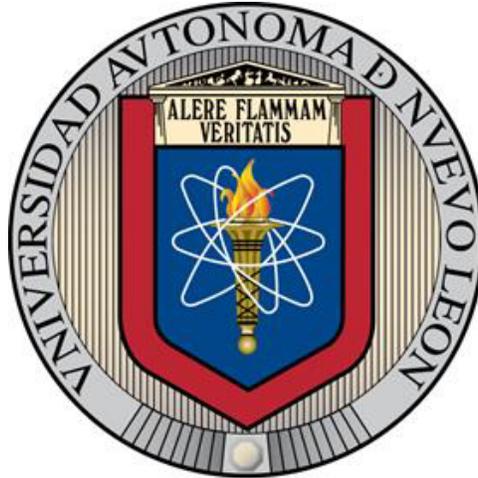


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA



TESIS

**ESTUDIO NUMÉRICO DE LOS EFECTOS DE LAS
PROPIEDADES TERMOFÍSICAS Y DE TRANSPORTE
EN EL PROCESO DE INYECCIÓN DE
COMBUSTIBLES ALTERNATIVOS PARA MOTORES
DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN**

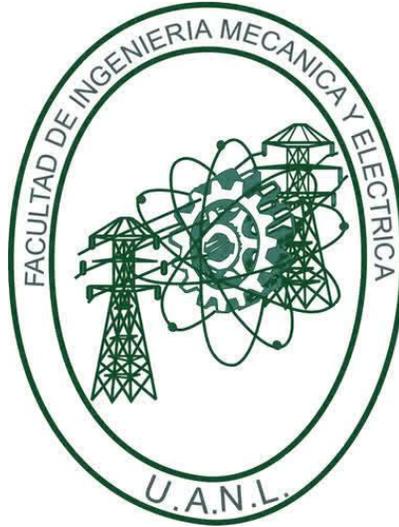
POR

ING. LUIS FERNANDO RUA MOJICA

**COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA CON
ORIENTACIÓN EN ENERGÍAS TÉRMICA Y RENOVABLE**

NOVIEMBRE, 2017

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA
SUBDIRECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



TESIS

**ESTUDIO NUMÉRICO DE LOS EFECTOS DE LAS
PROPIEDADES TERMOFÍSICAS Y DE TRANSPORTE
EN EL PROCESO DE INYECCIÓN DE
COMBUSTIBLES ALTERNATIVOS PARA MOTORES
DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN**

**POR
ING. LUIS FERNANDO RUA MOJICA**

**COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA CON
ORIENTACIÓN EN ENERGÍAS TÉRMICA Y RENOVABLE**

DIRECTOR DE TESIS: Dr. Simón Martínez Martínez

NOVIEMBRE, 2017

Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica

Subdirección de Estudios de Posgrado

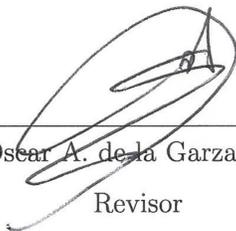
Los miembros del Comité de Tesis recomendamos que la Tesis «*Estudio numérico de los efectos de las propiedades termofísicas y de transporte en el proceso de inyección de combustibles alternativos para motores de encendido por compresión.*», realizada por el estudiante **Luis Fernando Rua Mojica**, con número de matrícula 1833080, sea aceptada para su defensa como requisito para obtener el grado de Maestría en Ciencias de la Ingeniería con Orientación en Energías Térmica y Renovable.

El Comité de Tesis



Dr. Simón Martínez Martínez

Director



Dr. Óscar A. de la Garza de León

Revisor



Dr. Salvador Valtierra Gallardo

Revisor

Vo. Bo.



Dr. Simón Martínez Martínez

Subdirector de Estudios de Posgrado

San Nicolás de los Garza, Nuevo León, noviembre de 2017

*A book is a loaded gun in the
house next door...Who knows
who might be the target of the
well-read man?.*

Ray Bradbury, Fahrenheit 451

AGRADECIMIENTOS

Esta etapa de mi vida que culmina con este documento ha sido influenciada por muchas personas, no es fácil pensar cuántas y en que grado pudieron haber aportado a mi construcción como ser humano y como profesional. Este pequeño espacio es para nada justo, puesto que indudablemente quedará alguien por fuera de él y además no plasmaré el inmenso sentimiento de gratitud que me inunda, porque como todos sabemos no es posible llegar a ningún lugar, ni alcanzar metas, en solitario. Por esta razón empiezo por agradecer a todos aquellos que no alcance a mencionar.

Debo empezar por decirle gracias a mi familia, ellos, quienes toda la vida me han apoyado en las decisiones que tomo para mi futuro. Luz Mery, mi madre, siempre ha tenido una fe ciega en mí, y por eso espero nunca llegar a decepcionarla, gracias ma. Ramiro, mi padre, siempre fue un ejemplo de perseverancia y trabajo, creo que eso es lo mejor que pude aprender de él y como me gustaría que estuvieras con nosotros para compartir la alegría, haces falta viejo. Mis hermanos, Alfredo y Mariana, les agradezco la confianza y buenas energías que me han brindado.

Agradezco enormemente al profesor John Ramiro Agudelo, porque sin su apoyo y confianza no habría llegado a donde estoy el día de hoy. Al Dr. Simón Martínez por abrirme las puertas de este gran espacio y tener la oportunidad de crecer con sus enseñanzas, sin su asesoramiento este trabajo no se hubiera culminado. Al Dr. Fausto Sánchez por su labor como coordinador del programa de maestría. Agradezco al Grupo de Energías Térmica y Renovable y todos sus integrantes por todo su apoyo y hacer posible este logro. Especial gratitud al profesor Octavio Armas y el Grupo

de Investigación en Procesos Energéticos y Medioambientales de la Universidad de Castilla-La Mancha por su colaboración durante el desarrollo de mi trabajo.

A mis compañeros y amigos, con quienes día tras día fuimos construyendo este camino, Alfredo Jiménez, Victor Sánchez, Juan Carlos Ulloa, Pablo Gómez, Guillermo Rubio, Lis Corral, Hugo Ramírez y todos mis demás compañeros, gracias por sus aportes y amistad.

A la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica por el apoyo recibido durante el desarrollo de este programa académico.

Esta tesis forma parte de la *“Red Temática en Investigación e Innovación en Tecnología Energética”*, apoyada por el *“Programa para el Desarrollo Profesional Docente - PRODEP”*, así como del proyecto *“Uso y Aprovechamiento Energético de Biocombustibles en Motores de Combustión Interna (Proyecto CB-239943)”*, financiado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Igualmente, agradezco a México y al CONACYT por el apoyo otorgado a través de la beca número 705184, desde agosto de 2015 a julio de 2017.

Por último, no menos importante, por el contrario, se lleva mi más profunda gratitud, a Stephanie Montoya, gracias por ser uno de los pilares de mi vida, gracias por estar a mi lado durante los buenos y malos momentos, gracias por permitirme hacer parte de tu vida, realmente no te alcanzas a imaginar lo que para mí significa tu amistad y amor, solo puedo decir una y mil veces, GRACIAS.

RESUMEN

La disminución de emisiones producto de la combustión de los motores de encendido por compresión, así como el interés internacional por disminuir la dependencia directa de los productos derivados del petróleo, han impulsado proyectos de investigación que permitan establecer los beneficios generados por el uso de combustibles alternativos, ya sean de carácter renovable o provenientes de otras tecnologías de producción.

Uno de los procesos más importantes del desarrollo de la combustión en este tipo de motores es la fase de inyección de combustible, puesto que todo el proceso de combustión depende de su óptima ejecución. Por esta razón, es de vital importancia conocer como los nuevos combustibles llevan a cabo la formación del chorro inyectado y el proceso de mezcla.

El análisis del proceso de mezcla para un nuevo combustible puede ser realizado de forma experimental, pero la compleja infraestructura necesaria para ejecutar tipo de pruebas impide que puedan llevarse a cabo de manera amplia en toda la comunidad científica.

Este trabajo pretende aprovechar las ventajas de la modelación computacional para evaluar el comportamiento de tres combustibles alternativos y de esta forma abrir el camino a la exploración de éstos desde un punto de vista numérico. De igual forma la metodología empleada en este trabajo de investigación podrá ser empleada para analizar cualquier otro tipo de combustible que sea desarrollado.

ÍNDICE GENERAL

1. Introducción	1
1.1. Motivación	2
1.1.1. Motores Diesel y sus emisiones	2
1.1.2. Combustibles alternativos	4
1.1.3. Técnicas experimentales y numéricas	5
1.2. Antecedentes	7
1.2.1. Procesos de inyección de diésel	7
1.2.2. Métodos numéricos en la inyección	9
1.2.3. Inyección de combustibles alternativos	10
1.3. Hipótesis	12
1.4. Objetivos	12
1.4.1. Objetivo General	12
1.4.2. Objetivos específicos	12
2. Marco teórico	14

2.1. Chorros de inyección en motores de encendido por compresión	16
2.1.1. El sistema de inyección	16
2.1.2. El inyector y la tobera de inyección	18
2.1.3. Flujo másico de combustible	20
2.1.4. Chorro diésel	21
2.2. Modelado numérico del chorro de inyección	29
2.2.1. CFD como herramienta de investigación	30
2.2.2. Descripción matemática del fenómeno	35
2.3. Combustibles y sus propiedades termofísicas y de transporte	65
2.3.1. Combustibles de estudio	65
2.3.2. Combustibles y simulación	68
2.4. OpenFOAM, código CFD libre	81
2.4.1. SprayFoam, modelo numérico para simulación de chorros de inyección.	81
3. Metodología	86
3.1. Vista general del proceso	87
3.2. Desarrollo experimental	88
3.2.1. Caracterización de la geometría del inyector	88
3.2.2. Inyección experimental	92
3.2.3. Procesamiento de imágenes	96

3.3. Desarrollo numérico	99
3.3.1. Estimación de propiedades termofísicas y de transporte para cada combustible	99
3.3.2. Implementación de propiedades de combustibles dentro de Open- FOAM	108
3.3.3. Parámetros de simulación	110
3.3.4. Preparación y ejecución de la simulación	115
4. Resultados	118
4.1. Caracterización de la tobera de inyección	120
4.2. Caracterización de los combustibles y sus propiedades	126
4.2.1. Propiedades básicas de los combustibles	126
4.2.2. Densidad de la fase líquida	127
4.2.3. Viscosidad de la fase líquida	128
4.2.4. Tensión superficial	128
4.2.5. Presión de vapor	130
4.2.6. Calor latente de vaporización	130
4.2.7. Calor específico de la fase vapor	131
4.2.8. Calor específico de la fase líquida	131
4.2.9. Conductividad térmica la fase líquida	133
4.2.10. Viscosidad de la fase vapor	133
4.2.11. Conductividad térmica de la fase vapor	134

4.2.12. Difusividad de la fase vapor	134
4.2.13. Segundo coeficiente del virial	135
4.3. Resultados implementados en modelo de simulación de OpenFOAM .	135
4.4. Validación experimental del modelo	140
4.5. Resultados de simulación	144
4.5.1. Penetración con 2 milisegundos de energización	144
4.5.2. SMD con 2 milisegundos de energización	149
4.5.3. Velocidad máxima	154
5. Conclusiones	160
6. Trabajos futuros	163
Referencias	165

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. Evolución histórica del estándar de emisiones europeo.	3
2.1. Sistema de inyección common rail.	17
2.2. Vista interna del inyector piezoeléctrico.	19
2.3. Estructura interna del conjunto tobera - aguja de inyección.	20
2.4. Regímenes de atomización.	23
2.5. Ruptura de un chorro de inyección de combustible.	25
2.6. Volumen de control discreto unidimensional.	32
2.7. Nomenclatura de un volumen de control discretizado.	33
2.8. Flujos máxicos entrando y saliendo del volumen de control.	38
2.9. Flujos de cantidad de movimiento entrando del volumen de control.	40
2.10. Esfuerzos normales y cortantes.	41
2.11. Flujos convectivos de energía a través del volumen de control.	44
2.12. Flujo turbulento inestable.	47
2.13. Idea básica del método Monte-Carlo.	55
2.14. Representación del método Blob.	58

2.15. Esquema del modelo KH.	60
2.16. Deformación de gota.	62
2.17. Esquema de participación - Modelo Blob-KH/RT.	64
2.18. Componentes del solucionador sprayFom.	82
2.19. Componentes del líquido C14H30 en OpenFoam.	83
2.20. Fragmento del archivo C14H30.H	83
2.21. Librería de funciones para cálculo de propiedades de un líquido.	84
2.22. Diagrama de colaboración entre librerías.	84
2.23. Contenido del archivo IC8H18.C.	85
2.24. Cálculo para una propiedad física de líquidos en OpenFoam	85
3.1. Metodología planteada en el estudio	87
3.2. Tobera de inyector Denso-DCRI105189	89
3.3. Molde de silicona obtenido.	91
3.4. Muestra preparada para visualización.	92
3.5. Imagen obtenida con un SEM.	92
3.6. Instalación experimental para inyección de combustible.	93
3.7. Cámara de volumen constante.	94
3.8. Cámara de volumen constante - Esquema de configuración.	94
3.9. Imágenes adquiridas.	96
3.10. Imagen con fondo sustraído.	97

3.11. Binarización y obtención de contornos.	98
3.12. Parámetros calculados en cada chorro.	98
3.13. Estructura final para la librería de líquidos del usuario.	109
3.14. Función NSRDS No.5.	109
3.15. Ajuste de curva personalizado, densidad C15H32.	110
3.16. Tasa de flujo másico para cada combustible.	111
3.17. Comparación de tasa de flujo másico - $P_{back} = 60 \text{ bar}$	112
3.18. Contenido básico - Caso de simulación.	115
3.19. Volumen de control para simulación.	117
4.1. Visualización SEM de los moldes de silicona	120
4.2. Dimensiones geométricas de la tobera.	121
4.3. Longitud de un orificio	122
4.4. Dimensiones capturadas en un orificio	122
4.5. Visualización por rayos X.	124
4.6. Caracterización por rayos X.	125
4.7. Propiedades termofísicas y de transporte de los combustibles - Parte 1.	129
4.8. Propiedades termofísicas y de transporte de los combustibles - Parte 2.	132
4.9. Validación experimental de la penetración - diésel.	142
4.10. Validación experimental de la penetración - biodiésel.	143
4.11. Variación de la penetración para diésel y biodiésel.	145

4.12. Variación de la penetración para GTL y farnesano.	146
4.13. Comparación de la penetración - 4 combustibles.	148
4.14. Comparación de la penetración - 3 combustibles.	149
4.18. Comparación del SMD entre combustibles - 490 bar.	150
4.15. Variación del SMD - diésel y biodiésel.	151
4.16. Variación del SMD - GTL y farnesano.	152
4.17. Comparación del SMD entre combustibles - 300 y 550 bar.	153
4.19. Diésel, $P_{inj} = 550$ bar	155
4.20. Biodiésel, $P_{inj} = 550$ bar	156
4.21. Farnesano, $P_{inj} = 550$ bar	157
4.22. GTL, $P_{inj} = 550$ bar	158

ÍNDICE DE TABLAS

2.1. Propiedades para modelación numérica de procesos de inyección . . .	68
3.1. Propiedades físicas y de transporte necesarias y métodos utilizados. .	100
3.2. Composición de los biodiésel presentes en la mezcla.	101
3.3. Composición química para el GTL trabajado	102
3.4. Contribución grupos funcionales - Joback	103
3.5. Contribución grupos funcionales - Constantinou-Gani	103
3.6. Densidad de referencia para estimación con ecuación de Rackett. . .	104
3.7. Valor del parachor para cada grupo de contribución.	105
3.8. Coeficientes específicos para biodiésel de soya	109
3.9. Parámetros de inyección - diésel	113
3.10. Parámetros de inyección - biodiésel	113
3.11. Parámetros de inyección - Farnesano	114
3.12. Parámetros de inyección - GTL	114
3.13. Ángulo medio teórico del cono	115
3.14. Condiciones iniciales del volumen de control	116

4.1. Dimensiones principales de la tobera	123
4.2. Propiedades básicas estimadas.	126
4.3. Datos incorporados en nuevos líquidos de OpenFOAM	136
4.4. Coeficientes para cálculo de la densidad en OpenFOAM.	136
4.5. Coeficientes para cálculo de presión de vapor.	136
4.6. Coeficientes para cálculo de entalpía de vaporización.	137
4.7. Coeficientes para cálculo de calor específico-líquido.	137
4.8. Coeficientes para cálculo de calor específico-vapor.	137
4.9. Coeficientes para cálculo del segundo coeficiente del virial.	138
4.10. Coeficientes para cálculo de viscosidad-líquido.	138
4.11. Coeficientes para cálculo de viscosidad-vapor.	138
4.12. Coeficientes para cálculo de conductividad térmica líquido.	139
4.13. Coeficientes para cálculo de conductividad térmica-vapor.	139
4.14. Coeficientes para cálculo de tensión superficial.	139
4.15. Coeficientes para cálculo de coeficiente de difusión.	140
4.16. Propiedades del biodiésel aceite usado de cocina.	141
4.17. Condiciones de operación - Inyección experimental.	141

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

En este capítulo se consigna la razón que impulsa esta investigación en el área de inyección de combustibles para motores Diesel, los antecedentes concernientes al tema y los objetivos que determinan el alcance del trabajo.

1.1. Motivación	2
1.1.1. Motores Diesel y sus emisiones	2
1.1.2. Combustibles alternativos	4
1.1.3. Técnicas experimentales y numéricas	5
1.2. Antecedentes	7
1.2.1. Procesos de inyección de diésel	7
1.2.2. Métodos numéricos en la inyección	9
1.2.3. Inyección de combustibles alternativos	10
1.3. Hipótesis	12
1.4. Objetivos	12
1.4.1. Objetivo General	12
1.4.2. Objetivos específicos	12

1.1 MOTIVACIÓN

1.1.1 MOTORES DIESEL Y SUS EMISIONES

Desde 1892 cuando Rudolf Diesel planteó el funcionamiento de los motores de encendido por compresión (MEC), se ha demostrado a través de su historia que poseen una eficiencia de conversión energética mayor que otros tipos de máquinas térmicas de combustión interna. Adicionalmente, por la forma en la que se desarrolla la combustión en condiciones de exceso de aire, los niveles de emisión de hidrocarburos sin quemar (HC) y monóxido de carbono (CO) normalmente son bajos. No obstante, por el tipo de flama que se genera cuando el combustible es quemado al interior del cilindro, se fomenta una mayor producción de material particulado (MP) y óxidos de nitrógeno (NO_x) [1].

Estas características de los productos de combustión tiene como consecuencia el aumento de las restricciones en los niveles de emisiones permitidos en las regulaciones gubernamentales a nivel mundial. A su vez, en un intento por mitigar los problemas de cambio climático y los problemas de salud relacionados con el uso de combustibles en el sector transporte (y por consiguiente sus emisiones) se crean estándares internacionales como la norma EURO, nombre con el que se le reconoce de forma global. Ésta surge en la unión europea alrededor del año 1992 y desde su implementación a evolucionado de tal forma que en la actualidad se encuentra instaurada la versión *EURO 6*, cuya característica principal señala que los motores Diésel que se construyan a partir del año 2014 deben generar emisiones de MP menores a 0.5 mg/kg y de NO_x inferiores a 80 mg/kg (si se toma como base la unidad de generación g/km se presentan límites de 0.0048 y 0.08 para el MP y NO_x respectivamente). En Figura 1.1 se puede observar como ha sido la transformación específica de los niveles permitidos en cada versión de la norma para los autos de pasajeros [2, 3, 4].

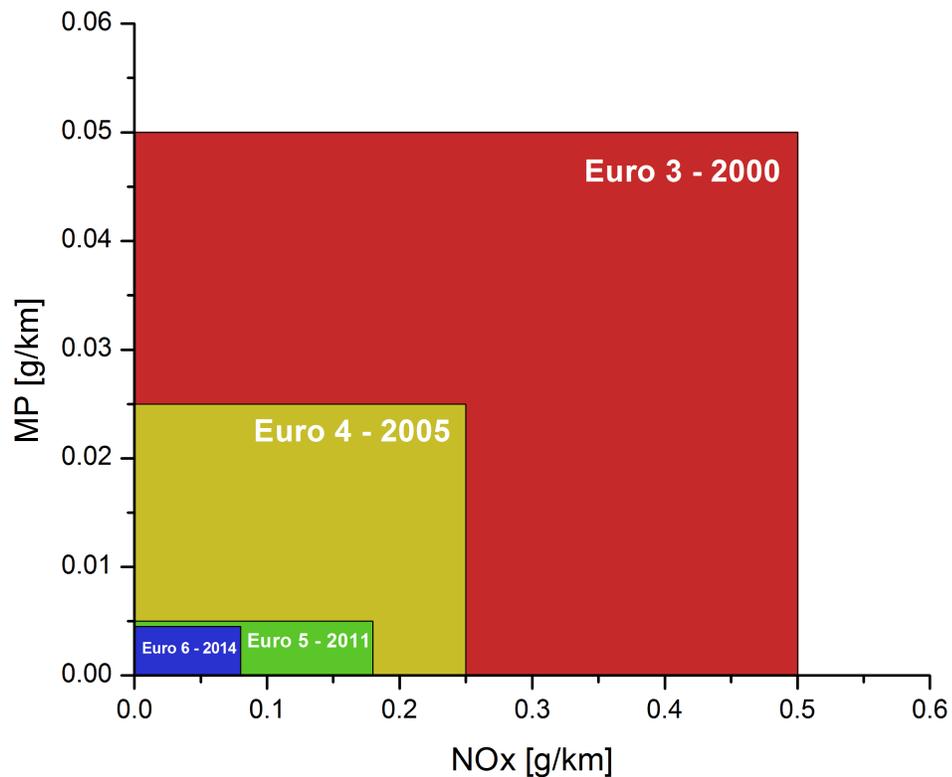


Figura 1.1: Evolución histórica del estándar de emisiones europeo.

Es así como las fuertes regulaciones ambientales, las presiones del mercado (basadas en los avances de tecnologías híbridas de electricidad y gasolina) y los costos de combustible han generado grandes demandas a satisfacer por los desarrollos tecnológicos de los motores Diesel. A este panorama se le enfrentan respuestas como tecnologías de inyección avanzadas, control de emisiones por recirculación de gases de escape (EGR), actuación de válvulas variable, tecnologías de combustión avanzadas, catálisis selectiva (SCR) y trampas de NO_x , entre otras [5, 6]; desde otro centro de esfuerzos se encuentra la evolución de los combustibles alternativos.

1.1.2 COMBUSTIBLES ALTERNATIVOS

La inestabilidad en las reservas y precios del petróleo a nivel mundial, junto a la necesidad de disminuir los efectos adversos debidos a las emisiones contaminantes, han generado que en la última década el interés por combustibles amigables con el medio ambiente haya aumentado. Es por esto que surgen alternativas energéticas como el biodiésel, bioetanol, biobutanol, entre otros. Adicionalmente su desarrollo, aplicación y desempeño se encuentran activamente en progreso.

Para el caso de los motores de encendido por compresión, se ha demostrado que el uso de biodiésel es una alternativa renovable y no tóxica prometedora, de sencilla implementación con la que no es necesario realizar mayores cambios en la infraestructura actual de los sistemas de transporte. El biodiésel es un compuesto orgánico producido a partir de triglicéridos conformados por ácidos grasos de cadena larga, obtenidos de diversas fuentes que pueden ser de origen animal o vegetal. Un proceso conocido como transesterificación transforma estos triglicéridos en un aceite de menor viscosidad gracias a la reacción de un alcohol con los ácidos grasos o ésteres que lo componen. Es conocido que el uso de biodiésel puro o en mezclas con diésel puede disminuir las emisiones de CO , HC y MP , pero puede incrementar la generación NO_x así como la existencia de una mínima disminución en la potencia desarrollada por el motor [7].

La necesidad de mejorar las emisiones contaminantes y obtener nuevas opciones de alimentación para los MEC, lleva al desarrollo de combustibles sintéticos ultra limpios como el GTL (por sus siglas en inglés, Gas To Liquid), cuya obtención se realiza por medio del proceso de síntesis Fischer-Tropsch (FT) realizado al gas natural. En éste, las moléculas de metano son separadas en un reformador o generador donde es convertido en un gas de síntesis, una combinación de monóxido de carbono e hidrógeno. Por último este gas es transformado nuevamente en un hidrocarburo líquido al obligar una reacción entre estos dos compuestos. Los productos obtenidos del proceso incluyen gasolina (mezcla de naftas), keroseno, diésel y químicos

diversos para uso como materias primas, cuya característica principal es su virtual inexistencia de sulfuros, aromáticos o toxinas [8]. Por estas cualidades y el incremento de yacimientos de gas natural a nivel mundial, el GTL se ha convertido en un combustible de alto interés internacional.

En un esfuerzo por reducir la dependencia de los combustibles fósiles así como la generación de los contaminantes productos de la combustión, surge en la última década un nuevo combustible sintético cuya patente pertenece a la empresa *Amyris Biotechnologies, Inc.* Se trata de un producto obtenido de la fermentación de caña de azúcar por medio de bacterias modificadas genéticamente, que, luego de un proceso de hidrogenación se obtiene una alternativa al diésel fósil así como para los combustibles de uso en la aviación. Es conocido actualmente bajo el nombre de *Farnesano* [9] y tiene la particularidad de ser casi un compuesto puro, un alcano ramificado de fórmula química $C_{15}H_{32}$ (trimetil-dodecano), hecho que lo convierte en un combustible ultra limpio con alta probabilidad de tener un menor índice de generación de emisiones de NO_X [10].

Bajo este panorama, en el que surgen nuevas opciones a tener en cuenta en los procesos de combustión de los MEC, se hace necesario ampliar el conocimiento de su comportamiento en los fenómenos que ocurren al interior del cilindro.

1.1.3 TÉCNICAS EXPERIMENTALES Y NUMÉRICAS

Es de conocimiento generalizado que la comprensión de los fenómenos que ocurren en el universo es la puerta por medio de la cual la humanidad puede lograr el control de su entorno, mejorar su calidad de vida y avanzar hacia un mejor aprovechamiento de los recursos que la rodean. Dentro de este proceso de aprendizaje, la investigación es uno de los pilares que sustenta la posibilidad de alcanzar múltiples metas y podría llegar a afirmarse que el ser humano la ha usado desde su aparición en el mundo. En la actualidad gran parte de la investigación que se realiza está ligada a

la necesidad de encontrar solución a los problemas que se presentan a nivel mundial, siendo el control y reducción de emisiones contaminantes, la búsqueda de nuevas fuentes de energía limpia y la maximización de la eficiencia en el aprovechamiento de éstas, solo una ínfima parte de los campos en los que se trabaja.

La investigación siempre ha tenido una componente experimental y otra teórica, siendo ambas de mutuo acompañamiento. La experimentación es el camino más tangible al entendimiento y visualización de los fenómenos, mientras que la investigación teórica es la forma en que estos pueden estudiarse en los límites de su entendimiento. Ambas ramas desembocan en la construcción de modelos matemáticos de comportamiento (teóricos o empíricos) que plasman sus bases para la comprensión de fenómenos adicionales.

La investigación experimental permite conocer de manera muy confiable la información referente a un proceso físico o químico, ya que es posible medir de forma directa las variables que intervienen en éste. Aunque la reproducción de fenómenos a escala completa es el medio ideal para capturar la información, en muchos casos no es posible de llevar a cabo, en cambio el escalamiento del fenómeno permite disminuir costos o infraestructura penalizando en muchos casos la precisión de la extrapolación de los datos a una escala mayor. Adicionalmente, existen situaciones en las que realizar un experimento es físicamente imposible.

De otra mano, la investigación teórica basada en la predicción de fenómenos por medio de modelos matemáticos, presenta retos que aunque son diferentes no pueden considerarse simples. Es común que dicha representación matemática no logre solucionarse por métodos analíticos, debido a que se componen de arreglos de ecuaciones diferenciales con múltiples variables, es aquí donde los avances computacionales modernos y el uso de métodos numéricos cobra especial relevancia. A lo largo de las últimas décadas el uso de simulaciones computacionales ha aumentado, logrando tener un mejor entendimiento del comportamiento de distintos procesos como los que involucran fenómenos de transporte, usando herramientas como la

dinámica de fluidos computacional (CFD).

Una buena predicción teórica necesita de correctos datos experimentales para su validación y posterior mejoramiento, de igual forma un desarrollo experimental satisfactorio debe ser guiado por la predicción de su futuro comportamiento, lo que permite acotar el rango de las variables que intervienen en el proceso. Es así como un buen trabajo de investigación debe poder acoplar ambos caminos.

1.2 ANTECEDENTES

1.2.1 PROCESOS DE INYECCIÓN DE DIÉSEL

La inyección de combustible juega un papel de alta importancia en el desempeño térmico de los motores y sobre la formación de emisiones contaminantes. Del proceso de inyección dependen la ruptura del chorro líquido y su posterior formación de gotas, la tasa de evaporación de las gotas, la correcta mezcla de combustible-aire, la combustión y la generación de emisiones contaminantes. Es por esto que ha sido un campo de estudio con una amplia variedad de trabajos de investigación, donde los primeros datos experimentales pueden ser atribuidos a Browne *et al.* en 1986, cuyo trabajo con tres distintas técnicas ópticas busca establecer los efectos de la variación en las propiedades del combustible en el proceso de mezcla y la formación del chorro inyectado [11].

En 1996, Ishikawa *et al.* realizan un estudio de la estructura de los chorros de inyección por medio de fotografía magnificada y velocimetría por imagen de partículas (PIV), ellos determinan que el ancho del chorro se hace más angosto con el aumento de la velocidad de salida del combustible, de igual forma la magnitud de la vorticidad también aumenta con la velocidad. [12].

Así como Ishikawa *et al.*, Siebers D. en 1998 realiza una recopilación de los

trabajos de experimentación en chorros de inyección realizados hasta ese momento [13]. Siebers describe el experimento llevado a cabo en los *Laboratorios Nacionales Sandia* en EE.UU. En éste, se hace énfasis en la distancia axial de penetración de la fase líquida del combustible en condiciones evaporativas y su variación debido a un amplio rango de condiciones de operación, entre los parámetros variados se encuentra la presión de inyección, el diámetro del orificio, la temperatura y densidad del gas de ambiente y la volatilidad del combustible. Los aspectos más relevantes producto de su trabajo son que la longitud del líquido disminuye linealmente con el diámetro del orificio de salida, adicionalmente se presenta una disminución de ésta cuando la temperatura o densidad del gas de ambiente aumenta, la presión de inyección tiene poco efecto sobre la longitud del chorro líquido, mientras que la disminución de la volatilidad del combustible la aumenta y, que la longitud de mezclas de combustibles inyectados es controlada por la menor volatilidad de sus componentes. Por último, hace referencia a la influencia del englobamiento de aire sobre la vaporización del combustible.

A partir de los estudios recopilados en estos trabajos de investigación, se hace notable que los parámetros macroscópicos de interés en el análisis de los chorros de inyección diésel son la longitud de penetración de la fase líquida, el ángulo del chorro y el área ocupada por el chorro, desde un punto de vista microscópico se torna relevante el tamaño de las gotas y de estas se tiene presente la tasa de evaporación (en el caso de estudios evaporativos).

Múltiples trabajos de investigación han sido realizados con el fin de describir el comportamiento de las características de los chorros de inyección, su variación con respecto a las condiciones de operación de los sistemas de inyección y el efecto de los niveles de contrapresión en la cámara de combustión.

Seang-wock Lee *et al.*, en 2002, estudian la influencia de las propiedades del combustible en la formación de la mezcla y el proceso de combustión al comparar diésel ligero y diésel estándar [14]. En 2004 Payri *et al.* realizan ensayos experimen-

tales para determinar la influencia de la geometría del inyector en el flujo interno de combustible así como el comportamiento macroscópico del chorro inyectado, donde concluyen que los efectos de la cavitación al interior del inyector producen un considerable aumento del ángulo del cono [15]. Por su parte Desantes *et al.* en 2005 realizan estudios de inyección de diésel en los que cuantifican y predicen el comportamiento macroscópico de los chorros en función de los parámetros que gobiernan el proceso de inyección [16].

1.2.2 MÉTODOS NUMÉRICOS EN LA INYECCIÓN

La modelación matemática del proceso de inyección, ruptura y evaporación del chorro permite analizar los efectos de la variación de los parámetros que controlan el fenómeno en un amplio rango de posibilidades (por no decir infinitas). Con la ayuda de métodos numéricos y su solución computacional R. D. Reitz y R. Diwakar en 1987 usan el modelo tridimensional de combustión en motores *KIVA* (desarrollado en el Laboratorio Nacional de Los Alamos, EE.UU. - 1985 -) para calcular la interacción entre las gotas del chorro inyectado a alta presión y un gas de ambiente [17].

A su vez, durante el mismo año también es introducido el modelo numérico TAB para la ruptura de las gotas en los chorros de inyección al interior de la programación original del *KIVA*. El modelo TAB fue desarrollado por P. O'rouke y A. Amsden [18] y en su publicación hacen comparaciones entre éste, datos experimentales y otros métodos como el Reitz-Diwakar.

Otro modelo de ruptura de relevancia es el Kelvin-Helmoltz/Rayleigh-Taylor (KH-RT) que puede ser usado en la simulación de chorros tanto de gasolina como de diésel [19], en éste se hace énfasis el tratamiento del fenómeno como dos etapas, la ruptura primaria y secundaria. A esta característica se le atribuye la satisfactoria predicción de la forma del chorro, la penetración y el diámetro medio de Sauter local (SMD). La simulación de los chorros de inyección diésel es fuertemente trabajada en

las últimas décadas, donde en los trabajos resultantes siempre intentan mejorar la predicción de los modelos de ruptura por medio de la comparación de los resultados teóricos y experimentales [20, 21, 22].

1.2.3 INYECCIÓN DE COMBUSTIBLES ALTERNATIVOS

Los esfuerzos por comprender y mejorar los procesos de inyección crecen constantemente y la aparición de combustibles alternativos obliga a desarrollar aún más la investigación en estos campos. Es así como en el 2005, Chang Sik Lee *et al.* [23] realizan un trabajo experimental sobre la atomización y combustión de biodiésel de arroz y de soya, así como de diferentes mezclas de éstos con diésel estándar. En este trabajo se enfocaron principalmente en la longitud de penetración, el SMD y la distribución de velocidad. Entre los resultados plantean que en los productos de la combustión se presenta una disminución de HC y CO emitidos a medida que la fracción de biodiésel aumenta, mientras que las emisiones de NO_X se incrementan.

En 2007, K. S. Kim *et al.* [24] llevan a cabo una investigación experimental para comparar el chorro inyectado y las características de combustión al variar la presión de inyección y la temperatura del ambiente, usando GTL y diésel como combustibles de análisis en una maqueta de volumen constante. Aquí señalan que la longitud de la fase líquida es más corta para la inyección de GTL frente a la de diésel bajo las mismas condiciones de operación.

Por su lado, Su Han Park *et al.* [25] desarrollan un análisis numérico y experimental de las características del chorro y la atomización de biodiésel de soya a distintas condiciones de temperatura ambiente y del combustible. Los resultados experimentales fueron comparados con simulaciones realizadas en el software KIVA-3V. Notan que no hay variación significativa en la longitud de penetración como consecuencia de aumentar la temperatura de inyección del combustible, mientras que un incremento en la temperatura del gas de ambiente causa una reducción en

dicha longitud. Adicionalmente plantean que hay una relación directa entre el incremento de la temperatura del combustible y la disminución de la cantidad de gotas formadas y el aumento de la masa de combustible en fase vapor.

Ya en 2010, Xiang Wang *et al.* [26] estudian el efecto de ultra altas presiones de inyección (hasta 300 MPa) en el desarrollo del chorro de inyección. Los combustibles de análisis fueron biodiésel de aceite usado de cocina, biodiésel de palma y diésel mineral. Como resultados exponen que el retraso de la inyección y la longitud de penetración fueron mayores para los biodiésel frente a lo observado en el diésel. Adicionalmente, el ángulo del cono y el área proyectada fueron menores para los ensayos con biodiésel que con diésel.

En 2012, H. M. Ismail *et al.* [27] desarrollan un conjunto de propiedades termofísicas y de transporte para biodiésel obtenido de diversas fuentes con el fin de realizar simulaciones del chorro y la combustión al interior del cilindro. Realizan una comparación del cambio de las propiedades con respecto a la composición del biodiésel y como ésta afecta el proceso de inyección.

Yousefifard m. *et al.* en 2014 [28] y usando OpenFOAM realizan simulaciones numéricas de chorros de inyección de biodiésel bajo ultra altas presiones que son comparadas con resultados experimentales de Xiang Wang *et al.* [26]. Establecen que un combustible con mayor tensión superficial causa una mayor longitud de penetración y un correspondiente ángulo de cono menor. Adicionalmente, los autores presentan que la presión de inyección del combustible tiene un efecto directo en la longitud de penetración en la etapa inicial del proceso de inyección, mientras que el ángulo de cono no sufre afectación por la misma.

Choi K. *et al.* [29] estudian experimentalmente los efectos de los parámetros de inyección en las características del chorro de inyección al usar GTL, biodiésel y diésel para un inyector multiorificio en un motor diésel. Aquí realizan comparaciones del comportamiento de la longitud de penetración, el ángulo del cono y el área proyectada de los tres combustibles bajo las mismas condiciones de operación.

Es importante recalcar que hasta el momento no existen estudios numéricos o experimentales de chorros de inyección usando Farnesano como combustible.

1.3 HIPÓTESIS

El análisis numérico y experimental de los chorros de inyección de combustibles alternativos requiere del conocimiento de las propiedades termofísicas y de transporte de estos. La fidelidad de los resultados numéricos depende del uso de dichas propiedades, por ende el comportamiento de un chorro inyectado en el proceso de mezcla se ve afectado por la variación de éstas.

1.4 OBJETIVOS

1.4.1 OBJETIVO GENERAL

Analizar el comportamiento fluido-dinámico de combustibles alternativos tales como biodiésel, farnesano y GTL durante el proceso de inyección.

1.4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estimar las propiedades físico-químicas y de transporte de combustibles alternativos como biodiésel, farnesano y GTL.
- Analizar las diferencias relevantes en la composición y propiedades termofísicas y de transporte de 4 combustibles para motores Diésel.
- Implementar satisfactoriamente las propiedades termofísicas y de transporte de combustibles no convencionales inexistentes en el software OpenFOAM.

-
- Caracterizar la geometría interna de un inyector diésel destinado para pruebas experimentales de validación.
 - Evaluar de forma numérica las diferencias existente en el proceso de inyección de 4 combustibles para motores Diesel, tales como: biodiésel, GTL, Farnesano y diésel de referencia.

CAPÍTULO 2

MARCO TEÓRICO

El presente capítulo contiene el fundamento científico que soporta cada elemento de análisis utilizado en la investigación.

2.1. Chorros de inyección en motores de encendido por compresión	16
2.1.1. El sistema de inyección	16
2.1.2. El inyector y la tobera de inyección	18
2.1.3. Flujo másico de combustible	20
2.1.4. Chorro diésel	21
2.2. Modelado numérico del chorro de inyección	29
2.2.1. CFD como herramienta de investigación	30
2.2.2. Descripción matemática del fenómeno	35
2.3. Combustibles y sus propiedades termofísicas y de transporte	65
2.3.1. Combustibles de estudio	65
2.3.2. Combustibles y simulación	68
2.4. OpenFOAM, código CFD libre	81

2.4.1. SprayFoam, modelo numérico para simulación de chorros de inyección.	81
---	----

El campo de acción de este trabajo de investigación comprende tres núcleos del conocimiento. En primera instancia, se encuentra el comportamiento físico de un chorro de combustible inyectado en un ambiente presurizado y en condiciones no evaporativas. En segundo lugar, las diferencias en el comportamiento de las propiedades termofísicas y de transporte de combustibles diésel alternativos obtenidos de diversas fuentes. Por último, el modelado numérico de los chorros de inyección en condiciones no evaporativas. Es por esta razón que el desarrollo del marco teórico se basará en los fundamentos científicos para el tratamiento de estos tres temas, los cuales serán ampliamente abordados a continuación.

2.1 CHORROS DE INYECCIÓN EN MOTORES DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN

2.1.1 EL SISTEMA DE INYECCIÓN

La combustión en los MEC requiere que una mezcla entre un combustible en fase vapor y el aire (que actúa como agente oxidante) se auto inicie como consecuencia de la alta presión y temperatura presente en la cámara de combustión después de la carrera de compresión. En este punto del ciclo, las condiciones del aire en la cámara se encuentra aproximadamente a 800 K de temperatura y a presiones que pueden variar desde 5 MPa hasta 10 MPa ($50 - 100\text{ bar}$). Bajo estas circunstancias el combustible en fase líquida es inyectado de forma directa en la cámara de combustión (proceso perteneciente a los motores de inyección directa, cuando ésta se realiza de forma indirecta existen algunas variaciones en la forma en que se lleva a cabo la combustión), este chorro líquido necesita ser evaporado para que pueda existir una mezcla gaseosa de combustible-aire, requisito indispensable para la combustión.

Es necesario que el chorro de combustible líquido se rompa, que se generen

pequeñas gotas y que éstas a su vez se evaporen en una pequeña fracción de tiempo. Para conseguirlo, la inyección se realiza con grandes diferencias de presión (con respecto a la presión de la cámara de combustión) a través de los orificios de la tobera del inyector, cuyo diámetro es del orden de $150\mu m$ (este valor cambia dependiendo del diseño y necesidad de los motores). Las presiones de inyección típicamente se encuentran en el rango de 20 - 170 MPa (200 - 1700 bar) [1], aunque en la actualidad pueden alcanzar 230 y hasta 300 MPa . La alta presión permite que el flujo tenga la suficiente velocidad para que el rompimiento en gotas y evaporación ocurra en el tiempo requerido.

Los sistemas de inyección actuales se encuentran conformados principalmente por una bomba de alta presión, un *common-rail* para lograr el mismo nivel de presión de inyección en todos los cilindros, líneas de alta presión, los inyectores y una unidad de control ECU (Electronic Control Unit), estos componentes pueden observarse en la Figura 2.1 [30]. El funcionamiento del sistema debe tener la capacidad de entregar la cantidad correcta de combustible para cada cilindro en cada modo de operación en el que se encuentre el motor (se entiende por modo de operación como el régimen de giro y la carga en un determinado instante de funcionamiento).

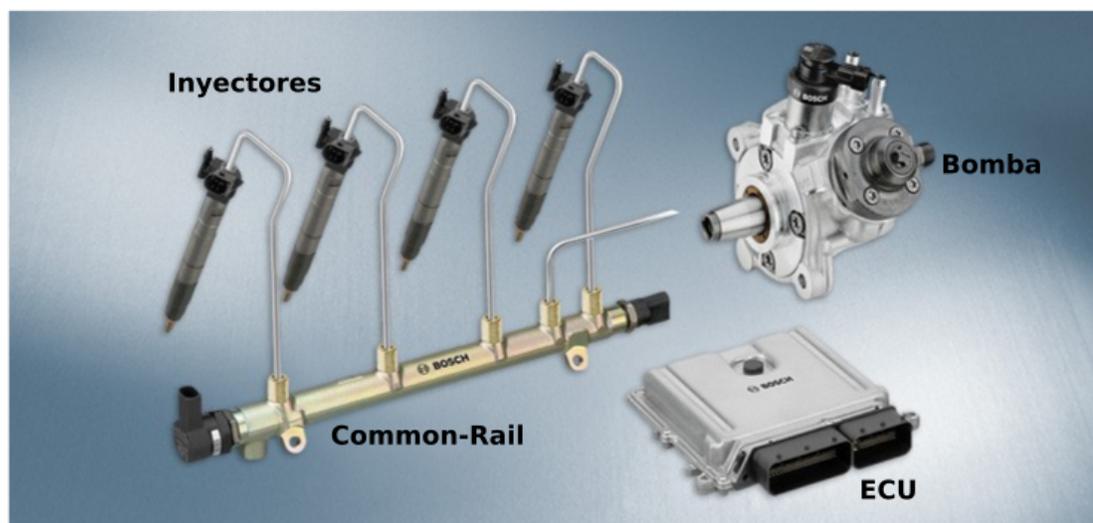


Figura 2.1: Sistema de inyección common rail.

Una bomba de alimentación extrae el combustible desde el depósito de almacenamiento, permite que éste pase por un filtro hacia el circuito de baja presión, de esta forma se evita que la bomba de alta presión llegue a trabajar en vacío. A su vez, la bomba de alta presión se encarga de aumentar la presión como consecuencia del alto flujo de combustible, alcanzando de esta forma los rangos requeridos; La ECU controla la apertura de la válvula de suministro en la bomba de alta presión, permitiendo que el combustible pase por las líneas de alta presión, llega al *common rail* donde se estabiliza, generando así un mismo nivel de presión para cada inyector. Por último, la ECU controla el tiempo de energización del inyector permitiendo así el paso del combustible por la tobera de éste y dándole salida a través de los orificios. Es importante señalar que el sistema tiene líneas de retorno, por una parte, hay un retorno de combustible desde los inyectores al depósito de combustible, éste permite que el combustible usado para accionar el levantamiento de la aguja pueda evacuar el circuito hidráulico del inyector; igualmente hay un retorno desde la bomba de alta presión hasta el depósito que permite controlar los niveles de presión, evitando así que se genere una sobrepresión en el sistema y aumento de temperatura innecesario en el combustible.

2.1.2 EL INYECTOR Y LA TOBERA DE INYECCIÓN

El inyector es el dispositivo que permite que el flujo de combustible ingrese al interior del cilindro. Los inyectores utilizados en los motores actuales se encuentran conformados por tres partes principales, la válvula electromagnética o actuador piezoeléctrico, el cuerpo del inyector y la tobera de inyección.

La válvula electromagnética es una bobina encargada de accionar el levantamiento de la aguja del inyector, que descansa sobre la base interna de la tobera, siendo presionada en esta posición (normalmente cerrada) por un resorte. Al energizar esta bobina se permite que el combustible ingrese al cuerpo del inyector, de tal forma que una diferencia de presión entre dos cámaras del circuito hidráulico interno,

libere el resorte que presiona la aguja, generando así un flujo de combustible a través de la tobera y que será expulsado por los orificios. La cantidad de combustible que ingresa al cilindro es determinado por el tiempo de energización de la bobina. En el caso de poseer un mecanismo basado en actuador piezoeléctrico, su funcionamiento se da por la aplicación de una corriente eléctrica a un material con propiedades de deformación (dilatación o contracción) debido a su sensibilidad al flujo de electrones. Esta deformación al igual que en el caso de la válvula electromagnética, posibilita la liberación del resorte y el flujo de combustible a través del cuerpo del inyector, donde el comportamiento posterior es similar al ya mencionado. El uso de materiales piezoeléctricos conlleva a una respuesta más rápida del inyector y un nivel de control más preciso.

El cuerpo del inyector contiene la mayor parte de los elementos mecánicos de éste, el circuito hidráulico interno para el levantamiento de la aguja, mantiene ésta en su posición de alineamiento con el eje central de la tobera y conduce el combustible aguas abajo hacia la tobera y los orificios de salida.



Figura 2.2: Vista interna del inyector piezoeléctrico.

La Figura 2.2 [31] ilustra los componentes principales de un inyector tipo pie-

zoeléctrico. En ésta se puede apreciar el cuerpo del inyector (1), el conector eléctrico (2), el cristal piezoeléctrico (3), la válvula de control (4), la entrada de combustible (5), la aguja del inyector (6) y la tobera de inyección (7).

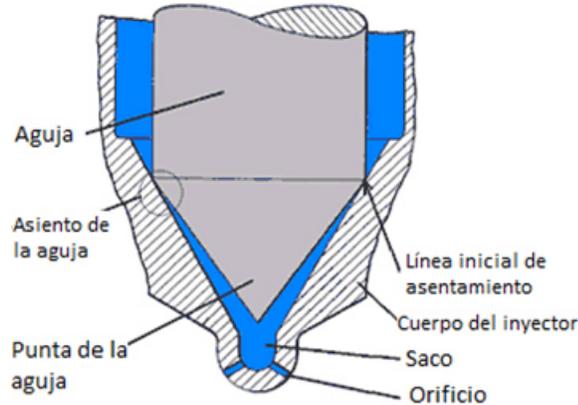


Figura 2.3: Estructura interna del conjunto tobera - aguja de inyección.

La tobera es uno de los componentes más importantes que intervienen en el proceso de inyección. Su geometría interna determina el comportamiento del combustible a la salida de los orificios y el diámetro final de éstos juega un papel trascendental en los parámetros macroscópicos del chorro inyectado (Figura 2.3) [15].

2.1.3 FLUJO MÁSCICO DE COMBUSTIBLE

Las condiciones físicas a las que se enfrenta el combustible al momento de la inyección, conllevan a que la predicción del comportamiento de éste requiera de complicados modelos matemáticos. Una aproximación de la cantidad de combustible inyectado puede realizarse si se conoce la presión de inyección, la presión ambiente del gas y si se considera un fenómeno de estado cuasiestable, incompresible y en una dimensión [1], se tiene que:

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

donde A_n es la mínima área de la tobera (que puede ser el área de salida del

orificio), C_D el coeficiente de descarga, ρ_f la densidad del combustible y Δp la caída de presión en la tobera.

Si se tiene en cuenta el tiempo en el que transcurre el evento de inyección, el cual se encuentra relacionado con intervalo del ángulo de cigüeñal en el que ocurre y al régimen de giro del motor, se puede obtener la cantidad total de combustible inyectado.

$$m_f = C_D A_n \sqrt{2\rho_f \Delta p} \frac{\Delta\Theta}{360N} \quad (2.2)$$

En esta expresión $\Delta\Theta$ representa la variación del ángulo de cigüeñal durante la apertura de la válvula de inyección y N es la velocidad del motor en *RPM*.

De esta forma al conocer la tasa de inyección de combustible para un inyector determinado es posible calcular el C_D , parámetro que permite evaluar la relación entre el flujo másico real frente al ideal, con lo que se establece el desempeño de una tobera de inyección, posibilitando así la predicción de futuros comportamientos.

2.1.4 CHORRO DIÉSEL

Cuando el combustible es expulsado por los orificios de la tobera hacia el interior del gas en la cámara de combustión, aparece un primer fenómeno conocido como la ruptura de la vena líquida. Esta ruptura presenta una fase inicial donde la vena líquida se fragmenta en un conjunto de gotas a cierta distancia axial denominada longitud intacta. Posteriormente coexisten los fenómenos de disgregación y coalescencia de gotas. En el primero, las gotas de mayor tamaño se dividen en gotas de diámetros menores, mientras que en el segundo, las gotas chocan entre si aumentando de esta forma su diámetro. Estos dos fenómenos conllevan al hecho de que al final del proceso exista una distribución de tamaño de gota más o menos homogénea [32].

La atomización del combustible afecta de forma directa el proceso de mezcla combustible-aire, por lo que un aumento en la velocidad con la que ésta se lleva a cabo favorece la evaporación del combustible, que es una consecuencia de la alta temperatura alcanzada por el proceso de compresión. De estos fenómenos aquí mencionados, depende el retraso físico entre el inicio de la inyección y el comienzo de la combustión.

2.1.4.1 ATOMIZACIÓN DEL CHORRO INYECTADO

La velocidad con la que el chorro es inyectado (relación directa del número de Reynolds) determina 4 regímenes de atomización como lo expone Lefèvre [33]:

1. *Régimen de Rayleigh.*

La ruptura de la vena líquida se da en gotas de tamaño uniforme debido a las deformaciones radiales axisimétricas generadas en ésta. Estas deformaciones se han amplificado desde la primera interacción entre las perturbaciones iniciales de la superficie del chorro y las fuerzas de tensión superficial que toman lugar al momento en que el fluido abandona el orificio de salida. Este comportamiento es típico de velocidades del orden de $10m/s$. La Figura 2.4.a [32] ilustra este comportamiento.

2. *Primer régimen inducido por interacción aerodinámica.*

El aumento de la velocidad relativa entre la vena líquida y el gas ambiente intensifica el efecto de las fuerzas aerodinámicas. En este punto se presentan dos casos que dependen de la velocidad del chorro. Si ésta continua siendo baja, la interacción aerodinámica amplifica las inestabilidades causadas por las deformaciones radiales axisimétricas, lo que conlleva a una atomización más rápida pero el diámetro de las gotas sigue siendo del orden del diámetro de la vena líquida. Un segundo caso se presenta cuando la velocidad es más alta y las fuerzas aerodinámicas cobran importancia, es aquí donde el chorro

adquiere una forma helicoidal alargada y la sección de la vena disminuye, con lo que se provoca una atomización del líquido similar al régimen anterior como se puede observar en la Figura 2.4.b.

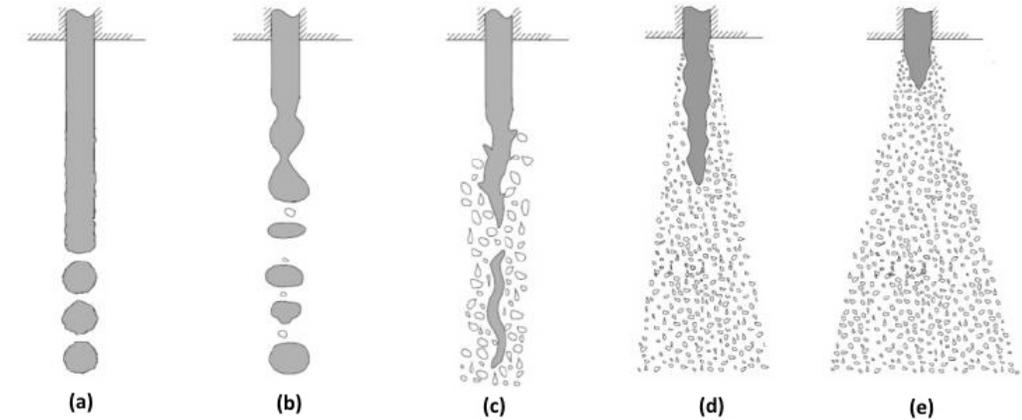


Figura 2.4: Regímenes de atomización.

3. Segundo régimen inducido por interacción aerodinámica.

Cuando las fuerzas aerodinámicas son predominantes como consecuencia del aumento de la velocidad del chorro, las perturbaciones en la vena líquida generadas por la salida del orificio tienden a tener menor relevancia que las oscilaciones producto de la interacción aerodinámica. La amplificación de las perturbaciones conllevan a una separación de gotas de forma irregular tal como se observa en la Figura 2.4.c y cuyo tamaño es definido por la longitud de onda de las oscilaciones.

4. Régimen de atomización.

En la Figura 2.4.d y 2.4.e se ilustra el comportamiento del régimen de atomización incompleto y completo (respectivamente), la diferencia entre ellos radica en la longitud de ruptura, siendo ésta menor para la atomización completa, generándose así un aumento en el ángulo de chorro. En este régimen, la formación de gotas se produce muy cerca del orificio de salida, llegando a darse en éste cuando la velocidad es lo suficientemente alta, gracias a los efectos de

turbulencia, cavitación y otros fenómenos que toman lugar.

La desintegración de la vena líquida puede ser cuantificada por medio de números adimensionales que relacionan los distintos parámetros que intervienen en el fenómeno. La primer relación encontrada entre parámetros es el cociente entre densidades del combustible y del gas circundante.

$$\rho_g/\rho_f \quad (2.3)$$

Así como el número de Reynolds.

$$Re = \frac{u_{ef} D \rho_f}{\mu_f} \quad (2.4)$$

Y el número de Weber, que representa la relación entre las fuerzas aerodinámicas y las fuerzas de tensión superficial,

$$We_g = \frac{\rho_g u_{ef}^2 d}{\sigma} \quad (2.5)$$

En éstas u_{ef} representa la velocidad relativa entre la gota y el gas, d es el diámetro del orificio, ρ_f y ρ_g son las densidades del combustible y el gas respectivamente, σ es la tensión superficial del combustible y μ_f su viscosidad. Dependiendo del valor del número de Weber se presentan distintos comportamientos en la ruptura del chorro. En un chorro de inyección de combustible la mayor parte del proceso de desintegración ocurre cerca de la salida de la tobera donde los valores del número de Weber son altos.

Las condiciones de inyección al interior del cilindro determinan claramente que el proceso se encuentra enmarcado en el régimen de atomización (aunque también y en menor medida, se da la presencia de los demás regímenes). En éste se establecen los dos fenómenos principales de formación de gotas, la ruptura primaria y secundaria.

Como se ha mencionado, en la ruptura primaria se fragmenta la vena líquida resultando en grandes gotas que forman un chorro denso muy cerca del orificio de salida. Existe una relación intrínseca entre la geometría del orificio de salida, la densidad del ambiente donde ingresa el líquido y la longitud del proceso de ruptura primaria. La disminución en el diámetro del orificio refleja un decremento en la longitud de penetración de dicha fase y un aumento en la densidad del ambiente genera un desprendimiento prematuro de gotas [34]. Los principales mecanismos que conllevan a esta ruptura son la cavitación y turbulencia generadas al interior del orificio de la tobera como producto de la alta presión de inyección. La ruptura secundaria convierte las gotas existentes en otras más pequeñas como consecuencia de las fuerzas aerodinámicas que se presentan por la velocidad relativa entre las gotas y el gas [35].

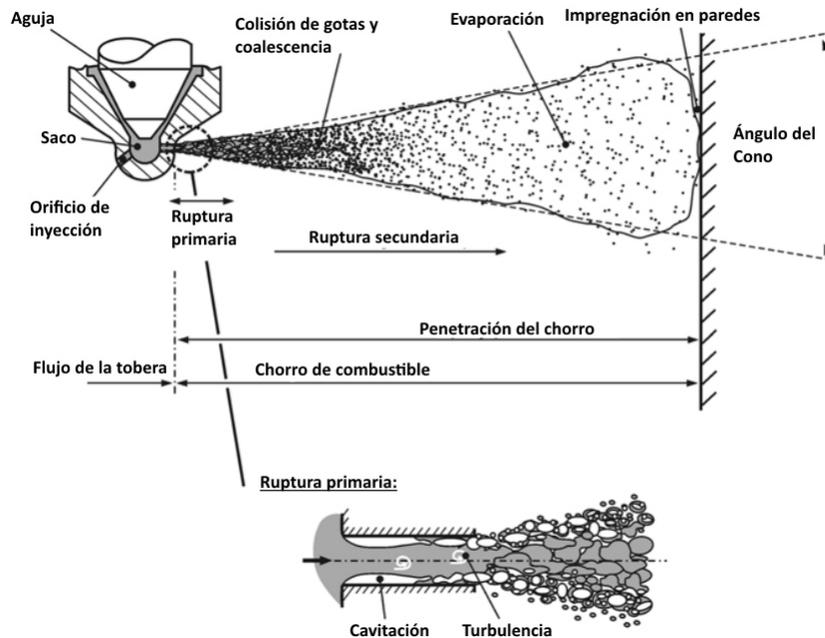


Figura 2.5: Ruptura de un chorro de inyección de combustible.

En la Figura 2.5 [35] se observa como se da el desarrollo completo de un chorro de combustible inyectado tal como ocurre al interior del cilindro. En ésta se encuentran delimitadas las zonas en las que ocurren la rupturas primaria y secundaria, así como los fenómenos colisión, coalescencia, cavitación y turbulencia.

2.1.4.2 PARÁMETROS MACROSCÓPICOS DE UN CHORRO DIÉSEL

Existen dos parámetros que permiten caracterizar el desempeño de un chorro inyectado en el proceso de mezcla, se trata de la *longitud de penetración* y el *ángulo del cono* formado. Estos parámetros pueden observarse de mejor forma durante el desarrollo de un chorro en condiciones no evaporativas, con lo que se logra una comprensión del comportamiento para ser extrapolado a las condiciones aptas para la combustión durante el funcionamiento normal de un motor. Adicionalmente, son relevantes el área generada por el chorro así como su volumen, pero estos parámetros pueden ser obtenidos a partir de la longitud de penetración y el ángulo del cono.

LONGITUD DE PENETRACIÓN.

Este parámetro está definido como la distancia que recorre el frente del chorro al interior del gas ambiente, medida desde el orificio de salida en la tobera [32]. La importancia de ésta se presenta debido a la existencia de un límite geométrico que impone la cámara de combustión, al presentarse una penetración muy larga como consecuencia de prolongados tiempos de inyección y altas presiones de la misma, ocurre una fuerte impregnación de combustible en las paredes de la cámara de combustión y la subsecuente formación de una película líquida sobre la superficie impactada, los efectos de este comportamiento influyen en el desempeño y generación de emisiones al no haber una evaporación correcta de combustible y por consiguiente una combustión incompleta.

En el estudio de los chorros de inyección se ha analizado ampliamente su comportamiento, generando así diversas correlaciones matemáticas para describir su evolución temporal, en cada una de ellas hacen presencia los mismos parámetros. Una de las correlaciones más aceptadas en la literatura es la presentada por Hiroyasu y Arai [36], en ella el desarrollo dependiente del tiempo de la penetración puede ser dividido en dos fases. La primera fase comprende desde el instante en que comienza

la inyección ($t = 0$) hasta que el líquido expulsado por la tobera comienza a desintegrarse ($t = t_{break}$). La segunda fase comprende el intervalo en el que las gotas realizan la penetración en el gas ambiente, siendo remarcable que la velocidad de la punta del chorro es inferior a las que presenta la vena líquida ($t > t_{break}$).

$$t < t_{break} : S = 0.39 \cdot \left(\frac{2\Delta p}{\rho_l} \right)^{0.5} \cdot t, \quad (2.6a)$$

$$t > t_{break} : S = 2.95 \cdot \left(\frac{\Delta p}{\rho_g} \right)^{0.25} \cdot (D \cdot t)^{0.5}, \quad (2.6b)$$

$$t_{break} = \frac{28.65 \cdot \rho_l D}{(\rho_g \Delta p)^{0.5}} \quad (2.6c)$$

Las ecuaciones 2.6 han sido aportadas por los autores para cada una de las fases mencionadas [35], para las cuales Δp es la diferencia entre la presión de inyección y la presión al interior de la cámara, ρ_l y ρ_g son la densidad del líquido y del gas respectivamente, t es el tiempo y D es el diámetro del orificio de salida.

ÁNGULO DEL CHORRO.

Este es otro parámetro de importancia en la estructura del chorro inyectado, debido a que su incremento genera que el área abarcada por las gotas de combustible dentro del gas ambiente sea mayor. Esto conduce a un aumento en la tasa de evaporación y por consiguiente un mejor proceso de mezclado tendrá lugar. Hiroyasu y Arai también investigaron esta característica y determinaron una relación para el ángulo total del cono, que se produce en el momento que la aguja del inyector se encuentra totalmente levantada [36]. En la Ecuación 2.7 es notable la dependencia de éste con la geometría del orificio de salida y la densidad, tanto del combustible como del gas en la cámara.

$$\Phi = 83.5 \left(\frac{L}{D} \right)^{-0.22} \left(\frac{D}{D_s} \right)^{0.15} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{0.26} \quad (2.7)$$

Aquí, D_s representa el diámetro inicial del orificio (justo en el saco de la tobera), D es el diámetro del orificio de salida, L la longitud del orificio, ρ_g la densidad del gas y ρ_l la densidad del combustible.

Una expresión para el ángulo del cono formado por altas presiones de inyección que es utilizada ampliamente fue presentada por Heywood [1], ésta es igualmente dependiente de la relación entre densidades:

$$\tan \frac{\Phi}{2} = \frac{4\pi}{A} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{3}}{6} \quad (2.8)$$

donde A es un parámetro de forma dado por la ecuación:

$$A = 3.0 + 0.28 \left(\frac{L}{D} \right) \quad (2.9)$$

2.1.4.3 PARÁMETROS MICROSCÓPICOS DEL CHORRO DIÉSEL

Al hacer un análisis del chorro en una escala menor, se hace relevante el conocimiento sobre la distribución de gotas y su velocidad. Dadas las características altamente transitorias del proceso de inyección, los diámetros de las gotas de combustible presentan una gran variabilidad espacial y temporal [32]. Por esta razón es común caracterizar la distribución del tamaño de gota por medio de un diámetro medio característico conocido como el diámetro medio de Sauter (SMD) y que representa el diámetro de una gota cuya razón entre su volumen y área superficial es igual a la razón del volumen frente al área superficial de un chorro completo [37]. El SMD es influenciado por las propiedades del gas ambiente y del combustible, así como por el diseño de la tobera y las condiciones de operación [38]. La Ecuación 2.12 es obtenida al igualar las ecuaciones 2.10 y 2.11 y describe la relación mencionada [35].

$$\left(\frac{V}{A}\right)_m = \frac{(\pi/6)SMD^3}{\pi SMD^2} = \frac{SMD}{6}, \quad (2.10)$$

$$\left(\frac{V}{A}\right)_{chorro} = \left(\sum_{i=1}^n d_i^3\right) / \left(\sum_{i=1}^n d_i^2\right). \quad (2.11)$$

$$SMD = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^3}{\sum_{i=1}^n d_i^2}. \quad (2.12)$$

La caracterización experimental de la distribución de gotas es posible realizarla por medio de técnicas láser como PDA (*Phase Doppler Anemometry*), que además de aportar el diámetro y distribución, adicionalmente proporciona información sobre la velocidad de éstas.

2.2 MODELADO NUMÉRICO DEL CHORRO DE INYECCIÓN

La cantidad procesos físicos que toman lugar durante el proceso de inyección, el tiempo en el que éstos se desarrollan y la complejidad de las ecuaciones matemáticas que representan su comportamiento, hacen virtualmente imposible el encontrar soluciones analíticas (igual que en casi todos los fenómenos de la naturaleza) que respondan al sin número de preguntas que surgen al iniciar cualquier tipo análisis. Debido a esto, en la actualidad se hace uso de herramientas numéricas que permitan darle solución aproximada a las ecuaciones que rigen el fenómeno, de igual forma las correlaciones semiempíricas desarrolladas tras años de estudios, permiten simplificar en cierto grado la complejidad del problema.

El estudio numérico de los chorros de inyección utiliza principalmente las herramientas de la mecánica de fluidos computacional, por medio de la cual se resuelven

las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) que gobiernan este tipo de procesos junto a los modelos específicos que se han desarrollado para éstos. Como resultado se encuentran predicciones de comportamiento con un nivel de precisión bastante acertado.

2.2.1 CFD COMO HERRAMIENTA DE INVESTIGACIÓN

La dinámica de fluidos computacional conocida comúnmente como *CFD*, es una técnica que usa métodos numéricos y algoritmos computacionales para analizar y resolver problemas sobre el comportamiento del flujo de fluidos, las reacciones químicas y la transferencia de calor y de masa, entre otros.

Aunque el desarrollo moderno de la CFD se da con la llegada de la computación digital cerca de la década de los años 50, los orígenes del uso de sus técnicas de solución pueden ser diversos. Se le atribuye a Lewis Fry Richardson en 1910 la publicación del primer trabajo que usaba métodos de diferencias finitas y la división del espacio en celdas, para analizar los esfuerzos en una presa [39], pero no es sino hasta aproximadamente 1940 que se comienza a realizar una revisión detallada y sistemática de las publicaciones hechas en temas relacionados con métodos de solución analíticos, numéricos y gráficos para problemas de la dinámica de fluidos.

Es posible afirmar que en la década de 1960 surge formalmente la CFD como un medio para simular fluidos en movimiento y se encuentra el que probablemente se considere como el primer trabajo que utilizó computadores para modelar el flujo de fluidos, éste se llevó a cabo en el Laboratorio Nacional de Los Alamos, por el grupo T3 bajo el liderazgo de Francis H. Harlow [40]. Con el paso del tiempo la CFD ha cambiado rápidamente, ganando más fuerza y ha dejado de ser una herramienta de uso exclusivo en la investigación, pasando a ser usada ampliamente en la industria para resolver problemas de ingeniería.

En un análisis CFD se realiza una discretización tanto del espacio analizado

como de las ecuaciones involucradas, el tipo de técnica está fuertemente ligada a la dimensión del problema y en el caso de problemas de tres dimensiones es el método de volúmenes finitos uno de los más utilizados.

2.2.1.1 MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS

La aplicación del método de volúmenes finitos (MVF) conlleva a la transformación de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) en un conjunto de ecuaciones algebraicas cuya solución se da en espacios *discretos* (celdas) al interior de una geometría *mallada*. Las EDP pueden ser expresadas por una ecuación general de conservación. Si la variable dependiente (propiedad de análisis) es denotada por ϕ , se tiene que:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\mathbf{u}) = \text{div}(\Gamma \text{grad } \phi) + S_\phi \quad (2.13)$$

La Ecuación 2.13 es conocida como la ecuación de transporte para la propiedad ϕ y está conformada por el término de la razón de cambio temporal y el término convectivo del lado izquierdo de la igualdad, del lado derecho se tienen el término difusivo y el término fuente. En esta ecuación Γ representa el coeficiente de difusión, ρ la densidad del fluido y \mathbf{u} es la velocidad.

En términos generales el MVF utiliza el teorema de la divergencia de Gauss para convertir los términos divergentes en una ecuación diferencial, integrada en un pequeño volumen de control, en integrales de superficie. Tomando como base un problema de difusión unidimensional y en estado estacionario la ecuación de transporte puede ser reducida como:

$$\text{div}(\Gamma \text{grad } \phi) + S_\phi = 0 \quad (2.14)$$

Y que reescrita en otra notación es:

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S_\phi = 0 \quad (2.15)$$

Para la solución de esta ecuación por medio del MVF primero se debe realizar una división del dominio continuo en volúmenes de control discretos, este proceso es conocido como la generación de malla para un volumen físico. La Figura 2.6 ilustra como un espacio de análisis unidimensional es dividido en secciones al ubicar ciertos puntos nodales entre las fronteras A y B [41]. Cada volumen de control tiene sus fronteras completamente definidas y están ubicadas en medio de la separación entre puntos nodales, generalmente se hacen coincidir las fronteras de los volúmenes de control más externos con las fronteras físicas globales del espacio de análisis.

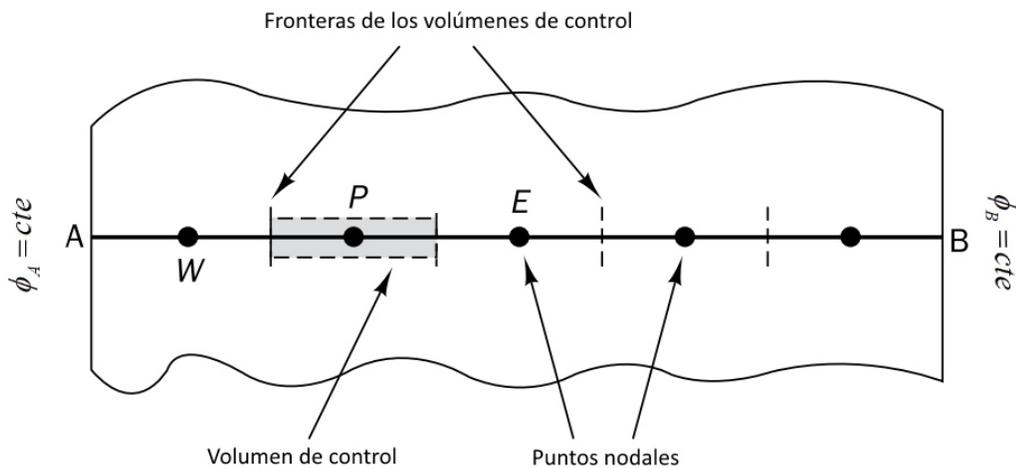


Figura 2.6: Volumen de control discreto unidimensional.

Este espacio discreto requiere de cierto tipo de notación que permita el reconocimiento de cada elemento del volumen discretizado. La Figura 2.7 permite observar la nomenclatura comúnmente usada en los métodos CFD [41]. En ésta, un punto nodal es identificado como P y los nodos vecinos a éste son llamados W y E (para un espacio unidimensional esto representaría el nodo al oeste de P y el nodo al este de P , en un espacio bidimensional surgen de forma adicional los nodos al norte y al sur de P). De igual forma las fronteras del volumen de control centrado en P

tendrán por nombre w y e , siendo así las fronteras al oeste y al este respectivamente. Por último, las distancias que separan el nodo P de los nodos W y E son definidas como δx_{WP} y δx_{PE} , de forma similar la separación entre las fronteras oeste y este con el nodo P son denominadas como δx_{wP} y δx_{Pe} , mientras que la distancia entre fronteras del mismo nodo será δx_{we} . Es así como todo el volumen discreto puede ser nombrado, este proceso puede ser fácilmente extrapolado a espacios bidimensionales y tridimensionales.

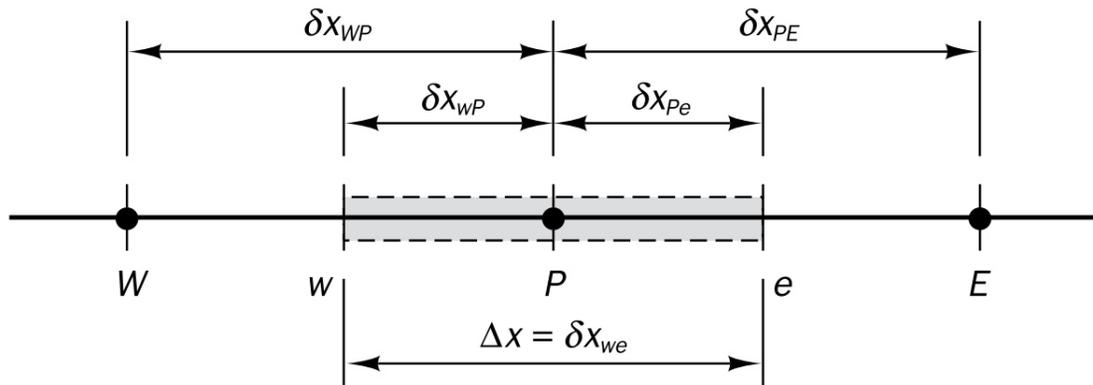


Figura 2.7: Nomenclatura de un volumen de control discretizado.

Igualmente que el espacio de análisis debe ser discretizado, las ecuaciones a resolver también deben estar en términos discretos. Lograr esto es el punto clave del MVF y se lleva a cabo al integrar las ecuaciones de gobierno sobre el volumen de control para el punto nodal P y que por medio del teorema de la divergencia de Gauss los elementos divergentes se convierten en una integral de superficie.

$$\int_{\Delta V} \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dV + \int_{\Delta V} S_{\phi} dV = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (2.16)$$

Donde A representa el área transversal de la cara del volumen de control, ΔV es el volumen y \bar{S} es el valor promedio de generación sobre el volumen de control. Es observable que la ecuación discretizada tiene una interpretación física relacionada con el balance de la propiedad ϕ , cuando ésta pasa sobre el volumen de control

centrado en el nodo P .

Los gradientes de la propiedad ϕ a través del volumen de control en la dirección establecida y el valor del coeficiente de difusión Γ , pueden ser calculados por medio de la definición de derivada y aproximaciones lineales entre las fronteras del volumen del control y el nodo P . De esta forma para el coeficiente de difusión y utilizando la diferenciación central se tiene que,

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2}, \quad \Gamma_e = \frac{\Gamma_P + \Gamma_E}{2} \quad (2.17)$$

Y los términos del gradiente de difusión son evaluados como

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad (2.18)$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad (2.19)$$

El término fuente de la Ecuación 2.16 puede estar en función de una variable dependiente, de tal forma que en el MVF éste puede ser aproximado de una forma lineal como $\bar{S}\Delta V = S_U + S_p\phi_P$. Al sustituir las ecuaciones 2.17, 2.18, 2.19 y la aproximación del término fuente detalla anteriormente en la Ecuación 2.16, se obtiene

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) + (S_u + S_p\phi_P) = 0 \quad (2.20)$$

Al reorganizar la ecuación anterior y reuniendo términos semejantes se tiene:

$$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w - S_p \right) \phi_P = \left(\frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) \phi_W + \left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) \phi_E + S_u \quad (2.21)$$

En la Ecuación 2.21 es fácilmente identificable que para los términos ϕ_W , ϕ_E

y ϕ_P se pueden reducir sus términos acompañantes a los coeficientes a_W , a_E y a_P respectivamente, con lo que esta ecuación puede tomar la forma

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + S_u \quad (2.22)$$

De esta forma la Ecuación 2.22 es una expresión lineal para solución de la ecuación de transporte de un problema de difusión unidimensional, evaluada en un volumen de control centrado en el nodo P . Si este procedimiento es extendido para todos los nodos contenidos en el espacio físico discretizado, se obtendrá un conjunto de ecuaciones lineales algebraicas solucionables por técnicas matriciales, esto arrojaría la distribución de la propiedad ϕ en todo el dominio de análisis.

2.2.2 DESCRIPCIÓN MATEMÁTICA DEL FENÓMENO

La inyección de un combustible líquido en un medio gaseoso, es un fenómeno multifásico que se modela matemáticamente como la conjunción de un análisis continuo y otro discreto. El análisis desde un punto de vista continuo comprende todas las variaciones presentes en la fase gaseosa, que está conformada por compuestos como nitrógeno (condiciones no reactivas) o aire y combustible evaporado. Por su lado, el análisis discreto se enfoca principalmente en el comportamiento de la fase líquida, cuyo componente relevante son las gotas de combustible líquido.

A partir de este momento se realiza una descripción de las ecuaciones que gobiernan el fenómeno de inyección. Las ecuaciones de conservación presentadas en este trabajo, así como los contenidos relacionados al modelado numérico, han sido extraídos a partir de la teoría expuesta por Baumgarten, Currie, Chung y Malalasekera *et al.* [35, 39, 41, 42].

2.2.2.1 DERIVADA MATERIAL

En el enfoque discreto utilizado para analizar el comportamiento de las gotas líquidas, se hace relevante el conocimiento de la posición en el espacio de una partícula específica como una función del tiempo, obteniendo a partir de ésta toda la información restante (velocidad y aceleración por ejemplo). Este enfoque es conocido como una descripción Lagrangiana, en la que la variación de una propiedad ϕ se encuentra descrita por:

$$\phi = \phi(p, t) \tag{2.23}$$

Aquí, p representa una partícula específica y para describir el desarrollo espacial y temporal en todo el campo de análisis es necesario conocer el comportamiento de cada elemento del líquido dentro de éste.

En contraste y debido a las características propias de un fluido gaseoso, es conveniente realizar para éste un análisis de sus propiedades de interés (densidad, temperatura, presión, velocidad, entre otras) basándose en el concepto de medio continuo, el cual establece que la variación de sus propiedades se da de forma ininterrumpida en todo el espacio de análisis. Dichas propiedades del flujo son descritas como una función de un punto en el espacio para un instante de tiempo determinado, de esta forma tenemos que para una propiedad ϕ su representación para un tiempo y punto del espacio específicos será:

$$\phi = \phi(\vec{x}, t) \tag{2.24}$$

Con base en esto, la completa descripción del campo de fluido se obtendrá al aplicar esta aproximación a cada punto del espacio, este enfoque es comúnmente conocido como una descripción Euleriana.

Los resultados obtenidos de la aplicación por separado del enfoque Euleriano

y Lagrangiano a un problema determinado deben ser iguales. Como consecuencia directa de este planteamiento se encuentra el concepto de la derivada material (también conocida como derivada sustancial o total):

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + u_1 \frac{\partial\phi}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial\phi}{\partial x_2} + u_3 \frac{\partial\phi}{\partial x_3} \quad (2.25)$$

que en notación vectorial toma la forma:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \phi \quad (2.26)$$

La derivada material representa el cambio total en la propiedad ϕ vista por un observador que sigue el flujo del fluido y se enfoca en una porción determinada de éste (partícula). La primer derivada parcial del lado derecho de la ecuación ($\partial\phi/\partial t$) es la derivada local y describe el cambio temporal de ϕ en un punto específico del espacio, este término será reducido a cero en el caso de estudiar un fluido en estado estable. El segundo término de la ecuación 2.26 (unión de los tres términos restantes de la ecuación 2.25) es denominado como la derivada convectiva, y representa el cambio de ϕ con el cambio de posición en el espacio. Con esto es posible afirmar que la aproximación Euleriana permite distinguir entre los cambios locales con el tiempo y los efectos convectivos mientras que la aproximación Lagrangiana no marca dicha diferencia.

2.2.2.2 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN EN LA FASE CONTINUA

CONSERVACIÓN DE LA MASA.

Al considerar que una porción de masa perteneciente a un fluido y cuyo volumen es V , se puede observar que su tamaño y forma pueden cambiar pero su cantidad de masa es invariante, a este hecho se le conoce como el principio de conservación de la masa y es aplicable siempre y cuando no existan reacciones nucleares al interior de

dicho volumen. Este principio se puede formular de forma Lagrangiana como:

$$\frac{Dm_{sis}}{Dt} = 0 \quad (2.27)$$

Al realizar un balance de masa sobre un volumen diferencial ($dV = dx_1 dx_2 dx_3$) fijo en el espacio, como el que se muestra en la Figura 2.8, la densidad de masa al interior de dicho volumen cambiará con base en:

$$\frac{\partial}{\partial t} (dx_1 dx_2 dx_3 \rho) = d\dot{m}_{x_1} + d\dot{m}_{x_2} + d\dot{m}_{x_3} \quad (2.28)$$

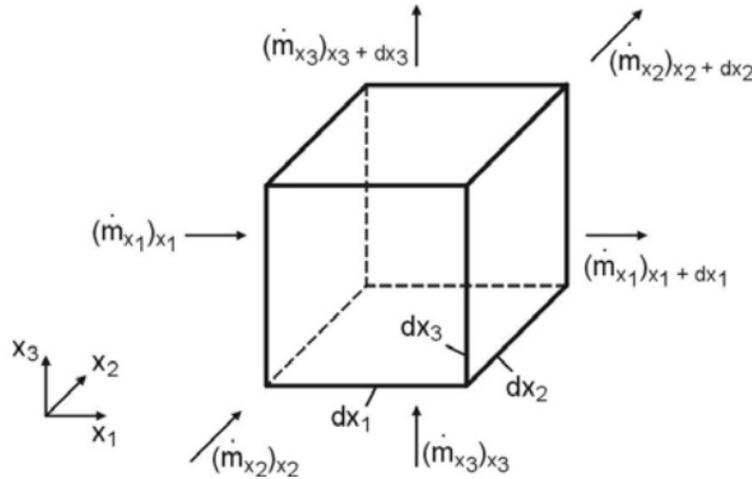


Figura 2.8: Flujos másicos entrando y saliendo del volumen de control.

Si se considera el balance de masa en la dirección x_1 se tiene que

$$d\dot{m}_{x_1} = (\dot{m}_{x_1})_{x_1} - (\dot{m}_{x_1})_{x_1+dx_1} = dx_2 dx_3 (\rho u_1)_{x_1} - dx_2 dx_3 (\rho u_1)_{x_1+dx_1} \quad (2.29)$$

El Segundo término del lado derecho de la Ecuación 2.29 puede ser expandido por una serie de Taylor truncada como:

$$(\rho u_1)_{x_1+dx_1} = (\rho u_1)_{x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} ((\rho u_1)_{x_1} dx_1) \quad (2.30)$$

Con lo que finalmente se obtiene que el balance de masa en la dirección x_1 es

$$dm_{x_1} = -dx_2 dx_3 \frac{\partial}{\partial x_1} (\rho u_1)_{x_1} dx_1 \quad (2.31)$$

Realizando un tratamiento similar a las direcciones restantes, es posible obtener expresiones similares para representar el balance de masa. Estos tres resultados son reemplazados en la Ecuación 2.28; Por último, es de notar que las ecuaciones aquí deducidas se encuentran en términos del volumen ($dx_1 dx_2 dx_3$) y la única solución posible para que se cumpla la conservación de la masa es que éste sea cero. Con todo lo anterior podemos escribir la ley de continuidad como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1} (\rho u_1) + \frac{\partial}{\partial x_2} (\rho u_2) + \frac{\partial}{\partial x_3} (\rho u_3) = 0 \quad (2.32)$$

Que en notación vectorial toma la forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.33)$$

Esta última puede ser escrita bajo notación de Einstein como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (2.34)$$

En la Ecuación 2.34 puede ser aplicada la regla del producto al segundo término, esto produce que la conservación de la masa se exprese como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.35)$$

donde $D\rho/Dt$ representa la derivada material de ρ . Por último, si el fluido es incompresible (su densidad es constante), la ecuación de continuidad se reduce a

$$\nabla \cdot \vec{u} = \text{div}(\vec{u}) = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.36)$$

CONSERVACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO.

La segunda ley de Newton establece que la suma de todas las fuerzas externas que actúan sobre un sistema es igual a la tasa de cambio de la cantidad de movimiento de éste. Dicho principio se representa matemáticamente como:

$$\frac{D\vec{M}}{Dt} = \sum \vec{F}, \quad (2.37)$$

Si se expresa la Ecuación 2.37 en términos de un volumen de control fijo en el espacio se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{cv} \rho \vec{u} dV + \int_{cs} \rho \vec{u} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dA = \sum \vec{F}, \quad (2.38)$$

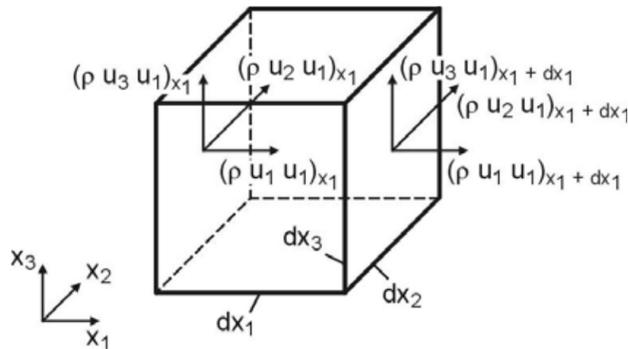


Figura 2.9: Flujos de cantidad de movimiento entrando del volumen de control.

La ecuación de la cantidad de movimiento está basada en el principio de que su cambio con el tiempo al interior del volumen de control es igual a la suma de todos los flujos de cantidad de movimiento entrando en el volumen menos la suma

de todos los flujos que salen de éste (Figura 2.9), más la suma de todas las fuerzas externas representadas en los esfuerzos normales y cortantes sobre las superficies del volumen de control (Figura 2.10).

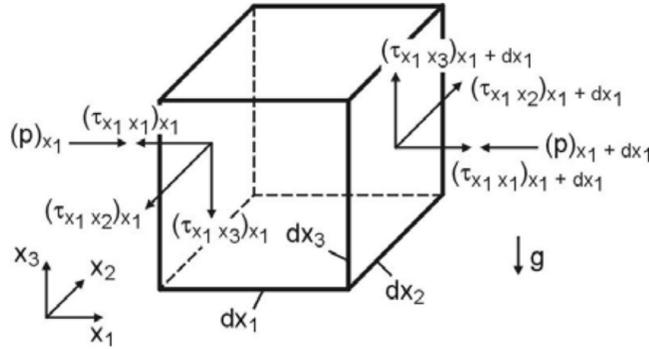


Figura 2.10: Esfuerzos normales y cortantes.

Realizando un balance similar al usado en la deducción de la conservación de la masa es posible obtener una expresión que representa toda la conservación de la cantidad de movimiento en la dirección x_1 como:

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du_1}{Dt} &= \rho \left(\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + u_3 \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{x_1 x_1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{x_2 x_1}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{x_3 x_1}}{\partial x_3} + f_1, \end{aligned} \quad (2.39)$$

De igual forma, las ecuaciones correspondientes para las direcciones x_2 y x_3 son:

$$\rho \frac{Du_2}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{x_1 x_2}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{x_2 x_2}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{x_3 x_2}}{\partial x_3} + f_2, \quad (2.40)$$

$$\rho \frac{Du_3}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_3} + \frac{\partial \tau_{x_1 x_3}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{x_2 x_3}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{x_3 x_3}}{\partial x_3} + f_3, \quad (2.41)$$

Al aplicar la notación de Einstein estas tres ecuaciones pueden ser reescritas de manera más simple:

$$\rho \frac{Du_j}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + f_j, \quad (2.42)$$

donde el término τ_{ij} representa el tensor de esfuerzos y que tiene en cuenta la transferencia de cantidad de movimiento debido a la fricción. La relación entre los esfuerzos cortantes y la velocidad puede ser expresada para flujos en tres dimensiones de la siguiente forma:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (2.43)$$

El término δ_{ij} presente en la Ecuación 2.43 es el símbolo de Kronecker, su valor será igual a 1 cuando $i = j$ y 0 en el caso que $i \neq j$. La representación completa del movimiento de un fluido Newtoniano se da por las conocidas ecuaciones de Navier-Stokes, cuya expresión general es:

$$\rho \frac{Du_j}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \right) + f_j, \quad (2.44)$$

Esta forma general se ve simplificada si se considera que el fluido es incompresible:

$$\rho \frac{Du_j}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2} + f_j, \quad (2.45)$$

y en forma vectorial libre la Ecuación 2.45 se reescribe:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) - \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \vec{f}. \quad (2.46)$$

CONSERVACIÓN DE LA ENERGÍA.

El principio de conservación de la energía resulta de la aplicación de la primera ley de la termodinámica a un elemento de fluido, por medio de ésta se define que los

cambios en la energía interna en dicho elemento de fluido son iguales a la suma del trabajo realizado sobre éste y cualquier cantidad de calor agregada al mismo.

De esta forma se tiene que el cambio total de energía en el sistema de análisis está determinado por:

$$\frac{DE_t}{Dt} = \dot{Q} + \dot{W}, \quad (2.47)$$

donde dQ/dt y dW/dt son la cantidad de calor y trabajo por unidad de tiempo transferidos al sistema. A su vez, E_t representa la energía total, que está constituida por la energía interna ρeV (V es el volumen y e es la energía interna por unidad de masa), la energía cinética $V\rho u^2/2$ y la energía potencial $-V\rho\vec{g}\vec{x}$ (\vec{x} es la posición del sistema en el tiempo t y \vec{g} es la aceleración de la gravedad). Teniendo en cuenta lo anterior y en términos de un volumen de control, la Ecuación 2.47 se puede expresar como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{cv} e_t \rho dV + \int_{cs} \rho e_t \vec{u} \cdot \vec{n} dA = \dot{Q} + \dot{W}, \quad (2.48)$$

donde para la Ecuación 2.48, se tiene que:

$$e_t = \frac{E_t}{m} = e + \frac{|\vec{u}|^2}{2} - \vec{g} \cdot \vec{x}. \quad (2.49)$$

Al plantear un análisis como el realizado en el caso de la conservación de la masa y la cantidad de movimiento, se debe considerar el cambio temporal de la energía en un volumen diferencial como el de la Figura 2.11.

De esta forma la energía total del elemento de fluido está determinada por:

$$E_t = \left(\rho e + \rho \frac{|\vec{u}|^2}{2} \right) dx_1 dx_2 dx_3, \quad (2.50)$$

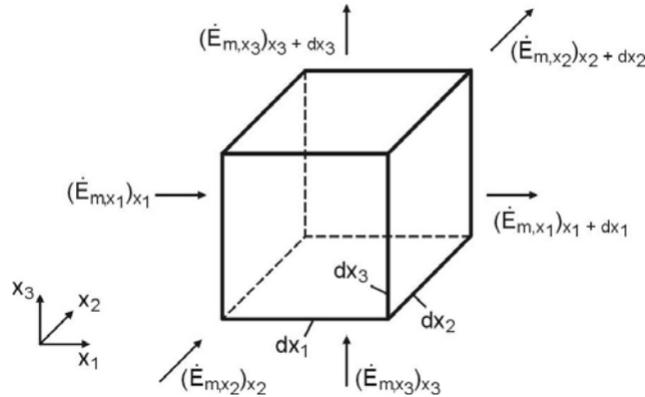


Figura 2.11: Flujos convectivos de energía a través del volumen de control.

y los cambios de energía al interior del volumen de control se rigen por los flujos de energía entrando y saliendo éste, más la energía generada en su interior. Es así como la ecuación de la energía puede ser escrita como:

$$E_t = \left(\rho e + \rho \frac{|\vec{u}|^2}{2} \right) dx_1 dx_2 dx_3 = \dot{E}_m + \dot{Q} + \dot{W}_p + \dot{W}_\tau + \dot{W}_g + \dot{W}_s, \quad (2.51)$$

En la Ecuación 2.51 dE_m/dt representa la energía que atraviesa el volumen de control como consecuencia de los flujos de masa, dQ/dt hace referencia al flujo de calor, dW_p/dt es el trabajo realizado por la presión sobre las fronteras del volumen, dW_τ/dt es el trabajo producido por la fricción viscosa, dW_g/dt expresa el trabajo relacionado a las fuerzas de cuerpo y dW_s/dt son todas las fuentes de energía que aparecen dentro del volumen, por ejemplo las reacciones químicas.

Realizando balances para cada uno de los tipos de energía que interactúan con el volumen de control es posible llegar a una expresión matemática que agrupa todos estos cambios para un fluido Newtoniano:

$$\rho \frac{De}{Dt} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - p(\nabla \cdot \vec{u}) + \mu \Phi + \frac{\dot{Q}_s}{dx_1 dx_2 dx_3}. \quad (2.52)$$

En la Ecuación 2.52 el término Φ es conocido como la función de disipación

viscosa, expresada como:

$$\Phi = 2 \left[\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} \right] + \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right)^2 \quad (2.53)$$

FLUJOS TURBULENTOS.

El modelado numérico de los fenómenos que ocurren durante un proceso de inyección, requiere del análisis preciso de las consecuencias de la turbulencia del flujo sobre las propiedades de interés.

Dado que los altos números de Reynolds (presentes en todo proceso de atomización de combustible) generan altos niveles de turbulencia, es necesario resolver las ecuaciones de Navier-Stokes en intervalos de tiempo y variaciones espaciales lo suficientemente pequeñas para poder resolver los diminutos *eddies* que se presentan, cuyos tamaños se encuentran a una de escala de 0.01 mm.

La solución de los problemas de la forma antes mencionada es conocida como DNS (*Direct Numerical Simulation*), y aunque teóricamente es posible realizarla, en la práctica no es eficiente debido al alto consumo de recursos computacionales que esta aproximación presenta.

LES (*Large Eddy Simulation*) es una técnica usada para el análisis de flujos turbulentos que no requiere de mallas tan finas como las de DNS. LES realiza una separación entre grandes y pequeños *eddies*, los de mayor tamaño son elegidos para ser calculados (resueltos) mientras que los pequeños son modelados. Esta separación está fundamentada en el hecho de que los *eddies* grandes contienen más información acerca de la energía, siendo más importantes para el transporte de las propiedades de interés, dejando así que los *eddies* de menor tamaño sean descritos por submodelos de esfuerzos de Reynolds, con base en esto existen dos pasos importantes en un

análisis LES: el filtrado y modelado escalado a una submalla.

El consumo de recursos computacionales de LES es menor que el de DNS, pero aún sigue siendo inadecuado para aplicaciones de ingeniería donde se requiere una solución de problemas más continua y rápida.

Ecuaciones RANS

La modelación de flujos por medio de métodos estadísticos como las ecuaciones RANS (*Reynolds averaged Navier-Stokes*), permiten tener en cuenta las fluctuaciones aleatorias que caracterizan la turbulencia. El método RANS en combinación con modelos de turbulencia es actualmente el método más utilizado en aplicaciones ingenieriles.

En este tipo de aproximación las propiedades de interés son divididas en dos, cantidades promediadas y componentes de las fluctuaciones. Esto resulta en la aparición de nuevas incógnitas en las ecuaciones de gobierno, haciendo necesaria la utilización de las ecuaciones RANS para cerrar el sistema. El proceso de separación es conocido como descomposición de Reynolds:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad \rho = \bar{\rho} + \rho', \quad T = \bar{T} + T'. \quad (2.54)$$

En las propiedades del flujo descritas por la Ecuación 2.54 la barra denota el promedio temporal y el apóstrofe (') la fluctuación superpuesta a éste. La Figura 2.12 presenta un ejemplo de la relación entre ambas componentes de una propiedad del flujo.

El promedio temporal de una propiedad ϕ estará determinado por:

$$\bar{\phi}_i = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi_i(\vec{x}, t) dt. \quad (2.55)$$

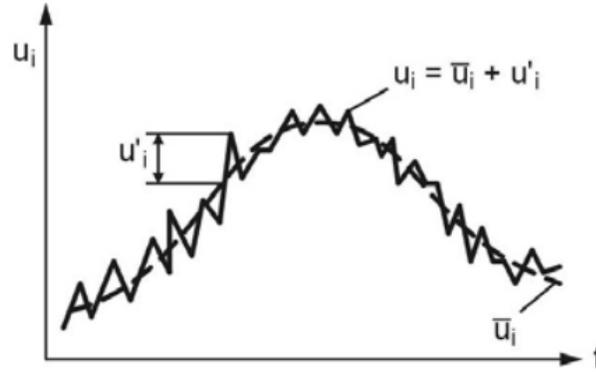


Figura 2.12: Flujo turbulento inestable.

El promedio temporal Δt presente en la Ecuación 2.55, debe ser compatible con la escala de temporal de las fluctuaciones turbulentas, no solo para la propiedad Φ si no también para las otras propiedades presentes en el dominio físico.

Las ecuaciones RANS son obtenidas al sustituir la descomposición de Reynolds dentro de las ecuaciones de conservación, para posteriormente promediarlas temporalmente. Con esto el flujo turbulento queda descrito por las ecuaciones de conservación en términos de propiedades promediadas temporalmente y como consecuencia se pierde la información de las propiedades fluctuantes turbulentas. Es por esta razón que se deben utilizar modelos de turbulencia y así lograr cerrar el sistema de ecuaciones nuevamente.

Si se sustituye la descomposición de términos dentro de la ecuación de continuidad y se promedia temporalmente, el principio de conservación de la masa para un flujo bidimensional toma la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} + \rho') + \frac{\partial}{\partial x_1}[(\bar{\rho} + \rho')(\bar{u}_1 + u'_1)] + \frac{\partial}{\partial x_2}[(\bar{\rho} + \rho')(\bar{u}_2 + u'_2)] = 0. \quad (2.56)$$

Teniendo en cuenta las siguientes reglas de promediado:

$$\begin{aligned} \overline{f'} &= 0, \quad \overline{\overline{f}} = \overline{f}, \quad \overline{f\overline{g}} = \overline{f}\overline{g}, \quad \overline{f'\overline{g}} = 0, \quad \overline{f + g} = \overline{f} + \overline{g}, \\ \overline{fg} &= \overline{f}\overline{g} + \overline{f'g'}, \quad \frac{\partial \overline{f}}{\partial s} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial s}, \end{aligned} \quad (2.57)$$

donde f y g son dos propiedades del flujo turbulento, de esta forma la ecuación de continuidad toma la forma:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{\rho u_1}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\overline{\rho u_2}) + \frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{\rho' u_1'}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\overline{\rho' u_2'}) = 0. \quad (2.58)$$

Para obtener las ecuaciones RANS de conservación de cantidad de movimiento y energía se debe hacer un procedimiento similar. Por ejemplo, para el caso de la cantidad de movimiento en la dirección x_1 de un flujo compresible, en dos dimensiones y en ausencia de fuerza externas se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u_1} + \overline{\rho' u_1'}) + \frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{\rho u_1^2}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\overline{\rho u_1 u_2}) + \frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{\rho u_1'^2}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\overline{\rho u_1' u_2'}) \\ + \frac{\partial}{\partial x_1}(\overline{\rho' u_1'^2}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\overline{\rho' u_1' u_2'}) + \frac{\partial}{\partial x_1}(2\overline{u_1 \rho' u_1'}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\overline{u_1 \rho' u_2'} + \overline{u_2 \rho' u_1'}) \\ = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_1} + \frac{\partial \overline{\tau_{x_1 x_1}}}{\partial x_1} + \frac{\partial \overline{\tau_{x_2 x_1}}}{\partial x_2}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Como puede observarse en la Ecuación 2.59, la complejidad y cantidad de términos que resultan de efectuar el promedio temporal de Reynolds aumenta significativamente cuando es comparada con la ecuación de continuidad (Ecuación 2.58).

Una opción de trabajo que reduce la complejidad de las ecuaciones es el uso de la técnica de A. Favre, este procedimiento es conocido como promedio ponderado de masa. El promedio de Favre resulta en ecuaciones de conservación similares a las originales y que contienen pocos términos adicionales producto del efecto de la turbulencia.

El promedio de Favre en una propiedad del flujo que se obtiene al dividir el producto promediado temporalmente de la propiedad de interés y la densidad por

el promedio temporal de la densidad. El producto de la propiedad por la densidad se define de la siguiente forma:

$$\overline{\rho\phi_i} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} (\rho\phi_i) dt, \quad (2.60)$$

por lo que el promedio de Favre quedará como:

$$\tilde{\phi}_i = \frac{\overline{\rho\phi_i}}{\bar{\rho}}. \quad (2.61)$$

Las propiedades del flujo son nuevamente divididas en dos, un valor promedio ($\tilde{\phi}$) y un valor fluctuante (ϕ''), por ejemplo:

$$u_i = \tilde{u}_i + u_i'', \quad T = \tilde{T} + T'' \quad (2.62)$$

Esto es realizado a todas las propiedades del flujo a excepción de la presión estática y la densidad que solo son promediadas temporalmente:

$$\rho = \bar{\rho} + \rho', \quad p = \bar{p} + p'. \quad (2.63)$$

A partir de estas definiciones y usando reglas de promediado las ecuaciones de conservación pueden ser obtenidas, tomando las siguiente forma en el caso de la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho(\tilde{u}_i + u_i'')})}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\rho u_i''}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.64)$$

la ecuación de la cantidad de movimiento:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{D\tilde{u}_j}{Dt} &= \bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{u}_i)}{\partial x_i} \\ &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) \quad , \quad (2.65) \end{aligned}$$

y la ecuación de energía resulta en:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} c_p \frac{D\tilde{T}}{Dt} &= \bar{\rho} c_p \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\bar{\rho} c_p \tilde{T})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} c_p \tilde{T} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{q}_i + c_p \overline{\rho T'' u_i''}) \quad , \quad (2.66) \end{aligned}$$

En las ecuaciones 2.65 y 2.66 aparecen términos adicionales como el tensor de esfuerzos ($\bar{\tau}_{ij}$), el flux de calor (\bar{q}_i), estos deben ser igualmente obtenidos por medio del promedio de Favre. Para mayor profundidad acerca de estos procedimientos pueden ser revisados los trabajos de Baumgarten y Chung [35, 39].

Es comúnmente asumido que la turbulencia tiene un efecto sobre la ecuación de la cantidad de movimiento, éste puede ser representado como un incremento en la viscosidad. Al derivar una expresión del tensor de esfuerzos que contenga esta premisa se obtiene el conocido modelo de viscosidad para los *eddies*

$$\bar{\tau}_{ij,t} = -\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad . \quad (2.67)$$

En la Ecuación 2.67 $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ o $\delta_{ij} = 0$ si son diferentes. El término μ_t es conocido como la viscosidad turbulenta, pero no representa una propiedad del fluido si no como una consecuencia de la turbulencia sobre el flujo. Por último el término k está denominado como la energía cinética turbulenta, determinada por

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} = \frac{1}{2} (\overline{u_1' u_1'} + \overline{u_2' u_2'} + \overline{u_3' u_3'}) \quad . \quad (2.68)$$

MODELOS DE TURBULENCIA

Un modelo de turbulencia tiene la finalidad de relacionar la viscosidad de los *eddies* turbulentos con las ecuaciones promediadas por el método RANS. Existen diversas opciones que permiten cerrar el sistema de ecuaciones pero éstas dependen del tipo de flujo turbulento que se está estudiando, puesto que la complejidad de los fenómenos turbulentos impide que haya un solo modelo que prediga todos los comportamientos de las ecuaciones de Navier-Stokes que se pueden presentar. Por esta razón los modelos de turbulencia solo pueden considerarse como aproximaciones y no leyes universales.

De acuerdo con el número de ecuaciones EDP necesarios para su descripción, los modelos de turbulencia están clasificados como algebraicos (cero EDP) y de una o dos ecuaciones. Dado que los fenómenos del proceso de inyección se desarrollan en zonas confinadas y a escalas de longitud pequeñas, el modelo de turbulencia que mejor se acopla es el denominado $k - \epsilon$.

MODELO DE TURBULENCIA $k - \epsilon$

La presencia del término de viscosidad turbulenta requiere de la utilización de un modelo de turbulencia que permita correlacionar éste con las ecuaciones RANS. El modelo $k - \epsilon$ fue publicado por Launder y Spalding en el año de 1974 y en la actualidad es uno de los más usados para la modelación de flujos turbulentos que se encuentran confinados.

La viscosidad turbulenta posee la misma dimensión que las moléculas, resulta del producto de una velocidad y una longitud, ésta puede ser expresada como:

$$\mu_t = C_\mu \cdot \rho \cdot l \cdot q , \quad (2.69)$$

En donde C_μ es una constante del modelo, l y q son una escala de longitud y velocidad características. La velocidad característica q es generalmente calculada co-

mo la raíz cuadrada de la energía cinética turbulenta (definida por la Ecuación 2.68) y la longitud característica puede ser relacionada con la energía cinética turbulenta por medio de la tasa de disipación ϵ como se muestra a continuación:

$$\epsilon \approx \frac{k^{3/2}}{l} . \quad (2.70)$$

En un flujo turbulento los *eddies* de mayor tamaño se encargan de transformar la energía cinética del flujo principal en energía cinética turbulenta. Esta energía transformada es transmitida por los grandes *eddies* hacia los más pequeños, siendo estos últimos los únicos que generan su disipación.

La tasa de disipación ϵ se puede ser analizada de la siguiente forma. El arrastre de un *eddy* de tamaño característico l es proporcional al producto de la velocidad relativa resultante a sus alrededores ($\overline{u'^2}$) y al área de su sección transversal (l^2), entonces la energía disipada por unidad de tiempo es proporcional a $l^2 \overline{u'^3}$. Con esto, la cantidad de energía cinética turbulenta que es disipada por unidad de volumen (ϵ), queda representada como:

$$\epsilon \approx \frac{l^2 \overline{u'^3}}{l^3} \approx \frac{k^{3/2}}{l} . \quad (2.71)$$

donde $u' = \sqrt{2k}$. Con esto la viscosidad turbulenta toma la forma:

$$\mu_t = C_\mu \cdot \rho \frac{k^2}{\epsilon} . \quad (2.72)$$

Las ecuaciones que describen la energía cinética turbulenta y su tasa disipación pueden ser obtenidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para propiedades fluctuantes. En ellas aparecen nuevos términos desconocidos que también deben ser modelados. Como resultado de esto se obtienen las siguientes expresiones:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \bar{u}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} \approx \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{C_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \epsilon, \quad (2.73)$$

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho \bar{u}_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \approx \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{C_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + C_1 \frac{\epsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k}. \quad (2.74)$$

En las ecuaciones 2.73 y 2.74 las constantes $C_\mu, C_k, C_\epsilon, C_1$ y C_2 no son universales, por lo que deben ser ajustadas para cada problema específico. Jones y Launder analizaron una gran cantidad de información experimental, con base en ello recomiendan usar:

$$C_\mu = 0.09, \quad C_k = 1.0, \quad C_\epsilon = 1.3, \quad C_1 = 1.44, \quad C_2 = 1.92. \quad (2.75)$$

2.2.2.3 DESCRIPCIÓN DE LA FASE DISCRETA

Como se ha mencionado en párrafos anteriores, la fase discreta de la modelación matemática de los chorros de inyección, se encuentra conformada por el análisis del comportamiento de las gotas resultantes de la atomización. Para tener una completa descripción de ésta se debe calcular para cada intervalo de tiempo t y para todas las posiciones $\vec{x} = (x, y, x)$ el valor del radio (r), velocidad (\vec{u}) y temperatura (T) de las millones de gotas que constituyen el chorro inyectado.

Al definir una función de probabilidad para la distribución de gotas como:

$$f(\vec{x}, \vec{u}, r, T, t) d\vec{u} dr dT, \quad (2.76)$$

se puede obtener una descripción estadística del chorro. La Ecuación 2.76 representa el número probable de gotas por unidad de volumen, en el tiempo t , en el punto \vec{x} , con velocidades en el rango $d\vec{u}$ alrededor de \vec{u} , mientras que el radio de

las gotas pertenecen al rango dr cerca de r y con temperatura en el intervalo dT en torno de T .

Se conoce como la *ecuación del chorro* a la descripción en forma diferencial de la evolución temporal de f y es obtenida por medio de una ecuación de transporte, tomando la forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}}(f\vec{u}) + \nabla_u(f\vec{a}) + \frac{\partial}{\partial T} \left(f \frac{dT}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(f \frac{dr}{dt} \right) = \dot{f}_{fuente}, \quad (2.77)$$

donde dr/dt y dt/dt representan la tasa de cambio del tamaño y temperatura de la gota (efectos de la vaporización y calentamiento), \vec{a} describe la aceleración $a = d\vec{u}/dt$ de la gota líquida y el término \dot{f}_{fuente} representa la variación en el número de gotas debida a otro tipo de procesos como ruptura del chorro o coalescencia.

Debido a la complejidad de la ecuación del chorro, ésta no puede ser resuelta de forma directa. En la actualidad para obtener una aproximación de la solución exacta, se utiliza la técnica de parcelas estocásticas (conocida por su nombre en inglés como *Stochastic-Parcel Technique*), que está basada en el método de Monte-Carlo.

El método de Monte-Carlo establece que es posible encontrar una solución aproximada de un problema complejo sin necesidad de conocer absolutamente todas las soluciones individuales que contribuyen al problema general. Un ejemplo típico es presentado en la Figura 2.13 [35], en ésta se aprecia una función $F(x)$ cuyos valores y en cada posición x son conocidos, pero que no es integrable y por lo tanto no es posible conocer el área bajo la curva.

El planteamiento principal consiste en considerar un número determinado de puntos discretos y cuya posición dentro del área $A = HL$ es distribuida de forma aleatoria. Es necesario conocer para cada punto si se encuentra encima o por debajo la curva $F(x)$. Conociendo esta información es posible establecer el tamaño del área, si al determinar la posición de cada punto discreto se establece que el 80 % se encuentra por debajo de la curva, entonces se puede afirmar que el área bajo la curva es

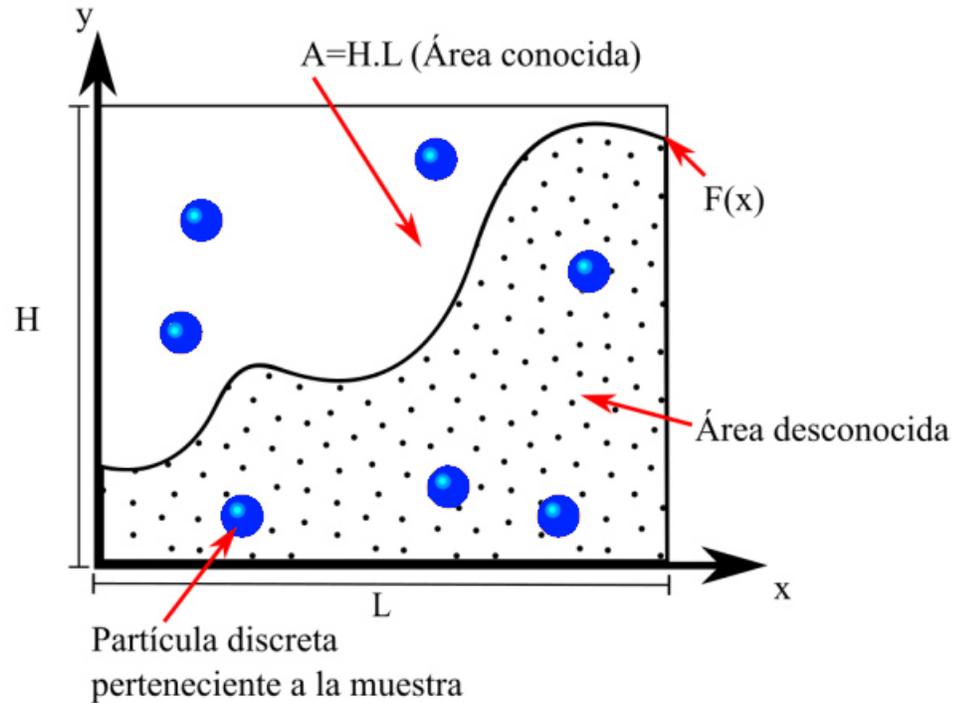


Figura 2.13: Idea básica del método Monte-Carlo.

aproximadamente el 80 % del área total A . Finalmente, cuantos más puntos discretos sean usados, más precisa será la aproximación.

Teniendo en cuenta lo anterior, el modelado del chorro consiste en calcular en detalle solo una cantidad discreta de gotas, un subconjunto de los millones de éstas presentes en el problema global. Sin embargo, la masa de combustible dentro del cilindro debe ser la correcta, por esto la masa de todas las gotas debe ser considerada, en consecuencia cada gota representativa recibe un número de gotas con idéntico tamaño, temperatura, velocidad y que tienen exactamente el mismo comportamiento y propiedades que la gota representativa. A este grupo de gotas idénticas se les llama parcelas (*parcels*). Es así como un chorro es representado por un sistema estocástico de un número discreto de *parcels*.

2.2.2.4 EL ENFOQUE LAGRANGIANO-EULERIANO

Como se ha visto, para el análisis del fenómeno de inyección de combustible dentro de una atmósfera gaseosa (como la de la cámara de combustión), se deben considerar dos fases, una del líquido disperso (discreto) y otra continua para el gas. La fase gaseosa es descrita con una formulación Euleriana por medio de las ecuaciones de Navier-Stokes en conjunto con un modelo de turbulencia, obteniendo así para todo tiempo t el comportamiento de cada parámetro relevante del flujo (componentes de velocidad, presión, densidad y temperatura) como una función de la posición (x, y, z) en todo el campo de flujo. Para la fase dispersa se hace necesario el uso de una formulación Lagrangiana, cada gota es entonces tratada como una masa puntual, cuya velocidad es reducida por fuerzas de arrastre como consecuencia de la velocidad relativa entre el gas y las gotas y su masa disminuye debido a la evaporación.

El comportamiento de ambas fases (descripción Euleriana y Lagrangiana) es acoplado por medio de la ecuación de cantidad de movimiento, la ecuación de energía y la ecuación de continuidad, debido a que existe un intercambio entre dichas fases. El efecto de la fase gaseosa es tenido en cuenta dentro de las gotas líquidas, esto se lleva a cabo al relacionar la información de cada celda como condiciones de frontera del cálculo lagrangiano cuando una gota cruza por un punto determinado en un tiempo t .

2.2.2.5 MODELADO MATEMÁTICO DEL CHORRO DE INYECCIÓN

En secciones anteriores se ha hecho notar que el proceso de formación de un chorro de combustible inyectado es un fenómeno de alta complejidad, de tal forma que existen múltiples puntos de vista al momento de formular un modelo matemático que lo describa, y aunque aun puede considerarse como un campo de estudio que no se encuentra completamente comprendido [43], hay en la actualidad buenas

aproximaciones a su comportamiento real. Estas aproximaciones son conocidas como *modelos de ruptura*, puesto que tratan acerca del rompimiento de una *vena líquida* en un conjunto de gotas.

La formación del chorro inicia en la tobera del inyector, específicamente en el orificio de salida que permite que el combustible fluya a través de él hacia la cámara de combustión, éste típicamente tiene forma cilíndrica o cónica, con diámetros entre 0.1 y 0.2mm y la caída de presión a través de él normalmente es alta (del orden de $1.8 \times 10^8 Pa$ para inyección de diésel). La alta velocidad con la que el combustible fluye por el orificio genera drásticas caídas de presión de forma local, llevando al combustible por debajo de su punto de presión de vapor y propiciando así la formación de fenómenos de cavitación al interior de la tobera [44]. Las perturbaciones generadas en el flujo hacen parte de los precursores del proceso de ruptura.

Para la descripción del proceso de ruptura se realiza una división en dos fases, la ruptura primaria y secundaria.

RUPTURA PRIMARIA.

Dadas las características del proceso de simulación con un enfoque Lagrangiano, con el que se logra describir la formación del chorro por medio del análisis de las gotas (partículas del medio discreto), se hace necesario determinar las condiciones iniciales de éstas cuando empiezan a penetrar en la cámara de combustión. La fase de ruptura primaria es la encargada de suministrar la información de las gotas iniciales, como su radio y las componentes de la velocidad iniciales, que será determinada por las condiciones del lujo al interior de los orificios de la tobera.

El procedimiento más común para la determinación de las características iniciales de las gotas es conocido como el método *Blob*, desarrollado por Reitz y Diwakar. Consta de una simple suposición, en la que se establece que no hay diferencia apreciable entre el proceso de atomización y las ruptura de gotas al iniciar la formación del chorro. Esto permite que el problema complejo de transformar un núcleo líqui-

do en un arreglo de múltiples gotas, sea reemplazado por la inserción de grandes gotas a la salida del orificio (inicio de la formación del chorro) cuyo diámetro será igual al diámetro del orificio de salida. La Figura 2.14 [35] ilustra el planteamiento establecido.

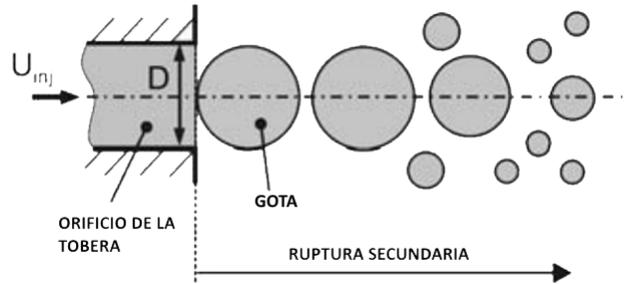


Figura 2.14: Representación del método Blob.

Dichas gotas de gran tamaño se rompen rápidamente en otras más pequeñas debido a su interacción con el gas, en un proceso de ruptura secundaria. Este comportamiento no impide que la región cercana a la salida del orificio, donde el chorro es representado por partículas líquidas de gran tamaño, sea tratado conceptualmente como un núcleo denso.

Al usar el método *blob* existen dos formas de hallar la velocidad de inyección. En la primera se asume que hay un flujo continuo de gotas al interior del orificio, por ende la conservación de la masa determina la velocidad de las gotas como:

$$U_{inj}(t) = \frac{\dot{m}_{inj}(t)}{A_o \rho_l}, \quad (2.78)$$

El planteamiento de la Ecuación 2.78 requiere del conocimiento del flujo másico de combustible, lo que normalmente requiere de instalaciones experimentales con cierto grado de complejidad.

La segunda forma en la que se emplea el método *blob* es usada cuando se desconoce el comportamiento del flujo másico. A partir de la ecuación de Bernoulli

para un flujo sin fricción se calcula un límite máximo para la velocidad, de tal forma que:

$$U_{inj,max} = \sqrt{\frac{2\Delta p_{inj}}{\rho_l}}, \quad (2.79)$$

donde Δp_{inj} es la diferencia de presión existente entre el interior de la tobera de inyección y la cámara de combustión. La velocidad $U_{inj,max}$ es reducida generalmente entre un 70 % a 90 % debido a las pérdidas de energía de acuerdo con resultados observados de forma experimental.

RUPTURA SECUNDARIA.

La interpretación física de la ruptura secundaria está ligada a la desintegración de las gotas ya existentes provenientes del proceso de ruptura primaria en otras de menor diámetro. Este proceso está relacionado a la interacción aerodinámica que existe entre las gotas y el gas ambiente. El número de Weber (Ecuación 2.80) para la fase gaseosa describe la relación entre las fuerzas internas de las gotas que intentan mantener la estructura y forma de éstas, y las fuerzas aerodinámicas que perturban la superficie de cada una de ellas hasta lograr que éstas ondas de inestabilidad sean transmitidas al interior de las mismas.

$$We_g = \frac{\rho_g u_{rel}^2 d}{\sigma}, \quad (2.80)$$

donde, σ es la tensión superficial del fluido, ρ_g es la densidad del gas, u_{rel}^2 es la velocidad relativa entre el gas y las gotas, y d es el diámetro de estas últimas. Números altos de We_g indicarán un dominio de las fuerzas aerodinámicas en el proceso, incrementando así la fragmentación de las gotas.

El valor del número de Weber permite establecer que mecanismo de ruptura se presenta cuando hay un fenómeno de atomización de un fluido.

Diversos modelos de ruptura han sido establecidos para explicar el proceso de fragmentación de gotas.

MODELO KELVIN-HELMHOLTZ

El modelo Kelvin-Helmholtz (KH) propuesto por Reitz se basa en un análisis lineal de primer orden del crecimiento de las inestabilidades en la superficie de un chorro líquido con forma cilíndrica de diámetro r_0 , éste penetra con una velocidad relativa u_{rel} dentro de un gas estacionario. Tanto el gas como el líquido son asumidos como incompresibles y el gas adicionalmente se trata como un fluido no viscoso.

En este modelo se supone que la superficie del chorro es cubierta por un espectro de ondas sinusoidales como consecuencia de la turbulencia generada al interior del orificio en la tobera. Estas ondas superficiales se ven aumentadas por la interacción aerodinámica entre el chorro y el gas producto de su velocidad relativa. La Figura 2.15 ilustra de manera gráfica este planteamiento.

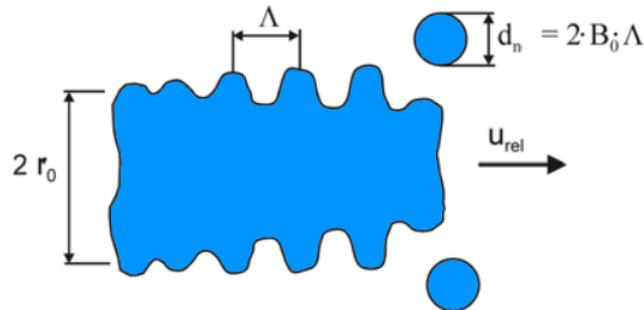


Figura 2.15: Esquema del modelo KH.

A través de un análisis linearizado de las ecuaciones de Navier-Stokes para ambas fases, se describe la relación entre la tasa de crecimiento y su longitud de onda. Si se denomina a Ω como la mayor tasa de crecimiento para una onda, se tiene que:

$$\Omega \left[\frac{\rho_l r_0^3}{\sigma} \right]^{0.5} = \frac{0.34 + 0.38 \cdot We_g^{1.5}}{(1 + Z) (1 + 1.4 \cdot T^{0.6})^{0.6}}, \quad (2.81)$$

cuya correspondiente longitud de onda será:

$$\frac{\Lambda}{r_0} = 9.02 \frac{(1 + 0.45 \cdot Z^{0.5})(1 + 0.4 \cdot T^{0.7})}{(1 + 0.865 \cdot W_{e_g}^{1.67})^{0.6}}, \quad (2.82)$$

donde:

$$Z = \frac{\sqrt{w_{e_l}}}{Re_l}, \quad T = Z \sqrt{W_{e_g}}, \quad W_{e_g} = \frac{\rho_g r_0 u_{rel}^2}{\sigma}, \quad W_{e_l} = \frac{\rho_l r_0 u_{rel}^2}{\sigma}, \quad Re_l = \frac{\rho_l r_0 u_{rel}}{\mu_l}.$$

Aquí, Z es el número de Ohnesorge, T el número de Taylor y r_0 es el radio del chorro sin perturbar.

Al aplicar esta teoría a la formación de gotas a partir de otras gotas, es asumido que el tamaño de las nuevas debe ser proporcional a la longitud de onda Λ , debido a que su formación proviene de las ondas superficiales que se produjeron en las gotas padre, de tal forma que:

$$r_n = B_0 \cdot \Lambda, \quad (2.83)$$

donde $B_0 = 0.61$ es constante. Dado que en el modelo KH no ocurre una ruptura total de la gota padre, si no que continuamente pierde masa mientras penetra en el gas, se da una contracción del radio cuya tasa de reducción a determinado tiempo depende de la diferencia entre el actual valor del radio y el radio de la gota hija, así como de un valor característico de un tiempo τ_{bu} , tal que:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_n}{\tau_{bu}}, \quad \tau_{bu} = 3.788 \cdot B_1 \frac{r}{\Lambda \cdot \Omega} \quad (2.84)$$

donde B_1 es una contante del modelo que ajustable e incluye la influencia de la turbulencia y geometría de la tobera. Para esta constante han sido propuestos valores entre 1.73 y 60. Si los valores de B_1 son altos la ruptura es reducida y por ende la

penetración aumentada, por el contrario si son bajos se incrementa la desintegración del chorro, el proceso de mezclado se lleva a cabo con mayor rapidez y la penetración es reducida.

MODELO RAYLEIGH-TAYLOR

El modelo RT (contracción de Rayleigh-Taylor), está basado en las inestabilidades en la interfaz entre dos fluidos de diferentes densidades, producto de la aceleración o desaceleración de uno frente al otro. Cuando un fluido se dirige dentro de un gas, ocurre un proceso de desaceleración como consecuencia de las fuerzas de arrastre provocadas por el gas.

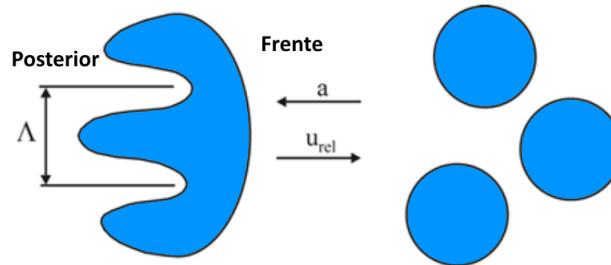


Figura 2.16: Deformación de gota.

La Figura 2.16 ilustra la deformación ocurrida en la parte posterior de una gota debido a la aceleración que se opone al movimiento de la ésta. Estas deformaciones (u ondas de inestabilidad) pueden crecer hasta lograr la desintegración de la gota en otras de menor tamaño. Es así como las fuerzas de arrastre aerodinámico inducen una fuerte desaceleración de las gotas (que salen a una alta velocidad del orificio) fomentado las inestabilidades en la interfaz líquido - gas.

$$F_{aero} = \pi r^2 c_D \frac{\rho_g u_{rel}^2 d}{2}. \quad (2.85)$$

La Ecuación 2.85 describe la fuerza de arrastre aerodinámica generada por el gas sobre las gotas líquidas, al dividirla entre la masa de la gota se tiene que la

aceleración experimentada por ésta es:

$$a = \frac{3}{8} c_D \frac{\rho_g u_{rel}^2}{\rho_l r}, \quad (2.86)$$

donde c_D es el coeficiente de arrastre de la gota. Sin considerar la viscosidad la tasa de crecimiento Ω y la longitud de onda Λ de la onda con mayor velocidad de crecimiento toman la forma:

$$\Omega = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[a(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (2.87)$$

y

$$\Lambda = C_3 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a(\rho_l - \rho_g)}}. \quad (2.88)$$

Después de un tiempo determinado, la gota se rompe en gotas más pequeñas y el diámetro de éstas es proporcional a Λ , pero la gota solo podrá fragmentarse si Λ es menor que el diámetro de la gota inicial.

La constante C_3 en la Ecuación 2.88 permite modificar la longitud de onda efectiva. Ésta incluye los efectos desconocidos de las condiciones iniciales de turbulencia y cavitación que pueden ocurrir dentro del orificio de la tobera.

RUPTURA COMBINADA

Al usar el método blob en combinación con el modelo KH se ha encontrado que los efectos del orificio sobre la ruptura primaria no son modelados satisfactoriamente, por el contrario el modelo RT solo resulta en una desintegración efectiva y rápida muy cerca del orificio de salida. Por esta razón ambos modelos (KH y RT) son normalmente usados en combinación del método blob para mejorar la descripción del fenómeno de atomización del chorro diésel.

MODELO BLOB-KH/RT Luego de que el método blob inyecta las gotas iniciales dentro del volumen de control, un primer modelo de ruptura secundaria es usado para describir los procesos relevantes de la desintegración inicial que el método blob no desarrolla correctamente y el segundo se encarga de la región del spray remanente.

La implementación del modelo KH-RT se realiza de forma competitiva, de tal forma que ambos modelos calculan de forma simultánea el crecimiento de las ondas de inestabilidad. Si el modelo RT predice un rompimiento en paso de tiempo actual, ocurre la desintegración de toda la gota bajo su mecanismo, de lo contrario el modelo KH producirá pequeñas gotas hijas y reducirá el tamaño de la gota madre.

Sin embargo, si el modelo RT es aplicado a las gotas justo cuando dejan el orificio, la reducción del tamaño de estas se realizará de forma prematura, por esta razón el modelo Rt es aplicado al chorro más allá de una distancia específica L_b y solo extracciones KH son permitidas. La Figura 2.17 ilustra este proceso.

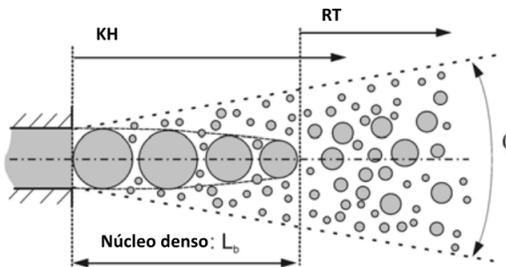


Figura 2.17: Esquema de participación - Modelo Blob-KH/RT.

OpenFOAM trae por defecto la aplicación del modelo de ruptura híbrido KH-RT y es el utilizado para desarrollar el presente trabajo.

2.3 COMBUSTIBLES Y SUS PROPIEDADES TERMOFÍSICAS Y DE TRANSPORTE

Los procesos de inyección y combustión que ocurren al interior del cilindro en un MEC, tienen una fuerte dependencia de las propiedades físicas del combustible. Como ejemplos se tiene que, la densidad y viscosidad influyen directamente en la penetración alcanzada, la tensión superficial determina el comportamiento de la fragmentación de las gotas así como su tamaño final y la presión de vapor afecta la tasa de evaporación, siendo estas propiedades solo algunas de las que intervienen en todo el proceso. Estas propiedades dependen completamente de la composición química de los combustibles, y de la naturaleza de su obtención.

2.3.1 COMBUSTIBLES DE ESTUDIO

Como se ha mencionado, el proceso de obtención de un combustible determina su composición final. Si se toma como ejemplo los combustibles renovables como el biodiésel, la gran variedad de fuentes para su obtención genera que su composición sea completamente heterogénea, generando un amplio rango de diferencias químicas entre un biodiésel producido en México y otro producido en España. Estas diferencias químicas afectan las propiedades termofísicas y de transporte (aunque en general los rangos de variación no son muy amplios), siendo de esta forma altamente relevante conocer la procedencia de un combustible y su composición química final.

El presente trabajo de investigación se centra en realizar un análisis de cuatro combustibles diésel de fuentes distintas: diésel (de origen fósil), biodiésel, farnesano y GTL.

2.3.1.1 DIÉSEL

El término diésel ha sido usado para denominar cualquier combustible que sea usado dentro de un motor Diesel, llamado así por su diseñador Rudolff Diesel. Actualmente y como consecuencia de la gran variedad de combustibles desarrollados para este tipo de máquinas térmicas, se han usado nombre más detallados, con el fin de establecer las suficientes diferencias sobre su procedencia. De esta forma el término petrodiesel (o diésel fósil) ha sido usado únicamente para declarar que el combustible es un derivado directo del petróleo.

El petrodiesel es una mezcla de familias de hidrocarburos compleja, conformada por parafinas, bencenos, aromáticos, solo por mencionar algunas. Su obtención se realiza por destilación fraccionada del petróleo crudo, a temperaturas entre el rango de 200 a 350 °C [45].

La complejidad de su composición hace extremadamente difícil ejecutar cálculos numéricos para cada tipo de hidrocarburo, por esta razón es común el uso de combustibles sustitutos, este es el caso de hidrocarburos puros como el heptano y el tetradecano [46].

El presente trabajo de investigación se toma el diésel como un componente puro para los efectos del proceso de simulación, por lo que será modelado como tetradecano (C₁₄H₃₀).

2.3.1.2 BIODIÉSEL

El biodiesel es combustible para motores de encendido por compresión obtenido a partir de aceites vegetales o grasas animales. Puede ser definido como una mezcla de metil-ésteres de ácidos grasos obtenidos por un proceso de transesterificación [47].

Su producción durante las dos últimas décadas se ha visto incrementada por su carácter renovable, lo que hace que sea una buena alternativa para disminuir la

dependencia de combustibles de origen fósil.

La composición química de un biodiésel dependerá de su fuente. Numerosos tipos de aceite vegetal son usados actualmente como materia prima en la producción de biodiésel. Adicionalmente se ha encontrado que la producción de biodiésel a partir de residuos de aceite comestible, tiene menores costos de producción, haciéndolo tomar relevancia en el mercado de los biocombustibles [48]. Generalmente los componentes de un biodiésel pueden ser reducidos un grupo de entre 5 y 8 metilésteres, lo que facilita el proceso de incorporación en estudios numéricos.

2.3.1.3 FARNESANO

El Farnesano es un biocombustible novedoso, es obtenido a partir de la hidrogenación del Farnesene, que es derivado por fermentación de azúcares a través de bacterias modificadas genéticamente para que produzcan parafinas. La empresa Amyris, de California, Estados Unidos posee la patente de su producción y está siendo evaluado internacionalmente como un posible sustituto diésel [49].

El Farnesano es un compuesto puro casi en su totalidad, se trata de un hidrocarburo ramificado conocido como trimetil-dodecano, de fórmula química $C_{15}H_{32}$ [50]. Al poseer solo este componente, el farnesano evita los problemas que trae consigo el diésel fósil y que se relacionan a los altos aromáticos y sulfuros [9].

2.3.1.4 GTL

El combustible conocido como GTL, que es una contracción de *Gas to Liquid*, es producido a partir de gas natural. Procesos de reformado autotérmico transforman el metano en un gas de síntesis compuesto por hidrógeno y monóxido de carbono. Este gas es convertido en un conjunto de hidrocarburos en un proceso llamado síntesis de Fisher-Tropsch [51].

Dado que durante el proceso de transformación es completamente controlado, es posible configurarlo con el fin de obtener ciertos tipos de parafinas y así crear una composición particular, este es el trabajo realizado por los productores que generan su propia composición específica para un mercado determinado [52].

EL GTL es entonces una mezcla de parafinas controlada, libre de aromáticos y sulfuros. permitiendo de esta manera disminuir complicaciones relacionadas con estos compuestos. Y con el aumento de las reservas de gas natural a nivel mundial, su costo de producción puede volverse lo suficientemente competitivo [53].

2.3.2 COMBUSTIBLES Y SIMULACIÓN

Desde el punto de vista computacional, la correcta modelación de los fenómenos físicos que involucran líquidos (como en el proceso de inyección) requiere información sobre el comportamiento con respecto a la temperatura de 12 propiedades termofísicas y de transporte, adicionalmente es necesario conocer ciertos parámetros del compuesto a simular como sus propiedades críticas. La Tabla 2.1 resume las propiedades que es necesario suministrar a un modelo computacional que simule procesos al interior de un MEC.

Tabla 2.1: Propiedades para modelación numérica de procesos de inyección

Propiedades críticas	Temperatura normal de ebullición
Presión de vapor	Viscosidad de la fase líquida
Entalpía de vaporización	Viscosidad de la fase vapor
Densidad	Conductividad térmica de la fase líquida
Calor específico de la fase líquida	Conductividad térmica de la fase vapor
Calor específico de la fase vapor	Tensión superficial
Segundo coeficiente viral	Difusividad del vapor

Aunque existe cierta diversidad en los trabajos experimentales sobre la medi-

ción de estas propiedades para diversos combustibles, son pocos los reportes de éstas donde se hayan trabajado en un amplio rango de temperaturas, siendo escasa en un mayor grado la información sobre las propiedades a medida que la temperatura se hace alta (por encima de 500 K). Por esta razón es necesario realizar el cálculo de las propiedades por medio de correlaciones semiempíricas, algunas de ellas son denominadas *correlaciones de grupos funcionales* puesto que el cálculo de una determinada propiedad se realiza con base en los grupos moleculares presentes en cada compuesto que conforma el combustible.

Como se ha mencionado anteriormente, los combustibles son mezclas de gran variedad de compuestos, por esta razón el cálculo de una propiedad debe realizarse de forma independiente para cada compuesto que conforma un determinado combustible. De manera posterior, la propiedad del conjunto se puede obtener por medio de reglas de mezclado. Es de uso común el uso de la regla de mezclado de Kay, representada como:

$$Q_m = \sum_{i=1}^n y_i Q_i. \quad (2.89)$$

Donde Q_m representa el valor de la propiedad Q para la mezcla de componentes Q_i , siendo y_i la fracción molar de cada componente.

A continuación se realiza una descripción detallada de cada uno de los métodos de cálculo utilizados para cada propiedad y para cada combustible.

2.3.2.1 TEMPERATURA NORMAL DE EBULLICIÓN

El cálculo de la temperatura normal de ebullición permite establecer un punto base para otras propiedades, es de vital importancia lograr una estimación suficientemente acertada y así evitar la propagación de errores en un futuro.

En la literatura se encuentran diversos métodos para sus estimación, siendo uno

de los más usados el método de Joback. Con este método se hace uso de del concepto de aportación por grupos funcionales, en donde cada grupo químico específico (metil, etil, éster, alcanos, etc.) contribuye de una forma especial a dicha propiedad [54]. La Ecuación 2.90 presenta el método de cálculo, donde N_k representa el numero de veces que el compuesto contiene un grupo funcional y tb_k es el valor específico del correspondiente grupo.

$$T_b = 198 + \sum_k N_k(tb_k). \quad (2.90)$$

Otro método avanzado de contribución de grupos bastante referenciado es el de Constantinou-Gani, éste se encuentra basado en los grupos UNIFAC [54] y mejorado al permitir que funciones más sofisticadas puedan describir lo que denominan contribuciones de segundo orden:

$$T_b = 204.359 \cdot \ln \left[\sum_k N_k(tb_{1k}) + W \sum_j M_j(tb_{2j}) \right]. \quad (2.91)$$

En la Ecuación 2.91 el término N_k y M_j son el número de grupos de primer orden y de segundo orden respectivamente. Si no existen grupos de segundo orden (o se desea calcular solo con los de primer orden) se tiene que $W = 0$, de lo contrario $W = 1$.

A partir de la literatura se puede afirmar que el método de Constantinou-Gani tiene un buen desempeño en la estimación de la temperatura normal de ebullición del biodiésel [55]. En el caso del Farnesano y el GTL sea optado por utilizar igualmente el método de Constantinou-Gani.

2.3.2.2 PROPIEDADES CRÍTICAS

Dentro de la evaluación numérica de un chorro de inyección, las propiedades críticas del combustible (líquido de estudio) establecen los límites dentro de los cuales

el cálculo de éstas pueden llevarse a cabo, adicionalmente para la estimación de otras propiedades de transporte se requiere de su conocimiento debido a su dependencia directa. Existen múltiples métodos para el cálculo de las propiedades críticas de un compuesto, cada uno de ellos presenta cierto grado de desviación con respecto a valores experimentales debido a los cambios en la estructura molecular de estos. Por lo anterior es necesario analizar que método se ajusta de mejor forma a cada tipo de compuesto perteneciente a cada combustible.

Nuevamente el método de Joback permite estimar las propiedades críticas de cada componente de los combustibles, teniendo las siguientes expresiones

$$T_c = T_b \left[0.584 + 0.965 \left(\sum_k N_k(tc_k) \right) - \left(\sum_k N_k(tc_k) \right)^2 \right]^{-1}, \quad (2.92)$$

$$P_c = \left[0.113 + 0.0032N_{atm} - \sum_k N_k(pc_k) \right]^{-2}, \quad (2.93)$$

$$V_c = 17.5 + \sum_k N_k(vc_k). \quad (2.94)$$

Constantinou-Gani también propusieron sus ecuaciones para la estimación de las propiedades críticas, siendo determinadas por las siguientes expresiones:

$$T_c = 181.128 \cdot \ln \left[\sum_k N_k(tc1_k) + W \sum_j M_j(tc2_j) \right]. \quad (2.95)$$

$$P_c = \left[\sum_k N_k(pc1_k) + W \sum_j M_j(pc2_j) + 0.10022 \right]^{-2} + 1.3705, \quad (2.96)$$

$$V_c = -0.00435 + \left[\sum_k N_k(vc1_k) + W \sum_j M_j(vc2_j) \right] \quad (2.97)$$

Un tercer método con buenos resultados de estimación cuando se trata del volumen crítico es el de Marrero-Pardillo, cuya expresión es:

$$V_c = 25.1 + \sum_k N_k(vcb_k) \quad (2.98)$$

Mientras que para el cálculo de la presión crítica, el método de Ambrosse, también es comúnmente utilizado.

$$P_c = M \left[0.339 + \sum \delta p \right]^{-2}, \quad (2.99)$$

2.3.2.3 DENSIDAD DE LA FASE LÍQUIDA

La importancia de esta propiedad radica en su influencia directa en la penetración del chorro, la formación de gotas en la atomización y la evaporación de éstas. Distintos trabajos se han realizado para lograr obtener una expresión que permita su correcta aproximación, estos difieren en su precisión o desviación relativa. Uno de los métodos más aceptados es el de Rackett y Hankinson, que para mezclas de compuestos puros propone su cálculo a partir de la temperatura, presión crítica y la fracción molar de cada componente y un factor de compresibilidad único para cada compuesto llamado Z_{RA} implementado por Spancer and Danner, de tal forma que:

$$v_s = \frac{RT_C}{P_c} Z_{RA}^{[1+(1-T_r)^{2/7}]}, \quad (2.100)$$

donde el factor Z_{RA} es calculado por Soave [56] como:

$$Z_{RA} = 0.2908 - 0.099\omega + 0.04\omega^2. \quad (2.101)$$

2.3.2.4 VISCOSIDAD DE LA FASE LÍQUIDA

La viscosidad determina las pérdidas de energía de los fluidos en movimiento; estas pérdidas por fricción cobran gran importancia en el proceso de inyección de un motor diesel, pues de ellas dependen cantidades tan importantes como la longitud de penetración y la velocidad con la que el chorro inyectado sale por la tobera del inyector.

Para el caso de un biodiésel, se presenta una correlación producto del trabajo de Ramirez-Verduzco, et al. Ellos hicieron un análisis de los métodos de estimación, compararon con resultados experimentales y dedujeron una expresión que tiene en cuenta el número de instauraciones presentes en las moléculas de los metil-ésteres que componen el biodiésel:

$$\ln \mu = -18.354 + 2.362 \ln PM - 0.127N + \frac{2009}{T}, \quad (2.102)$$

Donde PM es el peso molecular del compuesto y N es el número de enlaces dobles que tiene el metil-éster de ácido graso.

Dada la fuerte variación de esta propiedad con la temperatura, se realiza una separación de comportamientos, establecidos como planteamientos a baja y alta temperatura. En estos, se entiende por baja temperatura el desarrollo de la viscosidad a temperaturas reducidas menores de $T_r \leq 0.75$, mientras que para altas temperaturas se toman los valores superiores.

Si $T_r \leq 0.75$ se tiene para el estudio la ecuación de van Velzen, et al: [57]

$$\ln(\mu_l) = B(T^{-1} - T_0^{-1}) \quad (2.103)$$

donde B y T_0 están relacionados por la estructura del compuesto, siendo determinados por un factor de longitud de cadena denominado $N^* = N + \sum \Delta N_i$,

para el cual N es el número de átomos de carbono presentes en la molécula y ΔN representa una contribución estructural.

Otra expresión para la viscosidad a bajas temperaturas es la propuesta por Orrick Erbar que emplea una técnica de contribución de grupos [57]:

$$\ln \frac{\mu_l}{\rho_l PM} = A + \frac{B}{T} \quad (2.104)$$

Teniendo PM como el peso molecular, ρ_l como la densidad a 20° . Los términos de contribución A y B son obtenidos para cada compuesto en particular.

Para los casos en que $T_r > 0.75$ se hace necesario utilizar una expresión que describa de forma correcta las variaciones de la viscosidad. Satri [54] recomienda:

$$\ln(\mu_l) = \left[\frac{\ln \mu_B}{\ln(\alpha \mu_B)} \right]^\phi \ln(\alpha \mu_B) \quad (2.105)$$

siendo μ_B la viscosidad de la temperatura normal de ebullición y $\alpha = 0.1175$ para alcoholes y 0.248 para cualquier otro compuesto, por último:

$$\phi = \frac{1 - T_r}{1 - T_{br}} \quad (2.106)$$

2.3.2.5 TENSION SUPERFICIAL

La tensión superficial juega un papel de mucha importancia en el fenómeno de atomización y ruptura del combustible durante la inyección, pues representa las fuerzas intermoleculares que se oponen a la desintegración de la vena líquida inicial y de las gotas posteriormente formadas.

Dependiendo del tipo de compuesto, su estimación se ve influenciada por la estructura de éste. El método de Macleod-Sugden ha sido propuesto por varios au-

tores para la determinación de esta propiedad [57, 58, 59]. De esta forma la tensión superficial de cada componente se obtiene:

$$\sigma^{1/4} = \frac{[P]\rho}{M} \quad (2.107)$$

Donde σ es la tensión superficial del compuesto puro en N/m , $[P]$ representa el parámetro "parachor" que es determinado para compuesto, ρ es la densidad del compuesto en g/mL y M es la masa molar g/mol .

2.3.2.6 PRESIÓN DE VAPOR

La presión de vapor es la presión que ejerce el vapor de una sustancia sobre las otras fases de la misma cuando se encuentra en equilibrio con ellas, Pitzer propuso una expansión de la ecuación de Clapeyron que toma la forma [54]:

$$\ln P_{vPr} = f^0(T_r) + \omega_m f^1(T_r) \quad (2.108)$$

Donde, P_{vPr} es la presión de vapor en bares, ω_m es el factor acéntrico, T_r es la temperatura reducida tomada como $T_r = T/T_c$.

En 1954, Riedel propone su versión del cálculo de la presión de vapor con una ecuación de estados correspondientes:

$$\ln P_{vp} = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT^6 \quad (2.109)$$

La introducción del término T^6 permite describir el punto de inflexión en la curva de la presión de vapor en la zona de altas presiones.

2.3.2.7 CALOR LATENTE DE VAPORIZACIÓN

El calor latente de vaporización está definido como como la diferencia entre la entalpía de vapor saturado y la entalpía de líquido saturado a la misma temperatura. es la energía necesaria para que haya un completo cambio de fase en una sustancia. La ecuación de Fish y Lielmezs es sugerida por predecir la variación de ésta propiedad con el aumento de temperatura [57]. Esta se puede expresar como:

$$\Delta H_v = \Delta H_{vb} \frac{T_r}{T_{br} \frac{X+Xq}{1+X^p}}, \quad (2.110)$$

Donde

$$X = \frac{T_{br} (1 - T_r)}{T_r (1 - T_{br})}, \quad (2.111)$$

y los parámetros p y q son 0.35298 y 0.13856 respectivamente, estos están definidos para líquidos orgánicos.

2.3.2.8 CALOR ESPECÍFICO DE LA FASE VAPOR

Para las estimaciones de la capacidad calorífica de un compuestos orgánicos en fase gaseosa, el método de Joback es ampliamente usado [54].

$$C_p^o = \left(\sum_j n_j \Delta_a - 37.39 \right) + \left(\sum_j n_j \Delta_b + 0.210 \right) T \\ + \left(\sum_j n_j \Delta_c - 3.91 \times 10^{-4} \right) T^2 + \left(\sum_j n_j \Delta_d - 2.06 \times 10^{-7} \right) T^3, \quad (2.112)$$

Donde n_j es el número de grupos del tipo j y las contribuciones Δ son para el j -ésimo grupo molecular respectivo.

2.3.2.9 CALOR ESPECÍFICO DE LA FASE LÍQUIDA

Una de las técnicas más usadas para la estimación de la capacidad calorífica de los líquidos es el método de Bondi-Rowlinson. Dentro de su rango de aplicación presenta errores inferiores al 5%. Este método hace uso de una relación directa con la capacidad calorífica de la fase vapor, con esto da un punto de referencia para la correcta estimación. por lo que se tiene que:

$$\frac{C_{pl} - C_p^o}{R} = 1.45 + 0.45(1 - T_r)^{-1} + 0.25\omega [17.11 + 25.2(1 - T_r)^{1/3} \cdot T_r^{-1} + 1.742(1 - T_r)^{-1}], \quad (2.113)$$

en la Ecuación 2.113 R representa la constante universal de los gases, T_r es la temperatura reducida y ω el factor acéntrico.

2.3.2.10 VISCOSIDAD DE LA FASE VAPOR

La viscosidad del vapor relaciona la cantidad de energía cinética de las moléculas, a mayor temperatura la actividad molecular incrementa, las colisiones son de mayor magnitud y esto implica un aumento en la oposición al movimiento. Para su estimación el método de contribución de grupos de Reichenberg es ampliamente usado, éste describe la viscosidad del vapor como:

$$\mu_g = \frac{M^{1/2}T}{a^*[1 + (4/T_c)][1 + 0.36T_r(T_r - 1)]^{1/6}} \frac{T_r(1 + 270\mu_r^4)}{T_r + 270\mu_r^4}, \quad (2.114)$$

donde M es el peso molecular, μ_r es el momento dipolar reducido y a^* está definido como:

$$a^* = \sum n_i C_i \quad (2.115)$$

en este caso n_i representa el número de grupos del i -ésimo tipo y C_i es su respectiva contribución.

2.3.2.11 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA DE LA FASE LÍQUIDA

Se sabe que la conductividad térmica define con qué grado de facilidad se conduce el calor en una determinada sustancia. Durante el proceso de inyección ésta desempeña un papel muy importante puesto que determina la forma en la que el perfil de temperatura cambia e influye en la tasa de evaporación. Dentro de los distintos métodos de estimación existentes, el de Latini presenta muy buen ajuste frente a datos experimentales en cálculos realizados para los compuestos orgánicos que conforman los combustibles. Esta expresión usa la temperatura en el punto de ebullición T_b , la temperatura crítica T_c , el peso molecular M :

$$\lambda_l = \frac{A(1 - T_r)^{0.38}}{T_r^{1/6}}, \quad (2.116)$$

donde

$$A = \frac{A^* T_b^\alpha}{M^\beta T_c^\gamma}, \quad (2.117)$$

los parámetros A^* , α , β y γ son específicos para cada clase de compuesto orgánico, estos pueden ser encontrados en [57].

2.3.2.12 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA DE LA FASE VAPOR

Para la estimación de la conductividad térmica de la fase vapor diversos métodos han sido desarrollados, uno de los que mejores resultados los presenta la ecuación de Chung, et al [54], y relaciona el peso molecular, la viscosidad de la fase vapor, el calor específico a volumen constante, con lo que se obtiene:

$$\frac{\lambda M}{\mu_g C_v} = \frac{3.75\Psi}{c_v/R}, \quad (2.118)$$

donde

$$\Psi = 1 + \alpha[(0.215 + 0.28288\alpha - 1.061\beta + 0.26665Z)/(0.6366 + \beta Z + 1.061\alpha\beta)], \quad (2.119)$$

siendo

$$\alpha = (C_v/R) - 3/2, \quad \beta = 0.7862 - 0.7109\omega + 1.3168\omega^2, \quad Z = 2.0 + 10.5T_r^2 \quad (2.120)$$

Aquí ω representa el factor acéntrico de cada componentes del combustible.

2.3.2.13 SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL

El segundo coeficiente del virial pertenece a la ecuación de estado, es de práctica común el truncar la serie polinómica que la compone en el segundo término, con esto es posible relacionar los cambios de presión, temperatura y volumen específico de un fluido en fase vapor [54]. La determinación de este coeficiente se puede realizar por medio del método de Tsonopoulos:

$$\frac{BP_c}{RT_c} = f^{(0)} + \omega f^{(1)} + a f^{(2)} + b f^{(3)} \quad (2.121)$$

$$f^{(0)} = 0.1448 - 0.330/T_r - 0.1385/T_r^2 - 0.0121/T_r^3 - 0.000607/T_r^8 \quad (2.122)$$

$$f^{(1)} = 0.0637 + 0.331/T_r^2 - 0.423/T_r^3 - 0.008/T_r^8 - 0.000607/T_r^8 \quad (2.123)$$

$$f^{(2)} = 1/T_r^6 \quad (2.124)$$

$$f^{(2)} = -1/T_r^8 \quad (2.125)$$

Por último los coeficientes a y b son iguales a cero para hidrocarburos ramificados simples, mientras que para ésteres serán:

$$a = -2.14 \times 10^{-4} \mu_r^4 - 7.831 \times 10^{-21} \mu_r^8, \quad b = 0. \quad (2.126)$$

2.3.2.14 DIFUSIVIDAD DEL VAPOR

La difusividad del vapor describe como se realiza el proceso de difusión másica de una gas al ser insertado en otro. Para su calculo se usa la ecuación de Fuller, et al[54, 60]. Esta relaciona los pesos moleculares de los compuestos que intervienen en el proceso de difusión:

$$D_{AB} = \frac{0.00143T^{1.75}}{PM_{AB}^{1/2} \left[(\sum_v)_A^{1/3} + (\sum_v)_B^{1/3} \right]^2}, \quad (2.127)$$

en esta ecuación el término \sum_v es encontrado para cada compuesto sumando los volúmenes de difusión atómica de sus elementos constitutivos.

2.4 OPENFOAM, CÓDIGO CFD LIBRE

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) es una herramienta de simulación numérica escrita en el lenguaje de programación C++ con un enfoque orientado a objetos. Una de sus características más importantes es su calidad de "libre". Al estar bajo la *GNU general Public License* su reproducción es completamente gratuita y su programación está abierta en su totalidad al usuario [61, 62].

OpenFoam posee una amplio rango de herramientas (*solvers*) para solucionar problemas de mecánica de fluidos complejos relacionados con reacciones químicas, turbulencia, transferencia de calor; adicionalmente posee aplicaciones dirigidas a problemas de dinámica de sólidos y electromagnetismo.

2.4.1 SPRAYFOAM, MODELO NUMÉRICO PARA SIMULACIÓN DE CHORROS DE INYECCIÓN.

El software de simulación **OpenFOAM** es un paquete de solucionadores individuales que se conectan entre sí para resolver el conjunto de ecuaciones diferenciales que gobiernan cada fenómeno.

SprayFoam es uno de los múltiples solucionadores que existen dentro de OpenFOAM, en éste se resuelven todas las ecuaciones de conservación con un enfoque de dos vías. El fenómeno de inyección de combustible pertenece al caso particular de estudio que se compone de un flujo multifásico, ya que se trata del ingreso de un líquido a alta presión dentro una atmósfera gaseosa. Este hecho hace que su desarrollo se lleve a cabo por la superposición de un modelo lagrangiano (gotas líquidas) con uno euleriano (atmósfera gaseosa).

2.4.1.1 ESTRUCTURA DE FUNCIONAMIENTO

Dada las características de programación en OpenFOAM cuyo enfoque es dirigido a objetos, el solucionador sprayFoam está conformado por una serie de archivos individuales, cuya invocación se lleva a cabo desde el archivo principal `sprayFoam.C`. La Figura 2.18 presenta los componentes principales dentro del solucionador sprayFoam, donde destaca la invocación del proceso de cálculo de la continuidad para la densidad (`rhoEqn.H`) y la ecuación de momento (`UEqn.H`).

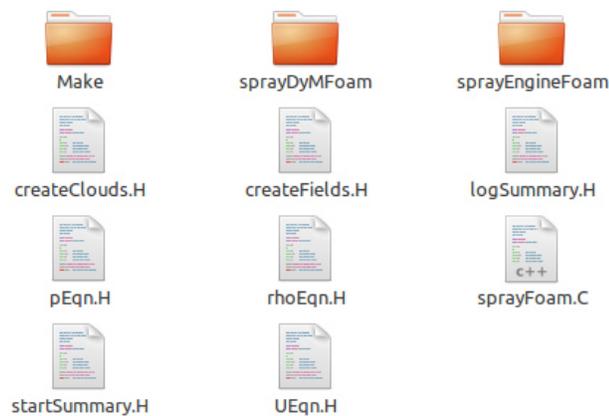


Figura 2.18: Componentes del solucionador sprayFom.

Toda la estructura de funcionamiento de OpenFOAM trabaja de forma similar, en donde un archivo principal realiza la invocación de cada uno de los objetos que necesita para su ejecución.

CÁLCULO DE PROPIEDADES FÍSICAS EN OPENFOAM

Cuando al solucionar una ecuación se requiere el valor de una propiedad física en un punto específico de temperatura, el solucionador realiza el llamado de la librería de propiedades, que para el caso de sprayFoam se trata de la librería `liquidProperties.H`. Esta librería está conformada por cada líquido utilizable en simulaciones.

Como ejemplo de su estructura, en la Figura 2.19 se observan los tres archivos

que gobiernan el uso del líquido C14H30.



Figura 2.19: Componentes del líquido C14H30 en OpenFoam.

El archivo C14H30.C se encarga de almacenar todos los valores constantes que se requieren en el cálculo de cada propiedad, C14H30.H realiza la vinculación entre las propiedades a calcular y la función requerida para dicha tarea como se puede observar en la Figura 2.20.

```
// Constructors
//- Construct null
C14H30();

//- Construct from components
C14H30
(
    const liquidProperties& l,
    const NSRDSfunc5& density,
    const NSRDSfunc1& vapourPressure,
    const NSRDSfunc6& heatOfVapourisation,
    const NSRDSfunc0& heatCapacity,
    const NSRDSfunc0& enthalpy,
    const NSRDSfunc7& idealGasHeatCapacity,
    const NSRDSfunc4& secondVirialCoeff,
    const NSRDSfunc1& dynamicViscosity,
    const NSRDSfunc2& vapourDynamicViscosity,
    const NSRDSfunc0& thermalConductivity,
    const NSRDSfunc2& vapourThermalConductivity,
    const NSRDSfunc6& surfaceTension,
    const APIdiffCoefFunc& vapourDiffussivity
);
```

Figura 2.20: Fragmento del archivo C14H30.H

Cada propiedad requerida por sprayFoam es calculada por medio de la librería de funciones NSRDS, en donde se especifica la relación entre cada función, sus parámetros de cálculo y el retorno de los resultados. La Figura 2.21 ilustra el contenido de la librería `thermoPhysicalFunctions`.

La forma en que interactúan las librerías `thermoPhysicalFunctions`, `NSRDS`, `liquidProperties`, y el líquido de trabajo puede ser observada en la Figura 2.22, donde se detalla el proceso de cálculo del calor específico de la fase líquida (`cp_`) para el líquido denominado IC8H18.

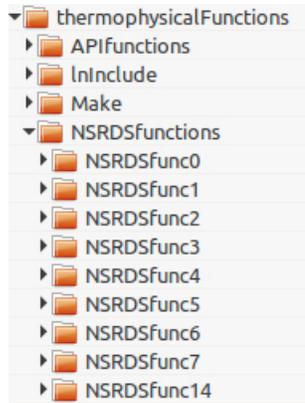


Figura 2.21: Librería de funciones para cálculo de propiedades de un líquido.

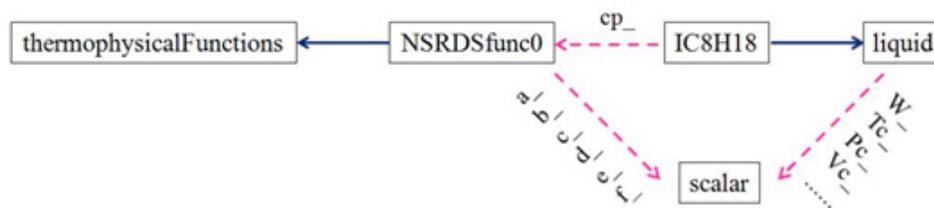


Figura 2.22: Diagrama de colaboración entre librerías.

Resumiendo con base en el diagrama de colaboración, cualquier solucionador de OpenFOAM establece que líquido usará en su simulación por medio del caso que lo ejecute, allí se establece una relación entre el caso de simulación, el solucionador y la librería de líquidos. Cuando una propiedad física es requerida, se lleva a cabo la invocación de la función `NSRDSfunc0` (requerida en este ejemplo en específico), la cual captura la información contenida en los ficheros del líquido, cuya estructura esta ilustrada en la Figura 2.23.

Siguiendo el ejemplo planteado en el diagrama (Figura 2.22) [63], donde los valores requeridos para el cálculo de la capacidad calorífica del líquido están detallados en la Figura 6.b. Estos valores son almacenados en las constantes a_- , b_- , c_- , d_- , e_- y f_- (Figura 2.24.a), para posteriormente ser usados en la ecuación establecida por la función `NSRDS` como se observa en la Figura 2.24.b.

Este proceso retorna el valor de la propiedad solicitada en el punto de tempe-

```

Foam::IC8H18::IC8H18()
:
  liquidProperties
  (
    114.231,
    543.96,
    2.5676e+6,
    0.468,
    0.266,
    165.78,
    1.4464e-2,
    372.39,
    0.0,
    0.3031,
    1.4051e+4
  ),
  rho_(67.2363666, 0.27373, 543.96, 0.2846),
  pv_(120.81, -7550, -16.111, 0.017099, 1.0),
  hl_(543.96, 375379.713037617, 0.1549, 0.138, 0.0666, 0.0),
  cp_
  (
    1219.89652546156,
    1.67205049417409,
    0.00414073237562483,
    0.0,
    0.0,
    0.0
  )

```

Figura 2.23: Contenido del archivo IC8H18.C.

```

cp_
(
  2565.72845679261,
  -4.78114036856325,
  0.0120362716238558,
  0.0,
  0.0,
  0.0
)

```

(a) Coeficientes para cp_.

```

// Member Functions

//- Evaluate the function and return the result
scalar f(scalar, scalar T) const
{
  return (((f_*T + e_)*T + d_)*T + c_)*T + b_)*T + a_;
}

//- Write the function coefficients
void writeData(Ostream& os) const
{
  os << a_ << token::SPACE
  << b_ << token::SPACE
  << c_ << token::SPACE
  << d_ << token::SPACE
  << e_ << token::SPACE
  << f_;
}

```

(b) Función NSRDSfunc0 para cálculo de cp_.

Figura 2.24: Cálculo para una propiedad física de líquidos en OpenFoam

ratura especificado, logrando así establecer las condiciones requeridas en la solución de las ecuaciones que gobiernan el fenómeno.

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA

A continuación se describe la metodología implementada para el estudio numérico de los chorros de inyección

3.1. Vista general del proceso	87
3.2. Desarrollo experimental	88
3.2.1. Caracterización de la geometría del inyector	88
3.2.2. Inyección experimental	92
3.2.3. Procesamiento de imágenes	96
3.3. Desarrollo numérico	99
3.3.1. Estimación de propiedades termofísicas y de transporte para cada combustible	99
3.3.2. Implementación de propiedades de combustibles dentro de OpenFOAM	108
3.3.3. Parámetros de simulación	110
3.3.4. Preparación y ejecución de la simulación	115

3.1 VISTA GENERAL DEL PROCESO

Durante la ejecución de este trabajo de investigación, varios componentes del desarrollo metodológico fueron llevados a cabo de forma simultánea. Por esta razón, se observa en la Figura 3.1 un esquema en paralelo, que puede tener interrelación entre los dos tipos de desarrollo.

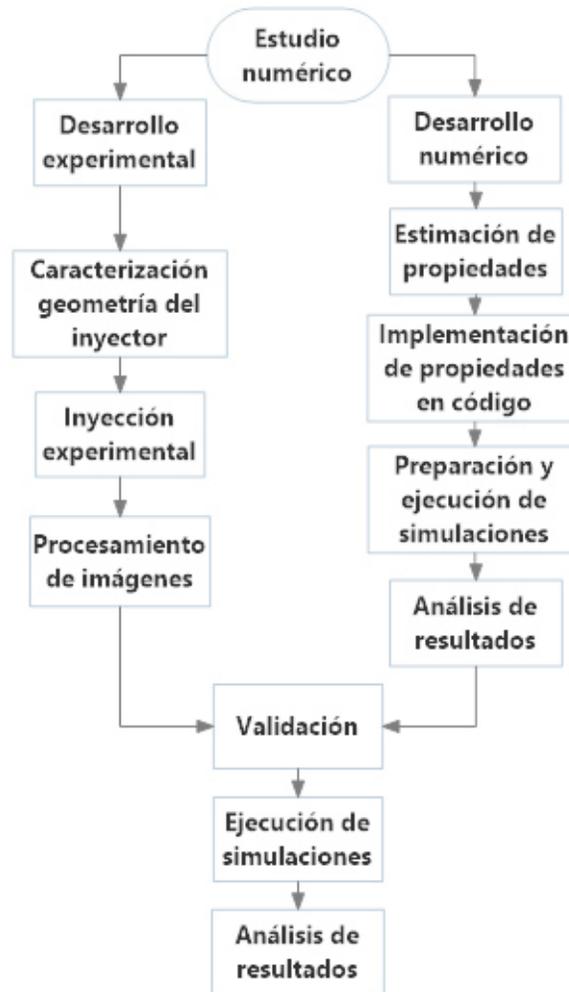


Figura 3.1: Metodología planteada en el estudio

Con base en lo anterior y tomando cómo base la premisa antes mencionada en la que se establece el carácter predominantemente numérico de este trabajo de investigación, la metodología presentada permite alcanzar cada uno de los objetivos propuestos.

El trabajo realizado tiene dos componentes fundamentales: (1) Un desarrollo experimental con el que se pretende dar una base sólida al proceso de simulación y adicionalmente aportar el grado de validez suficiente para analizar los combustibles de interés de forma numérica. (2) Un desarrollo numérico que permite delimitar un proceso robusto, mismo que asegura la reproducibilidad de este tipo de estudios.

3.2 DESARROLLO EXPERIMENTAL

Para llevar a cabo el desarrollo experimental se hizo necesario realizar diferentes etapas y que serán enumeradas a continuación.

3.2.1 CARACTERIZACIÓN DE LA GEOMETRÍA DEL INYECTOR

La modelación numérica de los procesos de inyección de combustible requiere de información específica de los elementos físicos que intervienen en ellos, siendo la geometría del inyector un conjunto de datos sumamente relevantes, en especial el diámetro de salida del orificio.

Aunque el conocimiento de la geometría interna de las toberas de inyección es claramente necesario, es de gran dificultad adquirirlo por medio de especificaciones dadas por los fabricantes, quienes no entregan esta información al considerarla secretos de sus propios desarrollos. A continuación se presenta un proceso de caracterización no destructivo [64].

3.2.1.1 ELABORACIÓN DE MOLDES DE SILICONA

La caracterización de la geometría se basa en la elaboración de moldes de silicona que capturan la estructura interna de las toberas, resultando así en una

figura sólida que permite su posterior manipulación. Para la correcta aplicación de esta técnica se recomiendan los siguientes pasos:

- I. Una vez seleccionado el inyector a caracterizar se procede a realizar la extracción de la tobera fuera de éste, procedimiento llevado a cabo de acuerdo a los lineamientos del fabricante para su correcto desensamble. En la Figura 3.2 se observa una tobera perteneciente a un inyector Denso-DCI105189 (a) y una ampliación de la punta de la tobera (b). Este inyector es el que se usará como base de los cálculos numéricos y la validación experimental.



(a) Vista general



(b) Punta de la tobera

Figura 3.2: Tobera de inyector Denso-DCRI105189

- II. Utensilios a usar:

- Recipiente de vidrio (beaker).
- Recipiente plástico.
- Mezclador.
- Pinzas.
- Hilo metálico o plástico (clip).
- Jeringa (3 a 5 ml).
- Retal de caucho o hule (elemento tipo empaque).

- III. Es importante recalcar la necesidad de limpiar la tobera una vez se ha extraído, no se debe permitir que existan impurezas al interior de ésta puesto

que afectaran la captura de la geometría realizada por la silicona, generándose así imperfecciones en el molde que deformaran los contornos a adquirir.

Este procedimiento puede ser realizado al sumergir completamente la tobera en un solvente como la acetona (el recipiente deberá ser de vidrio puesto que los polímeros pueden ser degradados por ésta) y agitarlo para permitir que todas las cavidades sean llenadas. La tobera podrá ser retirada después de cierta cantidad de tiempo que dependerá de su nivel de suciedad (en promedio 15 minutos). Si el grado de suciedad es muy alto se recomienda el uso de un baño ultrasónico para favorecer el desprendimiento de las partículas contaminantes. Es preferible hacer uso de pinzas para sujetar la tobera ya que la acetona puede afectar la piel. Por último se procede a secar la tobera con ayuda de aire comprimido para retirar cualquier remanente del solvente de su interior.

- IV. La silicona es un polímero que se crea a partir de una base y un catalizador mezclados en una proporción de 50-50 %. Este polímero puede ser mezclado en un recipiente plástico común y mezclado con cualquier utensilio para este fin.
- V. Por el orificio de entrada de combustible de la tobera, se inserta el hilo metálico, esto con el fin de impedir el ingreso de la silicona en este canal, ya que al momento de extraer el molde generaría un punto de anclaje del mismo.
- VI. La silicona en estado líquido es inyectada con la jeringa, procurando ejercer la mayor presión de inyección posible. Luego de la inyección la tobera es dejada en un lugar seguro para permitir que esta fragüe, proceso que tarda aproximadamente 40 minutos.
- VII. Una vez que la silicona se ha solidificado se procede a su extracción. Para esto se debe eliminar todo el material que pueda interferir con dicha labor. Con ayuda de aire a presión introducido por la punta de la tobera, el molde de silicona sale del interior de la tobera con relativa facilidad.

En la Figura 3.3 se observa un molde de silicona obtenido por el proceso descrito

anteriormente.

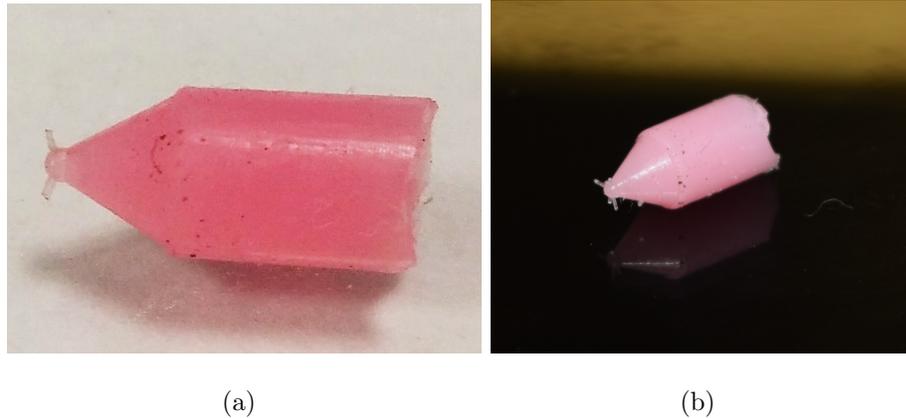


Figura 3.3: Molde de silicona obtenido.

3.2.1.2 OBTENCIÓN DE LAS DIMENSIONES RELEVANTES

Para obtener las dimensiones de la geometría interna de la tobera, el molde de silicona obtenido con el procedimiento descrito anteriormente es visualizado por medio de un microscopio electrónico de barrido (SEM por sus siglas en inglés).

El mecanismo físico utilizado por un SEM para obtener una imagen de alta resolución y percibir longitudes del orden de los micrómetros, necesita que la muestra a analizar conduzca la electricidad, puesto que el SEM realiza un bombardeo de electrones y registra la respuesta generada en la superficie. Esto implica se deba realizar un proceso de deposición por evaporación térmica de una capa de oro sobre la muestra, el espesor de la capa depositada es del orden de $0.01\mu m$, esto asegura que el cambio en las dimensiones observada no representa una desviación relevante en la medida capturada. La Figura 3.4 muestra el resultado de la deposición sobre la muestra.

La Figura 3.5 ilustra el tipo de imagen capturada por el SEM [64]. Las imágenes obtenidas con este método son luego procesadas con la ayuda de un software CAD y un correcto escalamiento para obtener todas las medidas relevantes.



Figura 3.4: Muestra preparada para visualización.

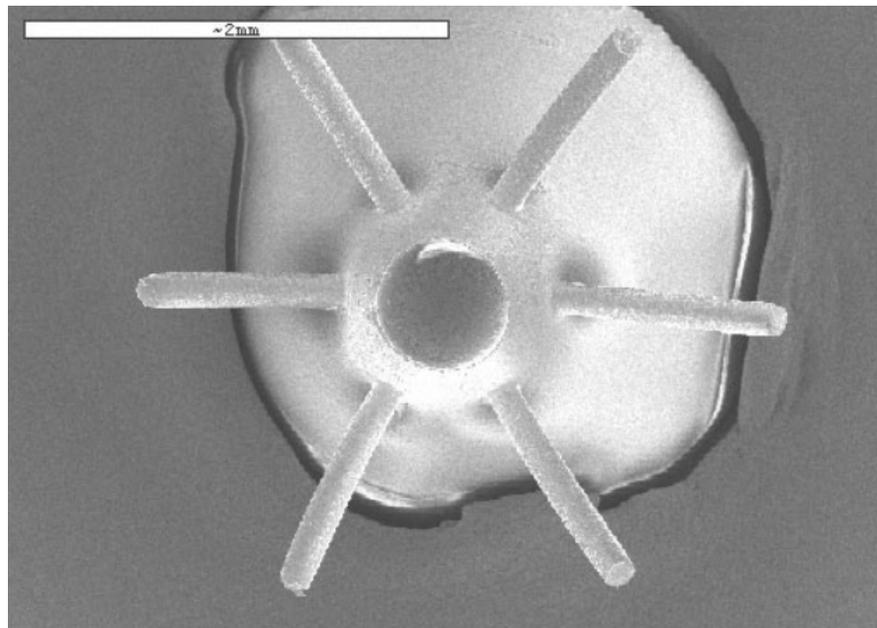


Figura 3.5: Imagen obtenida con un SEM.

3.2.2 INYECCIÓN EXPERIMENTAL

El Laboratorio de Investigación e Innovación en Tecnología Energética - LII-TE, perteneciente a la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica de la Universidad Autónoma de Nuevo León, posee una instalación experimental con la cual se pueden realizar estudios del comportamiento físico de los procesos de inyección de diferentes combustibles. Esta instalación fue utilizada para llevar a cabo la validación del modelo numérico de OpenFOAM por medio de la comparación de los resultados obtenidos de forma experimental y numérica.

3.2.2.1 INSTALACIÓN EXPERIMENTAL

En las Figuras 3.6.a y 3.6.b se observa de forma general la instalación experimental usada, ésta se encuentra diseñada con base en la aplicación de la técnica de dispersión Mie [65] y permite capturar imágenes del proceso de inyección como de la evolución temporal del chorro inyectado.



(a)

(b)

Figura 3.6: Instalación experimental para inyección de combustible.

La instalación experimental consiste de una cámara de volumen constante, un sistema de inyección a alta presión diésel con una unidad de control electrónico y sistema de adquisición de imágenes. A continuación se realizará una breve descripción de los elementos de la instalación, mayor información podrá ser encontrada en [66].

Cámara de volumen constante.

Este elemento de la instalación experimental es llenado con nitrógeno gaseoso para emular las condiciones de contrapresión existentes en la cámara de combustión de un motor diésel (Figura 3.7). Su diseño permite alcanzar valores de presión interna de hasta 80 *bar* cuenta con tres accesos ópticos para visualización e iluminación.

El nitrógeno a alta presión es ingresado manualmente desde un tanque de suministro típico. La presión y temperatura interna es monitoreada de forma activa por sensores instalados en dicha cámara.

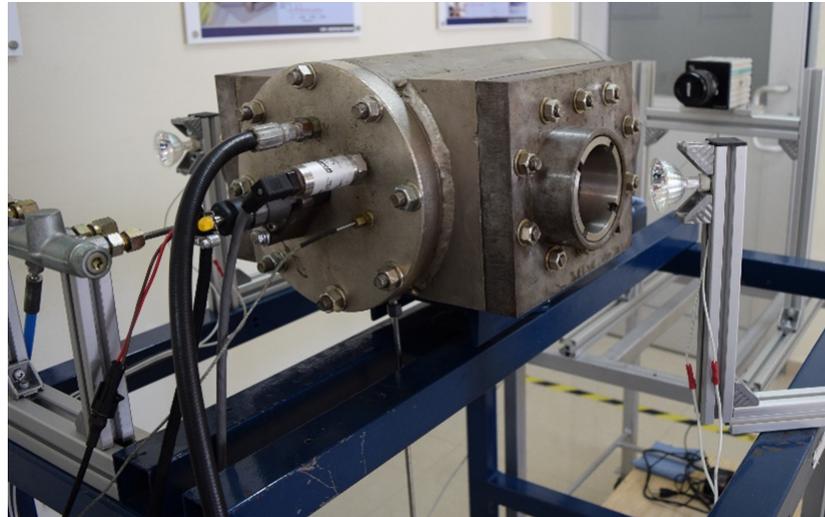


Figura 3.7: Cámara de volumen constante.

El inyector descrito en la sección 3.2.1.1 es posicionado en la cara frontal del recipiente cilíndrico que conforma el cuerpo de la cámara, de tal forma que solo la punta de la tobera queda expuesta al nitrógeno contenido en el interior de la misma.

Los accesos ópticos y de iluminación son ventanas de zafiro situadas en la cara opuesta a la ubicación del inyector y a ambos lados del mismo, esta disposición puede ser observada en la Figura 3.8

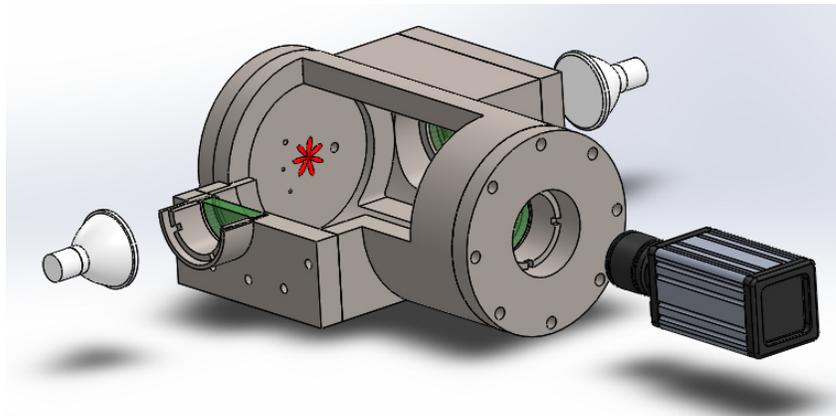


Figura 3.8: Cámara de volumen constante - Esquema de configuración.

Por último, la iluminación de los chorros inyectados se realiza por medio de lámparas de halógeno de corriente continua de 100Watts.

Sistema de inyección de combustible.

El sistema de inyección de combustible está conformado por una bomba de alta presión BOSCH CP1 que puede elevar la presión de éste hasta 1350 bar. La bomba es accionada por un motor eléctrico de 7.5 HP cuya velocidad de rotación puede ser controlada por un variador de frecuencia y la presión es controlada por medio de una unidad de control electrónico (ECU) gracias a un sensor piezoresistivo ubicado en el “*common rail*”.

Debido al incremento de presión, la temperatura del combustible deber ser controlada por medio de un sistema de refrigeración basado un conjunto de intercambiador de calor y baño térmico.

Este tipo de sistemas de inyección son descritos a mayor profundidad en [67, 68].

Adquisición de imágenes y técnica óptica.

El método de dispersión MIE ha sido usado para el análisis de la formación del chorro inyectado, ésta consiste en iluminar las gotas de combustible con una fuente de luz y capturar la luz reflejada con una cámara de alta velocidad [69].

La cámara de alta velocidad *Motion PRO X4 CMOS* utilizada, es equipada con un lente *Nikon* de 60 mm y la velocidad de adquisición de imágenes fue de 5000 fps. Las imágenes son capturadas en un formato de escala de grises, el tiempo de exposición fue de 197 μs y la distancia focal de 0.85 m. Esta configuración establece una relación pixel-milímetro de 4.35.

La activación del sistema es controlada por un sistema cRIO, una pinza amperimétrica instalada en la salida de la ECU detecta el paso de corriente hacia el inyector y en ese instante el cRIO envía una señal de activación a la cámara de alta velocidad, dando inicio al la adquisición de las imágenes.

3.2.3 PROCESAMIENTO DE IMÁGENES

Como producto de la adquisición de imágenes del proceso de inyección, se obtienen resultados como los observados en la Figura 3.9.

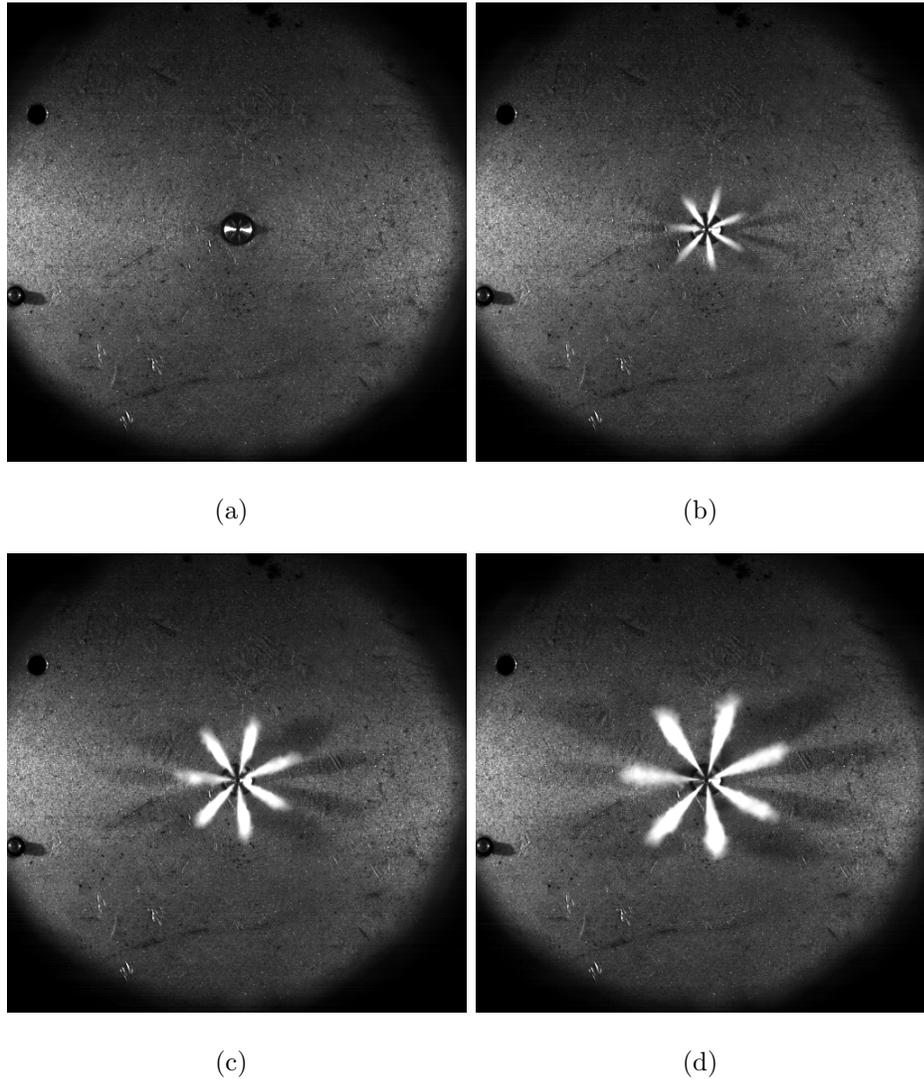


Figura 3.9: Imágenes adquiridas.

A partir de estas imágenes es posible obtener información sobre los parámetros macroscópicos del chorro (penetración, ángulo del cono y área del chorro).

A grandes rasgos el tratamiento realizado a cada imagen consta de los siguientes pasos:

- I. **Caracterización del fondo de las imágenes.** Esto permite obtener la información que no pertenece a los chorros inyectados
- II. **Sustracción del fondo a cada una de las imágenes a analizar.** Este paso elimina toda la información no relevante en el análisis de cada chorro (Figura 3.10).

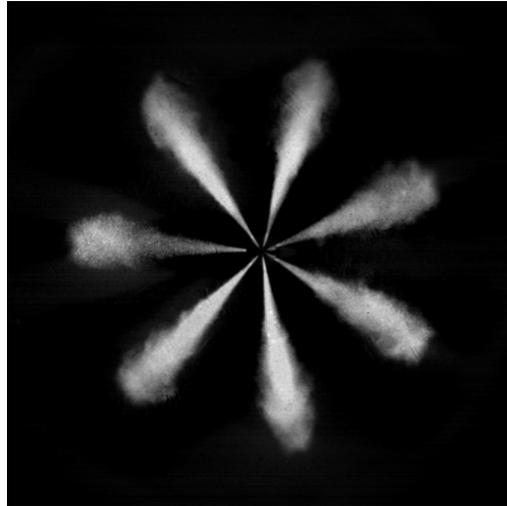
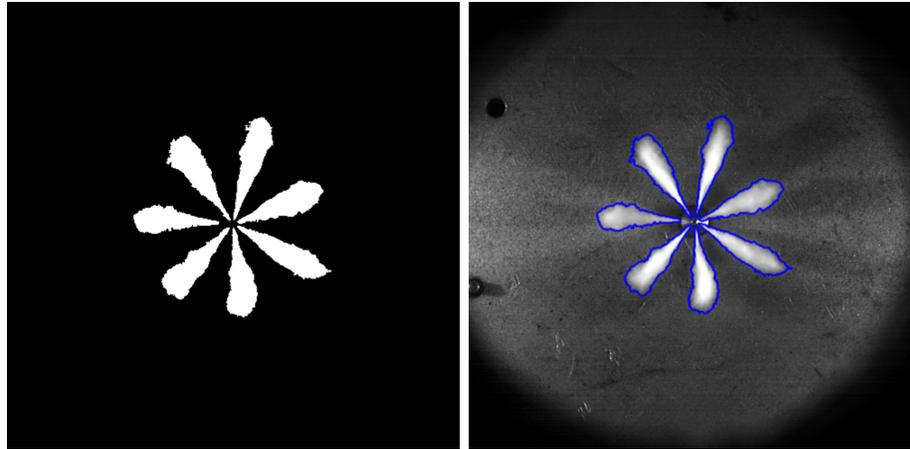


Figura 3.10: Imagen con fondo sustraído.

- III. **Binarización de imágenes.** Al sustraer el fondo de cada imagen, se obtiene otra que solo contiene los chorros que aparecen en ella. Esta imagen se convierte aun formato binario mediante el cálculo de un umbral de binarización, esto asigna dos valores (1 - 0), donde cada dígito representará un solo tono, blanco para la zona donde se encuentra el chorro y negro el resto de la imagen (Figura 3.11.a). Al obtener este tipo de representación se hace posible determinar el contorno de cada chorro inyectado (Figura 3.11.b).
- IV. **Cálculo de parámetros.** Con la imagen binarizada y el contorno de los chorros definidos, se procede a calcular cada parámetro macroscópico (Figura 3.12).
- V. **Repetición del proceso.** Los pasos 3 y 4 son repetidos cuantas veces sea necesario, con base en el número de imágenes a analizar.



(a) Imagen binarizada

(b) Contorno de chorros detectado

Figura 3.11: Binarización y obtención de contornos.

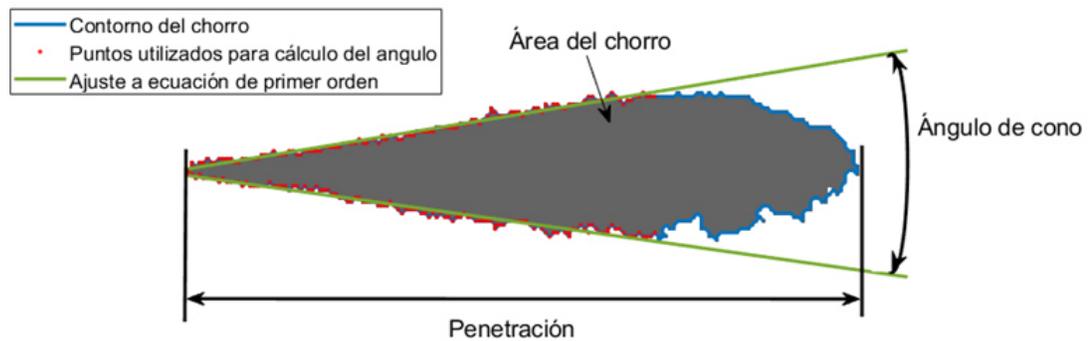


Figura 3.12: Parámetros calculados en cada chorro.

Los pasos descritos hacen parte de un algoritmo de análisis de imagen automático, programado en el software MATLAB[®] y realizado específicamente para la obtención de los parámetros macroscópicos de chorros de inyección. Dicho algoritmo fue desarrollado en el Grupo de Investigación en Energías Térmica y Renovable - GETR, diseñado por el Ing. Guillermo Rubio Gómez, puesto en práctica y validado en este trabajo de investigación (al momento de redactar este documento, el algoritmo se encuentra en evaluación para publicación en revista indexada).

De esta forma los resultados de penetración obtenidos del análisis de imagen del proceso de inyección experimental, son utilizados para llevar a cabo la validación de los resultados numéricos.

3.3 DESARROLLO NUMÉRICO

El desarrollo numérico del presente trabajo se realizó teniendo en cuenta el alcance de los objetivos específicos y consta de 4 fases: (1) Estimación de propiedades termofísicas y de transporte de los combustibles seleccionados, (2) Implementación de las propiedades calculadas al interior de **OpenFOAM** (3) Elección y cálculo de parámetros de simulación, (4) Preparación y ejecución de las simulaciones.

3.3.1 ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMOFÍSICAS Y DE TRANSPORTE PARA CADA COMBUSTIBLE

Han sido seleccionados 4 combustibles para el desarrollo del presente trabajo, con base en su trayectoria en el mercado y sus posibles ventajas ambientales, biodiésel, farnesano, GTL y diésel (combustible de referencia).

Como se ha mencionado antes, para la simulación de un chorro de inyección diésel es indispensable el conocimiento de las propiedades físicas y de transporte del combustible a simular. Dentro del proceso de inyección en frío (sin evaporación) el comportamiento de los parámetros macroscópicos se encuentra determinado principalmente por la densidad, la viscosidad, la presión de vapor y la tensión superficial. Adicional a estas cuatro propiedades, el correcto funcionamiento del modelo de simulación establecido en el software OpenFOAM requiere información sobre la variación con la temperatura de 12 propiedades específicas.

La Tabla 3.1 resume los métodos utilizados para estimar las propiedades requeridas en cada tipo de combustible. Ya que el error en la estimación puede variar debido a la naturaleza misma de los compuestos químicos, se hizo necesario realizar un análisis sobre la pertinencia de cada método aplicado en cada combustible y para cada propiedad [54, 27, 55]. Es de notar que el diésel no ha sido procesado de

Tabla 3.1: Propiedades físicas y de transporte necesarias y métodos utilizados.

Propiedades termofísicas y de transporte	Método de cálculo		
	Biodiésel	Farnesano	GTL
Propiedades críticas	Constantinou-Gani, Ambrose, Marreno-Pardillo	Constantinou-Gani, Joback.	API Technical Data
Densidad del líquido	Rackett - Soave	Rackett	Rackett
Presión de vapor	Riedel	Riedel	Riedel
Tensión superficial	Meissne H, Allen	Meissne H	Meissne H Van Velzen
Viscosidad del líquido	Ramirez - Verduzco	Orrick - Eckbar	Cardozo Langenkamp
Entalpía de vaporización	Fish-Lielmzs	Fish-Lielmzs	Fish-Lielmzs
Conductividad térmica del líquido	Latini	Latini	Latini
Calor específico del líquido	Boundi - Rowlison	Boundi - Rowlison	Boundi - Rowlison
Calor específico del vapor	Joback	Joback	Joback
Viscosidad del vapor	Reichenberg	Reichenberg	Reichenberg
Conductividad térmica del vapor	Chung	Chung	Chung
Difusividad del vapor	API, Fuller	API, Fuller	API, Fuller
Segundo coeficiente del virial	Tsonopolous	Tsonopolous	Tsonopolous

la misma forma, en su caso sea ha usado un sustituto conocido como tetradecano ($C_{14}H_{30}$), su amplio uso en la literatura ha permitido encontrar que los resultados numéricos tienen buen ajuste frente a los resultados experimentales. Este compuesto ya se encuentra incorporado por defecto en la librería de líquidos de OpenFOAM [70].

El Farnesano ($C_{15}H_{32}$) es un compuesto puro casi en su totalidad, por lo que su tratamiento no requiere de mayores consideraciones. De esta forma, el cálculo de sus propiedades y su variación con la temperatura se realizó desde 274 K hasta el valor de su temperatura crítica. Para el biodiésel, que es una mezcla de metilésteres de ácidos grasos, se debe tener en cuenta su composición molar, calcular las propiedades de cada uno de sus componentes y por último realizar una estimación de las propiedades

finales por medio de reglas de mezcla. El biodiesel simulado es a su vez una mezcla de dos fuentes, soya con una participación de 72 % y palma con un 28 % en fracción molar. La composición química de estos se enumera en la Tabla 3.2.

Tabla 3.2: Composición de los biodiésel presentes en la mezcla.

Metiléster de ácido graso	Composición en porcentaje molar	
	soya	Palma
Láurico (C12:0)	–	0.3
Mirístico (C14:0)	0.1	0.98
Palmítico (C16:0)	11.3	44.64
Palmitoléico (C16:1)	0.1	0.14
Estearico (C18:0)	3.9	4.53
Oléico (C18:1)	22.6	39.52
Linoléico (C18:2)	55.2	9.73
Linolénico (C18:3)	6.8	0.16

En el caso del GTL su composición química se basa en una mezcla de n-parafinas e iso-parafinas, es virtualmente libre de aromáticos y sin contenido de sulfuros. Éste es obtenido a partir del gas natural a través del proceso de síntesis Fischer – Tropsch (FT) [71]. Para el análisis de las propiedades termofísicas y de transporte de este conjunto de hidrocarburos se ha optado por considerar su composición como un conjunto de n-parafinas únicamente y ésta se presenta en la Tabla 3.3 [52]. De igual forma que en el caso del biodiésel, por medio del uso de reglas de mezcla se determina el comportamiento de cada propiedad a partir de la estimación de cada una de ellas en sus componentes individuales.

Tabla 3.3: Composición química para el GTL trabajado

Nombre	Fórmula	Contribución porcentual %
Nonano	C ₉ H ₂₀	2.96
Decano	C ₁₀ H ₂₂	7.83
Undecano	C ₁₁ H ₂₄	8.45
Dodecano	C ₁₂ H ₂₆	8.42
Tridecano	C ₁₃ H ₂₈	8.75
Tetradecano	C ₁₄ H ₃₀	8.34
Pentadecano	C ₁₅ H ₃₂	8.17
Hexadecano	C ₁₆ H ₃₄	10.98
Heptadecano	C ₁₇ H ₃₆	7.72
Octadecano	C ₁₈ H ₃₈	7.62

3.3.1.1 DESCRIPCIÓN DE LA ESTIMACIÓN

A continuación se expondrá de forma general la estimación de las propiedades para los combustibles de estudio. Es de anotar que el comportamiento de las propiedades para el C₁₄H₃₀ (sustituto del diésel) fue obtenido a partir de los datos y ecuaciones pertenecientes a OpenFOAM.

Temperatura normal de ebullición

Para la estimación de la temperatura normal de ebullición y crítica del C₁₅H₃₂ y de los componentes del biodiésel se emplearon las ecuaciones propuestas por Constantinou y Gani [54, 55], mientras que los valores correspondientes a los componentes del GTL se obtuvieron a partir de datos reportados por la API [60].

Propiedades críticas

Para la estimación de la temperatura normal de ebullición y crítica del C₁₅H₃₂

y de los componentes del biodiésel se emplearon las ecuaciones propuestas por Constantinou y Gani [54, 55], mientras que los valores correspondientes a los componentes del GTL se obtuvieron a partir de datos reportados por la API [60]. La presión crítica fue calculada con la expresión de Joback en el caso del C15H32 y la ecuación de Ambrosse para el biodiésel; nuevamente los valores pertenecientes al GTL fueron obtenidos de la API. Por último el cálculo del volumen crítico se llevo a cabo por medio de la ecuación de Joback para el C15H32, la expresión de Marrero y Pardillo [54, 55] para el biodiésel y datos de la API para el GTL. Con respecto a la obtención de los valor concernientes a la mezcla (GTL y Biodiésel) la regla de Kay ha sido utilizada [54]. Las tablas 3.4 y 3.5 contienen las aportaciones de grupo funcional para cada método utilizado.

Tabla 3.4: Contribución grupos funcionales - Joback

Grupo	tbk	tck	pck	vck
$-CH-$	21.74	0.0164	0.0020	41
$-CH_2-$	22.88	0.0189	0	56
$-CH_3$	23.58	0.0141	-0.0012	65
$-COO-$	81.10	0.0481	0.0005	82
$-CH =$	24.96	0.0129	-0.0006	46

Tabla 3.5: Contribución grupos funcionales - Constantinou-Gani

Grupo	$tb1_k$	$tc1_k$	$\omega1_k$
$-CH_2-$	0.9225	3.4920	0.147
$-CH_3$	0.8894	1.6781	0.296
$-CH_2COO-$	3.3953	13.8116	0.765
$-CH = CH-$	7.3691	7.3691	0.252
Segundo orden			
Grupo	$tb2_j$	$tc2_j$	$\omega2_j$
$CH_2 - CH_m = CH_n$	0.1406	-0.5231	-0.01150

Densidad de la fase líquida

La densidad del líquido para el biodiésel fue estimada por medio de la ecuación de Rackett con la modificación realizada por Spencer y Danner [54], adicionalmente se utilizó la variación del cálculo del factor Z_{RA} propuesta por Soave [56]. De igual forma para el C15H32 y el GTL se utilizó la variación de la expresión de Rackett que permite el uso de una densidad de referencia y nuevamente la propuesta de Soave para el factor Z_{RA} . La densidad de referencia para el Farnesano fue $770\text{kg}/\text{m}^3$ a una temperatura de 288.15K , mientras que para los componentes del GTL se utilizaron los valores presentados en la Tabla 3.6 [72].

Tabla 3.6: Densidad de referencia para estimación con ecuación de Rackett.

Componente	Temperatura de referencia [K]	Densidad [kg/m³]
C9H20	298.15	715
C10H22	298.15	728
C11H24	298.15	737
C12H26	298.15	745
C13H28	298.15	754
C14H30	298.15	758
C15H32	298.15	765
C16H34	298.15	770
C17H36	298.15	773
C18H38	589.3	576.9
C19H40	602.9	582.8
C20H42	616.93	579.9
C21H44	514.83	662.6
C22H46	523.22	662.3

Viscosidad de la fase líquida

La viscosidad de la fase líquida del biodiésel fue determinada con la expresión empírica de Verduzco [73] desarrollada específicamente para éste. Para el GTL se usaron dos diferentes aproximaciones debido a la fuerte dependencia de esta propiedad con la temperatura reducida. Cuando ésta es menor a 0.75 se considera que se trata de un cálculo a baja temperatura y por consiguiente para valores superiores se ha denominado que la estimación se realiza a alta temperatura. Cuando el rango de temperatura es bajo se hace uso de la ecuación propuesta por van Velzen et al [57]. Al presentarse temperaturas reducidas superiores a 0.75 se emplea la expresión recomendada por Sastri [54]. Al realizar el cálculo de la mezcla de los componentes del GTL se ha utilizado la regla adaptada por Kendall y Monroe [60].

Tensión superficial

Al realizar la estimación de la tensión superficial del biodiésel, GTL y C15H32 se empleó la expresión de Sudgen [74], ésta utiliza un parámetro conocido como “*parachor*”, la Tabla 3.7 recoge los valores para cada grupo presente en las distintas moléculas de cada cadena de los compuestos [75]. Por último al calcular la tensión superficial de la mezcla se empleó la regla propuesta por Allen et al [58].

Tabla 3.7: Valor del parachor para cada grupo de contribución.

Grupo	Parachor
-CH2-	40.11
-CH3	55.25
-COO-	64.97
-CH=	34.57

Presión de vapor

La presión de vapor determina el punto de equilibrio entre la fase líquida y

gaseosa de una sustancia a una temperatura determinada. Para su estimación se usó la ecuación de Riedel [54].

Calor latente de vaporización

El desarrollo de la entalpía de vaporización fue llevado a cabo por medio de la ecuación propuesta por Fish y Lielmzs [57]. Ésta requiere el cálculo adicional de la entalpía de vaporización en la a la temperatura normal de ebullición, la cual fue calculada al aplicar la expresión de Chen [54].

Calor específico de la fase vapor

Para la estimación del calor específico de la fase vapor del biodiésel, farnesano y GTL se empleó el método planteado por Joback [54]. Luego del proceso de evaporación, la mezcla aire combustible debe alcanzar la temperatura de ignición, es en este punto donde se hace relevante las características de esta propiedad.

Calor específico de la fase líquida

El calor específico de la fase líquida representa el cambio en la entalpía con la temperatura a una presión constante, éste fue estimado a través de la ecuación de Bondi con la modificación realizada por Rowlinson [57], la cual utiliza como referencia dentro del cálculo el valor del calor específico de la fase vapor a la temperatura de análisis.

Conductividad térmica de la fase líquida

Es conocido que la conductividad térmica de una sustancia representa la facilidad con la que ésta puede transmitir el calor entre dos puntos de su volumen, esto determina que tan rápido el chorro de combustible (o las gotas de éste) logra alcanzar el inicio de su proceso de evaporación. Para su estimación se ha empleado el método propuesto por Latini, et al [54].

Viscosidad de la fase vapor

La viscosidad en la fase vapor puede entenderse como un intercambio de *momentum* molecular aleatorio, que permite el transporte de movimiento desde una zona sometida a un esfuerzo cortante hacia otra en estado estacionario, de esta forma la velocidad del grupo de moléculas cerca del punto de aplicación del esfuerzo es alta, haciendo que éstas se desplacen y sean detenidas (disminuyan su velocidad) debido a las colisiones moleculares aleatorias. Para su estimación se empleó la relación de estados correspondientes de Reichenberg [54].

Conductividad térmica de la fase vapor

Dada la relevancia de los efectos producidos por la velocidad y libertad de movimiento de las moléculas en fase vapor, es necesario realizar un tratamiento más detallado para describir el comportamiento de la conductividad térmica en dicha fase. La conductividad térmica de la fase vapor para el farnesa fue estimada por medio de la expresión de Chung, et al [54], puesto que incorpora los efectos de las colisiones intermoleculares.

Difusión del vapor

La difusión en este punto se refiere al transporte neto de un compuesto al interior de otro que se encuentran en la misma fase (gases en este caso) y en ausencia de mezclado, generando así gradientes de concentración. Para su estimación fue usada la correlación empírica propuesta por Fuller, et al [54, 60] tomando la fase vapor de cada combustible y el aire como gases entre los cuales se da la difusión.

Segundo coeficiente del virial

La ecuación de estado en su forma virial es una serie polinómica que se encuentra en términos de la presión o el volumen y relaciona el comportamiento de estos con la temperatura, los coeficientes presentes en ella caracterizan las fuerzas potenciales

intermoleculares. Es práctica común truncar la serie en el segundo término, aquí radica la importancia de la estimación del coeficiente acoplado a éste. El segundo coeficiente del virial fue estimado por medio de la correlación de Tsonopoulos [54].

3.3.2 IMPLEMENTACIÓN DE PROPIEDADES DE COMBUSTIBLES DENTRO DE OPENFOAM

Teniendo como base la estructura de funcionamiento planteada anteriormente, a partir de este momento se realiza una descripción del proceso de incorporación de la información calculada y la creación de las nuevas librerías en OpenFOAM.

La construcción de nuevos ficheros de líquidos para cada combustible, sigue la misma estructura de programación de OpenFOAM y una posterior compilación de librerías de usuario, este proceso se encuentra ampliamente descrito en [62, 63].

Los nuevos ficheros para los combustibles de estudio, que fueron creados en la librería de usuario, deben contener la información precisa de los coeficientes utilizados por cada una de las ecuaciones que estiman las propiedades. La Figura 3.13 ilustra la disposición de los ficheros en la librería de usuario en OpenFOAM, respetando la jerarquía computacional del mismo.

Para el proceso de incorporación de los combustibles, por medio de los coeficientes de calculo de las propiedades de éste, se realizó un ajuste personalizado de la curva de variación con la temperatura de cada propiedad, frente a cada función especificada en el código de OpenFOAM, con esto se logra obtener cada uno de los coeficientes que dichas funciones requieren. Para el caso de la densidad, la Ecuación 3.1 representa la función NSDRS No. 5 (Figura 3.14) que calcula ésta al interior del código. Es así como los coeficientes a encontrar con el ajuste son a, b, c y d.

$$\rho = \frac{a}{b\left(1+\frac{1-T}{c}\right)^d} \quad (3.1)$$

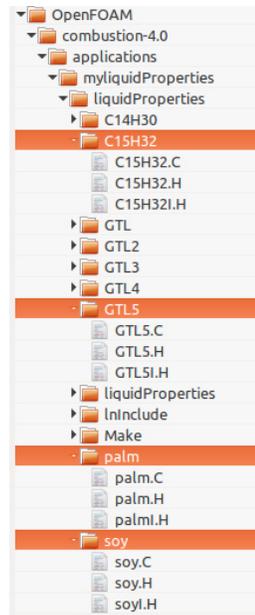


Figura 3.13: Estructura final para la librería de líquidos del usuario.

```

//- Evaluate the function and return the result
scalar f(scalar, scalar T) const
{
    return a_/pow(b_, 1 + pow(1 - T/c_, d_));
}

```

Figura 3.14: Función NSRDS No.5.

El ajuste personalizado fue llevado a cabo por medio de la aplicación de *fitting* perteneciente al software MATLAB[®]. La Figura 3.15 ilustra a manera de ejemplo el ajuste realizado a la curva de la densidad del C15H32, con base en la ecuación especificada en OpenFOAM.

A manera de ejemplo, la Tabla 3.8 recoge los coeficientes obtenidos como resultado del ajuste para la densidad del biodiésel de soya. Este procedimiento se realiza a cada una de las propiedades enumeradas con anterioridad y para cada combustible del estudio.

Tabla 3.8: Coeficientes específicos para biodiésel de soya

	a	b	c	d
Densidad	59.22	0.2323	758.327	0.2846

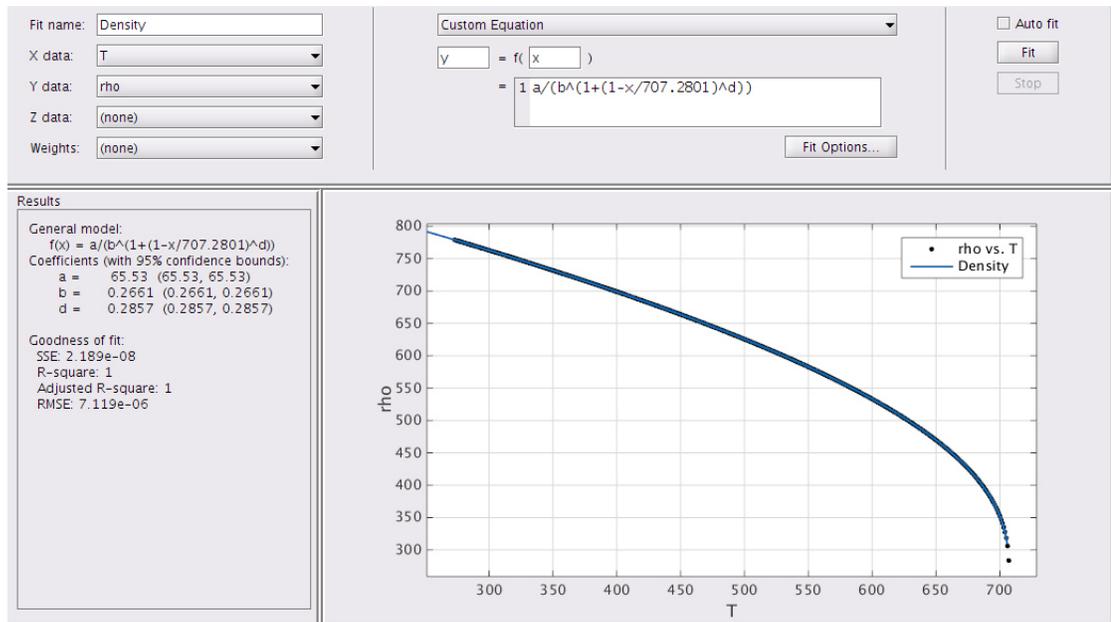


Figura 3.15: Ajuste de curva personalizado, densidad C15H32.

3.3.3 PARÁMETROS DE SIMULACIÓN

Los parámetros de simulación hacen referencia a cada uno de los datos de relevancia que deben ser programados, estos controlan la evolución temporal de la formación del chorro.

Las simulaciones realizadas en este trabajo de investigación, han sido configuradas con base en los ensayos experimentales de tasa de inyección realizados por la Universidad de Castilla-La Mancha, al interior del Grupo de Investigación en Procesos Energéticos y Medioambientales - GPEM, en el marco del desarrollo del proyecto *POWER*, Ref. ENE2014-57043-R.

Las Figuras 3.16.a - 3.16.d representan los resultados de ensayos experimentales para la medición del comportamiento del flujo másico a través de un inyector Denso-DCRI105189, con una duración de energización de $2ms$, cuando se trabaja con una contrapresión de 60 bar (6 Mpa) y para los 4 combustibles de estudio (diésel, biodiésel, farnesano y GTL). En cada una de las figuras es apreciable el aumento de flujo másico, producto del incremento en la presión de inyección. Adicionalmen-

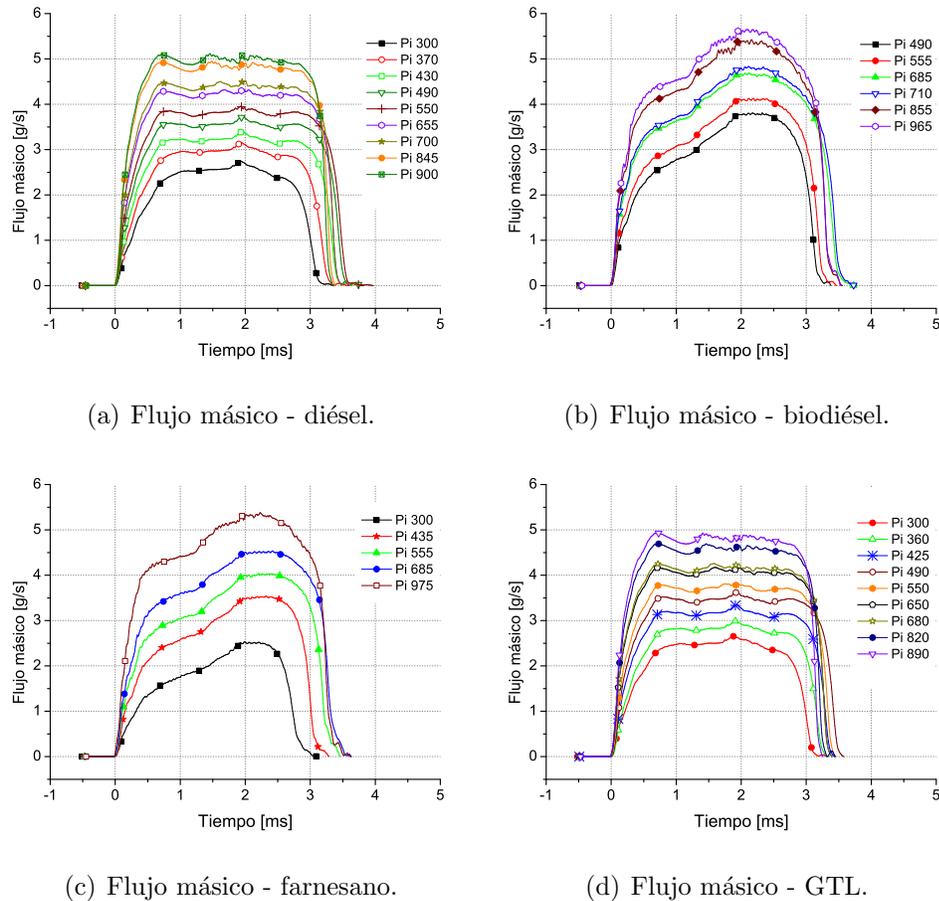
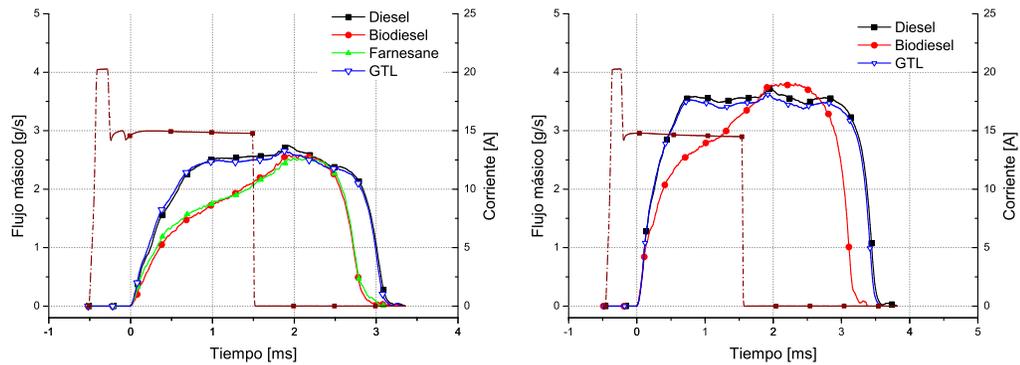


Figura 3.16: Tasa de flujo másico para cada combustible.

te es posible observar como se da la variación en el retraso del cierre del inyector, igualmente consecuencia de las mayores presiones de inyección que logran mantener la aguja del inyector levantada por mayor cantidad de tiempo, después del fin de la energización.

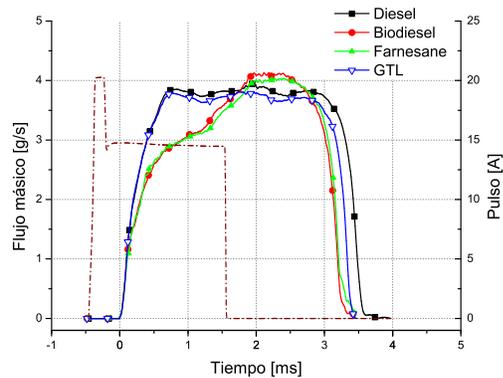
En las figuras 3.17.a - 3.17.c se realiza una comparación del comportamiento del flujo másico entre combustibles inyectados a la misma presión de inyección y bajo el mismo nivel de contrapresión (60bar), adicionalmente se presenta la duración del pulso de inyección que es de 2ms . En todos los casos se observa como la tendencia del flujo másico para el diésel y el GTL forma una estructura trapezoidal mientras que en el caso del biodiésel y el farnesano hay un retraso para alcanzar el punto de estabilidad. Esto afecta el total de masa inyectada, siendo menor para las inyecciones

con biodiésel y farnesano cuando se comparan con las del GTL y el diésel.



(a) Presión de inyección 300 *bar*.

(b) Presión de inyección 490 *bar*.



(c) Presión de inyección 550 *bar*

Figura 3.17: Comparación de tasa de flujo másico - $P_{back} = 60 \text{ bar}$.

En las figuras 3.17.a - 3.17.c se realiza una comparación del comportamiento del flujo másico entre combustibles inyectados a la misma presión de inyección y bajo el mismo nivel de contrapresión (60bar), adicionalmente se presenta la duración del pulso de inyección que es de 2ms. En todos los casos se observa como la tendencia del flujo másico para el diésel y el GTL forma una estructura trapezoidal mientras que en el caso del biodiésel y el farnesano hay un retraso para alcanzar el punto de estabilidad. Esto afecta el total de masa inyectada, siendo menor para las inyecciones con biodiésel y farnesano cuando se comparan con las del GTL y el diésel.

Con base en esta información, son calculados los parámetros finales que implementan en los casos de simulación, siendo estos la duración total del proceso de

inyección, la masa total inyectada por orificio y el coeficiente de descarga.

Las Tablas 3.9, 3.10, 3.11 y 3.12 resumen la información extraída de las curvas de tsa de inyección que se programan en cada caso de simulación (para cada presión de inyección de cada combustible).

Tabla 3.9: Parámetros de inyección - diésel

Presión de inyección [bar]	Duración de la inyección [ms]	Masa inyectada [mg]	Cd [-]
300	3.36	6.589	0.753
370	3.6	8.248	0.777
430	3.64	9.575	0.780
490	3.82	11.015	0.782
550	3.97	12.018	0.788
655	3.6	12.928	0.789
700	3.73	13.477	0.784
845	3.39	14.577	0.778
900	3.35	14.877	0.780

Tabla 3.10: Parámetros de inyección - biodiésel

Presión de inyección [bar]	Duración de la inyección [ms]	Masa inyectada [mg]	Cd [-]
305	3.3	4.948	0.636
410	3.37	7.242	0.696
490	3.38	9.005	0.725
555	3.47	10.208	0.739
685	3.77	12.741	0.754
710	3.77	13.232	0.760
855	3.56	14.444	0.775
965	3.53	15.202	0.762

Tabla 3.11: Parámetros de inyección - Farnesano

Presión de inyección [bar]	Duración de la inyección [ms]	Masa inyectada [mg]	Cd [-]
300	3.1	5.027	0.686
425	3.29	8.108	0.783
550	3.46	10.176	0.786
685	3.63	12.106	0.796
975	3.63	14.512	0.786

Tabla 3.12: Parámetros de inyección - GTL

Presión de inyección [bar]	Duración de la inyección [ms]	Masa inyectada [mg]	Cd [-]
300	3.32	6.502	0.781
360	3.34	7.841	0.796
425	3.44	9.342	0.799
490	3.58	10.708	0.796
550	3.46	11.223	0.797
650	3.39	12.226	0.792
680	3.41	12.463	0.795
820	3.45	13.535	0.785
890	3.26	13.964	0.787

Otro parámetro programado es el ángulo medio teórico del chorro, éste fue calculado por medio de la Ecuación 2.8. Dicha ecuación tiene en cuenta la geometría del inyector y depende únicamente de la densidad del fluido y del gas ambiente, misma que fue calculada con base a la contrapresión de 60 *bar* y una temperatura ambiente de 303 *K* por medio de la ecuación de estado para los gases ideales. La Tabla 3.13 contiene los valores obtenidos para el proceso de inyección de cada combustible.

Tabla 3.13: Ángulo medio teórico del cono

Diesel	GTL	Farnesane	Biodésel
12.844	13.877	13.584	12.475

3.3.4 PREPARACIÓN Y EJECUCIÓN DE LA SIMULACIÓN

Todo caso de simulación ejecutado en OpenFOAM posee 4 componentes básicos, definición de condiciones iniciales, control de especies químicas, constantes de simulación y control de simulación. Estos elementos pueden observarse en la Figura 3.18

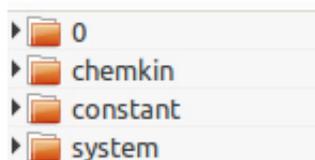


Figura 3.18: Contenido básico - Caso de simulación.

La carpeta 0 contiene la definición de los valores de todas las variables bajo las condiciones iniciales (y de frontera) del problema. Para todos los casos simulados en este trabajo, se han elegido los valores presentados en la Tabla 3.14 para el punto inicial de simulación al interior del volumen de control.

En la carpeta **chemkin** se establecen todas las relaciones existentes entre las especies químicas que intervienen en la simulación, por ejemplo reacciones químicas y entalpías de formación, se declaran los líquidos usados y las rutas de adquisición de sus propiedades.

En la carpeta **chemkin** se establecen todas las relaciones existentes entre las especies químicas que intervienen en la simulación, por ejemplo reacciones químicas y entalpías de formación, se declaran los líquidos usados y las rutas de adquisición de sus propiedades.

Tabla 3.14: Condiciones iniciales del volumen de control

Contrapresión [MPa]	6.0
	Aire:
Composición del ambiente	Oxígeno 23.4 %
	Nitrógeno 79.6 %
Velocidad interna [m/s]	0
Temperatura ambiente [K]	306

La carpeta `constant` permite organizar todos los parámetros de simulación, las constantes de las ecuaciones a resolver (radiación, combustión, especies químicas, turbulencia, etc).

Dentro de los parámetros configurados se encuentra el uso del modelo de inyección `pressureDrivenVelocity`, este permite que la simulación se lleve a cabo con base la presión de inyección. Adicionalmente se ha seleccionado el modelo de ruptura `ReitzKHRT` el cual configura la simulación para trabajar con base en el modelo híbrido conocido como *Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor*. No se consideran los efectos de la radiación, ni se activa la solución de los modelos de combustión.

La carpeta `system` permite declarar la geometría del volumen de control, ésta ha sido seleccionada como un paralelepípedo de caras ortogonales, cuyas dimensiones son $20mm \times 20mm \times 100mm$. El orificio de salida del inyector es posicionado en el centro geométrico de la cara superior con éste dirigido al interior del volumen, dicho volumen puede observarse en la Figura 3.19.

Adicionalmente el tiempo de simulación, el paso temporal y el paso de escritura de resultados es controlado en este apartado.

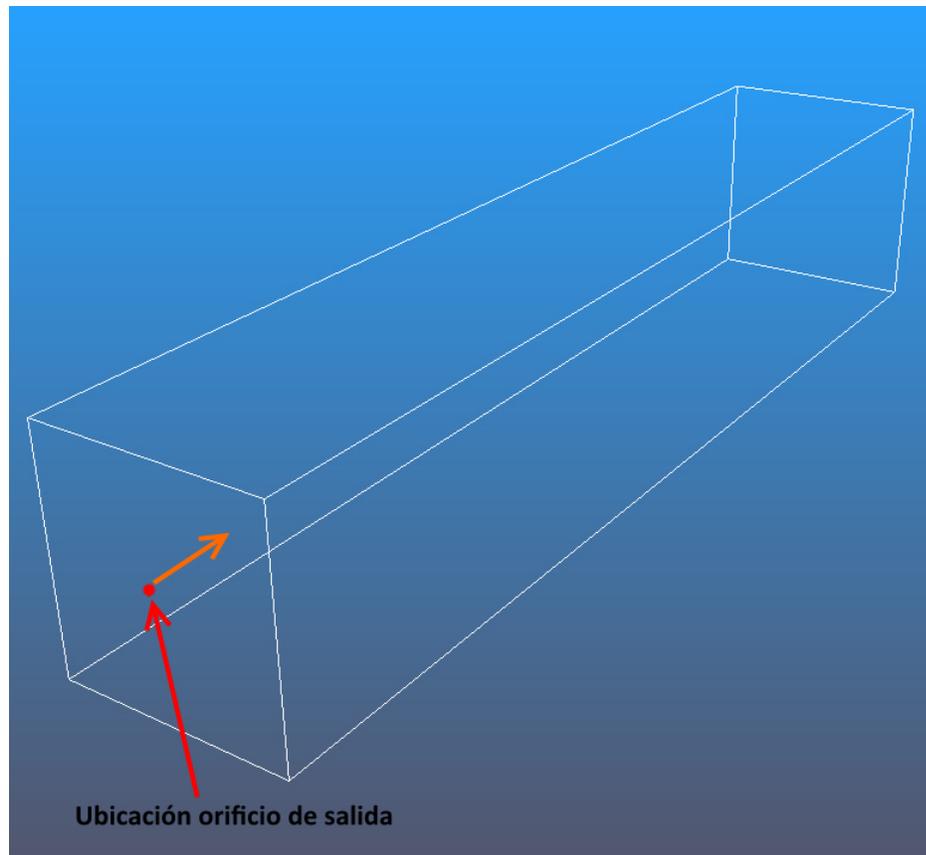


Figura 3.19: Volumen de control para simulación.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

El presente capítulo condensa los resultados obtenidos a lo largo del estudio al seguir la metodología desarrollada en la anterior sección

4.1. Caracterización de la tobera de inyección	120
4.2. Caracterización de los combustibles y sus propiedades .	126
4.2.1. Propiedades básicas de los combustibles	126
4.2.2. Densidad de la fase líquida	127
4.2.3. Viscosidad de la fase líquida	128
4.2.4. Tensión superficial	128
4.2.5. Presión de vapor	130
4.2.6. Calor latente de vaporización	130
4.2.7. Calor específico de la fase vapor	131
4.2.8. Calor específico de la fase líquida	131
4.2.9. Conductividad térmica la fase líquida	133
4.2.10. Viscosidad de la fase vapor	133
4.2.11. Conductividad térmica de la fase vapor	134
4.2.12. Difusividad de la fase vapor	134

4.2.13. Segundo coeficiente del virial	135
4.3. Resultados implementados en modelo de simulación de OpenFOAM	135
4.4. Validación experimental del modelo	140
4.5. Resultados de simulación	144
4.5.1. Penetración con 2 milisegundos de energización	144
4.5.2. SMD con 2 milisegundos de energización	149
4.5.3. Velocidad máxima	154

4.1 CARACTERIZACIÓN DE LA TOBERA DE INYECCIÓN

La caracterización de la tobera de inyección se llevó a cabo por medio de la técnica de la silicona, posteriormente se realizó una confrontación de los resultados frente a datos de un análisis de rayos x realizado en la UCLM. La Figura 4.1 contiene las capturas conseguidas en un SEM antes de realizar el tratamiento de imagen y toma de dimensiones.

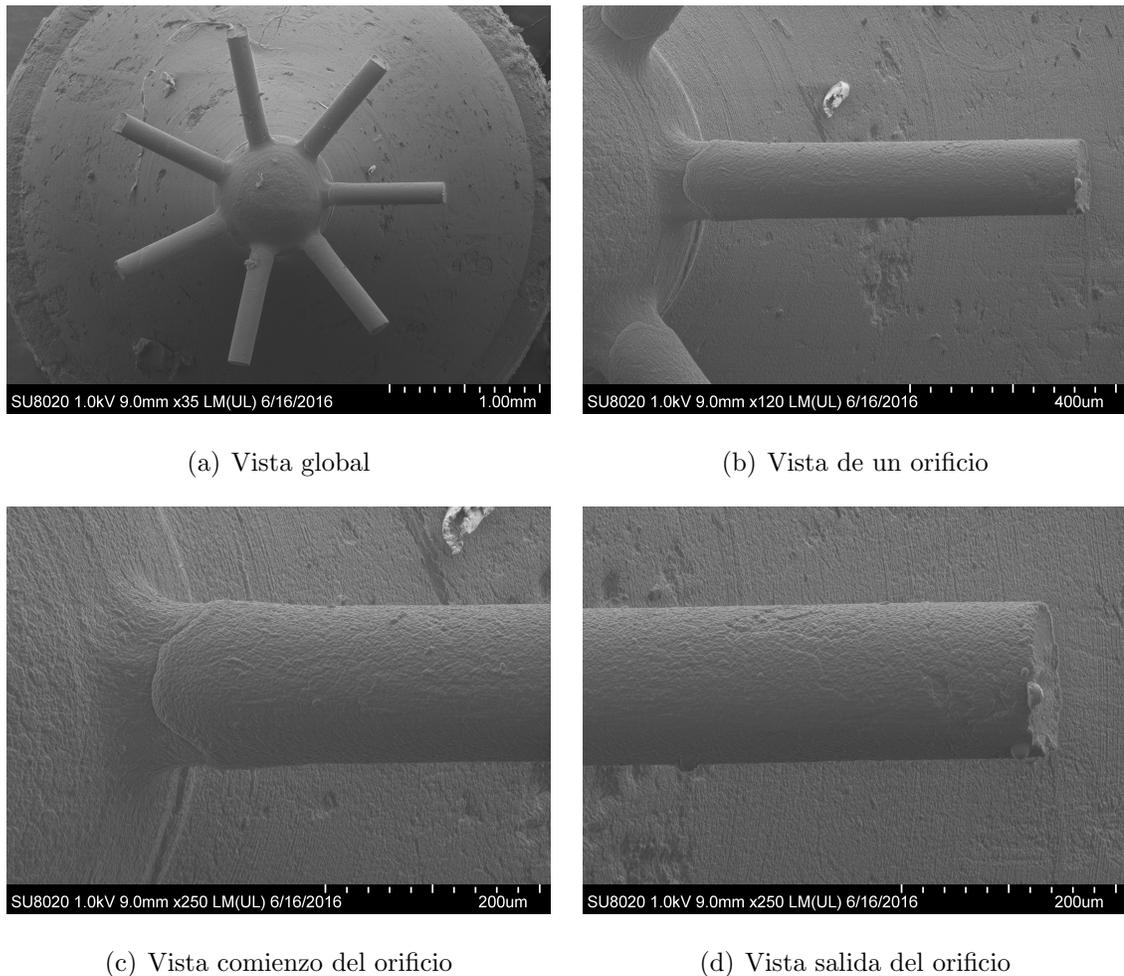


Figura 4.1: Visualización SEM de los moldes de silicona

La medida de las dimensiones representativas de la tobera y orificios fue llevada a cabo por medio de un software CAD. El primer conjunto de imágenes analizadas esta conformado por una serie de tomas efectuadas desde un ángulo perpendicular

a la parte inferior de la tobera, primero de forma global seguido de un acercamiento a cada uno de los orificios.

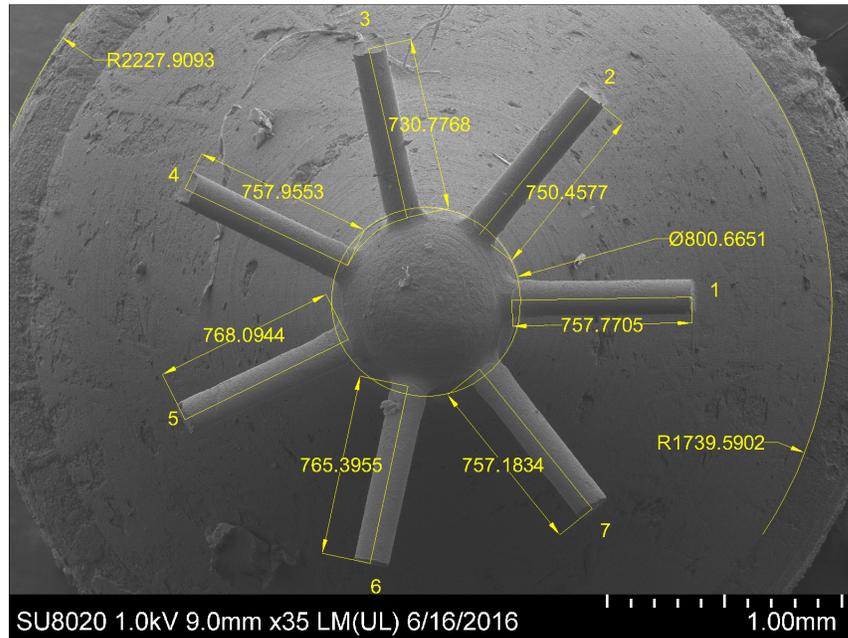


Figura 4.2: Dimensiones geométricas de la tobera.

La Figura 4.2 contiene de forma gráfica la longitud de cada uno de los orificios de la tobera, el diámetro de la base del saco, el radio de la base en la sección cónica de la tobera y el radio de la sección cilíndrica interna de la tobera. La información de la imagen (descrita de derecha a izquierda) permite conocer que el modelo del SEM es SU8020 producido por *Hitachi - High Technologies*, su fuerza electromotriz (que impulsa los electrones hacia la muestra) en el instante de captura es de $1.0kV$, la distancia de trabajo (medida desde el objetivo hasta la muestra) es de $9mm$, la magnificación (zoom) de 35 veces el tamaño original de la probeta ($\times 35$) y en la esquina inferior derecha se puede apreciar la barra de escala (con una longitud de 1 mm para esta imagen), por último las medidas aquí observadas se encuentran en μm . Cada imagen SEM (original o tratada) lleva en ella la información relevante acerca de su captura y puede ser leída conforme la descripción antes realizada.

Al realizar un acercamiento apropiado, es posible capturar la medida de lon-

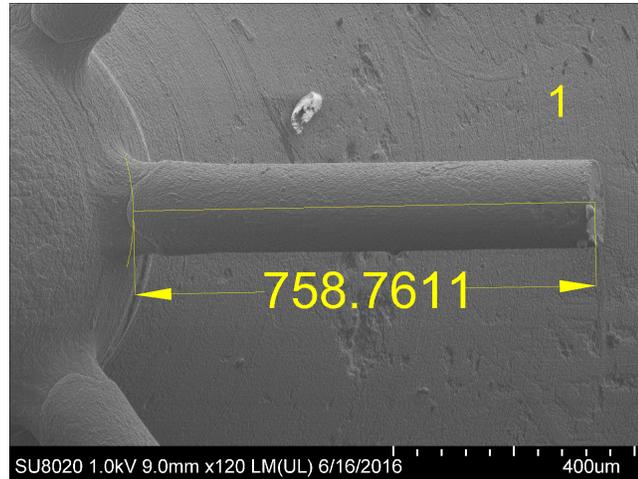
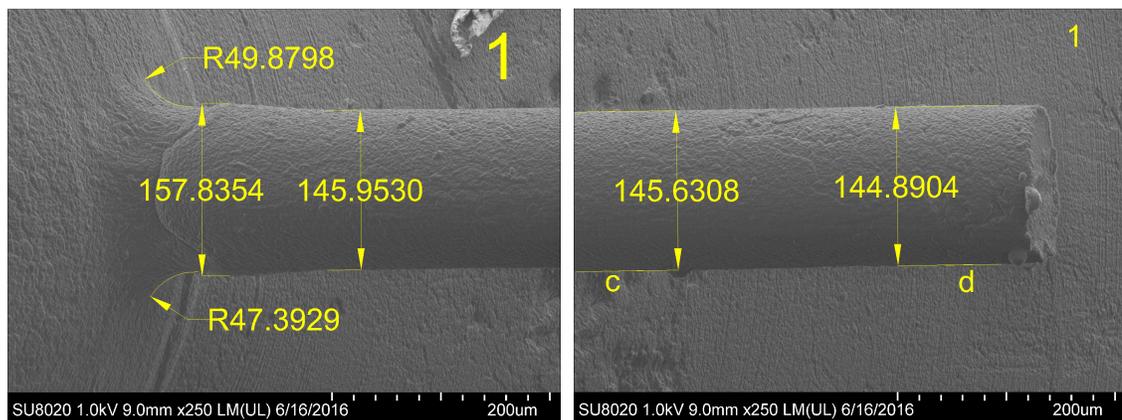


Figura 4.3: Longitud de un orificio

gitud del orificio, para esto se hace un aumento de $\times 120$. Al medir esta distancia en el software CAD se encuentra que para el orificio 1 (Ver Figura 4.3) tiene una magnitud de $758.7611\mu\text{m}$. Bajo el mismo procedimiento se realizó la medición de la longitud para cada uno de los 7 orificios de la tobera.



(a) Dimensiones en la zona inicial del orificio (b) Dimensiones en la zona final del orificio

Figura 4.4: Dimensiones capturadas en un orificio

A continuación el análisis del diámetro del orificio revela que la forma de éste es virtualmente cilíndrica como puede observarse en la Figura 4.4, ya que no presenta una mayor variación en su magnitud desde que inicia el en la base del saco hasta que

se alcanza el la sección de salida. De igual forma es apreciable un ensanchamiento en la zona inicial del orificio, justo al terminar el radio de acuerdo entre este y el saco de la tobera. La deformación presentada en la estructura de la tobera es atribuible a los procesos de desgaste por hidroerosión y cavitación, cuya magnitud puede verse aumentada por la geometría cilíndrica del orificio [76]. Adicionalmente se detalla (Figura 4.4.a) el radio de acuerdo (también conocido como radio de curvatura), característica relevante en los procesos de cavitación que ocurren al interior de la tobera.

Tabla 4.1: Dimensiones principales de la tobera

	L [μm]	\mathbf{Di} [μm]	\mathbf{Dihe} [μm]	\mathbf{Dm} [μm]	\mathbf{Do} [μm]	\mathbf{k}	\mathbf{AR} [%]	\mathbf{IHE} [%]	\mathbf{BE} [%]
Orificio 1	759	145.95	157.84	145.63	144.89	0.14	1.45	16.95	0.14
Orificio 2	737	148.84	163.44	146.59	145.03	0.52	5.05	20.59	-0.23
Orificio 3	727	147.48	155.24	145.39	143.91	0.49	4.79	10.79	-0.21
Orificio 4	763	147.22	159.41	145.33	145.69	0.20	2.08	17.24	-0.77
Orificio 5	769	149.61	160.16	144.81	144.91	0.61	6.19	14.60	-1.66
Orificio 6	767	149.35	159.27	147.37	145.69	0.48	4.84	13.74	-0.10
Orificio 7	750	147.21	160.81	145.28	144.63	0.34	3.48	19.33	-0.44
Promedio	753	147.95	159.45	145.77	144.96	0.40	3.98	16.17	-0.47
Desviación	16	1.34	2.54	0.89	0.62	0.17	1.72	3.38	0.60
Medida final	753 ± 16	148 ± 1	159 ± 3	146 ± 1	145 ± 1	0.4 ± 0.2	4.0 ± 1.7	16.2 ± 3.4	-0.5 ± 0.6

La Tabla 4.1 resume las principales dimensiones de cada uno de los orificios pertenecientes a la tobera del inyector. En ella, \mathbf{L} es la longitud del orificio, \mathbf{Di} representa el diámetro inicial del orificio, \mathbf{Dihe} es el diámetro de la zona afectada por la hidroerosión, \mathbf{Dm} es el diámetro en la mitad del orificio, \mathbf{Do} es el diámetro de salida del orificio, \mathbf{k} es conocido como el factor de conicidad y es determinado por $k = 100(Di - Do)/L$, \mathbf{AR} es otra forma de definir la conicidad del orificio por medio de las áreas ($AR = 100(A_i - A_o)/A_i$), \mathbf{IHE} es conocido como el impacto de la hidroerosión, determina la variación entre el área de entrada del orificio y el área de la sección transversal en la zona de erosión ($IHE = 100(A_i - A_o)/A_i$) y \mathbf{BE} describe el tipo de forma del orificio, se conoce como el efecto de barril ($D' = (D_i + D_o)/2$; $BE = 100(Dm - D')/D'$) [64].

Para efectos de la simulación de procesos de inyección, el diámetro del orificio de salida es la dimensión que más relevancia presenta frente al modelo utilizado, por lo que se ha usado el valor de $145\mu m$ como dato de entrada en las simulaciones realizadas.

Rayos X

Otro método existente para la caracterización de la geometría interna de las toberas de inyección es el análisis por rayos X. Por medio de este es posible ver los espacios vacíos al interior de la tobera, y bajo el correcto escalamiento es posible encontrar dimensiones con un buen grado de exactitud. La Figura 4.5 es una muestra de un proceso de visualización por rayos X, realizado en la Universidad de Castilla-La Mancha.

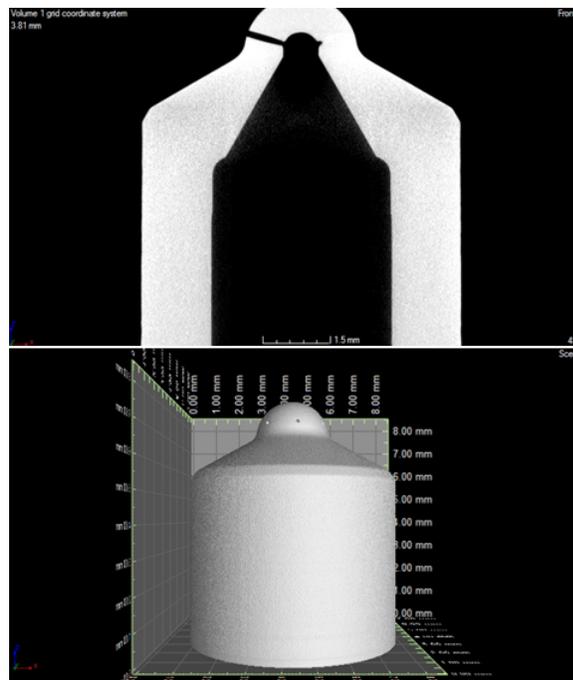


Figura 4.5: Visualización por rayos X.

La Figura 4.6 presenta la caracterización geométrica realizada por medio de la visualización por rayos X, en ella es apreciable que la longitud del orificio es de $811.84\mu m$, que el diámetro exterior del orificio de salida es de $149.77\mu m$ y el ángulo

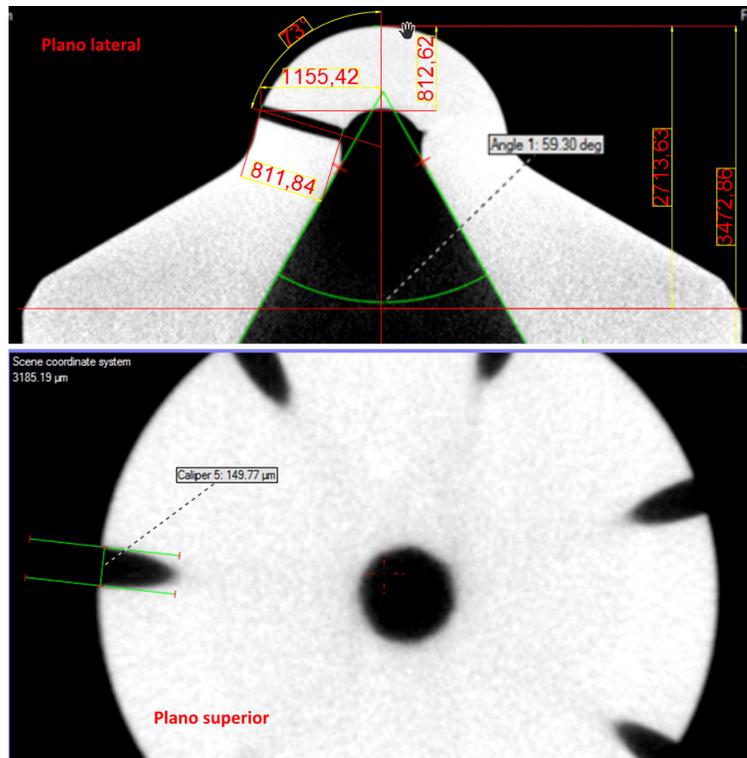


Figura 4.6: Caracterización por rayos X.

formado por el eje central del orificio con respecto al eje central de la tobera tiene un valor de 73° . Esta característica geométrica es de importancia para el cálculo de los parámetros macroscópicos por medio del análisis de imágenes de alta velocidad del proceso de inyección.

La caracterización por rayos X de la tobera del inyector permite obtener medidas con un buen grado de exactitud para dimensiones como el ángulo del orificio y su diámetro de salida, encontrándose una diferencia de tan solo $5 \mu m$ en esta última, al comparar los valores obtenidos por visualización SEM y rayos X. La técnica de la silicona demuestra ser de mayor exactitud, especialmente al comparar los valores de la longitud del orificio, para esta dimensión se presenta una diferencia de $59 \mu m$ entre las dos técnicas, pudiéndose afirmar que la caracterización por rayos X presenta una tendencia a sobre estimar las medidas en un rango entre un 3% y 8% aproximadamente.

4.2 CARACTERIZACIÓN DE LOS COMBUSTIBLES Y SUS PROPIEDADES

Teniendo como base la teoría expuesta en la sección 2.3, se presentan a continuación los resultados de la estimación de las propiedades físico químicas y de transporte de los combustibles analizados en este trabajo. Nuevamente es mencionado que el combustible diésel ha sido tratado como un compuesto puro debido a la complejidad y variación en su composición, por lo que las propiedades presentadas en adelante corresponden a su sustituto, el tetradecano (C14H30).

4.2.1 PROPIEDADES BÁSICAS DE LOS COMBUSTIBLES

La Tabla 4.2 recoge los resultados de la estimación para las propiedades básicas de los combustibles analizados.

Tabla 4.2: Propiedades básicas estimadas.

Propiedad	Combustible			
	C14H30	Biodiésel	C15H32	GTL
Temperatura normal de ebullición [K]	526.73	594.19	510.22	540.59
Temperatura crítica [K]	692.40	762.69	707.28	702.57
Presión crítica [MPa]	1.62	1.31	1.44	1.50
Volumen crítico [m ³ /kmol]	0.8428	1.084	0.8575	0.8923
Factor excéntrico	0.6617	0.9359	0.2816	0.6894

Es apreciable como se presenta una diferencia en la temperatura normal de ebullición de hasta $84K$ entre los combustibles, siendo el biodiésel el que mayor valor presenta y el farnesano el menor. Esto indica que durante el proceso de evaporación el biodiésel puede tardar más en iniciar el proceso de cambio de fase como consecuencia

de esta mayor temperatura.

Las propiedades críticas de los combustibles demarcan los límites en los combustibles se comportan como fluidos definidos (ya sea en fase líquida o vapor), de tal forma que calcular las demás propiedades por fuera de estos límites dejara de tener sentido físico [27]. Nuevamente es el biodiésel quien presenta los valores más altos en temperatura crítica y volumen crítico, mientras que en el caso de la presión crítica es el diésel (C14H30) quien registra el mayor valor.

4.2.2 DENSIDAD DE LA FASE LÍQUIDA

De los resultados presentados en la Figura 4.7a se puede apreciar como el biodiésel siempre presenta una mayor densidad a lo largo del rango de temperatura, mientras que para el caso del C14H30, C15H32 (Farnesano) y el GTL no existen diferencias pronunciadas, comportamiento observado en los trabajos de Ismail, et al y Gülüm, et al. [27, 77].

Una mayor densidad del combustible conlleva a obtener menores velocidades inyección [26], lo que a su vez implica un retraso en el proceso de ruptura, generando gotas de mayor tamaño, con lo que se disminuye la tasa de evaporación y la velocidad de mezclado con el aire. Todo lo anterior aumenta el retraso en la ignición, terminando con una combustión menos eficiente. A su vez, una mayor densidad requiere de mayores presiones de inyección para lograr ingresar a la cámara de combustión suficiente masa y así obtener la liberación de calor óptima.

Por el contrario la baja densidad del farnesano favorecería el proceso de ruptura, al lograr inyectarse el combustible con una mayor velocidad de salida.

4.2.3 VISCOSIDAD DE LA FASE LÍQUIDA

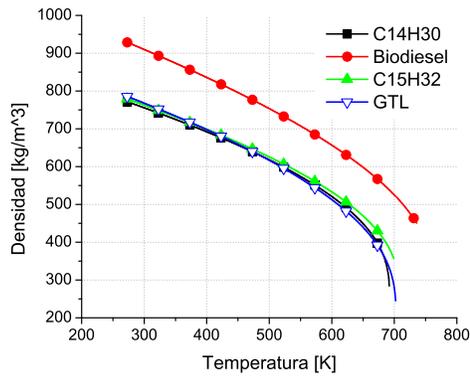
De los resultados observados en la Figura 4.7b se concluye que el biodiésel presenta una mayor viscosidad que los demás combustibles hasta que se alcanza una temperatura de $500K$, donde el comportamiento para los cuatro se hace similar y cercano a cero. El farnesano ($C_{15}H_{32}$) es el combustible que presenta menor viscosidad y finalmente se observa que el GTL y el diésel ($C_{14}H_{30}$) se comportan de forma similar en todo el rango de temperatura.

Un mayor nivel de viscosidad en el rango de temperatura de $300 - 320K$ (temperaturas típicas de inyección), implica una diferencia en el proceso de inyección y ruptura del combustible a iguales presiones de inyección. Al existir un mayor efecto de las fuerzas viscosas se espera que las velocidades de inyección sean menores conforme la viscosidad del combustible sea mayor. Igualmente este efecto produciría tamaños de gotas superiores.

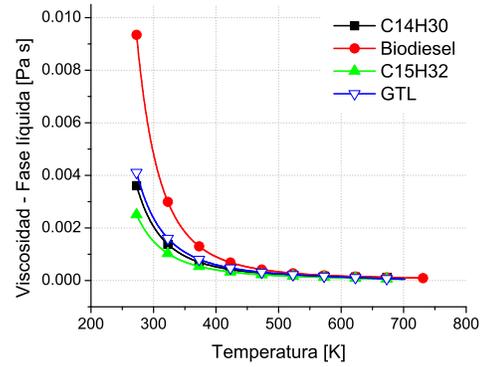
4.2.4 TENSIÓN SUPERFICIAL

La Figura 4.7c ilustra los resultados de la estimación para la tensión superficial. Es apreciable la diferencia entre el biodiésel y el $C_{15}H_{32}$ puesto que son los combustibles con los mayores y menores valores respectivamente, mientras que para el GTL y $C_{14}H_{30}$ se da un comportamiento similar a bajas temperaturas (menores a $350K$), punto desde el cual comienza a presentarse una separación en las tendencias de comportamiento en donde el GTL muestra un mayor nivel de esta propiedad.

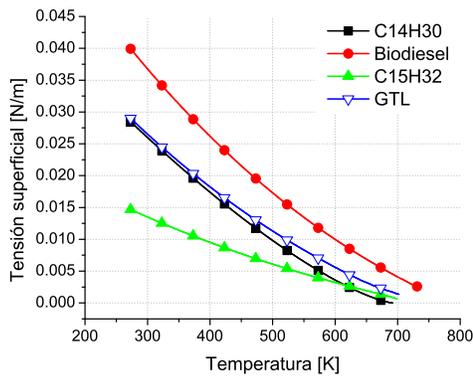
La tensión superficial es una propiedad de vital importancia para la predicción del proceso de ruptura. Mayores valores de ésta implican una oposición más fuerte a la desintegración de las gotas por efecto de las fuerzas dinámicas producto de la interacción entre las gotas y el gas circundante [37].



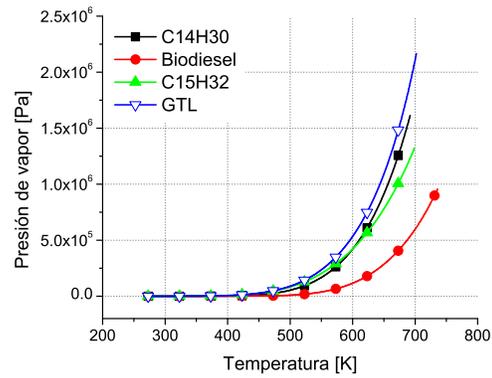
(a) Densidad - Fase líquida



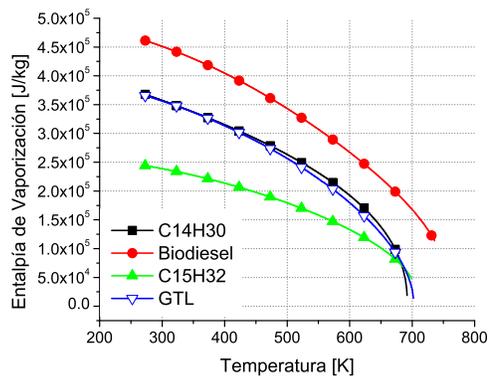
(b) Viscosidad - Fase líquida



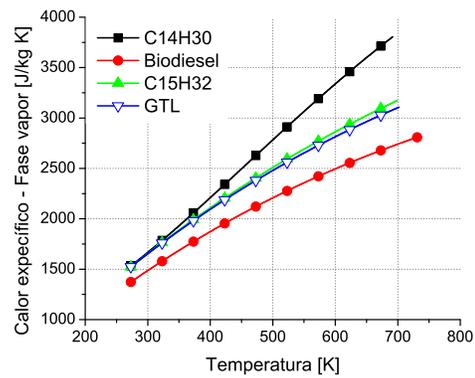
(c) Tensión superficial



(d) Presión de vapor



(e) Calor latente de vaporización



(f) Calor específico - Fase vapor

Figura 4.7: Propiedades termofísicas y de transporte de los combustibles - Parte 1.

4.2.5 PRESIÓN DE VAPOR

En la Figura 4.7d se presentan los resultados de la estimación de la presión de vapor para cada uno de los combustibles analizados, en ella se observa como el comportamiento de todos los combustibles es prácticamente idéntico en el rango de temperaturas comprendido entre los $273K$ y $450K$, a partir de este punto el GTL tiene una tendencia superior, seguido muy de cerca por el $C_{14}H_{30}$ y el farnesano, mientras que el biodiésel siempre permanece a valores inferiores de los otros tres, haciendo más grande esta diferencia conforme aumenta la temperatura.

Menores valores de presión de vapor generan la necesidad de aumentar la temperatura para que comience el cambio de fase, esto repercute completamente en el proceso de evaporación, con lo que se espera una menor tasa de evaporación para el biodiésel en comparación con los demás combustibles [27].

4.2.6 CALOR LATENTE DE VAPORIZACIÓN

En la Figura 4.7e se puede observar que para el rango de análisis el biodiésel siempre presenta mayores valores de calor latente de vaporización, el farnesano es el combustible cuyo comportamiento es menor y entre el sustituto de diésel y el GTL no hay una diferencia significativa. El hecho de tener un mayor calor latente de vaporización implica que se requiere una mayor cantidad de energía transferida al combustible para que se realice un cambio de fase, esto afecta de manera directa el proceso de evaporación, viéndose favorecido en el caso del farnesano y perjudicado con el biodiésel.

4.2.7 CALOR ESPECÍFICO DE LA FASE VAPOR

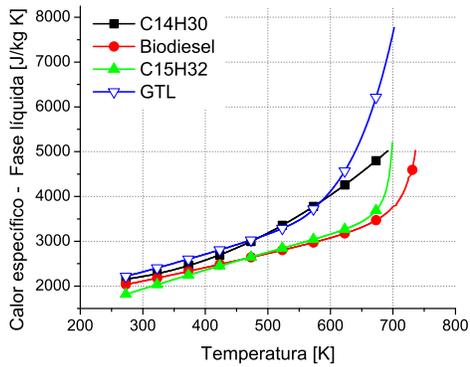
De los resultados presentados en la Figura 4.7f se puede apreciar como el biodiésel presenta los menores valores para todo el rango de temperatura, mientras que para el C14H30 se da un comportamiento de crecimiento más acelerado que toma lugar de forma temprana cerca del inicio del intervalo. Entre los 273K y 350K no existe diferencia perceptible en el comportamiento del C14H30 frente al farnesano y el GTL, desde ese punto en adelante se da una separación en las tendencias, dejando solo un comportamiento similar entre estos dos últimos.

Durante la fase vapor un calor específico menor implica una cantidad de energía necesaria para que la temperatura aumente de menor rango, esto conlleva a que la mezcla de aire combustible alcance la temperatura de ignición más rápido y haya un incremento en la energía transferida a las gotas en el proceso de evaporación.

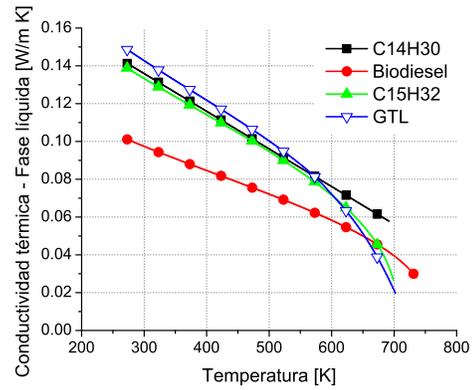
4.2.8 CALOR ESPECÍFICO DE LA FASE LÍQUIDA

Como puede observarse en la Figura 4.8a el comportamiento del calor específico del biodiésel y el C15H32 tienen tendencias similares y de menor grado que las del C14H30 y el GTL cuyas curvas se encuentran por encima de los dos anteriores. A temperaturas superiores de los 600K, se presenta una marcada separación entre los comportamientos del GTL y el C14H30, donde el calor específico del GTL aumenta de forma más rápida.

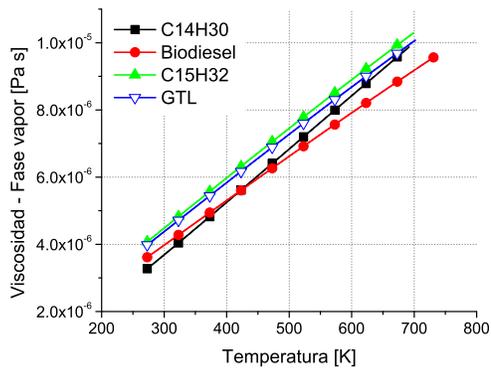
El comportamiento del calor específico en la fase líquida de los cuatro combustibles, indica que esta propiedad puede mejorar la tasa de evaporación del biodiésel y el farnesano, dado que se necesita una menor cantidad de energía para producir el mismo cambio de temperatura que en el caso del sustituto del diésel y del GTL.



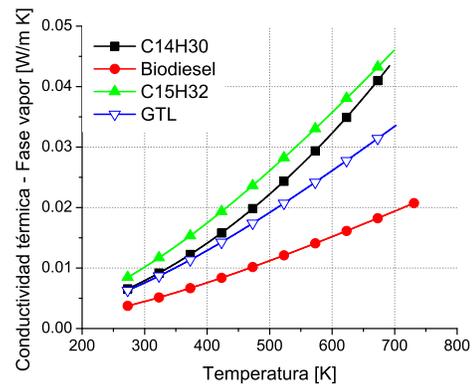
(a) Calor específico de la fase Líquida



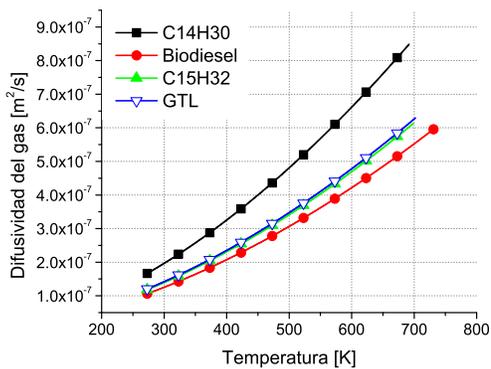
(b) Conductividad térmica - Fase líquida



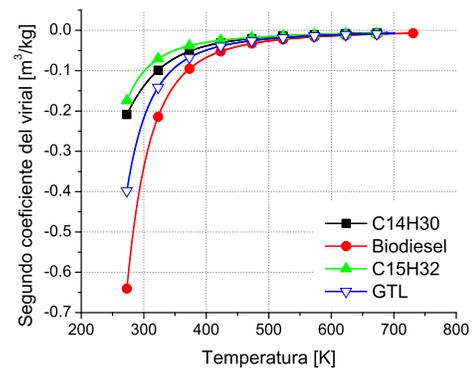
(c) Viscosidad - Fase vapor



(d) Conductividad térmica - Fase vapor



(e) Difusividad del vapor



(f) Segundo coeficiente del virial

Figura 4.8: Propiedades termofísicas y de transporte de los combustibles - Parte 2.

4.2.9 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA LA FASE LÍQUIDA

La Figura 4.8b ilustra como es el comportamiento de la conductividad térmica para los cuatro combustibles del estudio y se observa cómo para todos se presenta una tendencia decreciente con el aumento de la temperatura. Es notable el hecho de que el biodiésel es el compuesto con menor conductividad térmica en todo el rango de temperatura a excepción de valores superiores a $650K$ donde el GTL y farnesano toman valores inferiores. A pesar de esto, el GTL y el farnesano tienen valores cercanos a los presentados por el $C_{14}H_{30}$, siendo el GTL levemente superior a los otros dos cuando la temperatura es inferior a $560K$.

Con los valores menores de la conductividad térmica del biodiésel se espera la transferencia de calor que ocurre entre la superficie de las gotas y el interior de estas sea menor, lo que se traduciría en una disminución de la tasa de evaporación de este combustible al ser comparada con la de los demás. Por el contrario el farnesano presentaría una tasa de evaporación más alta, consecuencia de un aumento de la tasa de calor transferida al interior de las gotas líquidas.

4.2.10 VISCOSIDAD DE LA FASE VAPOR

En la Figura 4.8c se observa como la viscosidad de vapor tiene un comportamiento semejante para el farnesano y el GTL, siendo estos dos los que mayores valores presentan a lo largo del intervalo de temperatura. El biodiésel inicia con un valor superior al $C_{14}H_{30}$, pero cerca de los $450K$ la pendiente de su curva comienza a disminuir, lo que hace que su crecimiento se vea relegado y superado por el $C_{14}H_{30}$.

El aumento de la viscosidad de la fase vapor con la temperatura está determinado por la interacción molecular, a temperaturas mayores la vibración de las moléculas incrementa, generando así que las moléculas más livianas se opongan de

una forma mayor al movimiento.

4.2.11 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA DE LA FASE VAPOR

Durante la fase vapor la conductividad térmica se da en mayor proporción por colisión molecular, por lo tanto al aumentar la temperatura se incrementa la interacción entre moléculas y por consiguiente la conductividad térmica se eleva, este comportamiento puede ser observado en la Figura 4.8d. De los cuatro combustibles es el biodiésel quien presenta los menores valores durante todo el intervalo de temperatura en contraste al C15H32 que tiene los valores más altos. El C14H30 y el GTL tienen comportamientos semejantes a temperaturas inferiores de los $310K$, punto desde el cual comienza a marcarse una diferencia en sus tendencias.

Al igual que en el caso de la viscosidad de la fase vapor, la conductividad térmica en la misma fase se ve favorecida por la actividad molecular, permitiendo un mayor transporte de energía térmica debido al movimiento.

4.2.12 DIFUSIVIDAD DE LA FASE VAPOR

La Figura 4.8e muestra como el aumento de la temperatura induce un crecimiento en la difusividad. Adicionalmente es notable que los combustibles con mayores y menores valores de difusividad en el aire son el C14H30 y el biodiésel respectivamente, mientras que entre el comportamiento del C15H32 y el GTL no se aprecian diferencias marcadas, estando su tendencia levemente superior a la del biodiésel.

La actividad molecular aumentada por los incrementos de temperatura terminan en mayores valores de la difusividad. Es de esperar que moléculas más complejas y pesadas que la del sustituto del diésel presenten menores valores de difusividad, dado que encuentran una mayor dificultad al movimiento.

4.2.13 SEGUNDO COEFICIENTE DEL VIRIAL

La Figura 4.8f ilustra los resultados del cálculo para cada combustible, aquí se aprecia como el biodiésel tiene los menores valores para este coeficiente, mientras que el C15H32 contiene los mayores. Por encima de los 500K la diferencia entre las curvas de los combustibles comienza a ser poco notoria.

En la ecuación de estado, el segundo coeficiente del virial permite tener en cuenta las desviaciones del comportamiento ideal de los gases cuando se expanden [54].

4.3 RESULTADOS IMPLEMENTADOS EN MODELO DE SIMULACIÓN DE OPENFOAM

La Tabla 4.3 contiene los datos básicos incorporados en las nuevas librerías de líquidos, pertenecientes a cada archivo C15H32.C, palm.C, soy.C y GTL.C. Igualmente se presentan los del tetradecano (sustituto del diésel) cuyos valores vienen por defecto implementados. Estos son requeridos por los solucionadores de modelos termofísicos invocados por sprayFoam durante la simulación y establecen los límites físicos en los que ésta se llevará a cabo.

Las tablas 4.4 a 4.15 contienen los resultados obtenidos e incorporados en OpenFOAM para el resto de propiedades.

Tabla 4.3: Datos incorporados en nuevos líquidos de OpenFOAM

Parámetro	C14H30	C15H32	Palma	Soja	GTL
Peso molecular [kg/kmol]	198.392	212.41	283.9379	292.1553	214.152
Temperatura Crítica [K]	692.4	707.28	758.27	764.4	702.573
Presión crítica [Pa]	1621200	1441346	1330950	1309400	1600540
Volúmen crítico [m ³ /kmol]	0.8428	0.8575	1.0688	1.0902	0.8923
Factor de compresibilidad	0.237	0.2685	0.2169	0.2158	0.2359
Temperatura del punto triple [K]	279.01	234.39	288.333	286.502	280.485
Temperatura normal de ebullición [K]	526.73	510.22	590.18	595.75	540.59
Momento dipolar [debyes]	0	0	1.2695	1.2623	0
Factor acéntrico	0.6617	0.2816	0.9259	0.9398	0.6894

Tabla 4.4: Coeficientes para cálculo de la densidad en OpenFOAM.

Combustible	a	b	c	d
C14H30	60.9202	0.2582	692.4	0.2662
Biodiésel Palma	59.22	0.2323	758.327	0.2846
Biodiésel Soja	59.97	0.2323	764.406	0.2854
C15H32	65.53	0.2661	707.28	0.2857
GTL	35.22	0.1932	702.5732	0.241

Tabla 4.5: Coeficientes para cálculo de presión de vapor.

Combustible	a	b	c	d	e
C14H30	249.210	-16915.0	-35.195	0.028	1.0
Biodiésel Soya	142.700	-1.543e+04	-16.720	4.316e-06	1.999
Biodiésel Palma	142.900	-1.527e+04	-16.780	4.765e-06	1.990
Farnesano	176.800	-1.245e+04	-23.860	0.005	1.156
GTL	154.800	-9539.0	-28.840	5.385	0.373

Tabla 4.6: Coeficientes para cálculo de entalpía de vaporización.

Combustible	T_c	a	b	c	d	e
C14H30	692.400	455764.345	0.428	0.0	0.0	0.0
Biodiésel Soya	764.406	3.286e+05	-0.109	0.968	-0.446	0.043
Biodiésel Palma	758.277	3.347e+05	-0.114	0.983	-0.481	0.054
Farnesano	707.280	2.600e+05	-0.189	1.002	-0.479	0.065
GTL	702.573	3.877e+05	-0.384	1.808	-1.551	0.596

Tabla 4.7: Coeficientes para cálculo de calor específico-líquido.

Combustible	a	b	c	d	e	f
C14H30	2565.728	-4.781	0.012	0.0	0.0	0.0
Biodiésel Soya	15554.0	0.962	0.0	2.665e-05	-5.916e-08	4.069e-11
Biodiésel Palma	1693.0	4.018	-0.035	0.0	-2.504e-07	1.472e-10
Farnesano	2561.0	-11.550	0.040	-1.351e-05	-7.889e-08	7.755e-11
GTL	-5487.0	100.0	-0.543	0.001	-2.040e-06	1.094e-09

Tabla 4.8: Coeficientes para cálculo de calor específico-vapor.

Combustible	a	b	c	d	e
C14H30	1134.118	3629.178	-1440.300	2275.293	-682.0
Biodiésel Soya	888.900	1474.0	1403.0	1731.0	153.900
Biodiésel Palma	1089.0	1344.0	1554.0	1848.0	673.700
Farnesano	1012.0	2044.0	1520.0	2097.0	-601.500
GTL	997.900	1752.0	1398.0	1957.0	578.400

Tabla 4.9: Coeficientes para cálculo del segundo coeficiente del virial.

Combustible	a	b	c	d	e
C14H30	0.002	-2.626	-1427174.482	-1.682e+19	3.488e+21
Biodiésel Soya	0.068	-49.540	4.615+05	-1.683e+19	1.0
Biodiésel Palma	0.015	-16.260	4.987e+05	-1.683e+19	3.488e+21
Farnesano	0.015	-16.260	4.987e+05	-1.683e+19	3.488e+21
GTL	0.060	-43.500	4.987e+05	-1.683e+19	0.757

Tabla 4.10: Coeficientes para cálculo de viscosidad-líquido.

Combustible	a	b	c	d	e
C14H30	-18.964	2010.900	1.064	0.0	0.0
Biodiésel Soya	-22.810	2009.0	-0.007	10.770	0.0
Biodiésel Palma	-22.360	1963.0	0.002	11.240	-0.012
Farnesano	-19.030	1959.0	1.062	-0.076	-0.003
GTL	-18.400	1959.0	0.738	0.991	0.085

Tabla 4.11: Coeficientes para cálculo de viscosidad-vapor.

Combustible	a	b	c	d
C14H30	4.456e-08	0.868	228.160	-4347.200
Biodiésel Soya	1.528e-07	0.667	228.200	0.818
Biodiésel Palma	1.355e-07	0.685	228.200	-4347.0
Farnesano	1.564e-07	0.680	228.200	-4347.0
GTL	1.660e-07	0.667	228.200	-4347.0

Tabla 4.12: Coeficientes para cálculo de conductividad térmica líquido.

Combustible	a	b	c	d	e	f
C14H30	0.195	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Biodiésel Soya	0.656	-0.005	2.488e-05	-5.253e-08	5.442e-11	-2.220e-14
Biodiésel Palma	0.195	0.0	2.833e-06	-6.288e-09	7.111e-12	-3.297e-15
Farnesano	0.195	0.0	1.315e-06	-4.586e-09	7.353e-12	-4.483e-15
GTL	0.312	-0.001	8.551e-06	-2.095e-08	2.583e-11	-1.288e-14

Tabla 4.13: Coeficientes para cálculo de conductividad térmica-vapor.

Combustible	a	b	c	d
C14H30	0.0	0.944	-5490.0	0.0
Biodiésel Soya	3.045e-07	1.688	0.644	0.656
Biodiésel Palma	2.984e-07	1.699	0.644	5.617
Farnesano	-0.004	0.678	-7026.0	-25.490
GTL	2.945e-07	1.782	-3.195	259.9

Tabla 4.14: Coeficientes para cálculo de tensión superficial.

Combustible	T_c	a	b	c	d	e
C14H30	692.400	0.056	1.365	0.0	0.0	0.0
Biodiésel Soya	764.406	0.088	2.415	-2.722	3.329	-1.904
Biodiésel Palma	758.277	0.102	3.633	-6.692	7.692	-3.847
Farnesano	707.280	0.038	3.787	-7.699	9.815	-4.922
GTL	702.573	0.067	2.437	-2.933	3.550	-1.972

Tabla 4.15: Coeficientes para cálculo de coeficiente de difusión.

Combustible	a	b	W_f	W_a
C14H30	147.180	20.100	198.392	28.0
Biodiésel Soya	312.420	19.700	212.421	28.0
Biodiésel Palma	312.420	19.700	212.421	28.0
Farnesano	312.420	19.700	212.421	28.0
GTL	147.180	20.100	198.392	28.0

4.4 VALIDACIÓN EXPERIMENTAL DEL MODELO

Para realizar la validación experimental del modelo de simulación de chorros de inyección - `sprayFoam`, junto a los nuevos combustibles incorporados, han sido realizadas pruebas experimentales de inyección de diésel y biodiésel en la instalación descrita en la sección 3.2.2.1.

Las inyecciones experimentales fueron realizadas con diésel estándar y biodiésel de aceite usado de cocina. Un procedimiento similar al descrito para la incorporación de las propiedades de los combustibles alternativos antes descritos, fue llevado a cabo para ejecutar simulaciones con el biodiésel de aceite usado de cocina. La Tabla 4.16 resume los coeficientes incorporados a `OpenFOAM` y que describen el comportamiento de sus propiedades fisicoquímicas y de transporte. Para el caso del biodiésel de aceite usado de cocina no se presentan las curvas de comportamiento para cada una de las propiedades por conveniencia, optimización de espacio y alta similitud a las ya presentadas en gráficos anteriores.

Los parámetros de inyección para las pruebas experimentales fueron seleccionados con base en la información presentada anteriormente para la ejecución de simulaciones del biodiésel objeto de estudio en este trabajo (mezcla de 28 % palma y 72 % soya). La Tabla 4.17 resume las condiciones de operación del sistema al

momento de realizar las pruebas.

Tabla 4.16: Propiedades del biodiésel aceite usado de cocina.

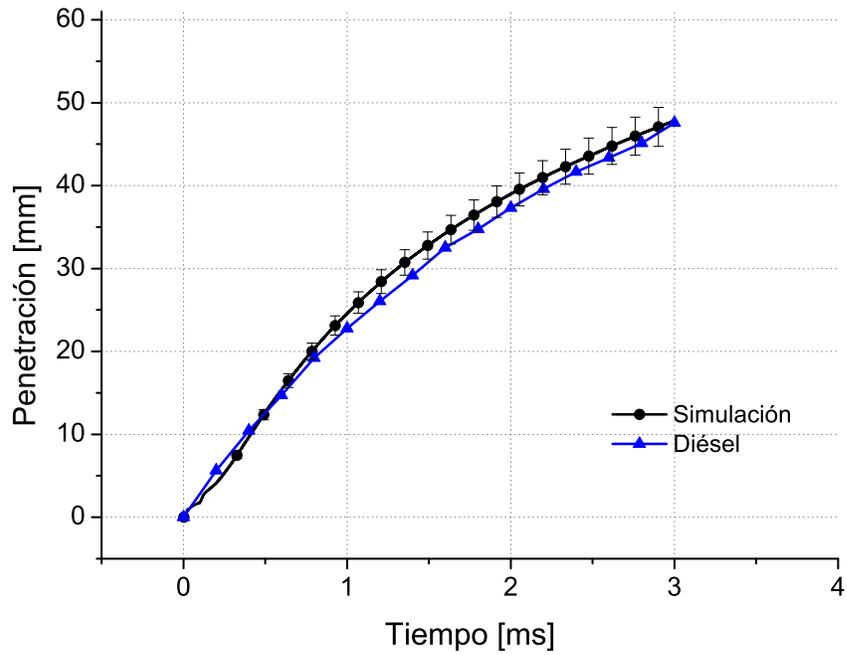
Propiedad	a	b	c	d	e	f	T_c	W_f	W_a
Densidad	52.610	0.218	759.938	0.271	-	-	-	-	-
Presión de vapor	136.9	-1.168e+04	-17.110	6.568e-06	2.086	-	-	-	-
Entalpía de vaporización	3.205e+05	-0.367	1.788	-1.522	2.086	-	759.938	-	-
Calor específico-líquido	1727.0	4.147	-0.032	0.0	-2.499e-07	1.523e-10	-	-	-
Calor específico-vapor	933.200	1486.0	1395.0	1721.0	582.600	-	-	-	-
Segundo coeficiente del vidial	0.036	-25.610	-9.541e+05	-1.683e+19	0.1966	-	-	-	-
Viscosidad-líquido	-234.0	1980.0	1.914	222.900	-0.009	-	-	-	-
Viscosidad-vapor	1.464e-07	0.672	228.2	-4347.0	-	-	-	-	-
Conductividad térmica-líquido	0.208	0.0	3.851e-06	-9.037e-09	5.442e-11	-2.220e-14	-	-	-
Conductividad térmica-vapor	3.045e-7	1.688	0.644	0.656	-	-	-	-	-
Tensión superficial	0.088	2.415	-2.722	3.329	-1.904	-	764.406	-	-
Coeficiente de difusión	312.420	19.700	-	-	-	-	-	242.421	28.0

Tabla 4.17: Condiciones de operación - Inyección experimental.

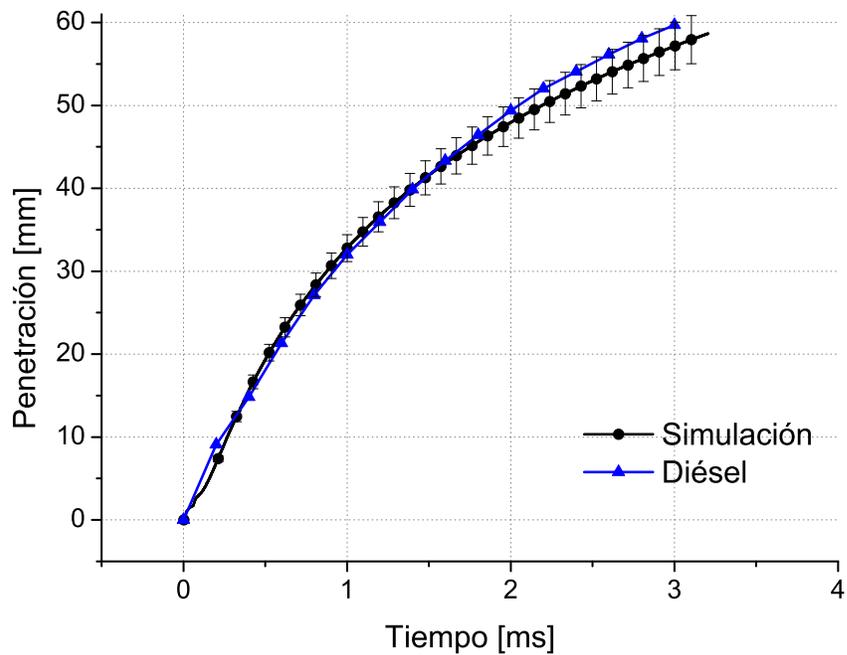
Parámetro	Diésel	Biodiésel
Presión de inyección [bar]	(1) 430	(1) 685
	(2) 845	(2) 855
Contrapresión [bar]	60	60
Composición gas ambiente	Nitrógeno	
	100 %	
Temperatura del gas [K]	29	
Duración de pulso [ms]	2	

La ejecución de las inyecciones experimentales y el procesamiento de resultados fue realizado conforme han sido descritos dichos procesos en secciones anteriores.

Las Figuras 4.9 y 4.10 muestran la comparación de los resultados experimentales frente a simulaciones realizadas bajo los mismas condiciones de operación. En ellas se puede observar como los resultados numéricos describen completamente la tendencia de la curva de penetración experimental y la desviación estandar estimada alcanzó valores máximos del 5 % en el caso del diésel y 8 % en el caso del biodiésel.

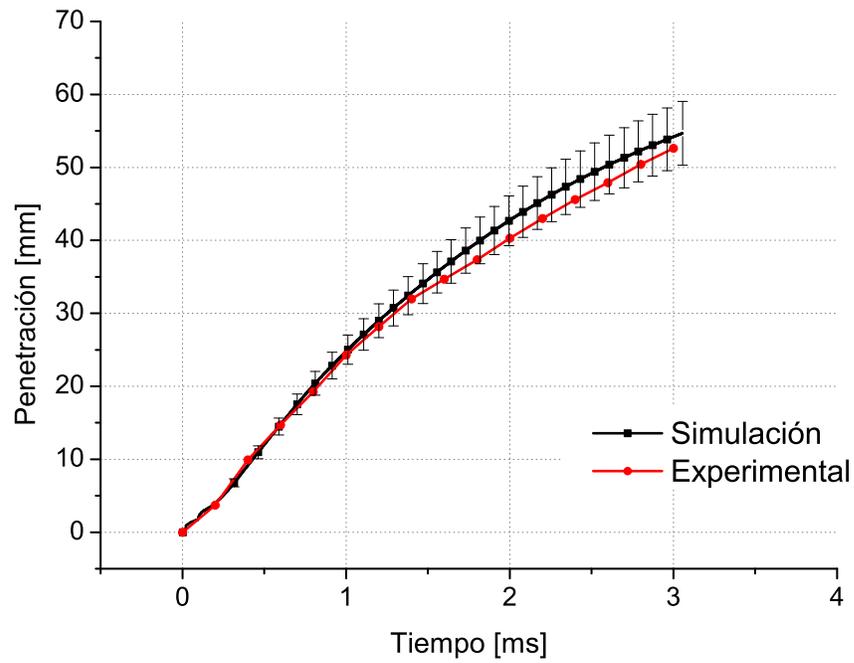


(a) Presión de inyección 430 bar.

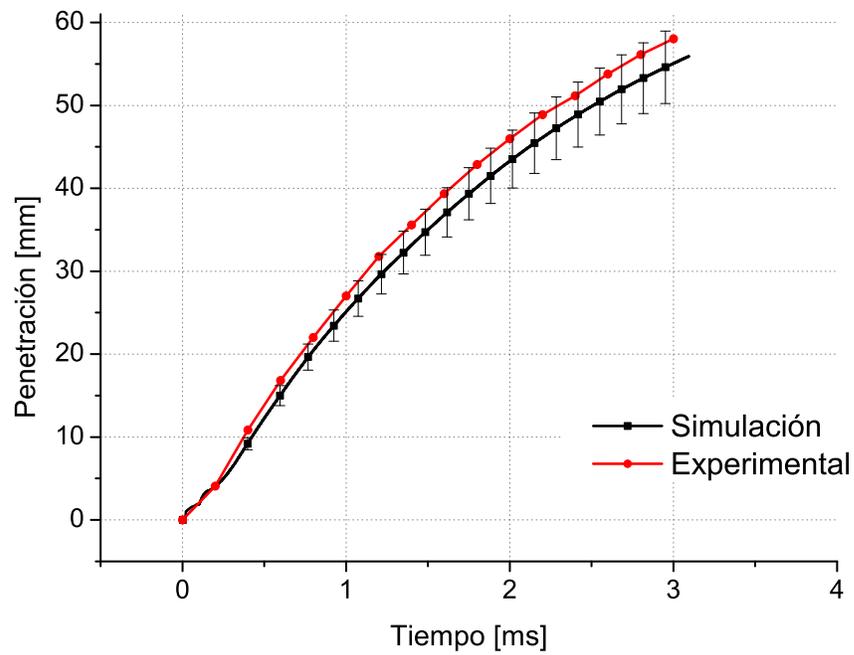


(b) [Presión de inyección 845 bar.

Figura 4.9: Validación experimental de la penetración - diésel.



(a) Presión de inyección 685 bar.



(b) Presión de inyección 855 bar.

Figura 4.10: Validación experimental de la penetración - biodiésel.

4.5 RESULTADOS DE SIMULACIÓN

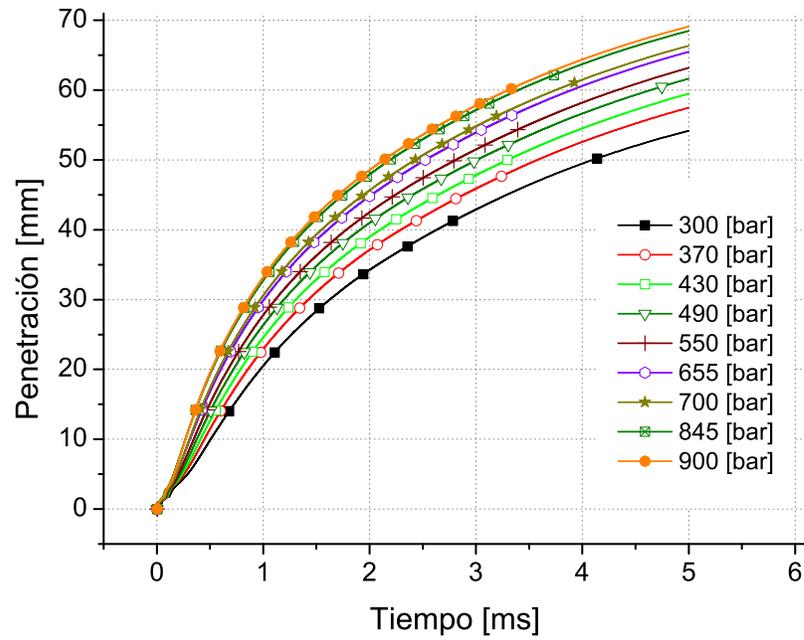
Simulaciones computacionales del proceso de inyección para combustibles alternativos han sido realizadas, su punto de partida han sido las condiciones de operación de los estudios de tasa de inyección utilizadas en los ensayos experimentales realizados en la Universidad de Castilla-La Mancha.

Como resultados de interés se tiene el comportamiento de los chorros con respecto a la penetración, su velocidad máxima de salida así como la obtenida en el punto de estabilidad del inyector, el diámetro medio de Sauter (SMD) y la distribución del tamaño de gota cuando el inyector se encuentra completamente abierto (región estable de la curva de tasa de inyección).

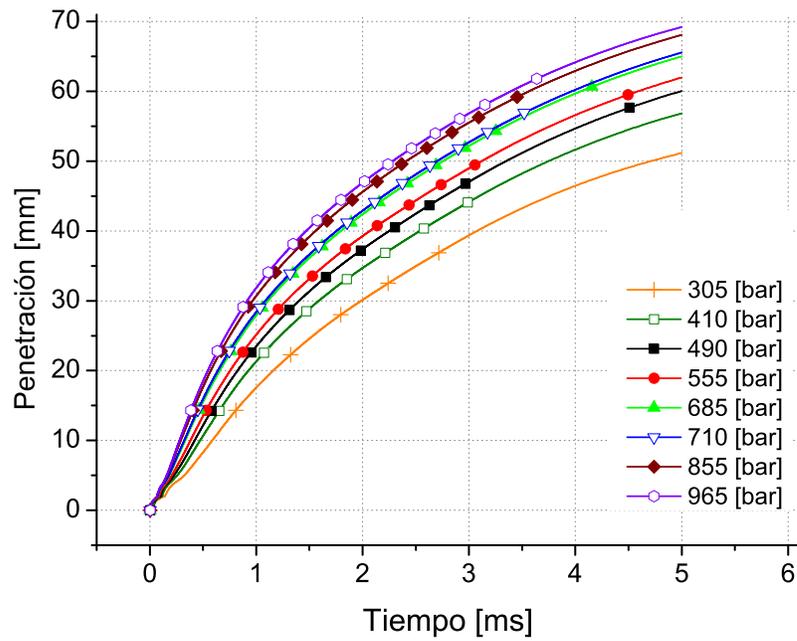
4.5.1 PENETRACIÓN CON 2 MILISEGUNDOS DE ENERGIZACIÓN

Las gráficas 4.11 y 4.12 muestran el resultado de la penetración simulada para los 4 combustibles de estudio bajo una contrapresión generada por el gas ambiente de 60 bar.

Es apreciable la variación de la penetración con el aumento de la presión de inyección, efecto atribuido al aumento de la velocidad de salida como consecuencia de una mayor diferencia de presión entre el interior de la tobera de inyección y el volumen de control. Esta diferencia conlleva de forma directa un aumento de la tasa de inyección, generando así mayor ingreso de masa al sistema y otorgando una mayor cantidad de movimiento a las partículas de combustible [35]. La tendencia descrita, es confirmada en cada uno de los combustibles.

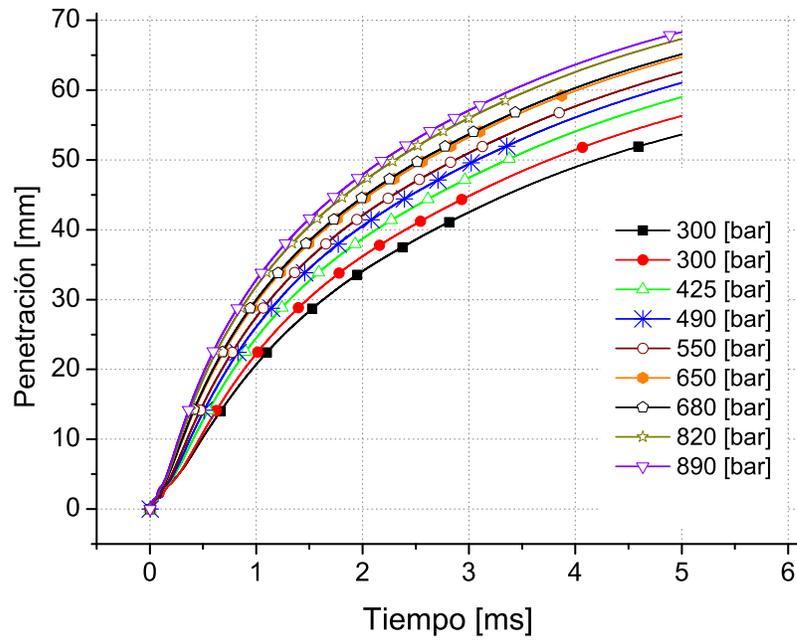


(a) Penetración C14H30.

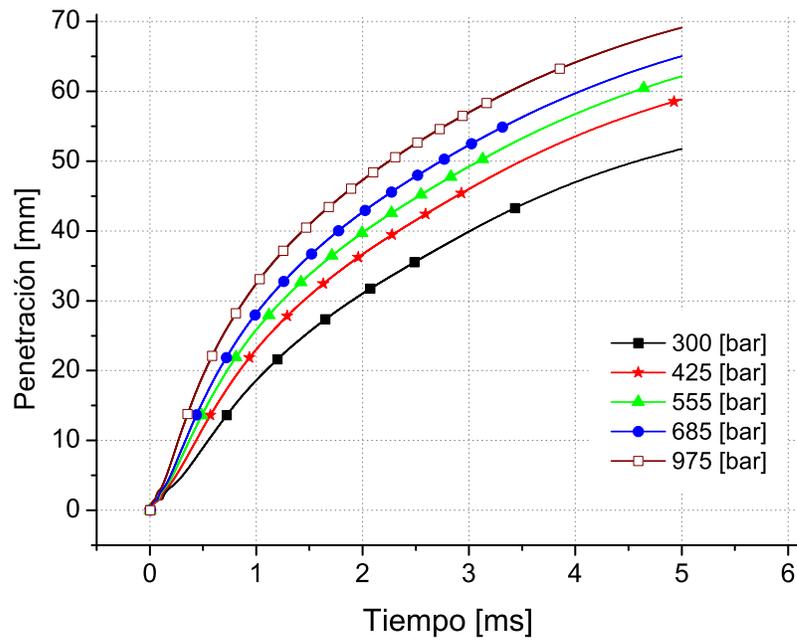


(b) Penetración biodiésel.

Figura 4.11: Variación de la penetración para diésel y biodiésel.



(a) Penetración GTL.



(b) Penetración Farnesano.

Figura 4.12: Variación de la penetración para GTL y farnesano.

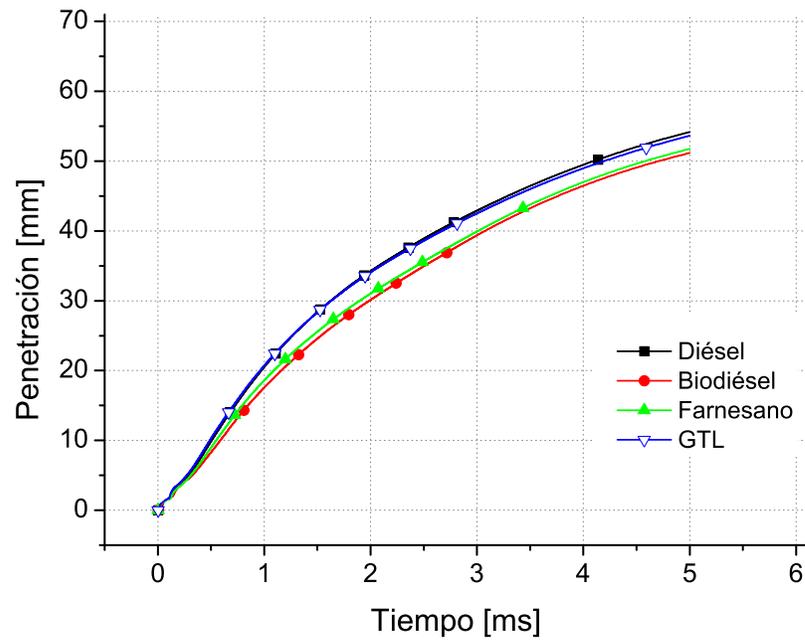
Las Figuras 4.13a y 4.13b ilustran la comparación de la penetración entre los 4 combustibles a 550 bar y en la Figura 4.14 se compara la penetración con una presión de inyección de 490 bar para el diésel, biodiésel y GTL.

En primera instancia es observable que no existe una diferencia marcada entre los valores de penetración para los combustibles, especialmente entre el GTL y el diésel, esto es debido a la alta contrapresión y baja presión de inyección [78], bajo estas condiciones de operación no se logra observar un efecto de las propiedades del combustible sobre la penetración del chorro.

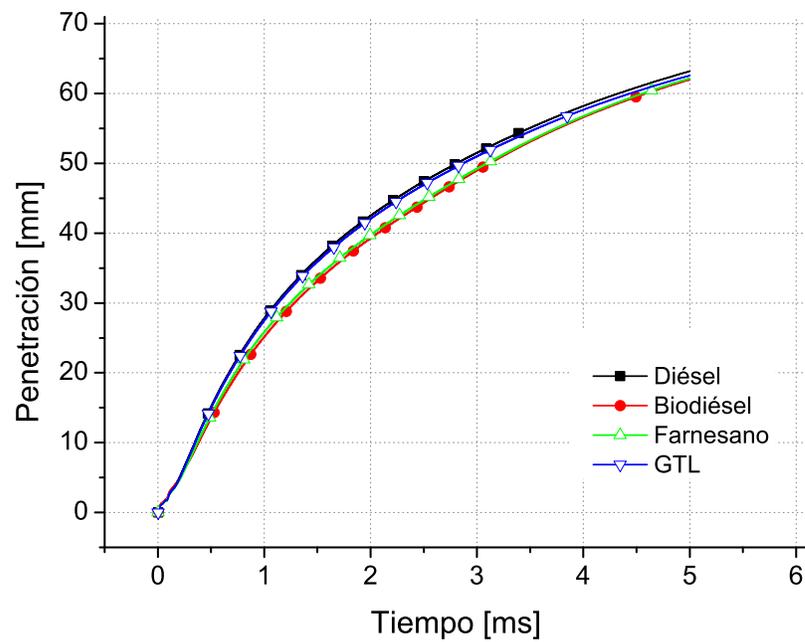
Si se analiza el comportamiento del biodiésel y el farnesano, es clara una tendencia a presentar menores valores de penetración a bajas presiones de inyección, mientras que el aumento en esta disminuye la diferencia presentada con respecto a los otros dos combustibles. Este comportamiento puede ser atribuido la forma de la curva de tasa de inyección, bajo la cual están programadas las simulaciones. Al observar las Figuras 3.17 a, b y c, se puede deducir que el impacto que tiene la menor pendiente en el flanco de subida de la curva, así como el retraso en alcanzar el punto de estabilidad, produce que el chorro inyectado tenga una menor cantidad de movimiento, contribuyendo con esto que la penetración final sea menor para el biodiésel y farnesano frente al diésel y el GTL.

Bajo las condiciones de operación usadas en este trabajo, no es clara la contribución de las propiedades de cada combustible al desarrollo de la penetración del chorro, pues la alta presión ambiente ejerce un completo dominio sobre el proceso de inyección. Es necesario analizar la penetración a diferentes relaciones de densidad ρ_f/ρ_{amb} y así encontrar la tendencia de comportamiento.

Es necesario determinar con mayor exactitud cual es la diferencia en el accionamiento del circuito interno del inyector, cuando este trabaja con distintos combustibles, este análisis permitiría encontrar la relación entre las propiedades del combustible y la tasa de flujo másico, siendo esta último una de las que más aporta a la diferencia encontrada entre la penetración del biodiésel y farnesano frente a la

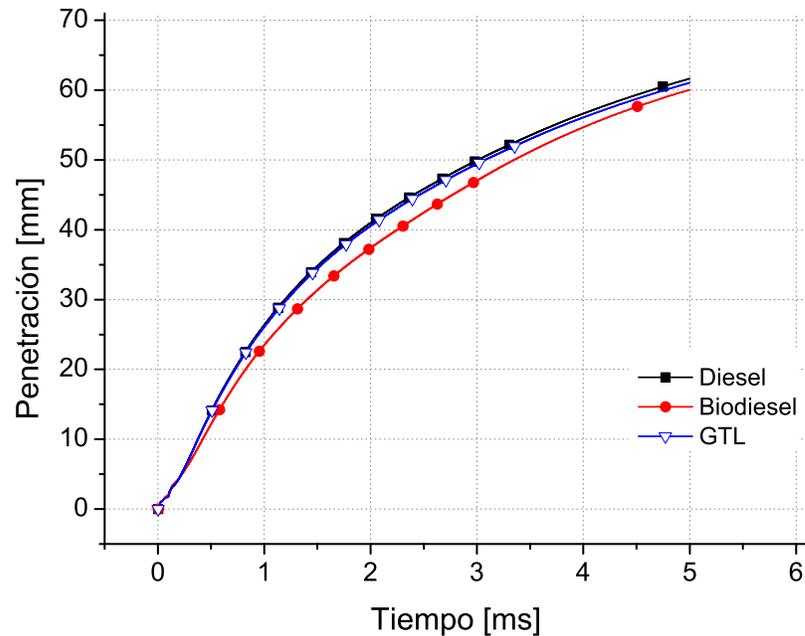


(a) Presión de inyección 300 bar.



(b) Presión de inyección 550 bar.

Figura 4.13: Comparación de la penetración - 4 combustibles.



(a) Presión de inyección 490 bar.

Figura 4.14: Comparación de la penetración - 3 combustibles.

del diésel y el GTL.

4.5.2 SMD CON 2 MILISEGUNDOS DE ENERGIZACIÓN

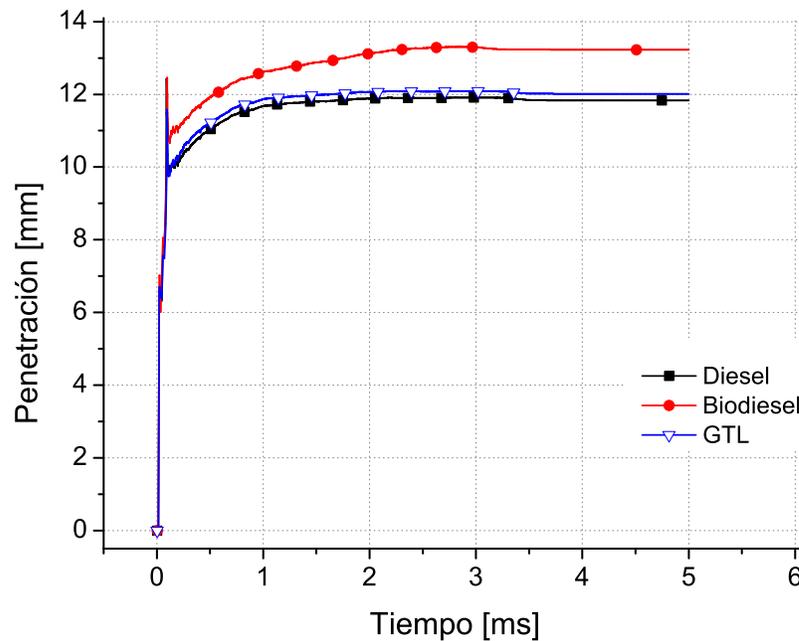
Los resultados obtenidos en las simulaciones de los 4 combustibles son presentados en las Figuras 4.15 y 4.16, en ellas se observa claramente como el aumento de la presión de inyección obliga a una disminución en el SMD, esto es una consecuencia de un aumento en la velocidad de salida del chorro, por lo que según el número de Weber las fuerzas aerodinámicas que experimenta el chorro y las gotas son mayores, propiciado así un vencimiento de las fuerzas internas (representadas por la tensión superficial) más acelerado.

La Figura 4.17 ilustra el comportamiento del SMD para los cuatro combustibles a presiones de inyección de 300 bar y 550 bar, por su parte la Figura 4.18 presenta los resultados comparados para una presión de 490 bar y los combustibles diésel,

biodiésel y GTL.

En este punto el efecto de las propiedades del combustible toma relevancia, el comportamiento menor del farnesano es causado por su menor viscosidad y tensión superficial. Al tener menor viscosidad las fuerzas aerodinámicas pueden deformar con mayor facilidad las gotas, permitiendo que las perturbaciones superficiales sean aumentadas, lo que ocasiona que la baja tensión superficial se deforme rápidamente y se provoque la fragmentación de las mismas.

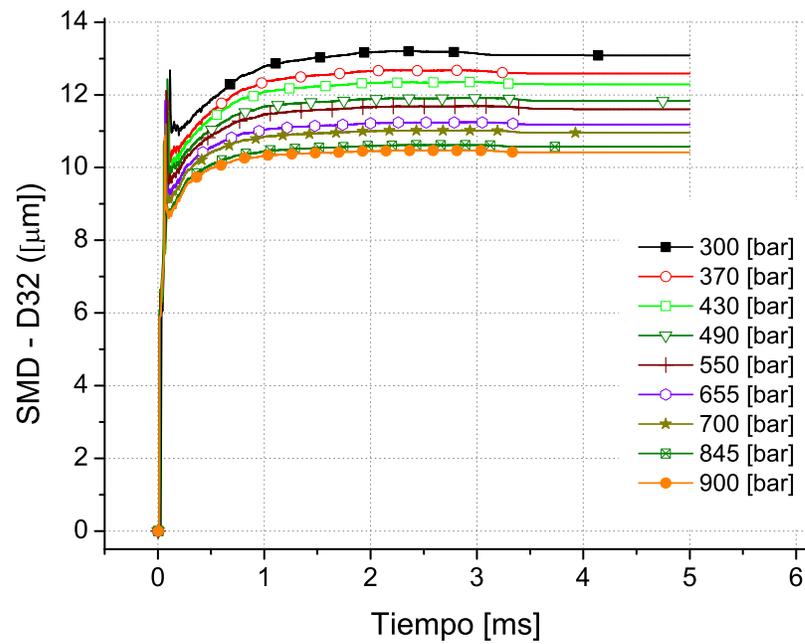
Por el contrario, en el caso biodiésel que posee una mayor viscosidad y tensión superficial, las gotas conservan su forma con mayor facilidad y la tensión superficial ejerce mayor oposición a las perturbaciones superficiales, terminando en la producción de gotas de mayor tamaño [79].



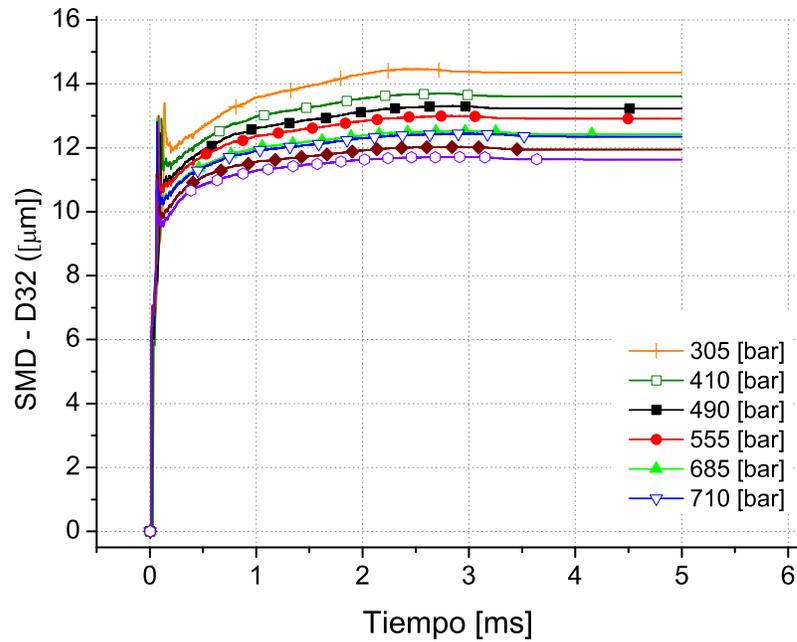
(a) Presión de inyección 490 bar.

Figura 4.18: Comparación del SMD entre combustibles - 490 bar.

Con respecto al diésel y el GTL, si se observa el comportamiento de las curvas de viscosidad y tensión superficial (Figuras 4.7.b y 4.7.c), sus valores se encuentran

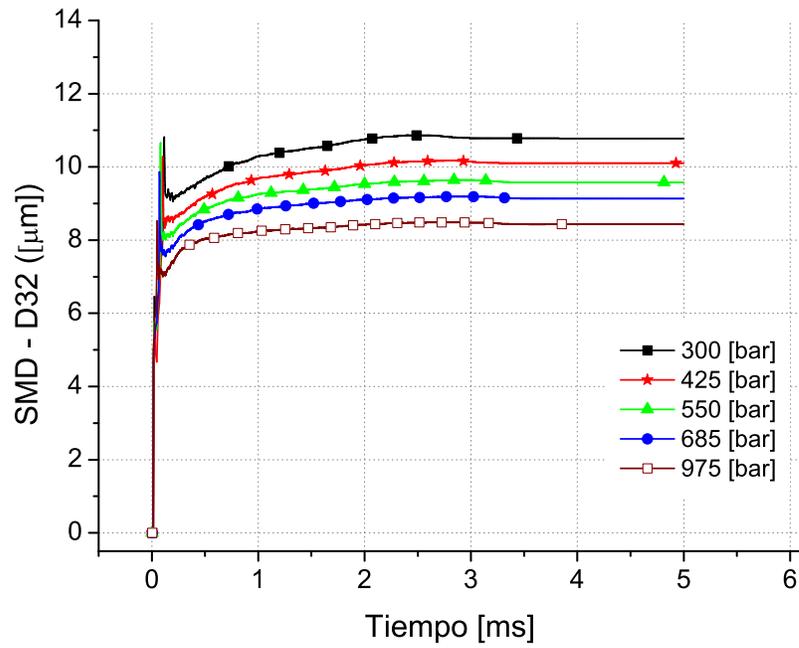


(a) SMD C14H30.

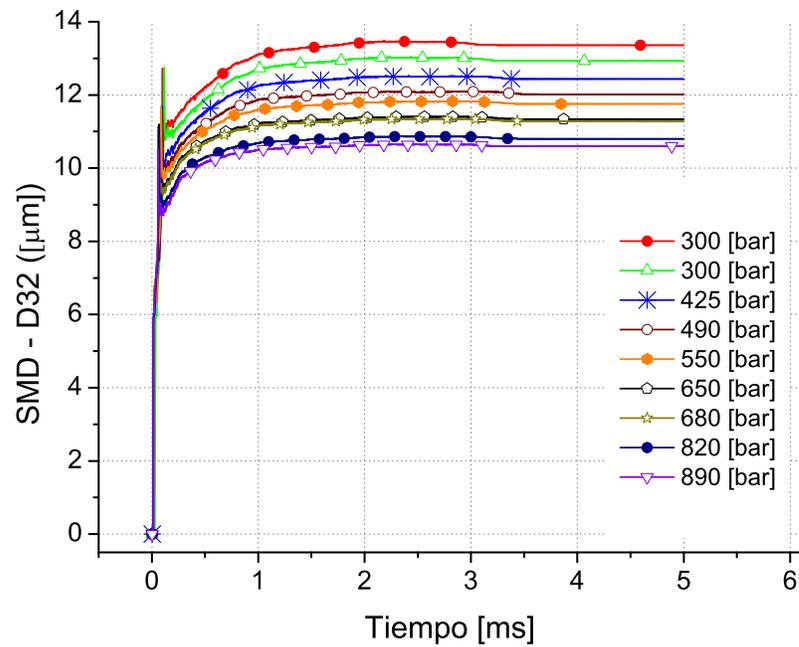


(b) SMD biodiésel.

Figura 4.15: Variación del SMD - diésel y biodiésel.

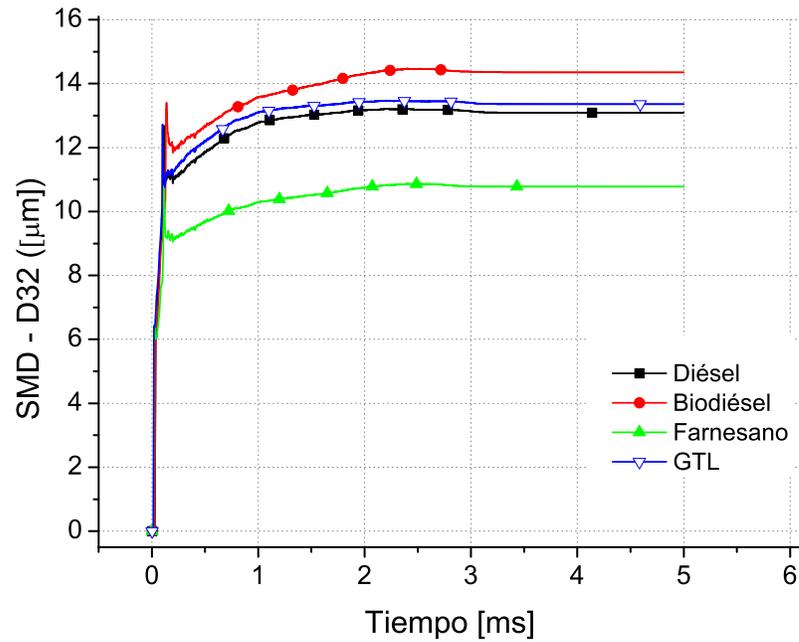


(a) SMD Farnesano.

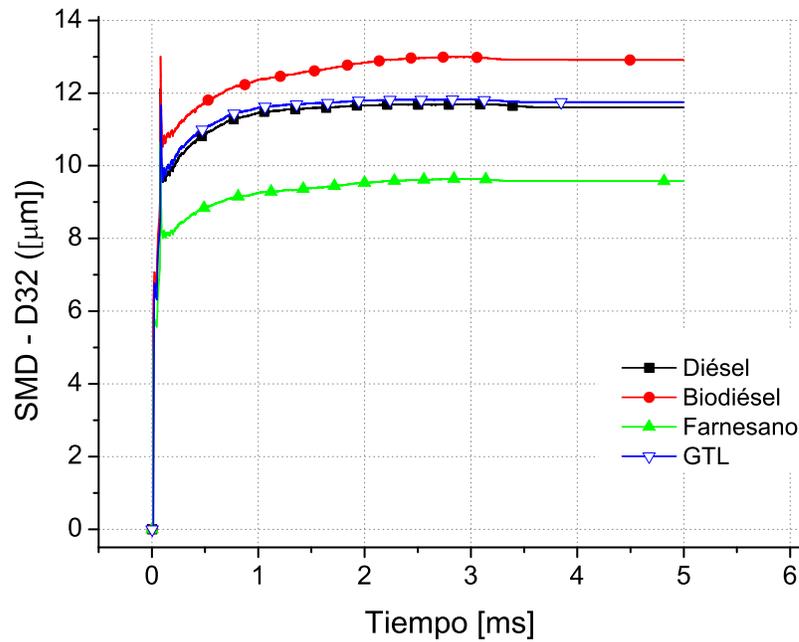


(b) SMD GTL.

Figura 4.16: Variación del SMD - GTL y farnesano.



(a) Presión de inyección 300 bar.



(b) Presión de inyección 550 bar.

Figura 4.17: Comparación del SMD entre combustibles - 300 y 550 bar.

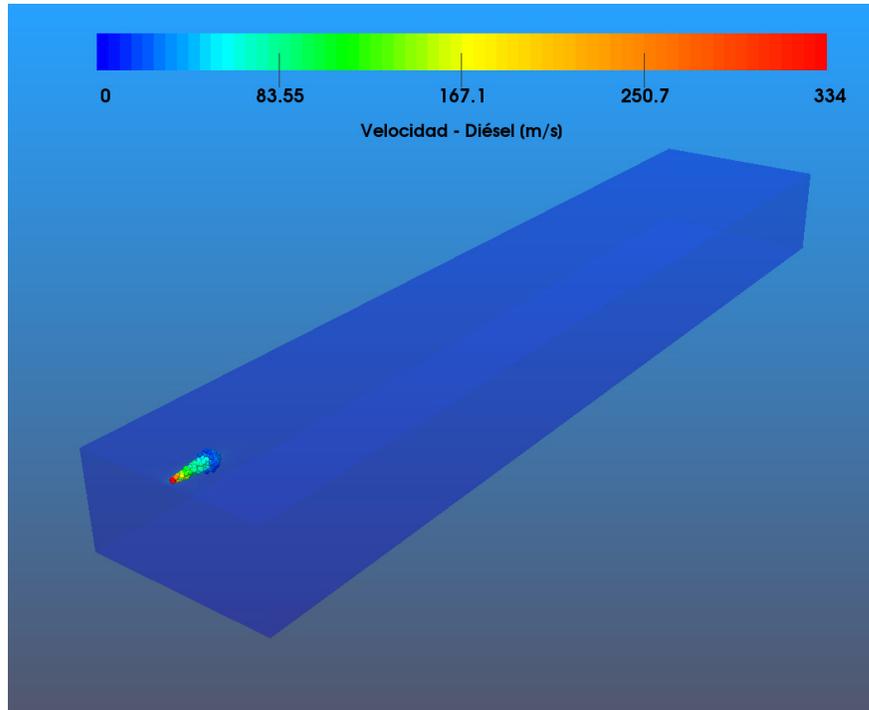
entre los presentados por el biodiésel y el farnesano. Este comportamiento es trasladado a los resultados de SMD, donde no se encuentra diferencia remarcable entre los dos (diésel y GTL) y su SMD se encuentra entre los dos valores externos (biodiésel y farnesano).

4.5.3 VELOCIDAD MÁXIMA

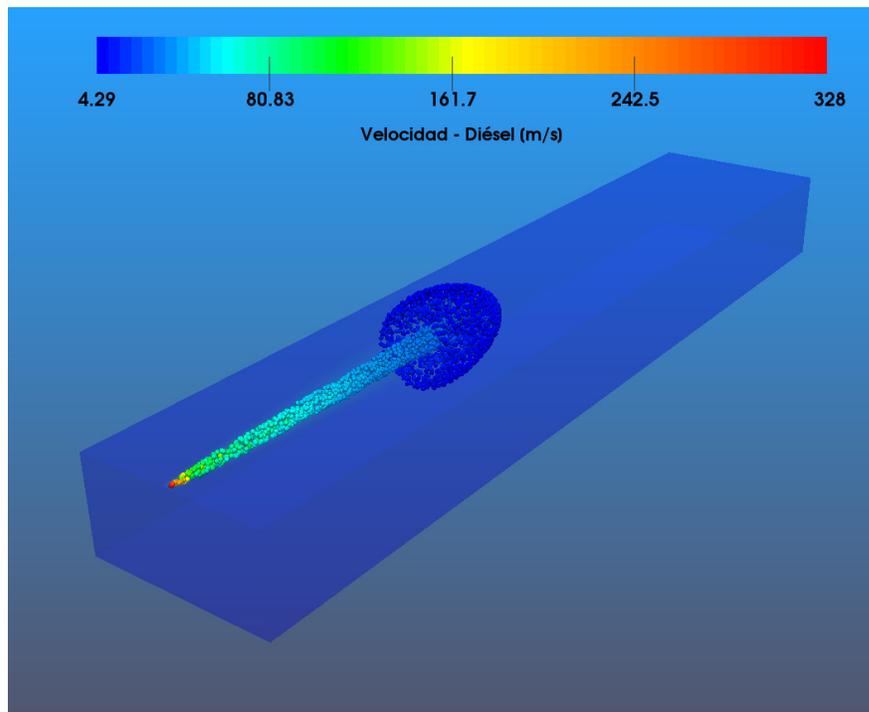
En las Figuras 4.19 a 4.22 se observa el comportamiento de la velocidad de las gotas para cada chorro de combustible inyectado y en dos instantes de tiempo, 0.2 ms y 2 ms. Estos dos tiempos han sido seleccionados para realizar una comparación entre el instante de salida del combustible y el momento en que el inyector se encuentra completamente abierto y en la zona estable.

El primer punto importante por recalcar es como la velocidad disminuye durante el proceso de inyección, para todos los combustibles la velocidad al inicio de la inyección es superior mientras que en la zona estable la curva de tasa de inyección, el chorro ha disminuido su velocidad de avance. Fenómeno que puede ser explicado gracias a la acción de la contrapresión, al momento de iniciar el proceso de inyección las primeras partículas de combustible que salen del orificio de la tobera se encuentran en un proceso de aceleración instantánea, ocasionando que e logre el punto de máxima velocidad. Cuando el inyector se encuentra totalmente abierto, el efecto de la contrapresión es más evidente, generando un punto de velocidad cuasi estable.

Al analizar el comportamiento de las velocidad entre combustibles, se encuentra que el menor valor de velocidad inicial lo presenta el biodiésel, Resultado esperado por los mayores niveles de viscosidad que presenta. El farnesano aunque posee el menor valor de viscosidad entre todos los combustibles, no posee la máxima velocidad inicial debido al comportamiento de su curva de tasa de inyección donde presenta una menor pendiente en el flanco de subida. Al comparar las velocidades del diésel y GTL (para quienes ses curvas de tasa son similares), el comportamiento relegado del

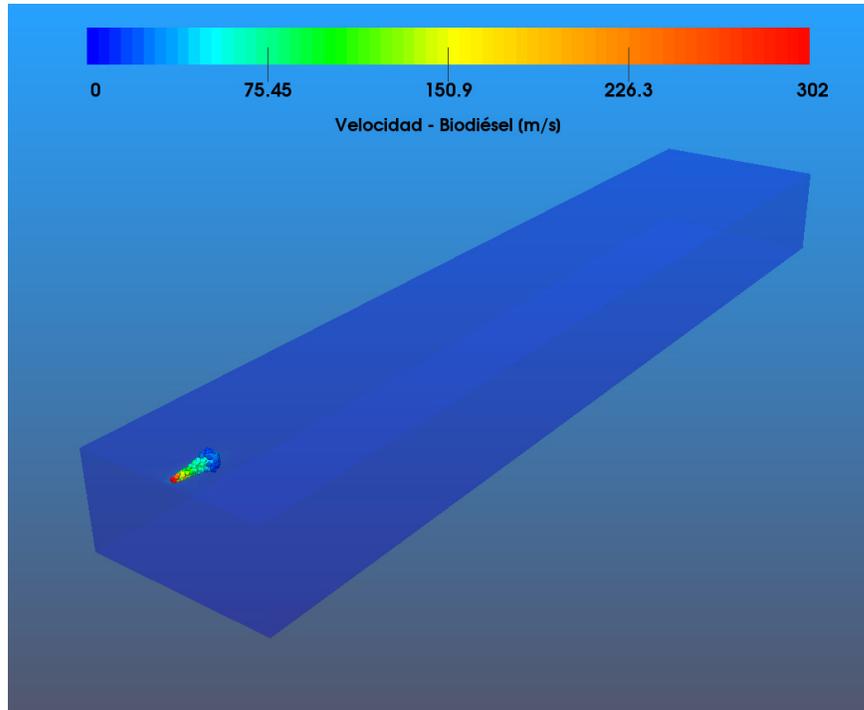


(a) Velocidad en $t=0.2$ ms.

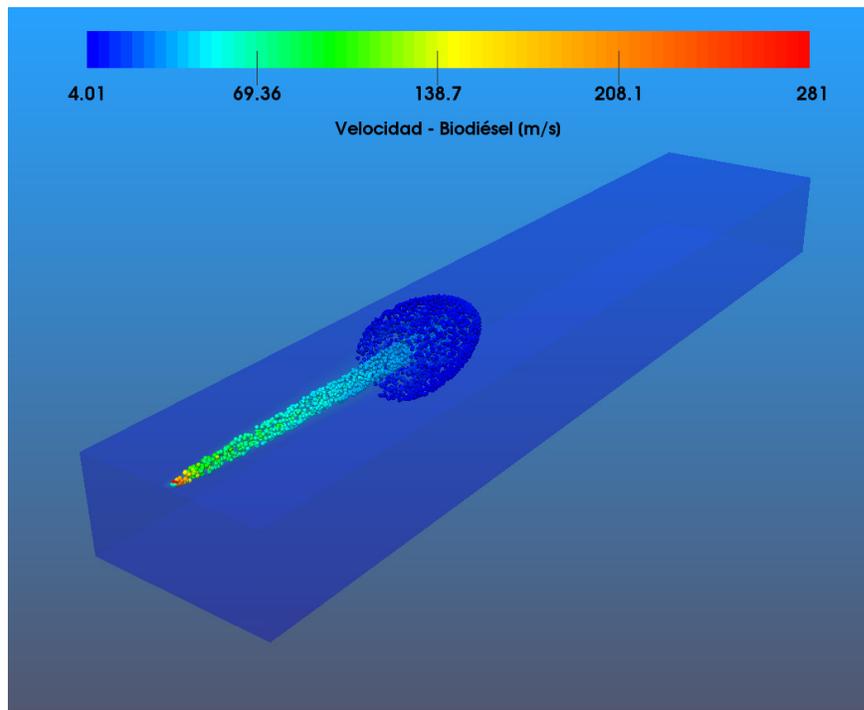


(b) Velocidad en $t=2$ ms.

Figura 4.19: Diésel, $P_{inj} = 550$ bar

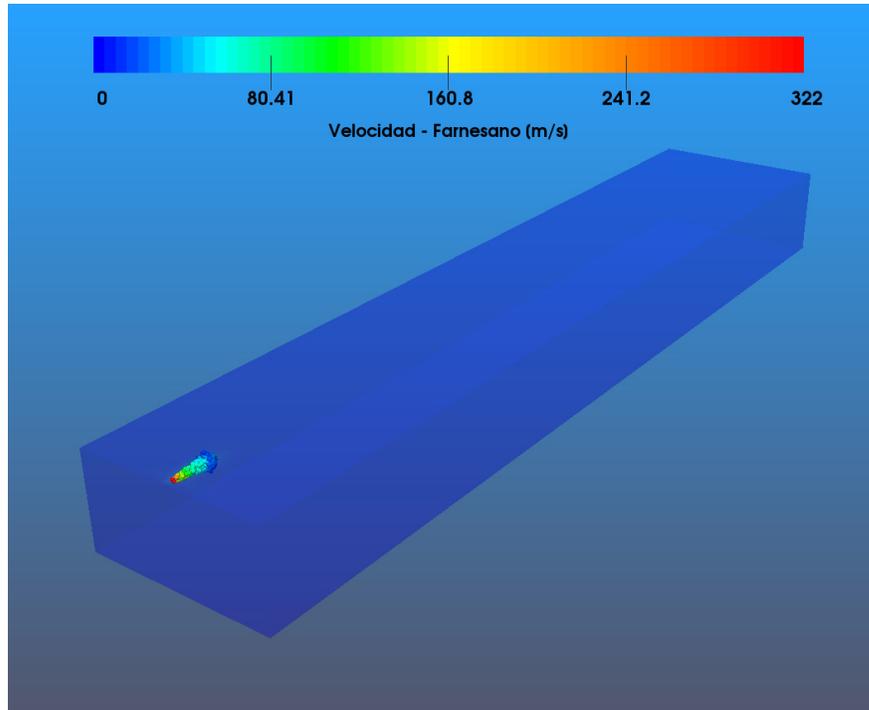
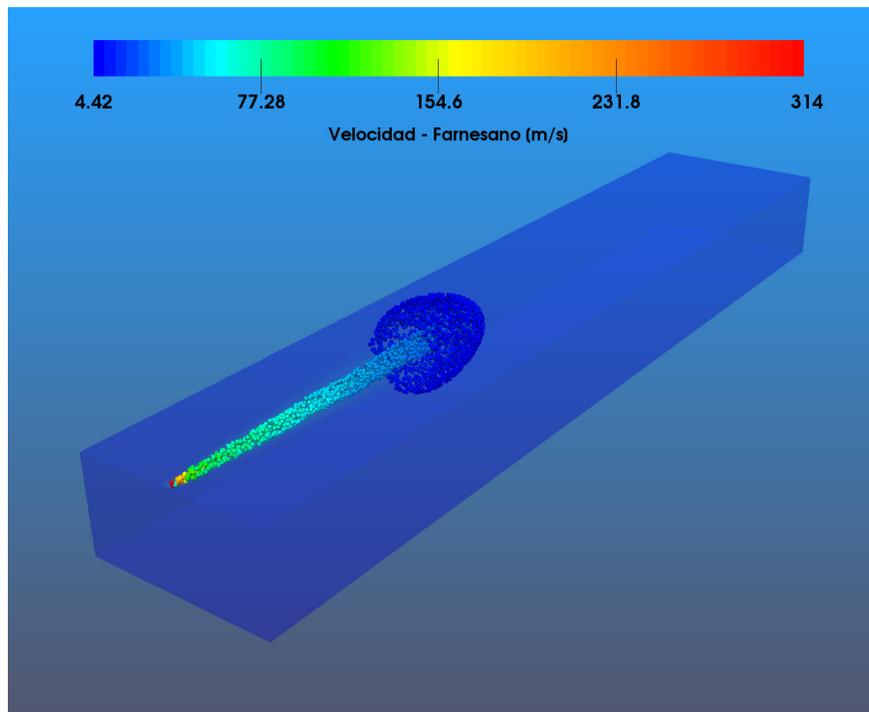


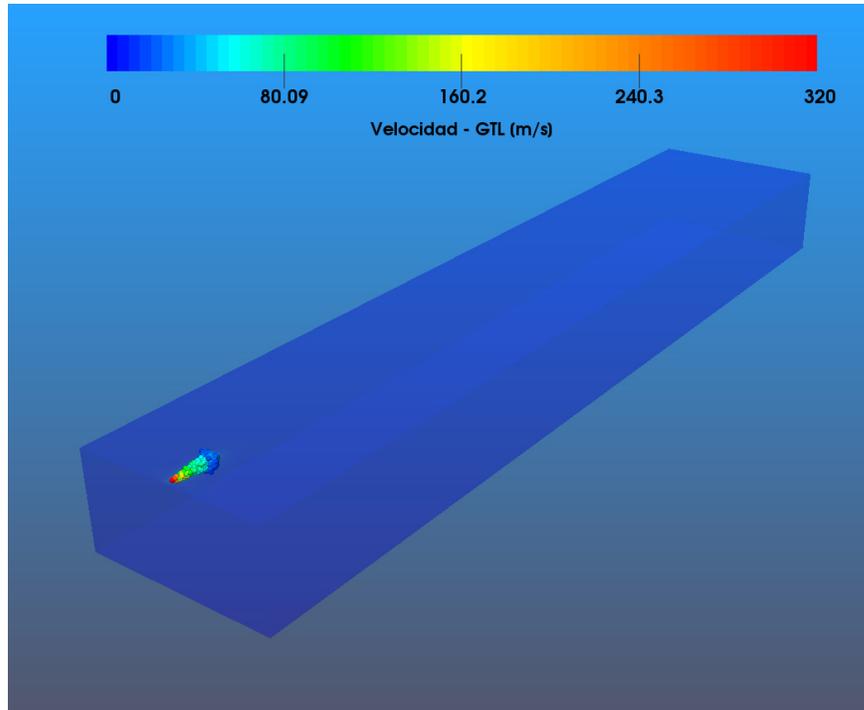
(a) Velocidad en $t=0.2$ ms.



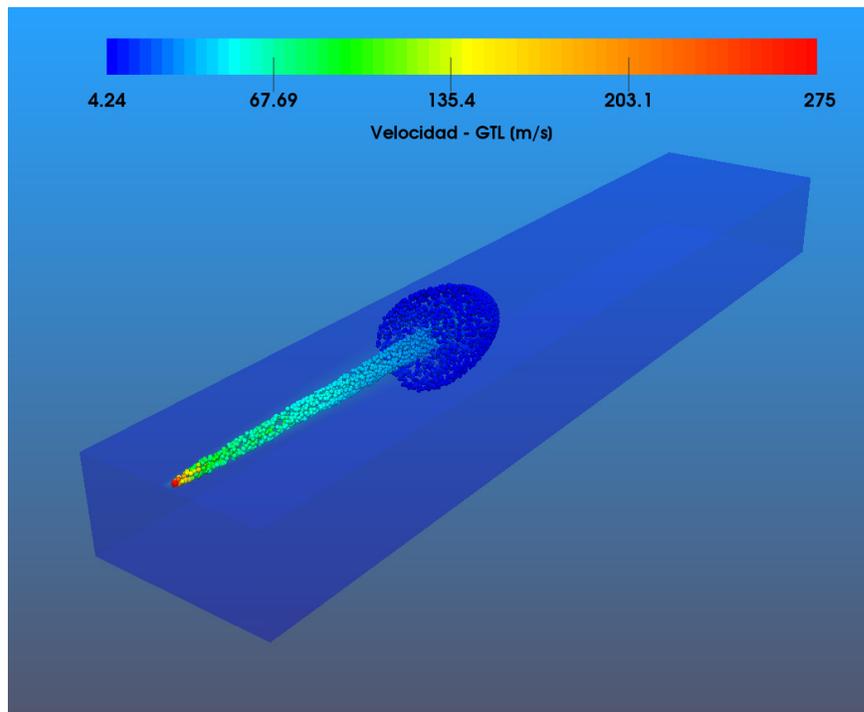
(b) Velocidad en $t=2$ ms.

Figura 4.20: Biodiésel, $P_{inj} = 550$ bar

(a) Velocidad en $t=0.2$ ms.(b) Velocidad en $t=2$ ms.Figura 4.21: Farnesano, $P_{inj} = 550$ bar



(a) Velocidad en $t=0.2$ ms.



(b) Velocidad en $t=2$ ms.

Figura 4.22: GTL, $P_{inj} = 550$ bar

GTL es atribuible a su mayor viscosidad, esto genera mayores esfuerzos cortantes internos, por lo que la energía cinética se ve disminuida.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

En este capítulo se enumeran las conclusiones formuladas con base en los resultados de este trabajo de investigación

En este trabajo de investigación ha sido estudiado el comportamiento durante el proceso de inyección, de 4 diferentes combustibles usados en motores de combustión interna de encendido por compresión, diésel, biodiésel, GTL y farnesano. Igualmente se analizaron las diferencias encontradas en las propiedades fisicoquímicas y de transporte de los mismos. Y una caracterización de la geometría interna de un inyector de combustible diésel utilizado en automotores de inyección directa diésel fue realizada. La relevancia del desarrollo de nuevos combustibles y la comprensión de su comportamiento dentro de un motor, radica en las necesidades globales de disminución de emisiones contaminantes y de la dependencia energética sobre combustibles derivados de petróleo.

A partir de los resultados analizados es posible concluir que:

- Existen múltiples alternativas al uso de diésel de origen fósil en los motores de combustión interna de encendido por compresión. Combustibles como el biodiésel y el farnesano, al ser obtenidos de biomasa, representan una opción que permite controlar las emisiones de CO_2 por medio del procesamiento de éste al interior del ciclo natural de carbono, evitando así liberar una mayor cantidad de este compuesto con la combustión de los derivados fósiles.
- El análisis de la geometría interna de la tobera de inyección revela un efecto elevado de hidro-erosión por cavitación. Consecuencia directa de la estructura cilíndrica de sus orificios.
- La comparación entre las técnicas de la silicona y rayos X para la caracterización de la geometría interna de la tobera, evidencia que existe una mayor exactitud en el uso de la técnica de la silicona, mientras que la técnica de rayos X tiende a sobre estimar las medidas en un rango comprendido entre un 3% y un 7%.
- Durante el proceso de inyección a altas presiones en cámara, se observa que no existe efecto considerable de las propiedades del combustible sobre la penetra-

ción del chorro, siendo una consecuencia del dominio de la contrapresión sobre todo el proceso de inyección.

- La diferencia en las propiedades fisico-químicas y de transporte de los cuatro combustibles permiten afirmar que la utilización de biodiésel puro, empeora el proceso de mezcla al generarse mayores diámetros de gota, lo que retrasaría el proceso de evaporación y mezclado, aumentando así el retraso al inicio de la combustión. EL farnesano, con su menor viscosidad y tensión superficial, permite que el proceso de ruptura se produzca a mayor velocidad, mejorando así la evaporación de combustible.

CAPÍTULO 6

TRABAJOS FUTUROS

Teniendo como base la información adquirida durante la realización de este trabajo, es posible enumerar los siguientes temas de estudio que pueden ser abordados como una continuación de esta línea de investigación.

- I. El modelo computacional de los chorros de inyección incluido en OpenFOAM describe con una aproximación aceptable el comportamiento general de éste. En años recientes han sido publicados trabajos que relacionan modificaciones a los modelos matemáticos de ruptura, estos indican que es posible aumentar la exactitud y precisión de los resultados numéricos relacionados con la formación de gotas de combustibles alternativos. El análisis de los nuevos modelos de ruptura y su implementación en OpenFOAM conforman un tema con aportaciones relevantes.
- II. Es necesario realizar una mayor cantidad de estudios experimentales que involucren los últimos desarrollos en combustibles alternativos (farnesano entre ellos). Dichos experimentos deben responder a las preguntas relacionadas con la fragmentación de la vena líquida y los mecanismos de formación de gotas, puesto que la credibilidad de los futuros modelos computacionales depende de la correcta validación de sus resultados. Técnicas láser como PDA (Phase Doppler Annemometry) pueden brindar información valiosa en este campo.

- III. Para determinar la verdadera aportación de las propiedades del combustible novedosos al desarrollo de parámetros macroscópicos como la penetración, es necesario realizar estudios dirigidos a analizar el proceso de inyección cuando se varía la razón entre densidades ρ_f/ρ_{amb} .
- IV. Dadas la relación intrínseca entre las propiedades del combustible y la formación del chorro en el proceso de mezcla, se vuelve relevante disminuir la incertidumbre que pueden generar las desviaciones típicas de la correlaciones semiempíricas que usualmente son empleadas para la estimación de las propiedades. Generar trabajos experimentales que logren ampliar los rangos de temperatura en los que hasta la actualidad se han obtenido los comportamientos de dichas propiedades permitirá explorar condiciones poco usuales con alto grado de confiabilidad.
- V. La modelación computacional de los fenómenos de combustión acoplados a los de inyección, es una continuación lógica en el estudio de nuevos combustibles. Para lograr esto, es necesario desarrollar modelos cinéticos de combustión para cada nuevo combustible alternativo así como para los desarrollados en el presente documento.
- VI. La ejecución de estudios experimentales del proceso de combustión con combustibles alternativos permitiría corroborar el funcionamiento de los modelos computacionales existentes, relacionar el proceso de inyección con la generación de energía al interior del motor, su desempeño global y generación de emisiones. Estos estudios pueden ser llevados a cabo en maquetas de combustión, con visualización del proceso por medio de cámaras de alta velocidad y espectroscopía láser, esto produciría una caracterización del tipo de flama formada por cada combustible.

REFERENCIAS

- [1] John B Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals*, volume 21. McGrawHill, 1988.
- [2] Pierre Weiss, Martin. Bonnel. Will euro 6 reduce the {NO_x} emissions of new diesel cars? – insights from on-road tests with portable emissions measurement systems (pems). *Atmospheric Environment*, 62:657 – 665, 2012.
- [3] Transport Policy, EU: Light-duty: Emissions. http://www.transportpolicy.net/index.php?title=EU:_Light-duty:_Emissions, 2016. Capturada: 2017-01-07.
- [4] REGLAMENTO (CE) No 715/2007 DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO de 20 de junio de 2007. <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/?uri=celex%3A32007R0715>, 2016. Accessed: 2017-01-07.
- [5] İbrahim Aslan Reşitoğlu, Kemal Altinişik, and Ali Keskin. The pollutant emissions from diesel-engine vehicles and exhaust aftertreatment systems. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 17(1):15–27, 2015.
- [6] Tim Johnson. Diesel engine emissions and their control. *Platinum Metals Review*, 52(1):23–37, 2008.
- [7] V.K. Shahir, C.P. Jawahar, and P.R. Suresh. Comparative study of diesel and biodiesel on {CI} engine with emphasis to emissions—a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 45:686 – 697, 2015.

- [8] Wisam Al-Shalchi. Gas to liquids technology(gtl). *Baghdad.-2006.-135 p*, 2006.
- [9] D.J. Mcphee and N.S. Renninger. Fuel compositions comprising farnesane and farnesane derivatives and method of making and using same, July 24 2008. WO Patent App. PCT/US2007/021,890.
- [10] Charles C Conconi and Paula Manoel Crnkovic. Thermal behavior of renewable diesel from sugar cane, biodiesel, fossil diesel and their blends. *Fuel processing technology*, 114:6–11, 2013.
- [11] KR Browne, IM Partridge, and G Greeves. Fuel property effects on fuel/air mixing in an experimental diesel engine. Technical report, SAE technical paper, 1986.
- [12] Naoya Ishikawa and Keiichi Niimura. Analysis of diesel spray structure using magnified photography and piv. Technical report, SAE Technical Paper, 1996.
- [13] LS Denis. Liquid-phase fuel penetration in diesel sprays. *SAE paper*, 980809, 1998.
- [14] Seang-wock Lee, Daisuke Tanaka, Jin Kusaka, and Yasuhiro Daisho. Effects of diesel fuel characteristics on spray and combustion in a diesel engine. *JSAE review*, 23(4):407–414, 2002.
- [15] Raul Payri, S Molina, FJ Salvador, and J Gimeno. A study of the relation between nozzle geometry, internal flow and sprays characteristics in diesel fuel injection systems. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 18(7):1222–1235, 2004.
- [16] JM Desantes, R Payri, FJ Salvador, and V Soare. Study of the influence of geometrical and injection parameters on diesel sprays characteristics in isothermal conditions. Technical report, SAE Technical Paper, 2005.
- [17] RD Reitz and R Diwakar. Structure of high pressure fuel spray sae tech. *Paper Series*, 870598, 1987.

- [18] Peter J O'Rourke and Anthony A Amsden. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. Technical report, SAE Technical Paper, 1987.
- [19] Jennifer C Beale, Rolf D Reitz, et al. Modeling spray atomization with the kelvin-helmholtz/rayleigh-taylor hybrid model. *Atomization and sprays*, 9(6):623–650, 1999.
- [20] TF Su, MA Patterson, Rolf D Reitz, and PV Farrell. Experimental and numerical studies of high pressure multiple injection sprays. Technical report, SAE Technical Paper, 1996.
- [21] Mark A Patterson and Rolf D Reitz. Modeling the effects of fuel spray characteristics on diesel engine combustion and emission. Technical report, SAE Technical Paper, 1998.
- [22] Chang Sik Lee and Sung Wook Park. An experimental and numerical study on fuel atomization characteristics of high-pressure diesel injection sprays. *Fuel*, 81(18):2417–2423, 2002.
- [23] Chang Sik Lee, Sung Wook Park, and Sang Il Kwon. An experimental study on the atomization and combustion characteristics of biodiesel-blended fuels. *Energy & fuels*, 19(5):2201–2208, 2005.
- [24] KS Kim, V Beschieru, DS Jeong, and Y Lee. Experimental investigation and comparison of spray and combustion characteristics of gtl and diesel fuels. *International journal of automotive technology*, 8(3):275–281, 2007.
- [25] Su Han Park, Hyung Jun Kim, Hyun Kyu Suh, and Chang Sik Lee. Experimental and numerical analysis of spray-atomization characteristics of biodiesel fuel in various fuel and ambient temperatures conditions. *International journal of heat and fluid flow*, 30(5):960–970, 2009.
- [26] Xiangang Wang, Zuohua Huang, Olawole Abiola Kuti, Wu Zhang, and Keiya Nishida. Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray cha-

- racteristics under ultra-high injection pressure. *International journal of heat and fluid flow*, 31(4):659–666, 2010.
- [27] Harun Mohamed Ismail, Hoon Kiat Ng, Xinwei Cheng, Suyin Gan, Tommaso Lucchini, and Gianluca D’Errico. Development of thermophysical and transport properties for the cfd simulations of in-cylinder biodiesel spray combustion. *Energy & Fuels*, 26(8):4857–4870, 2012.
- [28] Mahdi Yousefifard, Parviz Ghadimi, and Mostafa Mirsalim. Numerical simulation of biodiesel spray under ultra-high injection pressure using openfoam. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 37(2):737–746, 2015.
- [29] Kibong Choi, Donggon Lee, Hyun Gu Roh, and Chang Sik Lee. Effect of injection parameters on spray characteristics of gas-to-liquid (gtl), biodiesel, and diesel fuel for a multi-hole injector in a diesel engine. *Atomization and Sprays*, 25(12), 2015.
- [30] BOSCH, Invented for life. Common rail injection. http://de.bosch-automotive.com/en/parts_and_accessories/motor_and_sytems/diesel/common_rail_injection/common_rail_diesel_motorsys_parts, 2016. Accessed: 2016-11-30.
- [31] Auto-Medienportal.net, Invented for life. Continental produziert in Sachsen 50-millionsten Piezo-Injektor. <https://www.auto-medienportal.net/artikel/detail/14021>, 2012. Accessed: 2016-12-06.
- [32] José M Desantes and Francisco Payri González. *Motores de combustión interna alternativos*. Universidad Politécnica de Valencia, 2011.
- [33] Arthur Lefebvre. *Atomization and sprays*, volume 1040. CRC press, 1988.
- [34] S Martinez-Martinez, FA Sanchez-Cruz, JM Riesco-Avila, A Gallegos-Munoz, and SM Aceves. Liquid penetration length in direct diesel fuel injection. *Applied Thermal Engineering*, 28(14):1756–1762, 2008.

- [35] Carsten Baumgarten. *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [36] Hiro Hiroyasu and Masataka Arai. Structures of fuel sprays in diesel engines. Technical report, SAE Technical Paper, 1990.
- [37] Arthur H Lefebvre and Vincent G McDonell. *Atomization and sprays*. CRC press, 2017.
- [38] Viriato Semiao, Pedro Andrade, and Maria da GraCa Carvalho. Spray characterization: numerical prediction of sauter mean diameter and droplet size distribution. *Fuel*, 75(15):1707–1714, 1996.
- [39] TJ Chung. *Computational fluid dynamics*. Cambridge university press, 2010.
- [40] Francis H Harlow. Fluid dynamics in group t-3 los alamos national laboratory:(la-ur-03-3852). *Journal of Computational Physics*, 195(2):414–433, 2004.
- [41] Henk Kaarle Versteeg and Weeratunge Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education, 2007.
- [42] Iain G Currie. *Fundamental mechanics of fluids*. CRC Press, 2012.
- [43] Sergei Sazhin. *Droplets and sprays*, volume 63. Springer, 2014.
- [44] F Payri, V Bermudez, R Payri, and FJ Salvador. The influence of cavitation on the internal flow and the spray characteristics in diesel injection nozzles. *Fuel*, 83(4):419–431, 2004.
- [45] Frédérique Battin-Leclerc. Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(4):440–498, 2008.

- [46] William J Pitz and Charles J Mueller. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 37(3):330–350, 2011.
- [47] Fangrui Ma and Milford A Hanna. Biodiesel production: a review. *Bioresourcetechnology*, 70(1):1–15, 1999.
- [48] Mangesh G Kulkarni and Ajay K Dalai. Waste cooking oil an economical source for biodiesel: a review. *Industrial & engineering chemistry research*, 45(9):2901–2913, 2006.
- [49] Pamela P Peralta-Yahya, Fuzhong Zhang, Stephen B Del Cardayre, and Jay D Keasling. Microbial engineering for the production of advanced biofuels. *Nature*, 488(7411):320–328, 2012.
- [50] Firouz Abbasian, Robin Lockington, Megharaj Mallavarapu, and Ravi Naidu. A comprehensive review of aliphatic hydrocarbon biodegradation by bacteria. *Applied biochemistry and biotechnology*, 176(3):670–699, 2015.
- [51] Maria Sudiro and Alberto Bertucco. Production of synthetic gasoline and diesel fuel by alternative processes using natural gas and coal: Process simulation and optimization. *Energy*, 34(12):2206–2214, 2009.
- [52] Ian Myburgh and Paul Schaberg. Synthetic fuel with reduced particulate matter emissions and a method of operating a compression ignition engine using said fuel in conjunction with oxidation catalysts, December 3 2004. US Patent App. 11/004,361.
- [53] David A Wood, Chikezie Nwaoha, and Brian F Towler. Gas-to-liquids (gtl): A review of an industry offering several routes for monetizing natural gas. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 9:196–208, 2012.
- [54] Bruce E Poling, John M Prausnitz, John P O’connell, et al. *The properties of gases and liquids*, volume 5. Mcgraw-hill New York, 2001.

- [55] Frederico R do Carmo, Nathan S Evangelista, Fabiano AN Fernandes, and Hosiberto B de Sant'Ana. Evaluation of optimal methods for critical properties and acentric factor of biodiesel compounds with their application on soave–redlich–kwong and peng–robinson equations of state. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 60(11):3358–3381, 2015.
- [56] Xiangzan Meng, Ming Jia, and Tianyou Wang. Predicting biodiesel densities over a wide temperature range up to 523k. *Fuel*, 111:216–222, 2013.
- [57] REID RC PRAUNITZ JM POLING BE and JM Prausnitz. The properties of gases & liquids. *Mac Graw Hill Book Co., Fourth Edition, New York*, 1987.
- [58] Cecil AW Allen, K Chris Watts, and Robert G Ackman. Predicting the surface tension of biodiesel fuels from their fatty acid composition. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 76(3):317–323, 1999.
- [59] Reza Farzi and Feridun Esmaeilzadeh. Prediction of surface tension of pure hydrocarbons using esmaeilzadeh-roshanfekr equation of state and group contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 427:353–361, 2016.
- [60] API Publishing Services. Api technical data book-petroleum refining. *American Petroleum Institute (API), Washington DC*, 2016.
- [61] Free, Open Source Software from the OpenFOAM Foundation. <https://cpp.openfoam.org/v4/>, 2016. Accessed: 2017-01-07.
- [62] Adolfo Benitez. Estudio de los efectos de las propiedades de transporte y termofísicas del biodiésel derivado de aceite usado de cocina sobre la estructura dinámica de un chorro diésel. Tesis maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, Noviembre 2015.
- [63] Cheng Huang. Implementation of gasoline properties in openfoam library, Enero 2010.

- [64] V. Macian, V. Bermudez, R. Payri, and J. Gimeno. New technique for determination of internal geometry of a diesel nozzle with the use of silicone methodology. *Experimental Techniques*, 27(2):39–43, 2003.
- [65] José V Pastor, Jean Arrègle, José M García, and L Daniel Zapata. Segmentation of diesel spray images with log-likelihood ratio test algorithm for non-gaussian distributions. *Applied optics*, 46(6):888–899, 2007.
- [66] Omar Torres Garza. Efectos de los parámetros de inyección sobre el proceso de mezcla en un motor diesel. Tesis maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, Noviembre 2016.
- [67] Raul Payri, Juan P Viera, Venkatesh Gopalakrishnan, and Patrick G Szymkowicz. The effect of nozzle geometry over internal flow and spray formation for three different fuels. *Fuel*, 183:20–33, 2016.
- [68] Li Guan, Chenglong Tang, Ke Yang, Jun Mo, and Zuohua Huang. Effect of di-n-butyl ether blending with soybean-biodiesel on spray and atomization characteristics in a common-rail fuel injection system. *Fuel*, 140:116–125, 2015.
- [69] R Payri, J Gimeno, G Bracho, and D Vaquerizo. Study of liquid and vapor phase behavior on diesel sprays for heavy duty engine nozzles. *Applied Thermal Engineering*, 107:365–378, 2016.
- [70] Sujith Sukumaran and Song-Charng Kong. Modelling biodiesel–diesel spray combustion using multicomponent vaporization coupled with detailed fuel chemistry and soot models. *Combustion Theory and Modelling*, 20(5):913–940, 2016.
- [71] Tao Wu, Zhen Huang, Wu-gao Zhang, Jun-hua Fang, and Qi Yin. Physical and chemical properties of gtl- diesel fuel blends and their effects on performance and emissions of a multicylinder di compression ignition engine. *Energy & Fuels*, 21(4):1908–1914, 2007.

- [72] Carl L Yaws. *Thermophysical properties of chemicals and hydrocarbons*. William Andrew, 2008.
- [73] Luis Felipe Ramírez Verduzco. Density and viscosity of biodiesel as a function of temperature: empirical models. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 19:652–665, 2013.
- [74] HP Meissner and AS Michaels. Surface tensions of pure liquids and liquid mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry*, 41(12):2782–2787, 1949.
- [75] Robert H Perry and Don W Green. *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill Professional, 1999.
- [76] Zuo-Yu Sun, Guo-Xiu Li, Chuan Chen, Yu-Song Yu, and Guo-Xi Gao. Numerical investigation on effects of nozzle's geometric parameters on the flow and the cavitation characteristics within injector's nozzle for a high-pressure common-rail diesel engine. *Energy Conversion and Management*, 89:843–861, 2015.
- [77] Mert Gülüm and Atilla Bilgin. Density, flash point and heating value variations of corn oil biodiesel–diesel fuel blends. *Fuel Processing Technology*, 134:456–464, 2015.
- [78] Balaji Mohan, Wenming Yang, Kun Lin Tay, and Wenbin Yu. Experimental study of spray characteristics of biodiesel derived from waste cooking oil. *Energy Conversion and Management*, 88:622–632, 2014.
- [79] Su Han Park, Hyung Jun Kim, Hyun Kyu Suh, and Chang Sik Lee. A study on the fuel injection and atomization characteristics of soybean oil methyl ester (sme). *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(1):108–116, 2009.