butyl ether. *Journal of Chemical Engineering Data*, 1394-1397.

DOCUMENTO II. PRESUPUESTO

1. Precios unitarios

MANO DE OBRA				
CÓDIGO	UNIDADES	DESCRIPCIÓN	PRECIO (€)	COSTE UNITARIO (€/h)
MO.00	h	Servicios de ingeniería y tutoría prestados por tutor y personal del CMT. Se obtienen de acuerdo con la categoría profesional 1 según el régimen general de la Seguridad Social	4.769,36	29,8
MO.01	h	Servicios de ingeniería ofrecidos por estudiante de Máster. Se obtienen de acuerdo con la categoría profesional 1 según el régimen general de la Seguridad Social, aplicando la base mínima.	1.913,75	11,9

EQUIPOS INFORMÁTICOS Y LICENCIAS					
CÓDIGO	UNIDADES	DESCRIPCIÓN	AMORTIZACIÓN (años)	PRECIO (€)	COSTE UNITARIO(€/h)
EI.00	h	Ordenador personal	6	700	0,066
EI.01	h	Ordenador CMT	4	8.000	0,228
EI.02	h	Clúster RIGEL	5	60.000	1,369
EI.03	mes	Licencia Converge	1	50.000	208,33
EI.04	h	Licencia Matlab	1	1.000	0,114

*Teniendo el año de amortización para el ordenador personal una duración de 220 días hábiles. Para EI.01, EI.02 y EI.04 se utilizan durante el total de horas de un año ya que se considera que están en constante funcionamiento. El coste unitario de EI.03 se calcula como el 5% del coste de la licencia anual de Converge entre doce.

Considerando un coste medio de la electricidad de 0.17€/kWh

CONSUMO ELECTRICIDAD				
CÓDIGO	UNIDADES	DESCRIPCIÓN	POTENCIA (W)	COSTE UNITARIO (€/h)
CE.00	h	Potencia consumida por ordenador personal	60	0,102
CE.01	h	Potencia consumida por ordenador CMT	400	0,68
CE.02	h	Potencia consumida por el Clúster Rigel asumiendo 130 procesadores a 60W	7.800	13,26

2. Costes de las fases del proyecto

BÚSQUEDA INICIAL DE INFORMACIÓN				
CÓDIGO	UNIDADES	CANTIDAD	COSTE UNITARIO (€/h)	IMPORTE (€)
MO.00	h	20	29,8	596
MO.01	h	60	11,9	714
CE.00	h	80	0,102	0,46
EI.00	h	80	0,066	5,30

PREPARACIÓN DE CASOS				
CÓDIGO	UNIDADES	CANTIDAD	COSTE UNITARIO (€/h)	IMPORTE (€)
MO.00	h	15	29,8	447
MO.01	h	40	11,9	476
CE.00	h	55	0,102	5,61
EI.00	h	55	0,066	3,64

LANZAMIENTO DE CASOS				
CÓDIGO	UNIDADES	CANTIDAD	COSTE UNITARIO (€/h)	IMPORTE (€)
MO.00	h	15	29,8	447
MO.01	h	20	11,9	238
CE.00	h	35	0,102	3,57
EI.00	h	35	0,066	2,32
CE.02	h	720	13,26	9.547,2
EI.02	h	720	1,369	986,30
EI.03	h	2	208,333	416,66

POSTPROCESADO DE CASOS				
CÓDIGO	UNIDADES	CANTIDAD	COSTE UNITARIO (€/h)	IMPORTE (€)
MO.00	h	5	29,8	149
MO.01	h	20	11,9	238
CE.00	h	25	0,102	2,55
EI.00	h	25	0,066	1,65
CE.01	h	80	0,68	54,4
EI.01	h	80	0,228	18,26
EI.04	h	80	0,114	9,13

VALIDACIÓN DE CASOS				
CÓDIGO	UNIDADES	CANTIDAD	COSTE UNITARIO (€/h)	IMPORTE (€)
MO.00	h	10	29,8	298
MO.01	h	20	11,9	238
CE.00	h	15	0,102	1,53
EI.00	h	15	0,066	0,99

REDACCIÓN DE LA MEMORIA				
CÓDIGO	UNIDADES	CANTIDAD	COSTE UNITARIO (€/h)	IMPORTE (€)
MO.00	h	15	29,8	447
MO.01	h	160	11,9	1.904
CE.00	h	175	0,102	17,85
EI.00	h	175	0,066	11,60

3. Resumen

Fase inicial de búsqueda de información (€)	1.315,77
Preparación de casos (€)	932,25
Lanzamiento de casos (€)	11.641,05
Postproceso de casos (€)	473,00
Validación de casos (€)	538,52
Redacción de la memoria (€)	2.380,45
TOTAL(€)	17.281,06