



## ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

Titulación:

**INGENIERÍA INDUSTRIAL**

Título del proyecto:

**SIMULACIÓN Y ANÁLISIS EXPERIMENTAL SOBRE  
COMBUSTIÓN Y BALANCES TÉRMICOS EN UN H<sub>2</sub>-MEP**

**MEMORIA**

Jorge Trobajo San Martín

Tutor: Pedro M<sup>a</sup> Diéguez Elizondo

Pamplona, 28 de julio de 2011

*“Si supiera lo que estoy haciendo, no  
lo llamaría investigación. ¿No crees?”*

Albert Einstein

Quisiera mostrar por medio de estas líneas mi más sincero agradecimiento a todas las personas que me han apoyado a lo largo de la elaboración del presente proyecto.

En primer lugar, mi más profundo agradecimiento a mi tutor, D. Pedro M<sup>a</sup> Diéguez Elizondo, por la confianza depositada en mí y por su apoyo.

También a Iñigo Idareta Erro, Jose Carlos Urroz Unzueta y David Sainz Casas, por haberme prestado su ayuda en todo lo que he necesitado, y, en general, a todos los componentes del Grupo Hidrógeno, que en mayor o menor medida han hecho posible la realización de este proyecto, con un recuerdo especial hacia D. Carlos Sopena Serna.

Y gracias, muy especialmente, a mi familia, a mis amigos y a María, por aguantarme durante todo este tiempo.

## ÍNDICE

<b>1. Antecedentes.....</b>	<b>5</b>
<b>2. Introducción.....</b>	<b>7</b>
<b>3. Objetivos PFC.....</b>	<b>9</b>
<b>4. Fundamentos de combustión.....</b>	<b>10</b>
4.1. Reacción de combustión.....	10
4.2. Cinética química.....	13
4.2.1. Ecuación de velocidad.....	13
4.2.2. Orden de reacción.....	13
4.2.3. Influencia de la temperatura en las constantes cinéticas.....	14
4.3. Límite de inflamabilidad.....	16
<b>5. Herramienta CFD.....</b>	<b>18</b>
5.1. Introducción al cálculo por volúmenes finitos.....	20
5.2. Ecuaciones CFD.....	22
5.2.1. Ecuaciones de la mecánica de fluidos.....	22
5.2.2. Ecuaciones empleadas por Ansys CFX.....	28
5.3. Modelos de turbulencia.....	30
5.3.1. Ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds.....	30
5.3.2. Modelos de viscosidad turbulenta.....	31
5.3.3. Modelos de las tensiones de Reynolds.....	36
5.3.4. Modelos LES (Large Eddy Simulation).....	37
5.4. Modelos de reacción química.....	39
5.4.1. Modelo de disipación turbulenta.....	39
5.4.2. Modelo de reacción química de velocidad finita.....	40
5.4.3. Modelo de flámculas o modelo PDF.....	42
5.5. Modelos de radiación.....	46
5.5.1. El fenómeno de la radiación.....	46
5.5.2. Modelado de la radiación.....	49
<b>6. Presentación del motor.....</b>	<b>54</b>
6.1. Descripción básica de un MCIA.....	54
6.1.1. Parámetros físicos y dimensionales.....	55
6.1.2. Parámetros operativos.....	56
6.1.3. Relaciones.....	56
6.2. Ciclo termodinámico de un MEP.....	58
6.3. Combustión en los MEP.....	61
6.4. Pérdidas de calor.....	63
6.4.1. Ecuaciones generales para determinar las pérdidas de calor.....	64
6.4.2. Ecuaciones semiempíricas para determinar el calor transmitido.....	66
6.4.3. Balance térmico de un motor.....	69



6.5. Equipación empleada en la experimentación.....	72
6.5.1. Motor de combustión interna.....	72
6.5.2. Banco de ensayo.....	73
6.5.3. Adquisición y tratamiento de datos.....	75
<b>7. Modelo térmico.....</b>	<b>81</b>
7.1. Conservación de la energía en sistemas reactivos.....	81
7.1.1. Cálculos de la entalpía de formación para sistemas reactivos.....	81
7.1.2. Balances de energía para sistemas reactivos.....	82
7.1.3. Relación entre temperatura en el escape, potencia térmica y calor perdido.....	84
7.2. Datos experimentales.....	86
7.2.1. Potencia, par y trabajo del ciclo.....	86
7.2.2. Flujo de combustible y temperatura de entrada.....	90
7.2.3. Temperatura de salida.....	92
7.3. Modelo térmico H <sub>2</sub> -MEP.....	95
7.3.1. Potencia calorífica aportada por el combustible.....	95
7.3.2. Potencia de pérdidas caloríficas.....	98
7.3.3. Análisis de resultados.....	102
<b>8. Modelo de combustión.....</b>	<b>105</b>
8.1. Geometría y mallado.....	105
8.2. Ajuste del modelo sin combustión.....	108
8.2.1. Datos experimentales.....	108
8.2.2. Comparación con los resultados simulados.....	108
8.3. Ajuste del modelo con combustión.....	113
8.3.1. Elección del modelo de combustión.....	113
8.3.2. Transferencia de calor.....	114
8.3.3. Parámetros del modelo.....	119
8.3.4. Inicialización y funcionamiento del modelo.....	120
8.3.5. Influencia de diversos parámetros.....	123
8.4. Modelo de combustión H <sub>2</sub> -MEP.....	127
8.4.1. Datos experimentales.....	127
8.4.2. Ajuste de los distintos parámetros.....	129
8.4.3. Análisis de resultados.....	132
<b>9. Conclusiones.....</b>	<b>141</b>
<b>10. Futuras líneas de investigación.....</b>	<b>143</b>
<b>11. Nomenclatura y acrónimos.....</b>	<b>144</b>
<b>12. Bibliografía.....</b>	<b>145</b>

## 1. ANTECEDENTES

El presente Proyecto Fin de Carrera se incorpora a una serie de proyectos de simulación CFD realizados previamente en la Universidad Pública de Navarra, fruto de la colaboración con la empresa Acciona Energía. Esta colaboración comienza en el año 2001, cuando Acciona (entonces Energía Hidroeléctrica de Navarra) y la Universidad deciden crear una línea de investigación en temas relacionados con el hidrógeno.



Figura 1.1.1.- Colaboradores en la investigación

Esta amplia colaboración a lo largo de los últimos años ha permitido desarrollar importantes logros y ha dado lugar a la formación de un grupo de expertos en tecnologías relacionadas con el hidrógeno denominado “Grupo Hidrógeno” ([www.grupohidrogeno.es](http://www.grupohidrogeno.es)). La colaboración, a su vez, ha dejado una amplia colección de Proyectos Fin de Carrera que, junto con el trabajo del grupo, han desarrollado una investigación que engloba temas que van desde el análisis del estado del arte en lo que se refiere a tecnologías de producción de hidrógeno y puesta en marcha de electrolizadores al análisis de atmósferas explosivas y fenómenos de difusión de hidrógeno.

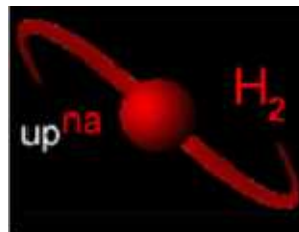


Figura 1.1.2.- Logotipo del Grupo Hidrógeno

Otra de las principales líneas de investigación ha sido la puesta en marcha de un motor de combustión interna alternativo (MCIA) alimentado por hidrógeno. La investigación ha alcanzado resultados muy interesantes, y actualmente está desarrollando su aplicación en un turismo convencional.



**Figura 1.1.3.- Volkswagen Polo alimentado con hidrógeno**

Es en este último apartado donde se incorpora el presente proyecto, como parte de la investigación en el desarrollo de un prototipo de motor de combustión alimentado por hidrógeno. Dentro de la trayectoria de esta investigación, la simulación de procesos de combustión se encuentra en sus inicios. Los PFC de D. Iosu Iriarte Labalde “Simulación del proceso de combustión en un MCIa alimentado con hidrógeno” y de D. Íñigo Idareta Erro “Simulación CFD de procesos de combustión de hidrógeno” son los dos únicos proyectos que se han adentrado en esta área. Sin embargo, aunque muchos son los aspectos que se han ido clarificando, todavía hay gran cantidad de ellos que se desconocen sobre este tipo de procesos y simulaciones. El presente proyecto pretende adentrarse en los mismos y seguir despejando algunas dudas.

## 2. INTRODUCCIÓN

Desde la creación de los primeros motores de combustión interna alternativos (MCIAs), muchos han sido los avances enfocados a mejorar su funcionamiento y eficiencia. Importantes áreas dentro del conjunto han sido profundamente estudiadas para conseguir dicho objetivo. Además de la progresión en cuanto a características dinámicas, estos estudios han dado como resultado importantes innovaciones en los diferentes sistemas del motor, como la admisión, el escape, la inyección del combustible, los sistemas de control, etc., obteniéndose grandes mejoras tanto en las prestaciones como en el rendimiento del mismo. De esta forma, se han conseguido grandes reducciones en el consumo de combustible y en las emisiones, temas muy de moda en la actualidad, sin pérdida de prestaciones.

Sin embargo, las ganancias que se pueden extraer mediante la evolución de estos sistemas es cada vez menor, y se hace necesario buscarlas en áreas menos estudiadas. Una de estas áreas es el sistema de refrigeración, que se ha empezado a ver como un importante foco de mejora del motor. La búsqueda de mayores potencias y el uso de motores sobrealimentados han dado lugar al uso de nuevos sistemas de refrigeración más complejos. Además, para conseguir reducir las emisiones, se emplea la recirculación de gases refrigerados, añadiéndose nuevos elementos al conjunto.

En la búsqueda por optimizar el proceso de combustión, se le está prestando gran atención al estudio de los balances térmicos en el motor, centrándose principalmente en la transferencia de calor entre el gas de trabajo y las paredes de los cilindros por sus implicaciones en el rendimiento termodinámico del mismo.

Una gran parte de la energía que consume nuestra sociedad se ha liberado por medio de un proceso de combustión. Por tanto, el estudio, la investigación y la optimización de estos procesos resulta clave a la hora de conseguir ese objetivo temporal de consumir nuestros recursos de forma óptima y responsable.

La combustión es básica a la hora de obtener la energía de los combustibles fósiles, es la que hace moverse a nuestros vehículos, calienta la mayoría de nuestros hogares y produce gran parte de la electricidad que consumimos. La combustión de este tipo de productos tiene sus defectos (generación de CO y otros inquemados, de CO<sub>2</sub>,...) además de los propios de toda combustión (NO<sub>x</sub> de origen térmico), pero a fin de cuentas, es una energía rápida, transportable y acumulable. No se puede decir lo mismo de las energías renovables, que no requieren un proceso de combustión, y aunque limpias, generan energía de forma aleatoria a consumir en el momento de su generación.



**Figura 2.1.1.- Motor BMW alimentado con hidrógeno**

En este instante es donde el hidrógeno entra en juego. El hidrógeno no es un recurso de nuestro planeta. Aunque es el elemento más abundante del planeta y del Universo, no disponemos de él como sustancia pura, sino que se encuentra formando compuestos. A pesar de todo, somos capaces de obtenerlo a partir de diversos procesos, como la electrólisis, que nos permite obtenerlo a partir del agua. Una vez en este estado, el gas permite ser quemado mezclado con oxígeno, generando como producto únicamente agua, creando así un ciclo cerrado.

Gracias a este ciclo, el hidrógeno se puede emplear como vector energético, producido a partir de energías renovables, sin generar emisiones, y ofreciendo una energía rápida, transportable y, especialmente de interés, acumulable. Como se ha comentado, ni actualmente ni a corto plazo las energías renovables serán capaces de abastecer la demanda global, pero cuanto más flexible sea la naturaleza de esa energía, su consumo podrá optimizarse.

### 3. OBJETIVOS PFC

El objetivo del presente Proyecto Fin de Carrera es profundizar en el estudio de los motores de combustión interna alternativos alimentados con hidrógeno, centrándose en los fenómenos de transmisión de calor de los mismos y en el proceso de combustión de la mezcla aire-hidrógeno.

El proyecto pretende, por otra parte, dar validez a los resultados obtenidos por medio de la herramienta computacional de elementos finitos y ofrecer una valoración de la capacidad de las simulaciones para recrear el comportamiento real del gas antes, durante y tras su combustión.

Las acciones a desarrollar para alcanzar estos objetivos serán las siguientes:

- Revisión de los modelos de transferencia de calor utilizados en los cálculos de flujos de calor con las condiciones de contorno presentes en motores modernos.
- Estudio experimental de la evolución de las temperaturas en el motor y su balance térmico.
- Análisis del estado del arte en lo que respecta a la simulación de procesos de combustión para combustibles gaseosos.
- Elección y adaptación del modelo a la herramienta computacional disponible para el presente proyecto.
- Experimentación para la validación del modelo propuesto.

El conocimiento adquirido a lo largo de este proceso y la disponibilidad de medios experimentales permitirán establecer como nuevo objetivo la creación de un modelo propio para la combustión en un cilindro de un motor alimentado por hidrógeno.

## 4. FUNDAMENTOS DE COMBUSTIÓN

Los procesos de combustión fueron considerados, en el origen de su estudio, como una parte de la química. Sin embargo, hoy en día no es sólo la química la ciencia requerida para su análisis, ya que los fenómenos de transmisión de calor, turbulencia y difusión adquieren una importancia casi tan alta como la de la propia reacción. Además, este tipo de factores adicionales representa una fuente de incertidumbre mucho mayor que la propia reacción química, más predecible al ser tan rápida.

Por lo tanto, a pesar de que la química supone la parte más básica y principal del proceso de combustión, en este apartado se mostrarán brevemente los aspectos más relevantes en lo que se refiere al análisis de este tipo de fenómenos, tanto químicos como de otro tipo, además de la definición de diversos conceptos críticos en el posterior desarrollo del presente proyecto.

### 4.1. REACCIÓN DE COMBUSTIÓN

Como toda reacción química, un proceso de combustión implica que un conjunto de sustancias, llamadas reactivos, se transformen en un nuevo conjunto de sustancias llamadas productos. En este caso, se trata de una reacción química exotérmica de una sustancia o una mezcla de sustancias llamada combustible con un oxidante, conocido en estos casos como comburente, por lo general oxígeno.



Se conoce como reacción completa aquella en la que todos los componentes del combustible alcanzan su máximo grado de oxidación posible.

- Hidrógeno:  $\text{H}_2 + (1/2) \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{Q}$
- Hidrocarburo general:  $\text{C}_a\text{H}_b + (a+b/4) \text{O}_2 \rightarrow (a) \text{CO}_2 + (b/2) \text{H}_2\text{O} + \text{Q}$

Estas expresiones representan una reacción general que engloba a toda una serie de reacciones elementales entre diferentes productos y radicales intermedios. Para el caso del hidrógeno, siendo este de los más sencillos, se han llegado a distinguir cerca de una veintena de reacciones diferentes, como muestra la figura 4.1.1. [24]. Es por ello que para un análisis del proceso a gran escala la aproximación de estas expresiones es suficiente, pero el estudio en detalle del proceso de combustión requeriría un análisis mucho más exhaustivo de todo este tipo de reacciones.



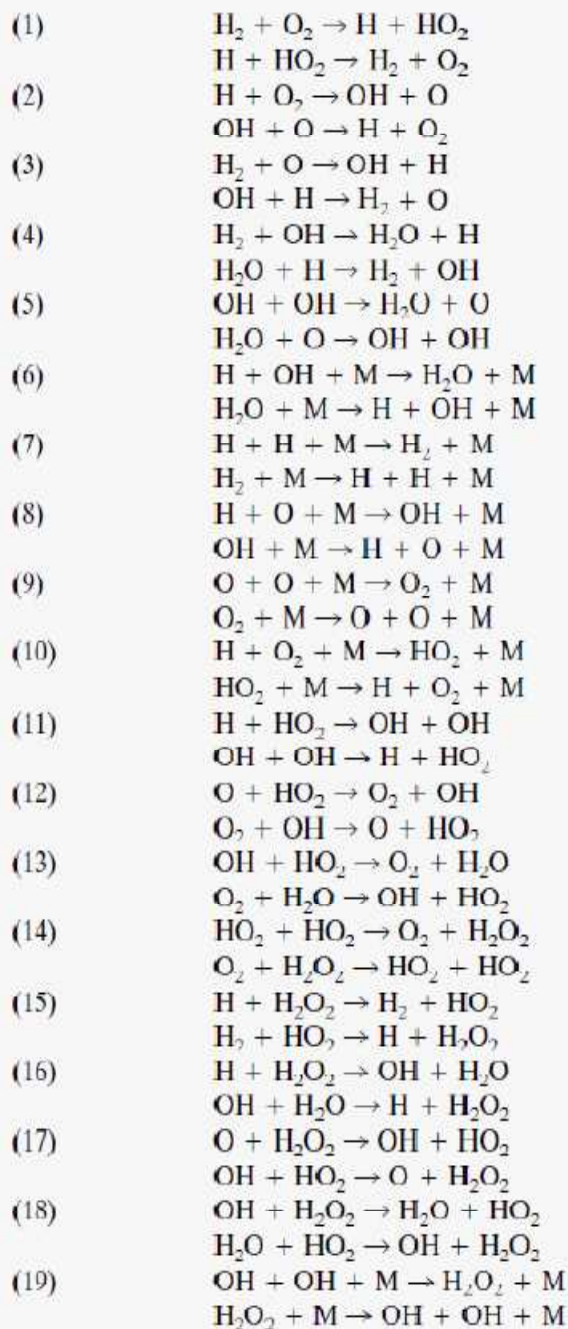


Figura 4.1.1. Reacciones elementales identificadas en la combustión del hidrógeno

Una de las consecuencias de esta complejidad es que, dado el gran número de reacciones que se dan tanto en la combustión del hidrógeno como en la de combustibles fósiles, existen casos en los que debido a una presencia de combustible por encima de la relación estequiométrica (es decir, dosado alto) a nivel local o global, el combustible no alcanza el máximo grado de oxidación posible, apareciendo nuevos productos en la reacción, conocidos como inquemados. Este tipo de combustión se conoce como



combustión incompleta, y suele tener como productos, además de  $\text{CO}_2$  y agua, al monóxido de carbono (CO), hidrocarburos completos (HC),...

Por otro lado, la reacción de combustión suele emplear como comburente aire en lugar de oxígeno puro. Esta presencia de nitrógeno, por un lado va a suponer una masa adicional inerte en la reacción, que absorberá energía para elevar su temperatura, implicando que las temperaturas máximas sean inferiores al caso de la combustión con oxígeno puro y por lo tanto disminuyendo el rendimiento del proceso. Pero además, el nitrógeno presente en la reacción puede oxidarse si se alcanzan temperaturas lo suficientemente altas, formando una serie de nuevos productos, generalmente agrupados en el grupo conocido como  $\text{NO}_x$ , óxidos de nitrógeno. Los mecanismos de formación de estos productos y las consecuencias de los mismos se analizarán más adelante.

## 4.2. CINÉTICA QUÍMICA

Este campo estudia la velocidad de reacción de los procesos químicos en función de todas las variables que la afectan: la concentración de las especies que reaccionan, los productos de reacción, los catalizadores e inhibidores, los diferentes medios disolventes, la temperatura, e incluso otros aspectos como la luz, las superficies de contacto o la agitación del medio.

Existen diferentes opciones para expresar la velocidad de una reacción. Para evitar ambigüedades, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) recomienda definir una velocidad general [16], que para una reacción general ajustada tal que:



se expresaría como:

$$\text{velocidad de reacción, } V = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{g} \frac{\Delta[G]}{\Delta t} = \frac{1}{h} \frac{\Delta[H]}{\Delta t} = \dots \quad (\text{Ec. 4.2.2})$$

### 4.2.1. ECUACIÓN DE VELOCIDAD

La cinética química pretende encontrar una expresión que relacione la velocidad de la reacción con las concentraciones de los reactivos que en ella intervienen. Esta ecuación, que se denomina ecuación de velocidad, frecuentemente se puede expresar, para una reacción general como la definida por la expresión 4.2.1, como:

$$\text{velocidad de reacción, } v = k [A]^m [B]^n \dots \quad (\text{Ec. 4.2.3})$$

La constante  $k$  se conoce como constante de velocidad, es una constante de proporcionalidad y es ella la que depende del tipo de reacción, de la presencia de catalizadores, de la temperatura,... Las unidades de la misma dependerán del número de reactivos involucrados y de sus exponentes, y en el caso general, para una reacción de orden  $n$ , se expresará como:

$$K [ \text{mol}^{1-n} \text{ litro}^{n-1} \text{ seg}^{-1} ]$$

### 4.2.2. ORDEN DE REACCIÓN

Existen dos tipos de orden de reacción:

**Orden de reacción con respecto a un reactivo:** Considerando la ecuación anterior, si  $m=1$  se dice que la reacción es de primer orden con respecto al reactivo A, si  $n=2$  se dice que la reacción es de segundo orden con respecto al B.

**Orden de reacción total:** Es la suma de todos los exponentes de la ecuación de velocidad. Así, suponiendo que la expresión anterior sólo involucre a los reactivos A y B, si  $m=1$  y  $n=2$  se dirá que la reacción es de tercer orden. En general, se expresará el orden de reacción como lo representa la ecuación 4.2.4.:

$$\text{Orden de reacción} = m + n + \dots \quad (\text{Ec. 4.2.4})$$

Si los coeficientes  $m, n, \dots$  de la expresión anterior son enteros, la reacción cumple la ley de acción de masas<sup>1</sup> y se denomina reacción elemental. Sin embargo, existen casos en los que, en lugar de aparecer una reacción elemental, tiene lugar un mecanismo de reacción que involucra varios de estos procesos elementales, como es el caso de los complejos procesos de combustión sobre los que se ha hablado anteriormente (Figura 4.1.1). Al expresar estos mecanismos con una sola ecuación de velocidad puede que los coeficientes no se ajusten a valores enteros. En este caso, no se suele hablar de un orden de reacción, sino que se indica directamente la expresión para la velocidad.

Dada esta última situación, salvo en el caso en que se pueda asegurar que la reacción es elemental, el orden de reacción debe ser considerado una magnitud estrictamente experimental.

### 4.2.3. INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA EN LAS CONSTANTES CINÉTICAS

El valor de las constantes cinéticas sufre importantes variaciones ante cambios de temperatura. En 1889, el sueco Svante August Arrhenius demostró que, para gran parte de las reacciones químicas, los datos de la constante  $k(T)$  podían ajustarse a la siguiente expresión, en la que introduce el concepto de energía de activación ( $E_a$ ):

$$k = A e^{-E_a/RT} \quad (\text{Ec. 4.2.5})$$

siendo  $A$  el factor pre-exponencial o factor de Arrhenius. La energía de activación es la energía mínima, superior a la energía cinética media, que deben tener las moléculas cuando chocan para que tenga lugar la reacción. En la figura 4.2.1 se representa este concepto para el caso de una reacción endotérmica. En el caso de una combustión, la energía potencial de los productos quedaría por debajo de la de los reactivos.

<sup>1</sup>Ley de acción masas: Si el producto de las concentraciones de todos los productos se divide entre el producto de las concentraciones de todos los reactivos, la razón originaria es una constante para todos los cambios excepto la temperatura

$$\frac{[X_{k+1}]^{v_{k+1}} \dots [X_m]^{v_m}}{[X_l]^{v_l} \dots [X_k]^{v_k}} = K_{eq}$$

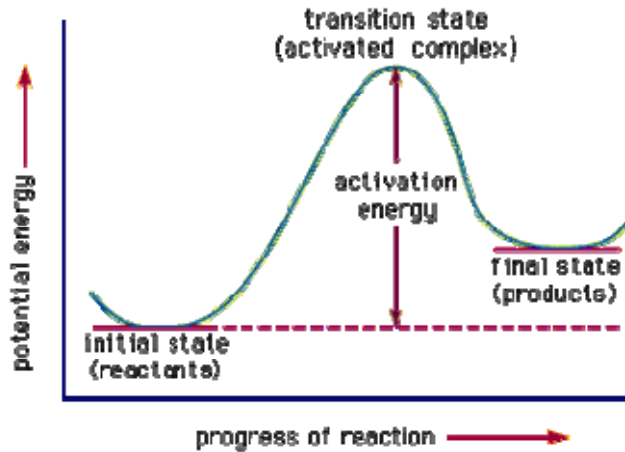


Figura 4.2.1. Concepto de energía de activación

Esta expresión resulta satisfactoria para casi todas las reacciones homogéneas elementales y muchas reacciones complejas. De ella y de su representación gráfica (Figura 4.2.1) se deduce que una energía de activación pequeña significa que la reacción es rápida.

El aumento de la velocidad con la temperatura se debe principalmente al aumento del número de colisiones cuya energía excede el valor de  $E_a$  al aumentar la excitación del medio.

Se han desarrollado teorías más complejas para la velocidad de reacción, conduciendo a ecuaciones similares, en las que en general  $A$  y  $E_a$  dependen de la temperatura (teoría del estado de transición,...), aunque sus variaciones se detectan para intervalos muy amplios de temperatura.

Habitualmente, la definición general de energía de activación, para cualquier proceso cinético, tanto si es función o no de la temperatura, es:

$$E_a = RT^2 \frac{d \ln k}{dT} \quad (\text{Ec. 4.2.6})$$

### 4.3. LÍMITE DE INFLAMABILIDAD

Según lo tratado en el apartado anterior, una molécula de combustible puede ser oxidada por una de comburente en cualquier punto en el que ambas coexistan y en el que se supere la energía de activación, lo cual es cierto. Sin embargo, para que la reacción se mantenga o se propague, no basta simplemente con eso. Las inestabilidades del frente de reacción, las pérdidas térmicas o incluso aspectos cinéticos pueden llevar a una extinción de la reacción. Se observa que para que la reacción continúe, es necesario que haya una presencia mínima de combustible y de comburente. Si cualquiera de los dos no alcanza estos valores mínimos, la reacción se extinguirá.

Estos valores mínimos de reactivos establecen los llamados límites de inflamabilidad, generalmente definidos como la presencia mínima y máxima de combustible que permite mantener la reacción de combustión. Lógicamente, estos límites van a ser diferentes en función del medio oxidante: no serán equivalentes en oxígeno puro o en aire, donde el primero está más diluido; ni tampoco lo serán en oxígeno puro o en flúor, cuyo poder oxidante es mayor. Sirva la imagen 4.3.1, que muestra los límites de inflamabilidad del metano para diferentes concentraciones de oxígeno y nitrógeno, como ejemplo:

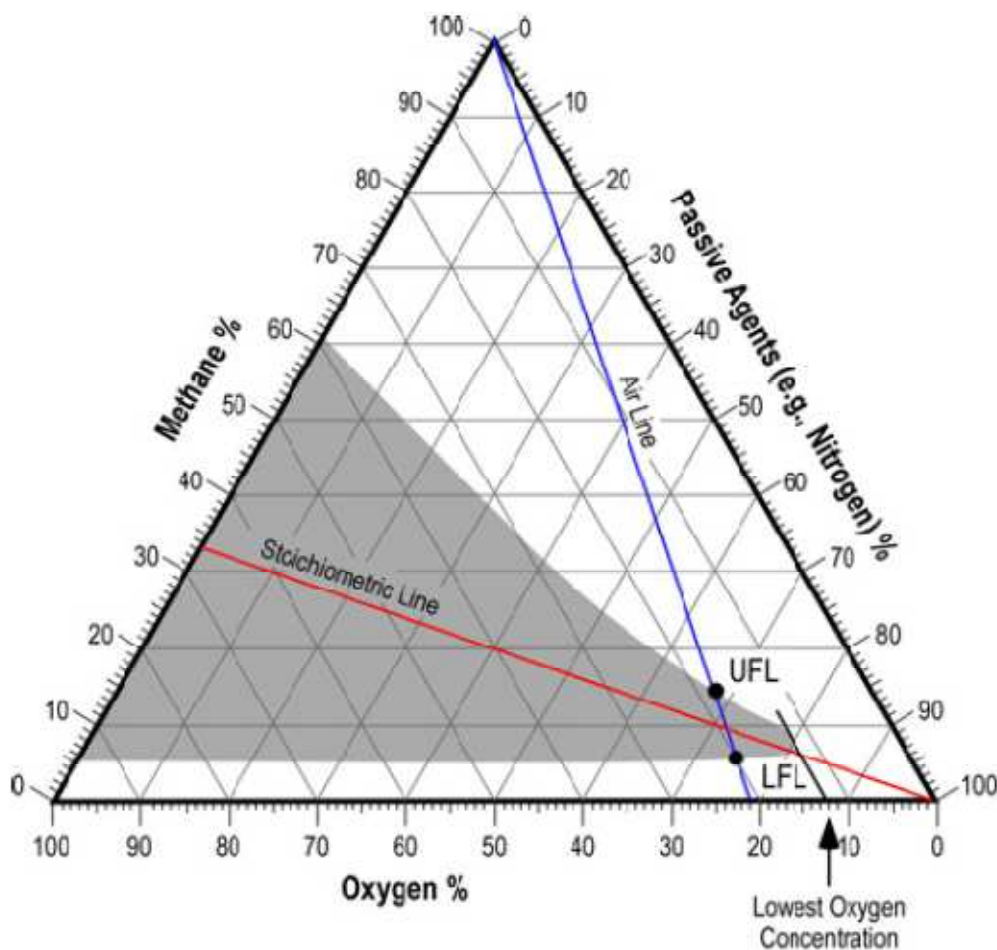


Figura 4.3.1. Triángulo de inflamabilidad del metano.

Por otra parte, el concepto de límites de inflamabilidad se ha extrapolado a otro aspecto importante: la detonación. De forma análoga a los de inflamabilidad, se definen los límites de detonabilidad como la presencia mínima y máxima de combustible que permiten que se dé un proceso de detonación. Estos valores no coinciden con los límites de inflamabilidad, siendo un intervalo más restrictivo. Para el caso del metano en aire, del que se acaba de mostrar que los límites de inflamabilidad son el 5% y el 15%, los límites de detonabilidad se encuentran en el 6.3 y el 13.5%.

Los procesos y sus condiciones para obtener estos valores están definidos en diferentes normativas y no todos ellos coinciden. Según los experimentos de Schroeder, los valores para los límites de detonabilidad del hidrógeno, en función de la normativa empleada, poseen los siguientes valores:

	DIN 51649	EN 1839 (T)	EN 1839 (B)	ASTM E 681
<b>LEL (H<sub>2</sub>-aire)</b>	3.8	3.6	4.2	3.75
<b>UEL (H<sub>2</sub>-aire)</b>	75.8	76.6	77.0	75.1
<b>LEL (H<sub>2</sub>-40%-N<sub>2</sub>-aire)</b>	3.6	3.6	4.4	3.65
<b>UEL (H<sub>2</sub>-40%-N<sub>2</sub>-aire)</b>	38.2	38.4	38.2	37.3

**Figura 4.3.2. Valores de los límites de inflamabilidad según diferentes normativas obtenidos por Schroeder**

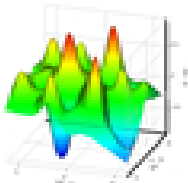
## 5. HERRAMIENTA CFD

Para el desarrollo de las simulaciones del presente proyecto, se ha empleado como herramienta computacional el programa ANSYS.



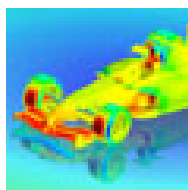
ANSYS Inc. diseña, desarrolla y comercializa herramientas computacionales que sirven para simular tanto las condiciones de fabricación como las de trabajo del diseño propuesto. ANSYS ha integrado una serie de módulos enfocados a distintos campos de actuación. En el presente proyecto se hará uso de los siguientes:

### ANSYS Workbench



ANSYS Workbench es un modulo complejo que ofrece diversas funciones, desde la creación de geometría a simulaciones mecánicas o cálculos de optimización. Dentro de ellas, será empleado aquí para la creación de geometrías y mallados.

### ANSYS CFX



ANSYS CFX es el modulo desarrollado por ANSYS para cálculo de dinámica de fluidos computacional (CFD). Trabaja con tres subapartados: uno para la definición de la simulación, otro para la resolución de la misma y un último para el postprocesamiento.

Este será el módulo principal en el presente proyecto, por medio del cual se desarrollarán todas las simulaciones de combustión. El módulo ofrece un interfaz amigable y su post-procesador ofrece unas capacidades muy amplias. Sin embargo, la flexibilidad en la definición de las simulaciones es en ocasiones insuficiente, como se verá en algunos de los casos simulados.

Con este software, ANSYS Inc. logra introducirse en el difícil mundo de la dinámica de fluidos. Un mundo gobernado por difíciles ecuaciones diferenciales que no tienen solución analítica pero que pueden ser discretizadas y resueltas numéricamente. Esto es lo que llamamos CFD: una herramienta computacional para la simulación del comportamiento de sistemas que contienen, fluidos, flujos, transferencia de calor y otros procesos físicos. Resuelve las ecuaciones del fluido sobre una región de interés y con unas condiciones de contorno específicas.



## 5.1. INTRODUCCIÓN AL CÁLCULO POR VOLÚMENES FINITOS

Para poder resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para casos reales se debe realizar una aproximación numérica que transforme las ecuaciones por aproximaciones algebraicas, que puedan ser resueltas por un método numérico.

La forma general de actuación consiste en la discretización del espacio en volúmenes finitos por medio de una malla, integrando las ecuaciones de la mecánica de fluidos para cada uno de estos volúmenes, respetando los principios de conservación en cada uno de ellos. Como ejemplo, sirva la integración de la ecuación de conservación para un volumen finito (volumen  $V$  y superficie  $s$ ) que no se deforma en el tiempo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_s \rho v_j dn_j = 0 \quad (\text{Ecs. 5.1.1})$$

Para la resolución, se crea en primer lugar un sistema de ecuaciones algebraicas linealizadas, empleando diversos métodos como por ejemplo las series de Taylor. Las aproximaciones empleadas suelen depender en cierto grado del tamaño de la malla y de la discretización temporal, de forma que los errores provocados por cada uno de estos tres factores se encuentren dentro de un mismo orden.

Al aplicar este tipo de procedimientos, la forma integral de la ecuación de conservación antes expuesta se transforma en la siguiente:

$$V \left( \frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} (\rho v_j \Delta n_j)_{ip} = 0 \quad (\text{Ec. 5.1.2})$$

El superíndice 0 indica el valor del instante anterior de la discretización y el subíndice ip se refiere a los puntos de integración dentro del volumen.

Más adelante, en la discretización, entran en juego otros muchos aspectos, desde métodos para mantener valores de gradientes a lo largo de las iteraciones hasta aproximaciones en mallas deformables, que sin embargo no se van a detallar aquí. Para mayor información, se puede consultar el manual de ANSYS-CFX [28].

Una vez discretizado el dominio, es necesario establecer una estrategia de resolución que permita la resolución de los sistemas de ecuaciones creados. El módulo ANSYS CFX emplea un esquema como el que aparece en el esquema de la figura 4.1.1 para obtener los resultados.

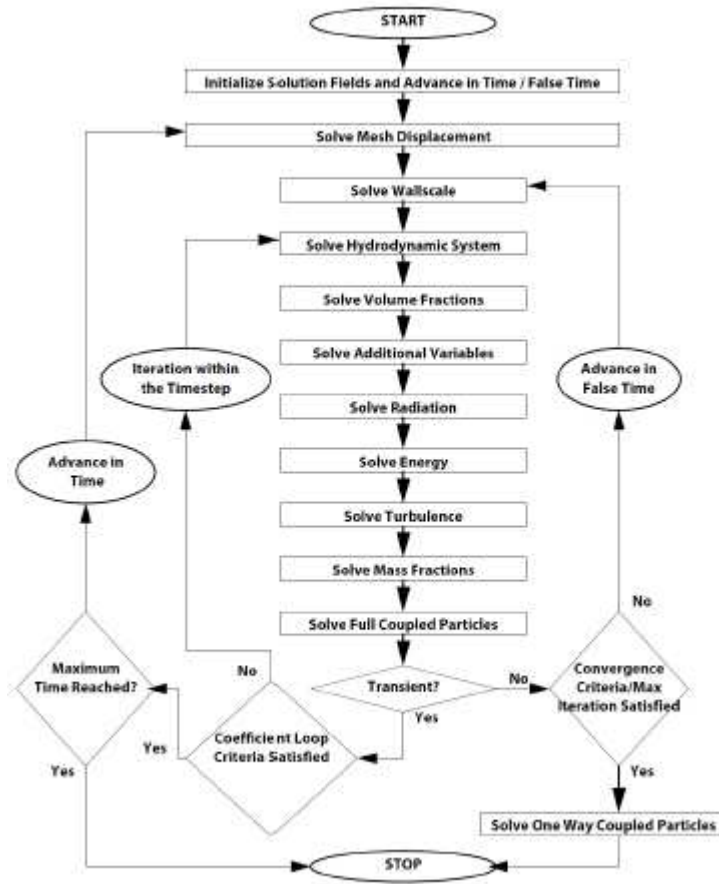


Figura 4.1.1. Esquema del algoritmo de cálculo realizado por ANSYS CFX para la convergencia de las ecuaciones CFD

Una vez resumidos los principios básicos del cálculo CFD, en los apartados posteriores se desarrollan en detalle las ecuaciones que serán resueltas por el programa para obtener los resultados de los casos tratados.

## 5.2. ECUACIONES CFD

El movimiento de un fluido es un proceso complejo, en el que intervienen un número importante de variables y en el que muchas de ellas están interrelacionadas. La Mecánica de Fluidos es la rama de la física que se encarga de su estudio. Como ciencia, está basada en un compromiso entre teoría y experimentación; como parte de la mecánica dispone de un conjunto de leyes de conservación bien definidas, que permiten un análisis teórico riguroso. A continuación se desarrollan estas expresiones y, más adelante, se mostrará brevemente cómo las aplica la herramienta computacional.

### 5.2.1. ECUACIONES DE LA MÉCANICA DE FLUIDOS

Existen dos formas de obtener expresiones para estas leyes: expresiones diferenciales y expresiones integrales. Para obtener las primeras, se parte de la propia definición de los principios de conservación; para las segundas, se emplea el teorema del transporte de Reynolds.

#### Teorema del transporte de Reynolds

Se trata de una expresión que indica como varía una propiedad del fluido dentro de un volumen de control. Lo expresamos por medio de la relación:

$$\frac{dB_{\text{sist}}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \iiint_{VC} \beta \rho dV \right) + \iint_{SC} \beta \rho (\vec{v}_r \cdot \vec{n}) dA \quad (\text{Ec. 5.2.1})$$

donde  $B_{\text{sist}}$  representa la propiedad a estudiar del sistema (masa, cantidad de movimiento,...), y  $b$  su derivada con respecto a la masa.

En primer lugar, observar que el término de la izquierda, la derivada de la propiedad en estudio, se refiere a un sistema, es decir, una cantidad de materia que no tiene entradas ni salidas. Sin embargo, las integrales de la derecha se refieren a un volumen de control (y a su frontera) en el que sí hay entradas y salidas que pueden aportar o sustraer materia, y con ella, propiedades.

Por lo tanto, y desde un punto de vista más tangible, el teorema del transporte de Reynolds aplicado a una propiedad relaciona la variación de la misma en un sistema con la variación de esta propiedad en el seno del volumen de control y la debida al transporte a través de las fronteras del volumen de control.

### Ecuación de continuidad o de conservación de la masa

Según el principio de conservación de la masa, la variación en el tiempo de la masa contenida en un volumen fluido es nula:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d\Omega = \frac{d(\rho \cdot \Omega)}{dt} = 0 \quad (\text{Ec. 5.2.2})$$

Desarrollando:

$$\frac{d\Omega}{dt} = \Omega \nabla \vec{v}, \text{ por lo que } \frac{d(\rho \Omega)}{dt} = \Omega \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{d\Omega}{dt} = \Omega \frac{d\rho}{dt} + \rho \Omega \nabla \vec{v} = 0 \quad (\text{Ec. 5.2.3})$$

Despejando, se obtiene la expresión diferencial de la ecuación de continuidad

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \vec{v} = 0 \quad \text{o bien} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{Ecs. 5.2.4})$$

Para obtener esta relación en forma integral, se emplea el teorema del transporte de Reynolds, tomando como propiedad a analizar la masa:

$$B_{sit} = m_{sist}$$

$$\beta = \frac{dB}{dm} = \frac{dm}{dm} = 1 \quad (\text{Ecs. 5.2.5})$$

$$\frac{d}{dt} \left( \iiint_{VC} \rho dV \right) + \iint_{SC} \rho (\vec{v}_r \cdot \vec{n}) dA = 0$$

### Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

Según el principio de conservación de la cantidad de movimiento, o segunda ley de Newton, aplicado a un volumen de fluido, la variación con el tiempo de su cantidad de movimiento es igual a la resultante de todas las fuerzas externas:

$$\frac{d}{dt} (\vec{D}) = \sum \vec{F}_{ext}, \text{ siendo } \vec{D} = \iint_{\Omega} \rho \vec{v} d\Omega, \text{ el momento lineal.}$$

Es decir,

$$\frac{d}{dt} \iint_{\Omega} \rho \vec{v} d\Omega = \frac{d}{dt} \left( \rho \vec{v} \int_{\Omega} d\Omega \right) = \frac{d}{dt} (\rho \vec{v} \Omega) = \sum \vec{F}_{ext} \quad (\text{Ecs. 5.2.6})$$

El conjunto de fuerzas que actúan sobre el volumen diferencial se enumeran a continuación:

$$\text{Fuerzas de volumen:} \quad \vec{F}_{\text{vol}} = \int_{\Omega} \rho \vec{f}_m d\Omega = \rho \vec{f}_m \Omega \quad (\text{Ec. 5.2.7})$$

donde  $f_m$  es el vector de fuerzas másicas, cociente entre todas las fuerzas de volumen presentes y la masa del fluido.

$$\text{Fuerzas superficiales:} \quad \vec{F}_{\text{sup}} = \int_{\Omega} \vec{n} \bar{\tau} d\sigma = \int_{\Omega} \nabla \bar{\tau} d\Omega = \nabla \bar{\tau} \Omega \quad (\text{Ec. 5.2.8})$$

En este caso, el tensor  $\bar{\tau}$  representa el tensor de esfuerzos total. Este tensor va a recoger los dos tipos de fuerzas superficiales que van a darse en el volumen infinitesimal: fuerzas debidas a la presión y fuerzas debidas a la viscosidad. Por lo tanto, se puede expresar como.

$$\bar{\tau} = -p\bar{I} + \overline{\tau}^{\text{EV}} \quad (\text{Ec. 5.2.9})$$

Y de esta forma, definir la ecuación de conservación de cantidad de movimiento como:

$$\rho \frac{d(\vec{v})}{dt} = \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \nabla \vec{v} = -\vec{\nabla} p + \nabla \overline{\tau}^{\text{EV}} + \rho \vec{f}_m \quad (\text{Ec. 5.2.10})$$

Esta expresión vectorial a priori sencilla forma en realidad un complejo conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales:

$$\begin{aligned} \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} &= \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} &= \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} &= \rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (\text{Ecs. 5.2.11})$$

Para obtener esta relación en forma integral, se emplea el teorema del transporte de Reynolds, tomando como propiedad a analizar el momento lineal:

$$\begin{aligned} B_{\text{sist}} &= m \cdot \vec{v} \\ \beta &= \frac{dB}{dm} = \frac{d(m \cdot \vec{v})}{dm} = \vec{v} \frac{dm}{dm} = \vec{v} \end{aligned} \quad (\text{Ecs. 5.2.12})$$

$$\frac{d}{dt} \left( \iiint_{VC} \vec{v} \rho dV \right) + \iint_{SC} \vec{v} \rho (\vec{v}_r \cdot \vec{n}) dA = \iint_{SC} (-pn + n \overline{\tau}^{\text{EV}}) dA + \iiint_{VC} \rho \vec{f}_m dV$$

## Simplificaciones

Para poder resolver las ecuaciones del transporte en forma diferencial antes expuestas, es necesario definir aún los términos viscosos en función de la velocidad. Para hacerlo, se emplean aproximaciones, de entre las cuales las más comunes son dos:

### *Ecuaciones de Euler*

La simplificación más importante de las ecuaciones del transporte se obtiene al suponer flujo no viscoso ( $\tau_{ij} = 0$ ), reduciendo la ecuación 5.2.12 a:

$$\rho \mathbf{g} - \nabla p = \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (\text{Ec. 5.2.13})$$

### *Ecuaciones de Navier Stokes*

La hipótesis de fluido newtoniano supone unos esfuerzos viscosos proporcionales a la velocidad de deformación y al coeficiente de viscosidad. Para flujos incompresibles, estos esfuerzos pueden representarse como:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \tau_{yy} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} & \tau_{zz} &= 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} & (\text{Ecs. 5.2.14}) \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= 2\mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \tau_{xz} = \tau_{zx} &= 2\mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) & \tau_{yz} = \tau_{zy} &= 2\mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

y de esta forma, se simplifica el conjunto de expresiones GGGG a la siguiente conjunto, conocido como ecuaciones de Navier Stokes:

$$\begin{aligned} \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{\partial u}{\partial t} \\ \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{\partial v}{\partial t} \\ \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{\partial w}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{Ecs. 5.2.15})$$

Las ecuaciones de Navier-Stokes proponen un sistema de ecuaciones en derivadas de segundo orden, que se termina de concretar por unas condiciones de contorno y unas condiciones iniciales.

Aunque se trata de un conjunto de ecuaciones simplificado con respecto a las ecuaciones, la resolución exacta de este problema es, en la mayoría de los casos, imposible. Únicamente se dispone de soluciones exactas para unos 80 tipos de problemas, referidos a fluidos con condiciones muy específicas, incompresibles, y alejados del interés práctico de la mecánica de fluidos.

### Ecuación de conservación del momento cinético

Dado que no existe un principio de conservación del momento cinético como tal, es necesario partir del teorema del transporte de Reynolds para obtener esta expresión. Introduciendo como variable principal en el teorema el momento cinético expresado como:

$$H_0 = \int_{\text{sist}} (\vec{r} \wedge \vec{v}) dm \quad (\text{Ec. 5.2.16})$$

se obtiene la siguiente expresión

$$\Sigma \overline{M}_0 = \frac{\partial}{\partial t} \left( \iiint_{V_C} (\vec{r} \wedge \vec{v}) \rho dV \right) + \iint_{S_C} (\vec{r} \wedge \vec{v}) \rho (\vec{v}_r \cdot \vec{n}) dA \quad (\text{Ec. 5.2.17})$$

Empleando las variables definidas en el caso de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento, se obtiene la expresión del teorema de Reynolds aplicado a la conservación del momento cinético:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \iiint_{V_C} (\vec{r} \wedge \vec{v}) \rho dV \right) + \iint_{S_C} (\vec{r} \wedge \vec{v}) \rho (\vec{v}_r \cdot \vec{n}) dA = \iint_{S_C} (\vec{r} \wedge \vec{n}) \bar{\tau} dA + \iiint_{V_C} (\vec{r} \wedge \rho \vec{f}_m) dV \quad (\text{Ec. 5.2.18})$$

### Ecuación de conservación de la energía

Según el principio de conservación de la energía, la variación en la unidad de tiempo de la energía total contenida en un volumen fluido es igual al trabajo por unidad de tiempo de las fuerzas de superficie y másicas que actúan sobre él, más el calor que recibe en la unidad de tiempo por conducción, radiación y reacción química.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \left( e + \frac{v^2}{2} \right) d\Omega = \int_{\sigma} (\vec{n} \cdot \vec{\tau}) \vec{v} d\sigma + \int_{\Omega} \rho (\vec{f}_m \cdot \vec{v}) d\Omega + \int_{\sigma} -\vec{n} \cdot \vec{q} d\sigma + \int_{\Omega} (Q_r + Q_q) d\Omega \quad (\text{Ec. 5.2.19})$$

Desarrollando la expresión anterior por medios similares a los analizados en casos anteriores, se obtiene la ecuación de conservación de la energía:

$$\rho \frac{d\left(e + \frac{v^2}{2}\right)}{dt} = \nabla(\bar{\tau} \vec{v}) + \rho \vec{f}_m \vec{v} - \nabla \dot{q} + Q_r + Q_q \quad (\text{Ec. 5.2.20})$$

Para obtener esta relación en forma integral, se emplea el teorema del transporte de Reynolds, tomando como propiedad a analizar la energía:

$$B_{\text{sist}} = E$$

$$\beta = \frac{dE}{dm} = e \quad \text{con} \quad dE = dQ - dW \quad (\text{Ecs. 5.2.21})$$

La derivada en función del tiempo de  $dW$  es la potencia que recibe el sistema, que se puede dividir en una potencia motor (álabes,...), una potencia debida a la presión y una potencia debida a los esfuerzos viscosos, de la siguiente forma:

$$\frac{dW}{dt} = \dot{W} = \dot{W}_m + \dot{W}_p + \dot{W}_{ev} = \dot{W}_m + \iint_{SC} p(\vec{v} \cdot \vec{n}) dA + \iint_{SC} (\bar{\tau} \vec{v}) dA$$

(Ec. 5.2.22)

Definiendo además la energía por unidad de masa como la suma de la energía interna, energía potencial y energía cinética, y recordando la definición de entalpía por unidad de masa:

$$e = u + \frac{v^2}{2} + gz \quad h = u + \frac{p}{\rho} \quad (\text{Ecs. 5.2.23})$$

La ecuación integral para la conservación de la energía se puede expresar como:

$$\dot{Q} - \dot{W}_m - \dot{W}_{ev} = \frac{d}{dt} \left( \iiint_{VC} e \rho dV \right) + \iint_{SC} \left( h + \frac{v^2}{2} + gz \right) \rho (\vec{v}_r \cdot \vec{n}) dA$$

(Ec. 5.2.24)



### 5.2.2. ECUACIONES EMPLEADAS POR ANSYS CFX

El módulo ANSYS CFX emplea expresiones análogas a las comentadas en el desarrollo teórico anterior. Según la documentación del mismo, las ecuaciones que gobiernan el cálculo son las siguientes:

*Ecuación de continuidad:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{Ec. 5.2.25})$$

*Ecuación del momento:*

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\vec{\nabla}p + \nabla\tau + S_M \quad (\text{Ec. 5.2.26})$$

definiendo  $\tau$  como:

$$\tau = \mu \left( \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \vec{v} \right) \quad (\text{Ec. 5.2.27})$$

*Ecuación de la energía:*

$$\frac{\partial(\rho h_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\vec{v} \tau) + \vec{v} S_M + S_E \quad (\text{Ec. 5.2.28})$$

Siendo  $h_{tot}$  la entalpía total, definida como

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2} \vec{v}^2 \quad (\text{Ec. 5.2.29})$$

En algunos casos, esta última se simplifica empleando la expresión conocida como “ecuación de la energía térmica”, para el caso de fluidos con densidad constante:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} e) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + p \nabla \cdot \vec{v} + -\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \tau : \nabla \vec{v} + S_E \quad (\text{Ec. 5.2.30})$$

Los términos  $S_M$  y  $S_E$  se incluyen para representar fuentes de energía o de momento dentro del dominio que no quedan representadas por las ecuaciones ni por las condiciones iniciales o de contorno, como puede ser la energía liberada en una chispa.

Por otra parte, estas expresiones no serán capaces de representar fenómenos químicos ni fenómenos de radiación. Es por ello que el programa, por medio de esos

términos fuente, modelizará estos dos aspectos para poder simularlos en el cálculo. Los modelos de reacción química y de radiación se detallan más adelante.

Por último, a pesar de que las ecuaciones de Navier-Stokes, y la adaptación realizada por ANSYS de las mismas, son capaces de representar perfectamente el flujo de un fluido, serían necesarias divisiones infinitesimales del dominio para poder caracterizar los casos de turbulencia. Dada la inviabilidad de estas divisiones para un cálculo eficiente, se desarrollan modelos de turbulencia que sean capaces de simular sus efectos sin resolverla de forma exacta.

### 5.3. MODELOS DE TURBULENCIA

El fenómeno de la turbulencia consiste en una serie de movimientos en forma de vórtice en el seno de un fluido, a diferentes escalas de tamaño y frecuencia de fluctuación, que se forman y evolucionan de manera aleatoria y no permanente. Es un régimen de flujo caracterizado por una baja difusión de momento, una alta convección y cambios espacio-temporales rápidos de presión y velocidad.

En principio, las ecuaciones de Navier-Stokes son capaces de describir perfectamente tanto el régimen laminar como el turbulento (en este hecho se basan los modelos DNS, “Direct Numerical Solution”). El problema se encuentra en el amplio rango de escalas a las que se dan los movimientos en forma de vórtice o remolinos, y especialmente en el hecho de que la turbulencia puede aparecer en una escala muchos órdenes de magnitud más pequeña que las empleadas en un análisis numérico: requeriría una capacidad operativa por encima de la actual y una descripción en extremo detalle de las condiciones de contorno.

Por lo tanto, se desarrollan modelos que permiten, sin tener que incurrir en un nivel de detalle tan extremo y acelerando el proceso de cálculo, simular de manera más o menos acertada (según el grado de complejidad) el fenómeno de la turbulencia y sus consecuencias para el sistema.

#### 5.3.1. ECUACIONES DE NAVIER-STOKES PROMEDIADAS POR REYNOLDS (RANS)

En general, prácticamente todos los modelos de turbulencia modifican las ecuaciones de Navier-Stokes considerando que cualquier variable puede expresarse como la suma de un valor promedio en un cierto incremento de tiempo y un valor que representa las variaciones turbulentas. Por lo tanto, los modelos de turbulencia no describen en detalle las fluctuaciones turbulentas, sino su efecto sobre las variables medias.

Así, una velocidad  $U$  se expresará como:

$$U = \bar{U} + u \quad \text{donde} \quad \bar{U} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} U dt \quad (\text{Ec. 5.3.1})$$

Empleando esta expresión en forma de valor medio ( $\bar{U}$ ) más valor variable ( $u$ ), las ecuaciones de Navier-Stokes pasan a expresarse de la siguiente forma:

*Ecuación de continuidad promediada:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (\text{Ec. 5.3.2})$$

*Ecuación de cantidad de movimiento promediada:*

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}\} = \nabla \cdot \{\boldsymbol{\tau} - \rho \overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}\} + S_M \quad (\text{Ec. 5.3.3})$$

*Ecuación de la energía promediada:*

$$\frac{\partial \rho h_{tot}}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho \mathbf{U} h_{tot}\} = \nabla \cdot \{\lambda \nabla \tau - \rho \overline{\mathbf{u} h}\} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\tau}) + S_E \quad (\text{Ec. 5.3.4})$$

*Ecuación para magnitudes escalares adicionales:*

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho \mathbf{U} \phi\} = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi - \rho \overline{\mathbf{u} \phi}) + S_\phi \quad (\text{Ec. 5.3.5})$$

### 5.3.2. MODELOS DE VISCOSIDAD TURBULENTA

Joseph Valentin Boussinesq, matemático y físico francés, fue el primero en realizar una propuesta para modelizar las tensiones turbulentas, introduciendo el concepto de *viscosidad turbulenta* o *viscosidad de remolino*. Boussinesq supuso que las tensiones turbulentas son proporcionales al gradiente de la velocidad media, como sucede con el movimiento laminar, de modo que se pueden expresar como:

$$-\rho \overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} = \mu_t (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) - \frac{2}{3} \delta (\rho k + \mu_t \nabla \cdot \mathbf{U}) \quad (\text{Ec. 5.3.6})$$

donde  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta,  $\delta$  es la delta de Kronecker y  $k$  la energía cinética media por unidad de masa de la turbulencia:

$$k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}^2} \quad (\text{Ec. 5.3.7})$$

El modelo de viscosidad turbulenta añade a esta primera hipótesis una adicional, la hipótesis de difusividad turbulenta, que supone que los flujos de Reynolds de un escalar están relacionados con el gradiente medio del escalar:

$$-\overline{\rho u \phi} = \Gamma_t \nabla \phi \quad (\text{Ec. 5.3.8})$$

donde  $\Gamma_t = \frac{\mu_t}{Pr_t}$ , es la difusividad turbulenta.

Estas dos hipótesis se pueden aplicar a las expresiones del punto anterior y de esta forma desarrollar las ecuaciones promedio de Reynolds, obteniendo las siguientes relaciones:

*Ecuación de cantidad de movimiento promediada:*

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \{ \rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U} \} = \mathbf{B} - \nabla p' + \nabla \cdot ( \mu_{eff} (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) ) \quad (\text{Ec. 5.3.9})$$

donde B es la suma de fuerzas volumétricas,  $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$  y el valor de p' se expresa como:

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k + \frac{2}{3} \mu_t \bar{\nabla} \cdot \mathbf{U} \quad (\text{Ec. 5.3.10})$$

*Ecuación de la energía promediada:*

$$\frac{\partial (\rho h_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h_{tot}) = \nabla \cdot \left( \lambda \nabla \tau - \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla h \right) + \nabla \cdot (\mathbf{U} \cdot \tau) + S_E \quad (\text{Ec. 5.3.11})$$

*Ecuación para magnitudes escalares adicionales:*

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \{ \rho \mathbf{U} \phi \} = \nabla \cdot \left( \Gamma_\phi + \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \right) \nabla \phi + S_\phi \quad (\text{Ec. 5.3.12})$$

Al sustituir la expresión de las tensiones turbulentas en las ecuaciones, se obtiene un sistema donde las únicas incógnitas son las variables promediadas en el tiempo. Sin embargo, aún no se puede resolver el problema debido a que no se conoce, a priori, el valor de la viscosidad turbulenta  $\mu_t$ . Esta no es una propiedad del fluido sino que depende del estado de la turbulencia y puede variar tanto espacial como temporalmente.

Los diferentes modelos de turbulencia basados en la viscosidad de remolino emplean diferentes técnicas para asignar un valor a esta  $\mu_t$ . En función del número de ecuaciones que añaden los modelos de viscosidad turbulenta para otorgar un valor a esta variable, se pueden clasificar en modelos de cero ecuaciones, modelos de una ecuación y modelos de dos ecuaciones.

### Modelos de cero ecuaciones

Los modelos más simples son modelos de cero ecuaciones. El caso más básico sería el que supone un valor de  $\mu_t$  constante en todo el volumen estudiado. Otros modelos, más desarrollados, relacionarían  $\mu_t$  con la velocidad media o con el gradiente de esta velocidad media (como el modelo de Prandtl<sup>1</sup>, el primero en este sentido), o emplean fórmulas empíricas más elaboradas para estimar el valor de esta viscosidad turbulenta

Estos modelos no se adecuan de manera satisfactoria a la realidad, ya que no tienen en cuenta posibles diferencias en la turbulencia dentro del propio fluido en estudio; es decir, son incapaces de reproducir flujos con separación y recirculación, no pueden simular el posible transporte o la difusión de la turbulencia dentro del fluido a zonas donde no exista generación.

### Modelos de una ecuación

Estos modelos, al igual que los modelos de dos ecuaciones, permiten incorporar los efectos de la historia del flujo en la viscosidad turbulenta por medio de una ecuación adicional al sistema. Básicamente, existen dos tipos de modelo a la hora de conseguirlo:

- Modelos basados en la viscosidad turbulenta para la conservación del momento.
- Modelos basados en la viscosidad turbulenta para la conservación de la energía cinética.

Siguen siendo modelos sencillos, obtenidos generalmente de forma experimental, que no terminan de ofrecer unos resultados con la calidad de modelos más complejos.

---

<sup>1</sup> El modelo de Ludwig Prandtl [1875-1953] introduce el concepto de longitud de mezcla, que representa la distancia media, perpendicular al flujo, a lo largo de la cual una partícula pierde su cantidad de movimiento extra y adquiere la velocidad media que exista en la nueva posición.

Siguen siendo modelos incompletos, y necesitan en general conocer el tipo de flujo de antemano.

### Modelos de dos ecuaciones

Para encontrar un modelo más cercano a la universalidad, especialmente para flujos separados, se debe buscar un modelo en el que los efectos de transporte sobre la longitud de escala de la turbulencia también sean tenidos en cuenta.

Entre este tipo de modelos de dos ecuaciones se encuentra el que sin duda es el más empleado actualmente para simulaciones de flujo turbulento en la industria y en la investigación: el modelo k-epsilon.

#### Modelo k-epsilon

Se trata de un modelo asentado actualmente en la industria y ampliamente validado, habiendo demostrado ser estable y robusto. Define dos nuevas variables que son las que le dan nombre:

k, la energía cinética de la turbulencia, definida como la variación de las fluctuaciones en la velocidad, y con dimensiones de  $m^2/s^2$ .

$\epsilon$ , la velocidad de disipación turbulenta, refiriéndose a la velocidad a la que las fluctuaciones de velocidad se disipan, y con dimensiones de  $m^2/s^3$ .

Introduciendo estas dos nuevas variables, el modelo se puede expresar como:

*Ecuación de continuidad:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (\text{Ec. 5.3.13})$$

*Ecuación de la cantidad de movimiento:*

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}\} - \nabla \cdot (\mu_{eff} \cdot \nabla \mathbf{U}) = -\nabla p' + \nabla \cdot (\mu_{eff} \cdot \nabla \mathbf{U})^T + \mathbf{B} \quad (\text{Ec. 5.3.14})$$

Recordando la definición del término  $\mu_{eff}$ :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (\text{Ec. 5.3.15})$$

siendo  $\mu_t$  la viscosidad turbulenta, que entra en relación con las variables del modelo k-epsilon según la siguiente relación:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{Ec. 5.3.16})$$

donde  $C_\mu$  es una constante adimensional de valor 0.09.

Por último, las dos ecuaciones que añade el modelo para conseguir ése valor de viscosidad turbulenta y que definen las dos variables que emplea son las siguientes:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (\text{Ec. 5.3.17})$$

siendo  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$  y  $\sigma_\varepsilon$  constantes adimensionales de valores 1.44, 1.92, 1.0 y 1.3 respectivamente. Por otra parte,  $P_k$  representa la generación de turbulencia a través de fuerzas viscosas y gravitatorias, definiéndose según la expresión:

$$P_k = \mu_t \nabla \mathbf{U} \cdot (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{U} (3\mu_t \nabla \cdot \mathbf{U} + \rho k) + P_{kb} \quad (\text{Ec. 5.3.18})$$

Los valores de  $\nabla \cdot \mathbf{U}$  son muy bajos para flujo incompresible, y solo alcanzan valores importantes en casos de variaciones fuertes de velocidad, como en choques. Por otro lado, el término  $3\mu_t$  se emplea para prevenir que en estos casos los valores de  $k$  y  $\varepsilon$  crezcan demasiado.



En lo que se refiere a la turbulencia proveniente de fuerzas gravitatorias, se recoge en el término  $P_{kb}$ . Este puede definirse empleando diversas relaciones, aunque la más general entre ellas sería:

$$P_{kb} = -\frac{\mu_t}{\rho\sigma_\rho} \mathbf{g} \cdot \nabla \rho \quad (\text{Ec. 5.3.19})$$

Existen todo un abanico de modelos de turbulencia similares a este modelo, que van desde modelos que simplemente introducen alguna variación al modelo k-epsilon (como el modelo RNG k-epsilon, en el que se definen algunas de las constantes adimensionales como funciones en lugar de emplear valores constantes) a modelos que introducen variables diferentes, como el modelo k-omega. Se trata de modelos empleados en casos más concretos de turbulencia, en los que dan mejores resultados. Sin embargo, como se ha comentado anteriormente, la robustez, adaptabilidad y bajo coste computacional del modelo k-epsilon lo convierte en el más empleado.

### 5.3.3. MODELOS DE LAS TENSIONES DE REYNOLDS

Este tipo de modelos son más complejos que los modelos de viscosidad turbulenta de dos ecuaciones. En lugar de emplear la hipótesis de viscosidad turbulenta, añaden al sistema de ecuaciones una ecuación para las tensiones de Reynolds a lo largo del fluido.

Existen dos tipos de modelos para turbulencia dentro de este grupo:

- Modelos algebraicos: introducen expresiones algebraicas al conjunto de ecuaciones del transporte a resolver.
- Modelos diferenciales: introducen expresiones diferenciales para cada una de las componentes de las tensiones de Reynolds.

En teoría, gracias a la introducción de un término de la producción exacta de turbulencia y a la capacidad de modelizar situaciones anisótropas, estos modelos obtendrían resultados más acertados en el estudio de flujos complejos. Sin embargo, la práctica demuestra que a menudo las diferencias son mínimas. Por lo tanto, este tipo de modelos no será tenido en cuenta en la realización del presente proyecto, y no serán desarrollados en más detalle.

### 5.3.4. MODELOS LES (LARGE EDDY SIMULATION)

Los modelos LES realizan un “filtrado” de las ecuaciones de Navier-Stokes empleando una descomposición de cada variable en dos partes: una parte a gran escala (que será la parte resuelta) y otra parte a pequeña escala (sin resolver). De esta forma, cualquier variable del dominio fluido podrá expresarse como:

$$f = \bar{f} + f' \quad (\text{Ec. 5.3.20})$$

De esta forma, la nueva expresión para las ecuaciones de Navier-Stokes pasa a ser.

$$\frac{\partial(\rho \bar{U}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\text{Ec. 5.3.21})$$

El término no lineal se puede desarrollar de la siguiente forma:

$$\overline{U_i U_j} = \overline{(\bar{U}_i + u_i')( \bar{U}_j + u_j')} = \overline{\bar{U}_i \bar{U}_j} + \overline{\bar{U}_i u_j'} + \overline{\bar{U}_j u_i'} + \overline{u_i' u_j'} \quad (\text{Ec. 5.3.22})$$

Introduciendo el concepto de las tensiones a pequeña escala o tensiones SGS (sub-grid scale),  $\tau_{ij}$ :

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{\bar{U}_i \bar{U}_j} \quad (\text{Ec. 5.3.23})$$

se consigue una nueva formulación:

$$\frac{\partial(\rho \bar{U}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \tau_{ij} + \rho \bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\text{Ecs. 5.3.24})$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{U}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial(\rho \tau_{ij})}{\partial x_j}$$

Y el término  $\tau_{ij}$  se puede expresar como:

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{U_i U_j} = \overline{\overline{U_i U_j}} + \overline{\overline{U_i u_j}'} + \overline{\overline{U_j u_i}'} + \overline{u_i u_j} - \overline{U_i U_j} = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} \quad (\text{Ec. 5.3.25})$$

donde  $C_{ij}$  representa a los términos cruzados.

Para resolver este sistema, se emplean diferentes hipótesis y modelos. Uno de los más extendidos es el propuesto por Smagorinsky, donde se supone que  $L_{ij} + R_{ij} = 0$  y hace dependiente el valor de estas tensiones a pequeña escala de las tensiones a gran escala por un lado y por otro, empleando una analogía con respecto al modelo de Prandtl y su longitud característica, relaciona la velocidad característica con los gradientes de la velocidad “filtrada”.

## 5.4. MODELOS DE REACCIÓN QUÍMICA

A la hora de simular una reacción química, es necesario la definición de un modelo para la misma. En general, la modelización de procesos de este tipo suele introducir en las ecuaciones del transporte términos “fuente” que eliminan reactivos y generan productos a lo largo de la simulación.

La expresión general de las ecuaciones del transporte para el componente I, añadiendo este nuevo término, es la siguiente:

$$\frac{\partial(\rho Y_I)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_I)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \Gamma_{I,eff} \frac{\partial Y_I}{\partial x_j} \right) + S_I \quad (\text{Ec. 5.4.1})$$

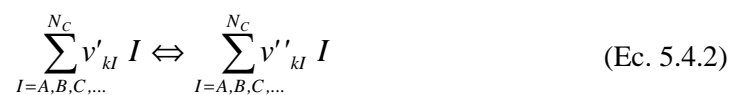
En la definición del término SI será donde los diferentes modelos aporten diversas expresiones que permitan un ajuste más o menos acertado y coherente con la realidad, según el caso a analizar.

Dentro del programa ANSYS CFX existen tres opciones principales, con diferentes variantes, para definir un proceso reactivo.

### 5.4.1. MODELO DE DISIPACIÓN TURBULENTA (EDDY DISSIPATION MODEL)

El modelo de disipación turbulenta se aplica para reacciones muy rápidas, casi instantáneas, en regímenes turbulentos. El modelo propone una reacción controlada por la mezcla de los componentes, es decir, en cuanto se produce la mezcla, se da la reacción. Se trata, de forma general, de un modelo robusto y sencillo, pero que tiende a sobreestimar temperaturas, y concentraciones de productos.

Para un conjunto de  $N_C$  reacciones como el siguiente:



el modelo define el término fuente para el componente I como:

$$S_I = W_I \sum_{k=1}^K (v''_{kl} - v'_{kl}) R_k \quad (\text{Ec. 5.4.3})$$

siendo  $R_k$  la velocidad de la reacción. Para hacer dependiente este término tanto de la concentración de los reactivos como del nivel de mezcla de los mismos, la expresión que emplea el modelo para su definición es la siguiente:

$$R_k = A \frac{\epsilon}{k} \min \left( \frac{[I]}{v'_{kl}} \right) \quad (\text{Ec. 5.4.4})$$

Siendo  $[I]$  la concentración de cada reactivo, y  $\epsilon$  y  $k$  las variables energía cinética de la turbulencia y disipación de la turbulencia definidas por el modelo k-epsilon. De esta forma, la velocidad de la reacción queda determinada por un lado por el reactivo limitante en la zona de análisis y por otro lado por el grado de mezclado, representado por el nivel de turbulencia en ese punto. Al valor  $A$  es un término de escala, que en general toma valores de 1 a 7, aunque en casos extraordinarios puede tomar valores dos órdenes de magnitud por encima.

El modelo permite, si es necesario, además introducir una limitación a esta velocidad de reacción por parte de los productos, escogiendo como valor para el término  $R_k$  el mínimo entre el valor obtenido en la expresión anterior y el obtenido en la siguiente:

$$R_k = AB \frac{\epsilon}{k} \min \left( \frac{\sum_P [I] W_I}{\sum_P v'_{kl} W_I} \right) \quad (\text{Ec. 5.4.5})$$

El empleo de esta expresión hará necesaria la presencia de productos para el inicio de la reacción y también para su progreso.

#### 5.4.2. MODELO DE REACCIÓN QUÍMICA DE VELOCIDAD FINITA (FINITE RATE CHEMISTRY MODEL)

Este modelo de reacción química es aconsejable para situaciones donde bien porque la velocidad de reacción sea baja o bien porque lo sea la turbulencia, la velocidad de la reacción viene definida por la cinética química. Es por tanto necesario disponer de información sobre la reacción para poder llevar a cabo su simulación.

El modelo emplea la misma expresión que el modelo de disipación turbulenta para la definición del término fuente, modificando sin embargo la expresión para el cálculo de la velocidad de reacción:

$$R_k = \left( F_k \prod_{I=A,B,..}^N [I]^{f_{ki}'} - B_k \prod_{I=A,B,..}^N [I]^{f_{ki}''} \right) \quad (\text{Ec. 5.4.6})$$

Gracias a esta expresión, este modelo permite definir una velocidad de reacción para los reactivos que se transforman en productos, pero también una velocidad para tener en cuenta la posible reacción inversa. La definición de las dos constantes de progreso de la reacción en una dirección o en otra son similares, con una dependencia con la temperatura de tipo Arrhenius como se muestra a continuación:

$$F_k = A_k T^{\beta_k} e^{\left(\frac{E_k}{RT}\right)} \quad B_k = A_k T^{\beta_k} e^{\left(\frac{E_k}{RT}\right)} \quad (\text{Ec. 5.4.7})$$

donde  $A_k$  es un factor preexponencial,  $\beta_k$  es el exponente de temperatura y  $E_k$  es la energía de activación para la reacción  $k$  (este último puede reemplazarse por la temperatura de activación, definida como  $TA=EA/R$ ), siendo estos tres los parámetros que el programa permite modificar.

Existe además la opción de incorporar a estas expresiones un tratamiento estadístico ante la posible influencia de las fluctuaciones debidas a la turbulencia. Para ello, el programa permite definir una función de densidad de probabilidad de tipo beta, y en función del campo de temperaturas obtenido, obtener gracias a ella una velocidad de reacción corregida que tenga en cuenta este efecto.

$$\tilde{k} = \frac{1}{T_{\text{sup}} - T_{\text{inf}}} \int_{T_{\text{inf}}}^{T_{\text{sup}}} k(T) \cdot P(T) dT \quad (\text{Ec. 5.4.8})$$

donde  $T_{\text{sup}}$  y  $T_{\text{inf}}$  son los límites inferior y superior para la integración, que en general deben definirse próximas a las temperaturas máxima y mínima dentro del dominio simulado.  $P(T)$  es la función de densidad de probabilidad estimada, para la que como se ha comentado se emplea una función de probabilidad del tipo beta:

$$P(T) = \frac{\varphi^{a-1} (1 - \varphi)^{b-1}}{\int_0^1 \psi^{a-1} (1 - \psi)^{b-1} d\psi} \quad (\text{Ec. 5.4.9})$$

donde

$$a = \tilde{\varphi} \left( \frac{\tilde{\varphi}(1-\tilde{\varphi})}{g} - 1 \right) \quad b = (1-\tilde{\varphi}) \left( \frac{\tilde{\varphi}(1-\tilde{\varphi})}{g} - 1 \right)$$

$$\varphi = \frac{T - T_{\text{inf}}}{T_{\text{sup}} - T_{\text{inf}}} \quad \tilde{\varphi} = \frac{\tilde{T} - T_{\text{inf}}}{T_{\text{sup}} - T_{\text{inf}}} \quad g = \frac{\tilde{T}''^2}{T_{\text{sup}} - T_{\text{inf}}} \quad (\text{Ecs. 5.4.10})$$

siendo  $\tilde{T}$  la temperatura media y  $\tilde{T}''^2$  la varianza de la temperatura, cuyo valor se obtiene por medio de la siguiente ecuación del transporte:

$$\frac{\partial \rho \tilde{T}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{T}''^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\bar{\mu}_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \tilde{T}''^2}{\partial x_j} \right\} + 2.0 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left( \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right)^2 - 2.0 \bar{\rho} \frac{\bar{\epsilon}}{k} \tilde{T}''^2 \quad (\text{Ec. 5.4.11})$$

### 5.4.3. MODELO DE FLAMÍCULAS (FLAMELET MODEL) O MODELO PDF (PROBABILITY DENSITY FUNCTION)

Se trata en este caso de un modelo dirigido especialmente a reacciones de combustión, asumiendo una cinéticas de reacción muy rápida. El modelo propone una reacción química que tiene lugar en películas muy finas llamadas flamículas, incluso en el caso de combustión turbulenta, tratada como un conjunto de flamículas laminares en el interior del flujo.

El modelo trabaja por medio de un método estadístico. La idea general del modelo es dar a cada punto del dominio analizado un valor para cada especie presente, en función del valor y la varianza de una nueva variable llamada “fracción de mezcla”, definida como la suma de todas las fracciones másicas elementales. La fracción másica elemental del elemento j se expresa como:

$$Z_j = \sum_{i=1}^n \frac{a_{ij} M_j}{M_i} Y_i \quad (\text{Ec. 5.4.12})$$

donde  $Y_i$  es la fracción másica de la sustancia i, M es la masa molecular de la especie o del elemento químico y  $a_{ij}$  es el número de elementos j en cada molécula de la sustancia i. De esta forma, dado que se basa en elementos en lugar de moléculas, esta fracción de mezcla no depende de las reacciones químicas que tengan lugar.

Para flujos turbulentos, se emplea la descomposición de Favre (explicar) para la resolución de la ecuación para la fracción de mezcla:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right\} \quad (\text{Ec. 5.4.13})$$

y para determinar el valor de su varianza, se emplea la siguiente expresión:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z}''^2)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z}''^2)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_{Z''^2}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \right\} + 2 \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi} \quad (\text{Ec. 5.4.14})$$

El término  $\tilde{\chi}$  se refiere a la velocidad de disipación escalar, modelizada empíricamente por medio de la siguiente expresión:

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}''^2 \quad (\text{Ec. 5.4.15})$$

Los valores de  $\sigma_Z$  y  $\sigma_{Z''^2}$  tienen por defecto un valor de 0.9; mientras que el parámetro  $C_\chi$  toma el valor 2.0.

Una vez obtenidos los valores para esta fracción de mezcla y su varianza, el programa va a obtener en función de ellos las fracciones másicas de cada componente que participa en la reacción como:

$$\tilde{Y}_i = \tilde{Y}_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{\chi}_{st}) = \int_0^1 Y_i(Z, \tilde{\chi}_{st}) \cdot P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2}(Z) \partial Z \quad (\text{Ec. 5.4.16})$$

Sin embargo, en lugar de realizar esta integración a lo largo de la simulación, el programa posee tablas de datos en las que esta integral ya ha sido resuelta para todo un mapa de valores de la fracción de mezcla y su varianza, empleando una función de densidad de probabilidad de tipo beta. De esta forma, simplemente hay que recurrir a estas librerías de datos e interpolar, simplificando el cálculo.

Para el caso en el que se pretenda simular combustiones con componentes premezclados, va a ser necesario modelizar el progreso global de la reacción. Para hacerlo, se va a incorporar una variable  $c$  que lo defina. El valor de  $c$  será nulo si se trata de componentes sin reaccionar y tomará valor 1 si se trata de materiales que han reaccionado por completo.



Se le otorga a esta variable una distribución bimodal, tomando valores 0 y 1 únicamente, al emplear la hipótesis de alta velocidad de reacción. De esta forma, la variable progreso de reacción promediada es la probabilidad de que la mezcla esté reaccionando en ese instante.

Para obtener la evolución de esta variable, se emplea la siguiente ecuación del transporte:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_c \quad (\text{Ec. 5.4.17})$$

### Velocidad de combustión laminar

Las librerías incorporan un valor para la velocidad de combustión laminar para la reacción,  $S_L$ , dado que es una propiedad de la mezcla de combustible únicamente. Se define como la velocidad del frente de llama respecto del fluido en la zona sin reaccionar. El programa ofrece diversas opciones a la hora de definir este valor.

Por un lado, permite incorporar una dependencia con el dosado, de forma que la llama se extinga más allá de los límites de inflamabilidad. También es posible hacerlo dependiente la temperatura y con la presión, por medio de expresiones del tipo Metghalchi-Keck:

$$S_L = S_L^0 \cdot \left( \frac{T_u}{T_{ref}} \right)^\alpha \cdot \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^\beta$$

$$\alpha = a_0 + a_1 \phi + a_2 \phi^2$$

$$\beta = b_0 + b_1 \phi + b_2 \phi^2 \quad (\text{Ecs. 5.4.18})$$

La definición del término  $S_L^0$  también permite cierta libertad, pudiendo emplear desde expresiones polinómicas hasta correlaciones por medio de funciones tipo beta.

## Velocidad de combustión turbulenta

Para cerrar el modelo propuesto en la expresión, el programa emplea el método del gradiente, definido en este caso como modelo de velocidad de combustión (Burning velocity model), que define de la siguiente forma el término fuente  $\omega_c$ :

$$\overline{\omega_c} = \overline{S_c} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\overline{\rho D}) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right] \quad (\text{Ec. 5.4.19})$$

Pudiendo expresar la expresión anterior como:

$$\frac{\partial(\overline{\rho \tilde{c}})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{c}})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right] + \overline{S_c} \quad (\text{Ec. 5.4.20})$$

Y definiendo finalmente el valor de  $Sc$  por medio de la expresión del gradiente como:

$$\overline{S_c} = \overline{\rho_u} S_T |\nabla \tilde{c}| \quad (\text{Ec. 5.4.21})$$

donde  $\rho_u$  es la densidad de la mezcla sin reaccionar. Por lo tanto, el único parámetro que queda por definir es el valor de  $S_T$ . Este valor representa la velocidad de combustión turbulenta, y de nuevo, el programa ofrece diversos métodos para su definición, relacionándola en general con la velocidad laminar de combustión. En este caso, las opciones están basadas en modelos más complejos que en el caso de la velocidad de combustión laminar. Las tres opciones más relevantes son las siguientes:

### Correlación de Zimont

$$S_T = A G u'^{3/4} S_L^{1/2} \lambda u'^{-1/4} l_t^{1/4} \quad (\text{Ec. 5.4.22})$$

### Correlación de Peters

$$S_T = S_L (1 + \sigma_t) \quad \text{con} \quad \sigma_t = -A \frac{1}{l_F} + \sqrt{\left( A \frac{1}{l_F} \right)^2 + \frac{u' l}{S_L l_F}} \quad (\text{Ec. 5.4.23})$$

### Correlación de Mueller

$$S_T = S_L (1 + \sigma_t) \left( 1 - \alpha \frac{\bar{\chi}}{\chi_q} \right) \quad \text{con} \quad \sigma_t = b_1 \frac{u'}{S_{L,st}} + b_2 \sqrt{\frac{u'}{S_{L,st}}} \quad (\text{Ec. 5.4.24})$$

Como se ha comentado, se trata de expresiones muy complejas, en las que no se va a profundizar en este momento.

## 5.5. MODELOS DE RADIACIÓN

Dado que hasta este momento el fenómeno de radiación no ha sido tenido en cuenta, se va a proceder aquí a realizar en primer lugar una breve descripción teórica del mismo, y más adelante se desarrollarán y analizarán las diferentes opciones de su modelización en programas de dinámica de fluidos computacional.

### 5.5.1. EL FENÓMENO DE LA RADIACIÓN

El fundamento teórico de la radiación fue establecido en 1864 por el físico James Clerk Maxwell, al postular que las cargas aceleradas o las corrientes eléctricas cambiantes dan lugar a campos eléctricos y magnéticos. Estos campos se denominan ondas electromagnéticas o radiación electromagnética y representan la energía emitida por la materia como resultado de los cambios en las configuraciones electrónicas de los átomos. Las ondas electromagnéticas se caracterizan por su frecuencia  $\nu$  y su longitud de onda  $\lambda$ , relacionadas entre sí por la expresión:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \quad (\text{Ec. 5.5.1})$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el medio. Las diferentes longitudes o frecuencias de las ondas radiadas conforman el conocido “espectro de ondas electromagnéticas” (Figura 5.5.1).

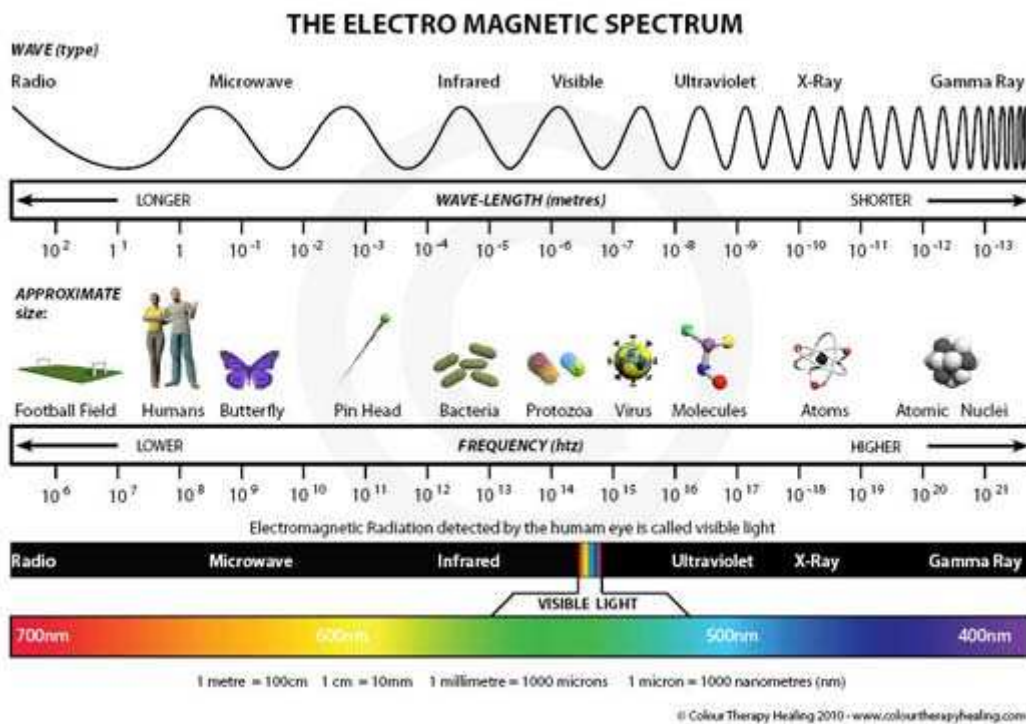


Figura 5.5.1.- Espectro electromagnético

El tipo de radiación electromagnética que resulta interesante para la transmisión de calor se conoce como radiación térmica, emitida como resultado de las transiciones energéticas de las moléculas, átomos y electrones de la materia (la temperatura también es un resultado de estas transiciones). Incluye toda la radiación visible e infrarroja, y además una parte de la radiación ultravioleta.

Concepto de cuerpo negro:

Se designa como cuerpo negro aquel “emisor y absorbedor perfecto de la radiación”, absorbiendo toda la radiación recibida y emitiendo radiación de forma uniforme en todas las direcciones. La cantidad de energía de radiación emitida por un cuerpo de este tipo fue determinada por Joseph Stefan en 1879:

$$E_b(T) = \sigma T^4 \quad (\text{Ec. 5.5.2})$$

donde  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann, con un valor de  $5.67 \cdot 10^{-8} \text{ [W m}^{-2} \text{ K}^{-4}]$ . Este poder de emisión de cuerpo negro,  $E_b$ , sería la máxima energía que puede radiar un cuerpo a una temperatura  $T$ .

Por otra parte, como se ha comentado, la temperatura y las ondas electromagnéticas son resultado de las transiciones energéticas de moléculas, átomos y electrones. Por lo tanto, es lógico que un cuerpo a una temperatura emita más energía por medio de unas longitudes de onda distintas a otro con una temperatura diferente. Este efecto queda representado al definir el poder de emisión espectral de cuerpo negro, que es la cantidad de energía de radiación emitida por un cuerpo negro a una temperatura absoluta  $T$  por unidad de tiempo, de superficie y de longitud de onda.

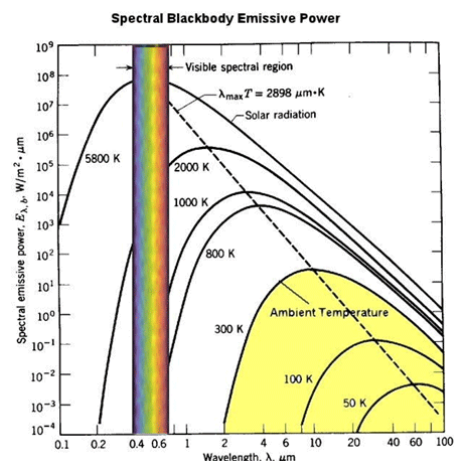


Figura 5.5.2.- Emisividad en función de la longitud de onda y la temperatura del foco emisor

Además, se define como intensidad de radiación emitida la velocidad a la cual la energía de radiación se emite en una dirección por unidad de área normal a la dirección y por unidad de ángulo sólido en torno a la misma.

En lo que respecta a la radiación emitida, la aproximación de cuerpo negro es un concepto ideal y no suele ser común en la práctica, donde las superficies reales emiten menos radiación que la que emitiría un cuerpo negro. De esta forma, se define el concepto de emisividad ( $\epsilon$ ) como la relación entre la radiación emitida por una superficie dada y la emitida por un cuerpo negro a la misma temperatura. Por tanto, una aproximación más

cercana a la realidad sería el concepto de cuerpo gris, que otorga a las superficies una emisividad pero sin dependencia de la longitud de onda.

De forma similar, en lo que concierne a la radiación absorbida por un cuerpo una superficie real no solo va a absorber radiación, sino que parte de esta será reflejada y en ocasiones, parte será transmitida a través del material; hechos que generan la definición de los conceptos de absorptividad ( $\alpha$ ), reflectividad ( $\rho$ ) y transmitividad ( $\tau$ ), siendo cada uno de ellos la relación entre la radiación absorbida, reflejada y transmitida y la radiación incidente respectivamente.

### Emisividad y absorptividad de gases y mezclas

En el presente proyecto, se va a trabajar principalmente con gases a elevadas temperaturas. Los gases, al igual que cualquier cuerpo con una temperatura superior al cero absoluto, radian energía. A su vez, cuando reciben una radiación, parte es absorbida, parte es reflejada y parte es transmitida a través del gas. Para su análisis, se pueden emplear los mismos conceptos de cuerpo negro y gris, si bien serán aproximaciones puesto que los coeficientes de absorptividad, reflectividad y transmitividad son función de la longitud de onda (Figura 5.5.3). Pero aún empleando la aproximación de cuerpo gris, la emisividad y absorptividad van a depender de la distribución de la masa, la temperatura, la presión y la composición del gas.

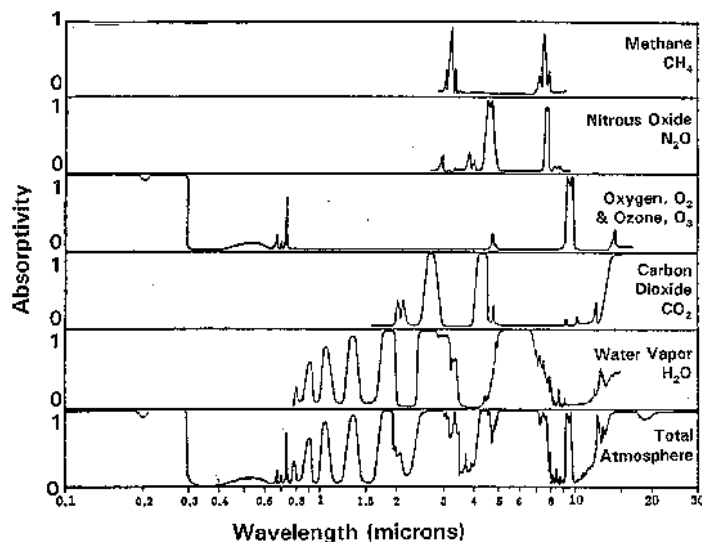


Figura 5.5.3.- Absorptividad de gases generadores de efecto invernadero

La herramienta CFD empleada dispone de un elevado número de opciones para determinar el proceso de transmisión de calor por radiación (a través de los modelos de radiación que serán analizados en el próximo apartado), pero también ofrece la posibilidad de definir las dependencias de los coeficientes de emisividad con la longitud de onda. Por otro lado, al definir mezclas, el módulo trabaja con valores medios en función de las diferentes composiciones de las mismas.

### 5.5.2. MODELADO DE LA RADIACIÓN

El modelado de la transmisión de calor por radiación busca, como principal objetivo, obtener un término fuente para la ecuación de la energía en cada punto del dominio analizado y determinar el flujo de energía radiada desde o hacia las paredes del mismo. Para determinar estos valores, se debe resolver la siguiente expresión, conocida como la ecuación de transferencia por radiación (RTE):

$$\frac{\partial I_v(r, s)}{\partial s} = \left( - (K_{av} + K_{sv}) I_v(r, s) + K_{av} I_b(v, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int_{4\pi} dI_v(r, s') \Phi(s * s') d\Omega' + S \right) \quad (\text{Ec. 5.5.2})$$

$I_v$  es la intensidad de radiación espectral, dependiente del vector posición ( $r$ ) y del vector dirección ( $s$ ). Los valores  $K_a$  y  $K_s$  son los coeficientes de absorción y de dispersión. El término  $I_b$  representa la intensidad de emisión del cuerpo negro y  $T$  la temperatura absoluta local. Por último,  $S$  es el término fuente y la función  $\Phi$  es una función de fase para la radiación recibida.

Se trata de una expresión integro-diferencial de primer orden para la función  $I_v$  en una dirección  $s$ . Por lo tanto, para su resolución van a ser necesarias condiciones de contorno para esta función. Sin embargo, el conjunto de estas condiciones de contorno y la expresión anterior generan un sistema con dependencia en las tres coordenadas del espacio, dos vectores de posición en cada punto y la frecuencia, que puede ser resuelto pero a un coste computacional altísimo. Es por ello que se buscan simplificaciones y aproximaciones a esta expresión por medio de modelos más sencillos.

La herramienta ANSYS CFX dispone de todo un abanico de posibles modelos de radiación para aproximar la solución de la expresión anterior:

- Modelo Rosseland
- Modelo de aproximación diferencial o P1
- Modelo de transferencia discreta
- Modelo Monte Carlo

Los dos últimos son los modelos recomendados por el propio programa ANSYS CFX para la modelización del fenómeno de la radiación en procesos de combustión. A continuación, se realiza un breve resumen del funcionamiento de cada uno de ellos, enunciando sus principales características y problemas.

## Modelos para la transferencia de calor por radiación

### Modelo Rosseland

Este modelo simplifica todo el sistema anterior introduciendo en la ecuación del transporte para la energía un nuevo término fuente:

$$q_r = -\int_0^\infty \frac{4}{3\beta - CK_s} \nabla E_{bv} dv \quad (\text{Ec. 5.5.3})$$

siendo  $\beta$  el coeficiente de extinción (debida a la absorción y la dispersión) y la función  $E_{bv}$  la emisión del cuerpo negro:

$$E_b(v, T) = \pi I_b(v, T) = \frac{2\pi v^2}{c^2} \frac{n^2 h v}{e^{(hv/k_B T)} - 1} = n^2 \sigma T^4 \left( \frac{h}{kT} \right) \left( \frac{15}{\pi^4} \frac{x^3}{e^x - 1} \right) \quad (\text{Ec. 5.5.4})$$

El valor de  $n$  representa el índice de refracción,  $h$  y  $c$  la constante de Planck y la velocidad de la luz en el vacío y  $k_B$  la constante de Boltzmann,  $1.3806 \cdot 10^{-23}$  [J K<sup>-1</sup>]. La variable  $x$  representa el valor del exponente,  $x = hv/k_B T$ , y por último, el término  $\sigma$  representa la expresión:

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} = 5.6704 \cdot 10^{-8} [\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}] \quad (\text{Ec. 5.5.5})$$

conocida como la constante de Stefan-Boltzmann. Integrando esta expresión para la emisión del cuerpo negro en todo el espectro de frecuencias a las que emite el mismo, se obtiene la expresión para el poder de emisión del cuerpo negro:

$$E_b(T) = n^2 \sigma T^4 \quad (\text{Ec. 5.5.6})$$

El modelo Rosseland es muy interesante dado que no introduce ninguna ecuación de transporte nueva. Sin embargo, solamente obtiene resultados adecuados para dominios ópticamente gruesos (aquellos en los que el gas es capaz de absorber la mayor parte de la radiación antes de que esta lo atraviese).

### Modelo P1

También conocido como modelo de aproximación diferencial, este modelo asume que la intensidad de radiación es independiente de la dirección en un punto dado del dominio. Como en el modelo anterior, introduce una expresión a la ecuación del transporte de la energía, pero en este caso de la siguiente forma:

$$q_{rv} = -\frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \nabla G_v \quad (\text{Ec. 5.5.7})$$

siendo A un coeficiente para representar la anisotropía. En este caso,  $G_v$  representa la radiación incidente:

$$G_v \equiv \int I_v d\Omega_s \quad (\text{Ec. 5.5.8})$$

Este modelo está añadiendo una nueva ecuación del transporte, con el correspondiente coste computacional. Aunque en ocasiones el modelo es adecuado, existen casos en los que los resultados son más variables de lo deseado.

### Modelo de transferencia discreta

El modelo de transferencia discreta supone que la dispersión es isotrópica, permitiendo simplificar la RTE por medio de esta hipótesis a la siguiente forma:

$$\frac{\partial I_v(r, s)}{\partial s} = \left( - (K_{av} + K_{sv}) I_v(r, s) + K_{av} I_b(v, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int_{4\pi} dI_v(r, s') d\Omega' + S \right) \quad (\text{Ec. 5.5.9})$$

Además, suponiendo un sistema aproximadamente homogéneo, se puede asumir que:

$$I_v(r) \approx I_v(r + dr) \quad q_v^R(r) \approx q_v^R(r + dr) \quad (\text{Ec. 5.5.10})$$

Y de esta forma obtener una expresión como la siguiente

$$I_v(r, s) = I_{v0} e^{-(K_{av} + K_{sv})s} + I_{bv} (1 - e^{-K_{av}s}) + K_{sv} \bar{I}_v \quad (\text{Ec. 5.5.11})$$

donde  $I_{v0}$  es la intensidad que abandona el contorno. A partir de esta expresión, el modelo integra I sobre el ángulo sólido pero en puntos discretos, obteniendo la radiación incidente y el flujo de calor por radiación, y emplea la hipótesis de homogeneidad para aplicar la solución al dominio completo.

Para hacerlo, el modelo emplea una serie de “rayos”, desde las condiciones de contorno, que se discretizan en función de las intersecciones con los elementos del dominio. En estos puntos de discretización es donde se realiza la integración que se ha comentado anteriormente.

El coste añadido por este tipo de modelos es en general mayor que el de los casos anteriores, aunque depende del número de “rayos” empleado para la simulación. Por otra parte, es necesario que en el interior de los elementos empleados se pueda emplear la hipótesis de homogeneidad, por lo que el tamaño del elemento empleado deberá escogerse de acuerdo a este hecho. A pesar de todo, es uno de los modelos más empleados para modelizar la radiación en procesos de combustión.



## Modelo Monte Carlo

El modelo Monte Carlo se asemeja al modelo de transferencia discreta, ofreciendo una perspectiva nueva en la simulación de la transmisión de calor por radiación. El modelo lanza fotones según la energía de la fuente de emisión y los va rastreando, modificando los valores de esta energía en función de la situación que vayan encontrando a lo largo de su camino, y modificando a su vez los términos fuente en las expresiones del transporte para la energía.

A partir de las “historias” obtenidas para los fotones lanzados, el modelo es capaz de obtener la intensidad de radiación, la intensidad absorbida y dispersada en cada elemento, y de esta forma, todos los valores necesarios para resolver la simulación.

Dado el gran número de historias necesarias para poder aproximar de forma correcta la radiación, el coste computacional es elevado, y en ocasiones se recomienda emplear un mallado más grueso para el fenómeno de radiación si se escoge este tipo de modelo. De nuevo, este modelo se emplea a menudo para la modelización del fenómeno de radiación en procesos de combustión.

### Dependencia con la frecuencia

Tal y como se ha visto en la introducción a los modelos de radiación, esta no solo depende de la temperatura de los focos emisores, sino también de su frecuencia. Para tener en cuenta esta situación, el módulo ANSYS-CFX no solo incorpora los modelos comentados anteriormente, sino que permite definir modelos con una emisividad variable en función de esta variable.

- Modelo gris: asume que todos los parámetros relacionados con la radiación son constantes en todo el espectro de frecuencias para un determinado gas.
- Modelo multibanda: divide el espectro de frecuencias en diferentes intervalos en los que los parámetros de radiación se mantienen constantes. El principal problema es que el coste computacional se eleva proporcionalmente al número de bandas en que se divide el espectro.
- Modelo multigris: En este caso, se define una dependencia de la emisividad con la presión parcial (p) y la distancia de transmisión (L), empleando la ecuación:

$$\epsilon_g = \sum_{i=1}^{N_g} a_{gi} (1 - e^{-k_i L p}) \quad (\text{Ec. 5.5.12})$$

El modelo se ajusta en función de resultados experimentales.

Como se comentará más adelante, a la hora de la validación de los modelos de combustión, será complicado determinar un mejor o peor ajuste dado el error experimental cometido. Es por ello que se empleará preferiblemente un modelo gris para los gases que participen en las simulaciones, ya que la mayor precisión obtenida por los otros modelos no se va a distinguir.

## 6. PRESENTACIÓN DEL MOTOR

En este capítulo se va a realizar un breve resumen sobre las principales características de los motores de combustión alternativa y del prototipo del que dispone el grupo de investigación.

### 6.1. DESCRIPCIÓN BÁSICA DE UN MCIA

Un motor de combustión interna alternativo básicamente está constituido por un volumen variable formado por unas fronteras fijas, el cilindro y la culata, y una frontera móvil, el émbolo o pistón que desliza por las paredes del cilindro, sometido a un movimiento alternativo. Dentro de ese volumen variable evoluciona el fluido de trabajo, que realiza el ciclo. El movimiento alternativo del pistón se transforma en circular por medio de un mecanismo biela-manivela, constituido por la biela y la muñequilla del cigüeñal. El cigüeñal es el eje donde obtenemos el trabajo mecánico directamente utilizable. En la figura 6.1.1. se pueden ver los elementos principales de un motor.

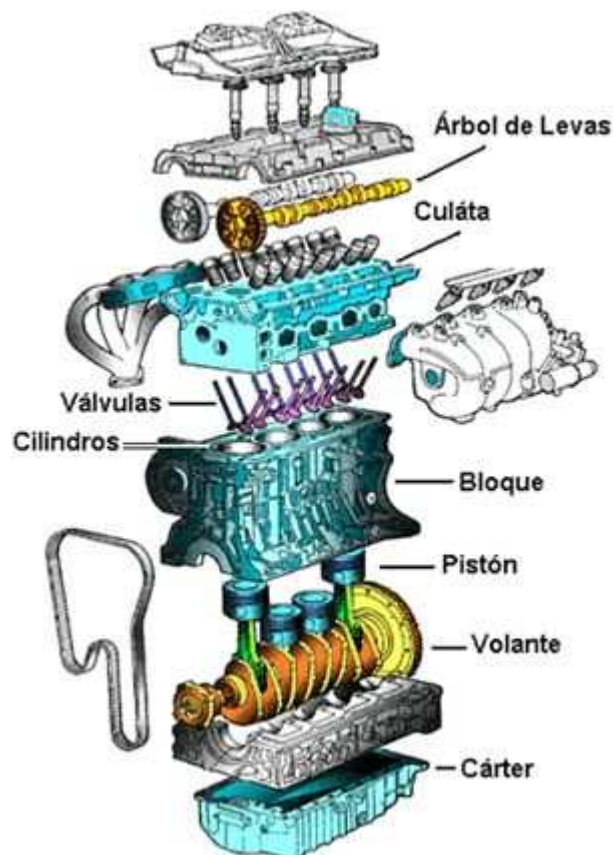


Figura 6.1.1. Elementos principales de un MCIA

Existen dos tipos básicos de motores de combustión: motores de encendido provocado (MEP) y motores de encendido por compresión o diesel (MEC). En esencia funcionan igual, la única diferencia es que en los MEP entra una mezcla de aire y

combustible por el colector de admisión (en los actuales motores de inyección directa en la admisión entra aire y se inyecta el combustible dentro de la cámara de combustión en la carrera de admisión y en la de compresión), que se comprime en el cilindro. Por medio de la energía aportada por la chispa de una bujía, se inicia la combustión que libera la energía química del combustible, a partir de la que se obtiene el trabajo mecánico en el cigüeñal.

Sin embargo, en los MEC solamente entra aire por el colector de admisión. Este aire se comprime fuertemente, con lo que aumenta notablemente su presión y temperatura, de forma que el combustible que se inyecta a continuación, al contacto con el aire, se inflama, originándose de este modo la combustión. La energía química del combustible se transforma en trabajo útil en el eje del cigüeñal.

Tanto los MEP como los MEC pueden realizar el ciclo de trabajo en 2 vueltas del cigüeñal que corresponden a 4 carreras del pistón, es lo que se llama ciclo de 4 tiempos, o en una vuelta del cigüeñal y 2 carreras del pistón, en lo que se llama ciclo de 2 tiempos.

A partir de este momento, el presente proyecto se centrará en motores de encendido provocado de 4 tiempos, ya que este es el tipo de motor que se está estudiando.

### 6.1.1. PARÁMETROS FÍSICOS Y DIMENSIONALES

A continuación se listan los principales parámetros físicos y dimensionales de un MCI y que son de interés para el presente proyecto.

- **Punto Muerto Inferior (PMI):** punto muerto mecánico del mecanismo pistón-biela-manivela generado cuando el pistón se encuentra en la posición más alejada de la culata, generando el volumen máximo del recinto de combustión.
- **Punto Muerto Superior (PMS):** punto muerto mecánico del mecanismo pistón-biela-manivela generado cuando el pistón se encuentra en la posición más cercana a la culata, generando el volumen mínimo del recinto de combustión (volumen de la cámara de combustión).
- **Diámetro,  $D$ :** es el diámetro del cilindro.
- **Carrera,  $S$ :** recorrido del pistón entre el punto muerto superior, PMS, y el punto muerto inferior, PMI.
- **Cilindrada unitaria,  $V_D$ :** volumen que hay entre los dos puntos muertos, o el que desplaza el pistón a lo largo de la carrera.
- **Cilindrada total,  $V_T$ :** cilindrada unitaria por el número de cilindros.
- **Volumen de la cámara de combustión,  $V_C$ :** volumen encerrado entre el pistón y la culata cuando el pistón está en PMS.
- **Volumen total del cilindro,  $V_C + V_D$ :** volumen encerrado por el pistón el cilindro y la culata cuando el pistón está en PMI.

- **Relación de compresión volumétrica,  $r$ :** relación entre el volumen total del cilindro ( $V_C + V_D$ ) y el volumen de la cámara de combustión ( $V_C$ ).

$$r = \frac{V_D + V_C}{V_C} \quad (\text{Ec. 6.1.1})$$

### 6.1.2. PARÁMETROS OPERATIVOS

A continuación se listan los principales parámetros operativos de un MCIA y que serán empleados en los siguientes apartados del presente proyecto.

- **Régimen de revoluciones:** velocidad de giro del cigüeñal expresada, generalmente, en revoluciones por minuto (rpm), que determina el valor de potencia que se puede conseguir con el motor si se mantiene la realización del ciclo termodinámico de modo adecuado.
- **Dosado absoluto,  $A$ :** es la relación entre la masa de aire seco y la masa de combustible con la que funciona el motor. (También se puede trabajar con relaciones combustible-aire,  $F$ ).
- **Dosado estequiométrico,  $A_e$ :** es la relación aire-combustible correspondiente a una combustión ideal en la que se quemará completamente el combustible con la mínima cantidad de aire seco posible, es decir, la relación combustible-aire que corresponde a las proporciones estequiométricas de la reacción química ideal de combustión.
- **Dosado relativo,  $\lambda$ :** es la relación entre el dosado absoluto y el dosado estequiométrico.
- **Poder calorífico inferior del combustible,  $H_c$ :** es la cantidad de calor producido por la combustión teórica y completa de una unidad de masa o volumen de combustible sin que condense el vapor de agua que contienen los productos de la combustión. Como en los MCIA la temperatura de los gases de la combustión es muy superior a la del ambiente, no se considera la condensación del vapor de agua, con lo que siempre se utiliza el poder calorífico inferior.

### 6.1.3. RELACIONES

En el presente apartado se citan las relaciones más importantes de las MCIA.

- **Potencia indicada:** es la potencia que se obtiene en el ciclo indicado, siendo  $W_i$  el trabajo indicado del ciclo.

$$N_i = \frac{1}{2} Z W_i n \quad (\text{Ec. 6.1.2})$$

- **Potencia efectiva:** es la potencia que se obtiene en el eje del cigüeñal, y es el resultado de restar a la potencia indicada la potencia de las pérdidas mecánicas.

$$N_e = N_i - N_{pm} \quad (\text{Ec. 6.1.3})$$

- **Presión media indicada:** se define como la presión constante, que durante una carrera, proporciona un trabajo igual al trabajo indicado del ciclo. Se puede expresar también en función de la potencia.

$$p_{mi} = \frac{W_i}{V_D} = \frac{N_i}{\frac{1}{2}nV_T} \quad (\text{Ec. 6.1.4})$$

- **Presión media efectiva:** se expresa también en función de la potencia y se tiene además la relación de presiones medias análoga a la de las potencias.

$$p_{me} = \frac{N_e}{\frac{1}{2}nV_T} \quad p_{me} = p_{mi} - p_{mpm} \quad (\text{Ecs. 6.1.5})$$

- **Par motor indicado/efectivo:** se define como la potencia indicada/efectiva dividida por la velocidad angular del motor. Se puede observar como analizar la presión media indicada/efectiva y el par motor indicado/efectivo es lo mismo, ambos son proporcionales.

$$M_i = \frac{N_i}{2\pi n} \quad M_e = \frac{N_e}{2\pi n} \quad (\text{Ecs. 6.1.6})$$

- **Rendimiento indicado/efectivo:** es la relación entre la potencia indicada y la potencia calorífica que teóricamente puede proporcionar el combustible que consume el motor, donde  $\dot{m}_f$  es el gasto de combustible.

$$\eta_i = \frac{N_i}{\dot{m}_f H_c} \quad \eta_e = \frac{N_e}{\dot{m}_f H_c} \quad (\text{Ecs. 6.1.7})$$

## 6.2. CICLO TERMODINÁMICO DE UN MEP

Se va a estudiar en el presente apartado el ciclo teórico de un MEP de 4 tiempos. El ciclo teórico es aquél en el que las válvulas se abren y cierran instantáneamente en los puntos muertos y la combustión se realiza también instantáneamente.

El ciclo teórico se realiza en 4 fases, figura 6.2.1:

- **Admisión:** el pistón parte de PMS y va hacia PMI con la válvula de admisión abierta y la de escape cerrada. En estas condiciones al cilindro entra una mezcla de aire y combustible. El cigüeñal da media vuelta.
- **Compresión:** el pistón va de PMI a PMS con las válvulas cerradas, comprimiéndose la mezcla. El cigüeñal da media vuelta.
- **Combustión-Expansión:** con el pistón en PMS al final de la compresión salta la chispa en la bujía y se origina la combustión. El aumento de presión y temperatura en el cilindro debido a la liberación de la energía química del combustible hace que el pistón se desplace desde PMS a PMI en la carrera de expansión. Es la única carrera útil, por lo que se llama carrera motriz. El cigüeñal de media vuelta.
- **Escape:** el pistón se desplaza de PMI a PMS con la válvula de escape abierta, de forma que los productos de la combustión son expulsados al exterior por el colector de escape. El cigüeñal da media vuelta.

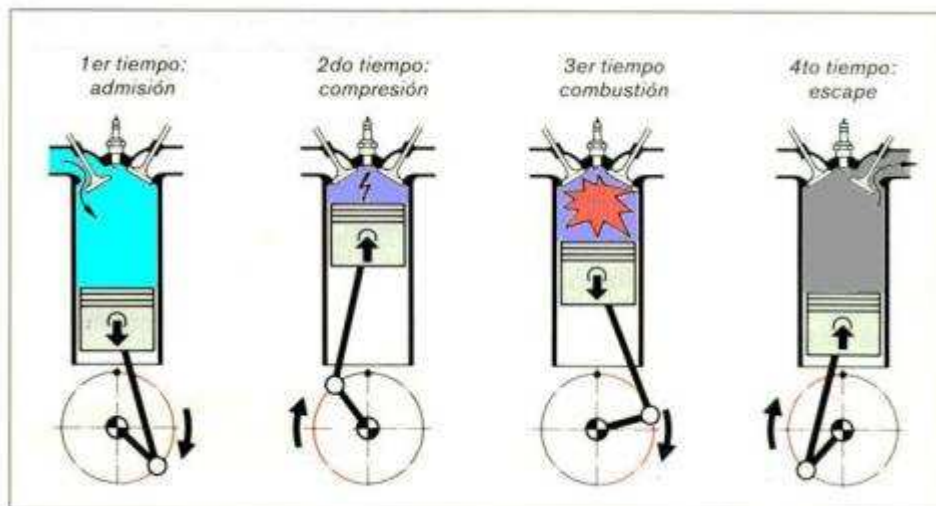


Figura 6.2.1. Ciclo de trabajo de un MEP

Sin embargo, los motores alternativos no funcionan según este ciclo teórico. Las válvulas no se abren y cierran en los puntos muertos, sino que se empiezan a abrir un poco antes y se terminan de cerrar un poco después de que el pistón haya pasado por los puntos muertos. De esta forma, se definen los avances a la apertura de la admisión (AAA) y del

escape (AAE) y los retrasos del cierre de la admisión (RCA) y del escape (RCE), los cuales optimizan el llenado y el vaciado del cilindro en función del ángulo de giro del cigüeñal. Cabe señalar que durante el AAA y el RCE las válvulas de admisión y escape están simultáneamente abiertas. Este fenómeno se denomina cruce de válvulas.

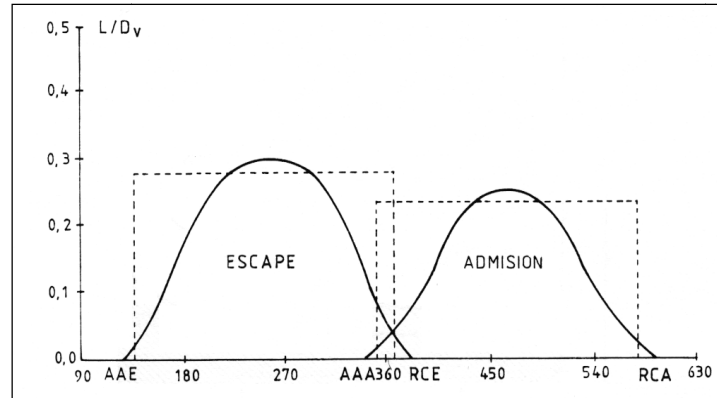


Figura 6.2.2. Movimiento de las válvulas y cruce de válvulas

Todos ellos tendrán un valor de grados de giro del cigüeñal respecto a los puntos muertos, AAA y RCE respecto PMS y RCA y AAE respecto a PMI. Estos cuatro ángulos se denominan cotas de reglaje de la distribución. Se caracterizan por ser fijos en un motor y se diseñan buscando el óptimo llenado del cilindro y el menor trabajo de escape, para unas condiciones de funcionamiento del motor (para un régimen de revoluciones concreto). En figura 6.2.3 se pueden comparar los diagramas de distribución teórico y real.

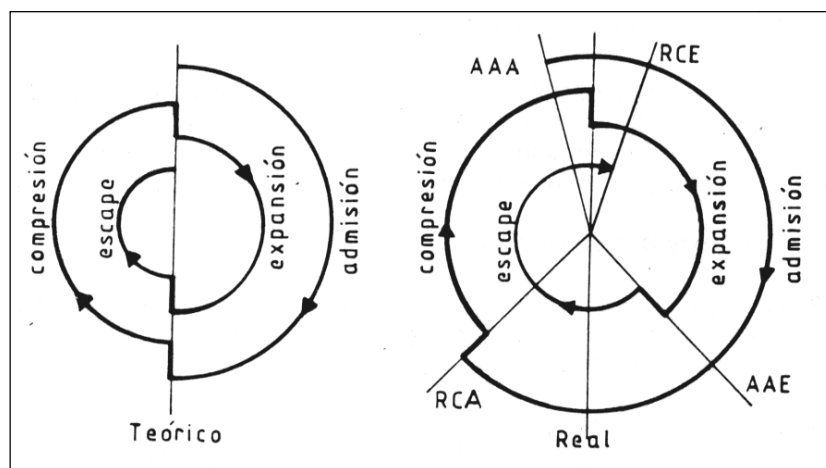


Figura 6.2.3. Ciclo teórico vs. Ciclo real



A continuación se va a analizar más detenidamente cada uno de estos ángulos:

- El **AAA** se utiliza porque la válvula de admisión no se abre instantáneamente, sino gradualmente. Además como hay un flujo de gases de escape, se crea una depresión en el cilindro que favorece la admisión de la mezcla fresca. Suele tener un valor entre  $5^\circ$  y  $20^\circ$ .
- El **RCA** se utiliza porque la válvula no se cierra instantáneamente y además, como hay un flujo de gases frescos que está entrando al cilindro cuando el pistón pasa por PMI, conviene mantener la válvula abierta mientras siga entrando la mezcla fresca, aunque el pistón esté en carrera de compresión. Cuando el flujo se invierte es cuando hay que cerrar la válvula. De esta forma se mejora el llenado del cilindro. Suele oscilar entre  $30^\circ$  y  $60^\circ$ .
- El **AAE** se utiliza porque la válvula de escape tampoco se abre instantáneamente sino gradualmente. Además, si la válvula abriese a partir del paso del pistón por PMI al final de la carrera de expansión, el trabajo que tendría que hacer el pistón sería relativamente grande, al ser la presión en el cilindro mayor que la atmosférica. Si se abre antes de que el pistón llegue a PMI al comenzar la carrera de escape, la presión en el cilindro será del orden de la atmosférica, y el trabajo de escape para barrer los gases quemados será mucho menor. Suele ser un ángulo comprendido entre  $40^\circ$  y  $70^\circ$ .
- El **RCE** se utiliza porque, al no cerrarse instantáneamente la válvula de escape y al estar abierta la válvula de admisión, el flujo de gases frescos que entran ayuda a barrer los quemados. El cruce de válvulas puede hacer que a determinado régimen de funcionamiento salgan gases frescos por el escape. Este ángulo suele tener un valor entre  $0^\circ$  y  $15^\circ$ .

La otra razón principal por la que un motor real no sigue el ciclo teórico es que la combustión no es instantánea, por lo que la chispa salta un poco antes de alcanzar el PMS. Se define el avance al encendido como el ángulo que gira el cigüeñal desde que salta la chispa hasta que el pistón llega a PMS de forma que se adelanta el comienzo de la combustión, logrando así que el ángulo de combustión quede centrado respecto a P.M.S. y que los picos de presión se den en el momento más adecuado de la carrera del pistón. Este ángulo es variable, dependiendo fundamentalmente del régimen de giro y del grado de carga. Varía entre  $0^\circ$  y  $50^\circ$ , según las condiciones de funcionamiento del motor.

### 6.3. COMBUSTIÓN EN LOS MEP

La combustión en un motor de encendido provocado comienza con el salto de una chispa entre los electrodos de la bujía. La mezcla que la rodea reacciona y la combustión comienza a propagarse entonces por medio de un frente de llama. Este frente de llama es la zona en la que está teniendo lugar la reacción de oxidación y separa los productos de la combustión de la mezcla fresca. Dado que este proceso no es instantáneo, como se acaba de comentar, es necesario adelantar el inicio de la combustión antes de la llegada del pistón a PMS, de modo que el pico de presión se produzca en el momento más adecuado.

El frente de llama avanza con una velocidad respecto a la cámara de combustión, llamada velocidad del frente de llama, que es suma de dos velocidades, la velocidad de llama o velocidad de combustión, velocidad con la que progresa la reacción química de oxidación, es decir la velocidad del frente de llama respecto a la mezcla sin quemar y la velocidad de arrastre o velocidad debida a que los productos quemados se dilatan comprimiendo a la mezcla que queda por quemar. En cada instante la presión en la cámara de combustión es prácticamente uniforme en toda la cámara.

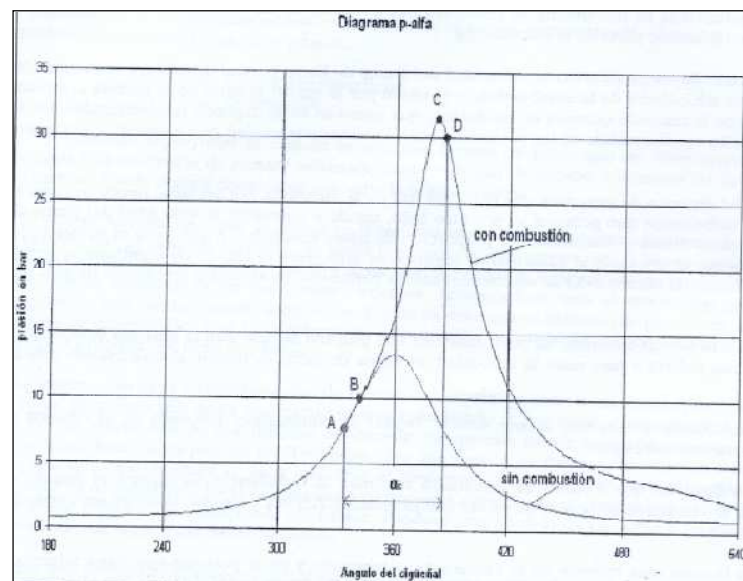


Figura 6.3.1. Diagrama p-alfa de un MEC

La figura 6.3.1 representa la presión durante las fases de compresión y combustión en el mismo cilindro con combustión y sin ella. En los instantes iniciales, la combustión queda definida por una combustión laminar (zona A-B), hasta que alcanza zonas donde existe mayor turbulencia. Esta turbulencia aumenta la masa de combustible que reacciona al aumentar el área del frente de reacción, aumentando por tanto la velocidad de arrastre, y la reacción pasa a ser una combustión turbulenta (zona B-C). Finalmente, en los últimos instantes, la presencia de las paredes del cilindro disminuye la turbulencia y la combustión vuelve a ser laminar (zona C-D).

La velocidad del frente de llama determina como se libera la energía del combustible y, por tanto, la variación de presión en el cilindro con el giro del cigüeñal, durante el proceso de combustión, característica que está ligada directamente al rendimiento y a la marcha más o menos suave del motor.

Los factores principales que afectan a la combustión, y por tanto, al avance al encendido, son los siguientes:

- **Turbulencia:** incrementa la velocidad de arrastre, y por tanto, la velocidad de propagación de la reacción. Aumentará con el régimen de giro del motor.
- **Grado de carga:** aumentará tanto la concentración de sustancias reaccionantes como la presión en el cilindro, aumentando tanto la velocidad de llama como la de arrastre.
- **Régimen de giro:** afectará, como se ha comentado, a la turbulencia, pero también disminuirá la presencia de mezcla fresca al aumentar los gases residuales, lo que disminuirá la velocidad de llama.
- **Dosado:** determinará la velocidad de combustión laminar, siendo máxima para valores cercanos al estequiométrico.
- **Recorrido del frente de llama:** Cuanto menor sea, la combustión se realizará de forma más rápida y por tanto, menor serán el ángulo de combustión y el avance al encendido.

Por lo tanto, la velocidad de combustión para un motor dado dependerá de dos aspectos principales: el régimen de giro del motor y el dosado empleado en la mezcla introducida al cilindro.

## 6.4. PÉRDIDAS DE CALOR

La refrigeración de los motores térmicos alternativos no viene impuesta por razones termodinámicas, siendo deseable, desde este punto de vista, que la evolución del fluido en el motor sea adiabática. La transmisión de calor al medio refrigerante, que se conceptúa como una pérdida, viene impuesta por exigencias de tipo mecánico, es decir, por la necesidad de mantener acotada la temperatura de los diversos elementos del motor compatible con la correcta lubricación, las dilataciones moderadas, etc.

A título orientativo se indican a continuación los límites dentro de los cuales han de mantenerse las temperaturas en las caras internas de las principales piezas del motor:

**Cilindro.** La temperatura máxima aconsejable para el interior de la pared es del orden de 423 y 473 K (150 y 200 °C). A temperaturas superiores pueden verificarse cambios del estado químico y físico del aceite lubricante, y como consecuencia, desgastes anormales del cilindro y del pistón, excesiva formación de depósitos carbonosos, agripamientos, etc.

**Pistón.** La temperatura en el punto más caliente, es decir, en el centro de la cabeza del pistón, se pueden alcanzar temperaturas de hasta 623 K (350 °C). La refrigeración en la mayor parte de los casos se produce por conducción de calor a la pared del cilindro y de ésta al fluido refrigerante. Un recalentamiento excesivo del pistón reduce su resistencia mecánica, por estar construido en aleación ligera.

**Cámara de combustión.** La temperatura sobre la superficie interior en las zonas más calientes es del orden de los 523 K (250 °C). Dentro de este límite se consigue asegurar una eficaz extracción de calor de los asientos de las válvulas y de la bujía y un correcto desarrollo del ciclo térmico del motor. Es importante obtener una cierta uniformidad de temperatura para evitar la formación de puntos calientes que puedan dar lugar a anomalías de funcionamiento como el pre-encendido y la detonación.

**Válvula de escape.** Con los materiales empleados normalmente la temperatura máxima admisible se encuentra comprendida entre los 973 y 1023 K (700 y 750 °C). A temperaturas superiores la resistencia mecánica y a la corrosión se reducen de manera imponente. La refrigeración se produce únicamente por conducción desde la válvula al asiento y de esta al refrigerante. No hay problemas para la válvula de admisión porque ésta está refrigerada por la mezcla o el aire que entra.

Aunque la refrigeración viene obligada por las razones antes señaladas, lleva consigo las correspondientes pérdidas de calor con la consiguiente influencia negativa sobre el rendimiento. Conviene recordad al respecto que las pérdidas de calor repercuten en mayor o menor medida en el rendimiento según el punto de la evolución en que tienen lugar. Las pérdidas de calor que se producen en las proximidades del punto muerto superior afectan más al rendimiento que las que tienen lugar, por ejemplo, al final de la expansión, mientras que las que se producen durante el proceso de escape no tienen influencia sobre el rendimiento.

### 6.4.1. ECUACIONES GENERALES PARA DETERMINAR LAS PÉRDIDAS DE CALOR

Para hacer el análisis de las pérdidas de calor en un motor se podrían aplicar las ecuaciones generales de la transmisión de calor entre el fluido y el refrigerante. El calor pasa por convección de los gases de combustión a la pared metálica, por conducción a través de la pared, y otra vez por convección de ésta al fluido refrigerante. La cantidad de calor que atraviesa la pared metálica es directamente proporcional al área involucrada, a la diferencia de temperaturas entre las dos superficies y a la conductividad del metal; en inversamente proporcional a la longitud del recorrido, es decir, al espesor de la pared.

Suponiendo flujo unidimensional, las ecuaciones generales de la transmisión del calor referidas a un elemento de pared, figura 6.4.1, tienen por expresión:

- Calor transmitido por convección desde el fluido a la pared por unidad de tiempo y de superficie en el lado del gas:

$$\frac{\dot{Q}}{A_g} = h_g [T_g - T_{sg}] \quad (\text{Ec. 6.4.1})$$

- Calor transmitido por conducción a través de la pared por unidad de tiempo y de superficie en el lado del gas:

$$\frac{\dot{Q}}{A_g} = \frac{k_w}{e} [T_{sg} - T_{sr}] \quad (\text{Ec. 6.4.2})$$

- Calor transmitido por convección desde la pared al fluido refrigerante por unidad de tiempo y de superficie en el lado del refrigerante:

$$\frac{\dot{Q}}{A_r} = h_r [T_{sr} - T_r] \quad (\text{Ec. 6.4.3})$$

en donde:

$\dot{Q}$  - calor transmitido por unidad de tiempo en el elemento de superficie considerado

$A_g$  - superficie de transmisión en el lado del gas

$A_r$  - superficie de transmisión en el lado del refrigerante

$T_g$  - temperatura del gas

$T_{sg}$  - temperatura de la pared en el lado del gas

$T_{sr}$  - temperatura de la pared en el lado del refrigerante

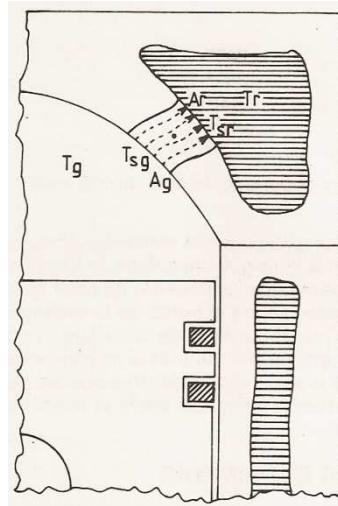
$T_r$  - temperatura del refrigerante

$h_g$  - coeficiente de película gas-pared

$h_r$  - coeficiente de película pared-refrigerante

$k_w$  - coeficiente de conductividad de la pared

$e$  - espesor de la pared



**Figura 6.4.1 Sección de un motor  
 con la nomenclatura utilizada**

La aplicación de estas ecuaciones al conjunto del motor presenta fundamentalmente los siguientes inconvenientes y dificultades:

1. La temperatura de los gases varía con el tiempo, no es la misma en admisión que en compresión, expansión o escape, y tampoco es la misma en todo el volumen del gas.
2. La temperatura del refrigerante varía con el tiempo, pero de una manera menos acusada.
3. Las superficies de transmisión varían con el tiempo, debido al movimiento del pistón.
4. Los valores de los coeficientes de convección entre los gases y las paredes del cilindro y las paredes del cilindro y el refrigerante varían de unos puntos a otros, debido a las diferencias locales en las condiciones termodinámicas, propiedades físicas, etc.
5. Los valores de la conductividad térmica son muy variables debido a la variación de espesores y materiales.
6. No se tienen en cuenta las pérdidas por radiación, que aunque son pequeñas, varían entre el 1% y el 5% de las pérdidas totales.

Aunque se aplicaran estas ecuaciones localmente, la determinación de las pérdidas de calor por este procedimiento resulta muy laboriosa, incluso con la ayuda de un ordenador.

## 6.4.2. ECUACIONES SEMIEMPÍRICAS PARA DETERMINAR EL CALOR TRANSMITIDO

Debido a la complejidad del proceso de cálculo, varios autores han propuesto ecuaciones empíricas para calcular las pérdidas de calor por unidad de tiempo, tanto por zonas como globales del motor, que se pueden utilizar para realizar cálculos paso a paso de la evaluación del fluido en el motor, modelización del proceso de combustión, etc.

### 1. Ecuación de Eichelberg

Parte, como en la práctica totalidad de las ecuaciones de transmisión de calor en un motor, de una ecuación de tipo convectivo.

$$\dot{Q} = h_g A [T_g - T_w] \quad (\text{Ec. 6.4.4})$$

en donde:

$h_g$  - coeficiente instantáneo de película del gas.

$A$  - superficie expuesta a la transmisión de calor.

$T_g$  - temperatura media instantánea del gas.

$T_w$  - temperatura media de las paredes del motor.

Para la determinación del coeficiente de película instantáneo, Eichelberg corrigió empíricamente la ecuación propuesta por Nusselt, aplicable a cámaras esféricas con transmisión de calor debida a convección libre, obteniendo la expresión:

$$h_g = 7,8 \cdot 10^{-3} \sqrt[3]{c_m} \sqrt{p T_g} \quad (\text{Ec. 6.4.5})$$

en donde:

$h_g$  - viene expresado en  $W / m^2 \text{ } ^\circ C$

$c_m$  - viene expresado en  $m / s$

$p$  - viene expresado en  $N / m^2$

$T_g$  - viene expresado en  $K$

La ecuación de Eichelberg es una ecuación que combina la sencillez con una exactitud razonable, por lo que se utiliza en muchos casos.

## 2. Ecuación de Woschni

La ecuación de Woschni parte de la misma expresión general de transmisión de calor por convección, pero el valor del coeficiente de película se obtiene a partir de la ecuación adimensional de transmisión de calor en conductos, de la forma:

$$Nu = K Re^{0,8} \quad (\text{Ec. 6.4.6})$$

donde se utiliza como longitud característica el diámetro del cilindro. A partir de la ecuación anterior realizando una serie de hipótesis, y ajustando los valores experimentales, Woschni propone la ecuación:

$$h_g = 1,3 \cdot 10^{-2} D^{-0,2} p^{0,8} T_g^{-0,53} \left[ C_1 c_m + C_2 \frac{V_T T_{CA}}{p_{CA} V_{CA}} (p - p_0) \right]^{0,8} \quad (\text{Ec. 6.4.7})$$

siendo:

$h_g$  - coeficiente de película en  $W / m^2 \text{ } ^\circ C$

$D$  - diámetro del cilindro en m

$p$  - presión instantánea en  $N / m^2$

$T_g$  - temperatura instantánea del gas en K

$c_m$  - velocidad lineal media en m / s

$V_T$  - volumen desplazado por el émbolo en  $m^3$

$T_{CA}$  - temperatura de la carga al final de la admisión en K.

$p_{CA}$  - presión de la carga al final de la admisión en  $N / m^2$

$V_{CA}$  - volumen de la carga al final de la admisión en  $m^3$

$p_0$  - presión instantánea con motor arrastrado en  $N / m^2$



Por otra parte, las constantes  $C_1$  y  $C_2$  varían con el tipo de motor y con la fase de trabajo considerada según la siguiente tabla:

<b>Cámara abierta</b>	$C_2 = 3.24 \cdot 10^{-3} \text{ m / s K}$
<b>Cámara dividida</b>	$C_2 = 6.22 \cdot 10^{-3} \text{ m / s K}$
<b>Proceso de renovación de la carga</b>	$C_1 = 6.18 + 0.417 c_u / c_m$
<b>Compresión y expansión</b>	$C_1 = 2.28 + 0.308 c_u / c_m$

Tabla 6.4.1 Valores de las constantes  $C_1$  y  $C_2$

El término  $c_u$  representa la componente tangencial de la velocidad del gas en la cámara de combustión, que puede medirse en un banco de ensayos estacionarios. Caso de no tener información al respecto puede despreciarse puesto que la influencia porcentual del término es reducida. Analizando la ecuación, se observa que el término comprendido entre corchetes representa la velocidad media de los gases considerando tanto el movimiento del émbolo como el proceso de combustión.

La ecuación de Woschni es tal vez la ecuación más utilizada para evaluar las pérdidas de calor en un motor, aunque su exactitud es menor en los MEP que en los M.E.C., para los que fue desarrollada en un principio.

En la figura 5.4.2 se muestra la evolución del coeficiente de película  $h$  con el giro del motor para las ecuaciones de Nusselt, Eichelberg y Woschni.

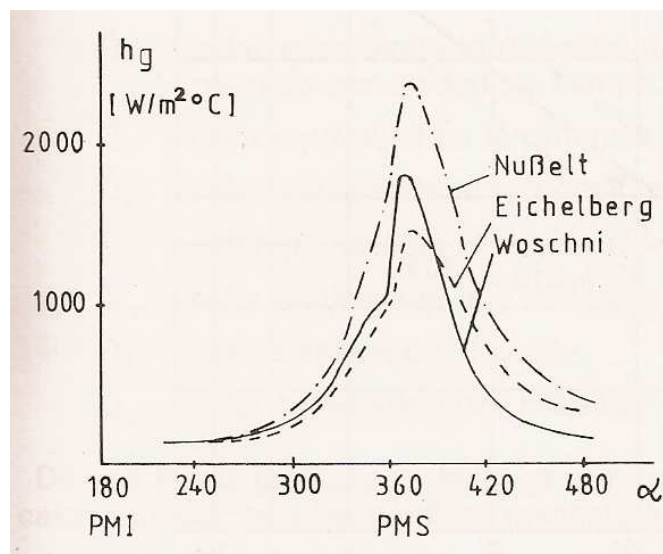


Figura 6.4.2. Comparación entre diferentes coeficientes de película

### 6.4.3. BALANCE TÉRMICO DE UN MOTOR

Si se hace un balance térmico en un motor alternativo de cómo se emplea la energía que teóricamente libera el combustible al quemarse, por unidad de tiempo, se tiene:

$$\dot{Q}_t = \dot{Q}_N + \dot{Q}_r + \dot{Q}_{ra} + \dot{Q}_a + \dot{Q}_{res} + \dot{Q}_g \quad (\text{Ec. 6.4.8})$$

siendo:

$\dot{Q}_t$  - flujo de calor que aporta el combustible al quemarse

$\dot{Q}_N$  - flujo de calor que se transforma en potencia efectiva

$\dot{Q}_r$  - flujo de calor cedido al refrigerante

$\dot{Q}_{ra}$  - flujo de calor perdido por radiación

$\dot{Q}_a$  - flujo de calor cedido al aceite

$\dot{Q}_{res}$  - flujo de calor perdido por combustión incompleta

$\dot{Q}_g$  - flujo de calor perdido con los gases de escape

De una forma gráfica este balance viene expresado en la figura 6.4.3, siendo  $\dot{Q}_{pm}$  el flujo de calor equivalente a las pérdidas mecánicas.

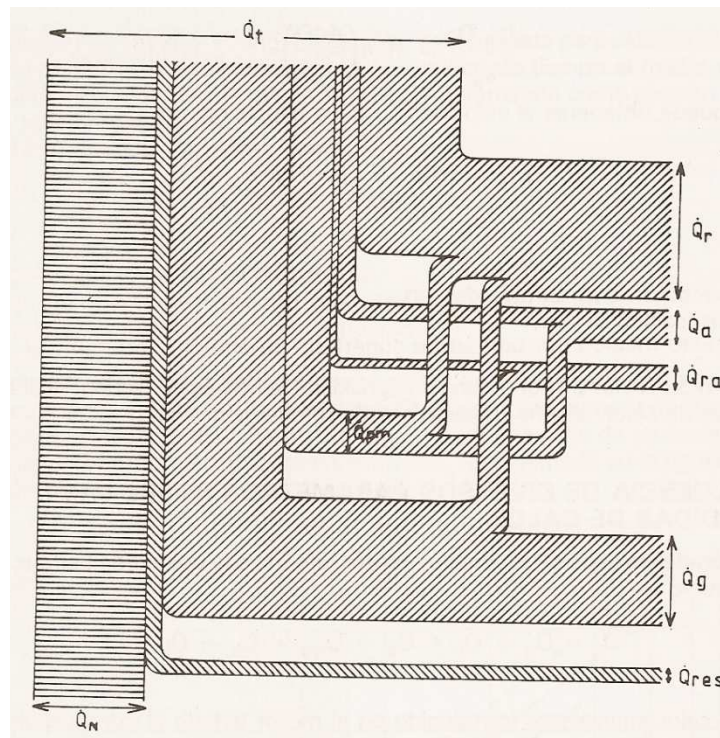


Figura 6.4.3. Balance térmico de un motor

Se observa que el calor disipado en el sistema de refrigeración es debido al calor transmitido por los gases contenidos en el cilindro, pero en parte también es consecuencia del calor generado por fricción entre los diversos órganos móviles del motor. El aceite también cumple una misión refrigerante, disipando una fracción importante del calor generado por fricción, así como una parte del calor transmitido desde los gases contenidos en el cilindro. Finalmente una fracción reducida de las pérdidas de calor del motor se produce en forma de radiación.

Para un MEP se observan los siguientes valores porcentuales:

$\dot{Q}_N$	25 – 28%
$\dot{Q}_r$	17 – 26%
$\dot{Q}_a$	3- 10%
$\dot{Q}_{res}$	2 – 5%
$\dot{Q}_g + \dot{Q}_{ra}$	34 – 45%

**Tabla 6.4.2. Valores porcentuales de las pérdidas de calor**

Si se hace un balance de las pérdidas de calor en un motor teniendo en cuenta donde se producen, se tiene:

CULATA	PARED DEL CILINDRO	CONDUCTOS DE ESCAPE	OTROS
50 – 60%	8 – 22%	16 – 26%	2 – 6%

**Tabla 6.4.3. Localización geométrica de las pérdidas de calor**

Además de la localización geométrica de las pérdidas, es importante realizar una localización a lo largo de un ciclo. Haciendo un estudio de cuáles son las pérdidas de calor que se producen en las distintas fases, se observa que están distribuidas aproximadamente según la siguiente tabla:

COMPRESIÓN	COMBUSTIÓN	EXPANSIÓN	ESCAPE
1 – 3%	6 – 10%	30 – 50%	50%
50%			

**Tabla 6.4.4. Localización de las pérdidas de calor a lo largo de un ciclo**

De la tabla anterior se desprende que solamente un 50% de las pérdidas de calor serán recuperables, puesto que el resto se origina durante la carrera de escape, en la que el fluido operante no puede realizar ningún trabajo. Si se hiciera un motor completamente adiabático, de este 50% que corresponde a compresión, combustión y expansión, sólo se podría recuperar del orden de la mitad, pues la otra mitad se iría en elevar el estado térmico de los gases de escape.

## 6.5. EQUIPACIÓN EMPLEADA EN LA EXPERIMENTACIÓN

### 6.5.1. MOTOR DE COMBUSTIÓN INTERNA

El motor que se utilizará para realizar este estudio es de la gama de motores que impulsan el modelo comercial Volkswagen Polo A04. En concreto se trata de un motor de gasolina de 1390 cm<sup>3</sup>, 16 válvulas y una potencia máxima de 59 kW.

Este motor empezó a ensamblarse en diferentes turismos del consorcio en 1998. Volkswagen introdujo en este motor varias medidas avanzadas respecto a otros modelos anteriores, obteniéndose una versión mucho más desarrollada:

- Colector de admisión en material plástico
- Culata con carcasa de los árboles de levas
- Impulsión de las válvulas a través de balancines de rodillo
- Bloque motor en fundición a presión de aluminio

Su ficha técnica es la siguiente:

MOTOR 1.4 l, 16V, 59 kW	
<i>Combustible</i>	gasolina
<i>Potencia máxima CV - kW / rpm</i>	80 - 59 / 5000
<i>Par máximo Nm / rpm</i>	126 / 3800
<i>Situación</i>	delantero transversal
<i>Número de cilindros</i>	4 en línea
<i>Material del bloque / culata</i>	aluminio / aluminio
<i>Diámetro x carrera (mm)</i>	76.5 x 75.6
<i>Cilindrada (cm3)</i>	1390
<i>Relación de compresión</i>	10.5
<i>Distribución</i>	4 válvulas por cilindro. Dos árboles de levas en la culata.
<i>Alimentación</i>	Inyección indirecta multipunto

Tabla 6.5.1. Ficha técnica del motor

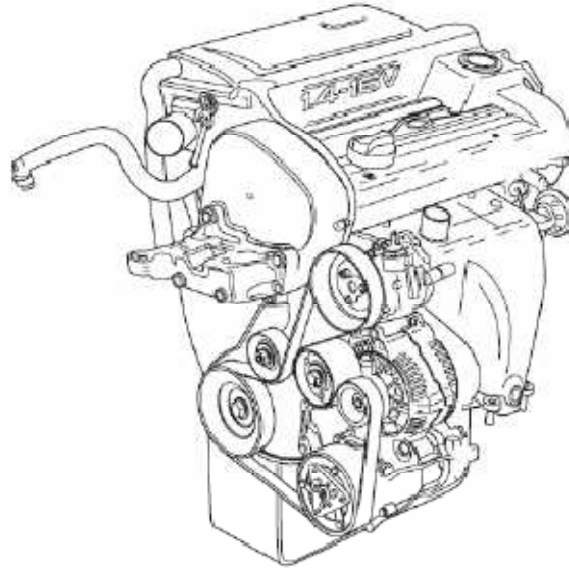


Figura 6.5.1. Croquis del conjunto motor

Este motor ha sido modificado para ser alimentado con hidrógeno.

### 6.5.2. BANCO DE ENSAYO

A continuación se muestra un esquema de la instalación completa, así como del motor ya instalado en el banco de ensayos y los ordenadores de control y adquisición de datos.

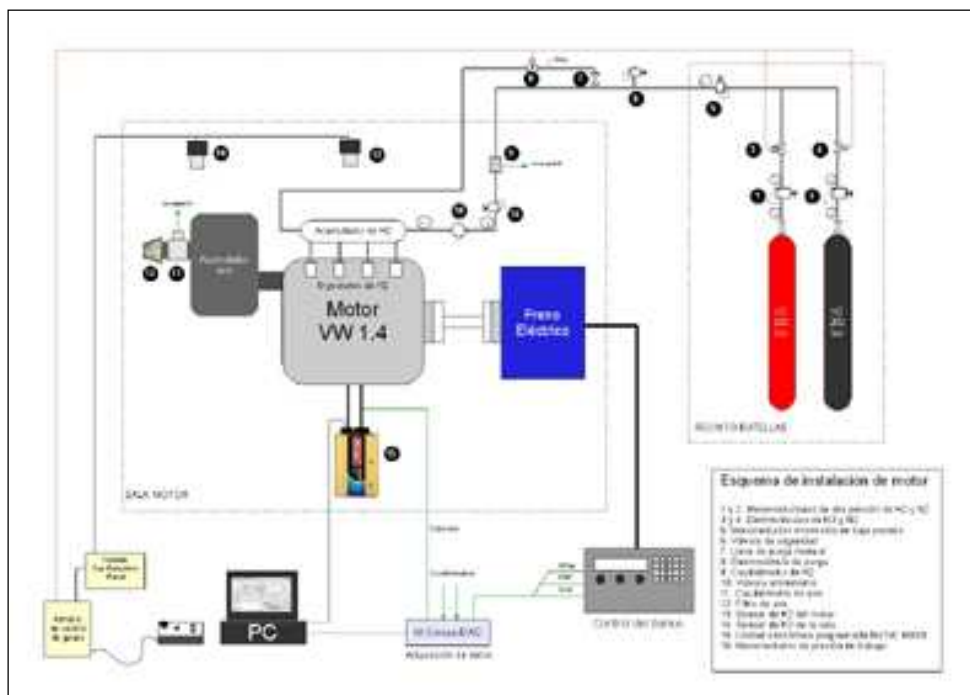


Figura 6.5.2. Esquema de la instalación





**Figura 6.5.3. Motor en el banco de ensayos**



**Figura 6.5.4. Control del banco de ensayos y sistema de adquisición de datos**

### 6.5.3. ADQUISICIÓN Y TRATAMIENTO DE DATOS

Para la obtención de la presión en el interior del cilindro se ha utilizado una bujía instrumentada, dotada de un sensor de presión Kistler e instalada en el primer cilindro.



Características KISTLER 6117BFD47	
Rango medidas	0...200 bar
Sobrecarga	250 bar
Sensibilidad	≈15 pC/bar
Frecuencia natural	≈130 kHz
Rango de temperaturas	-50...350 °C
Longitud rosca	22mm

Figura 6.5.5. Imagen y características del sensor KISTLER 6117BFD47



Figura 6.5.6. Situación de la bujía instrumentada

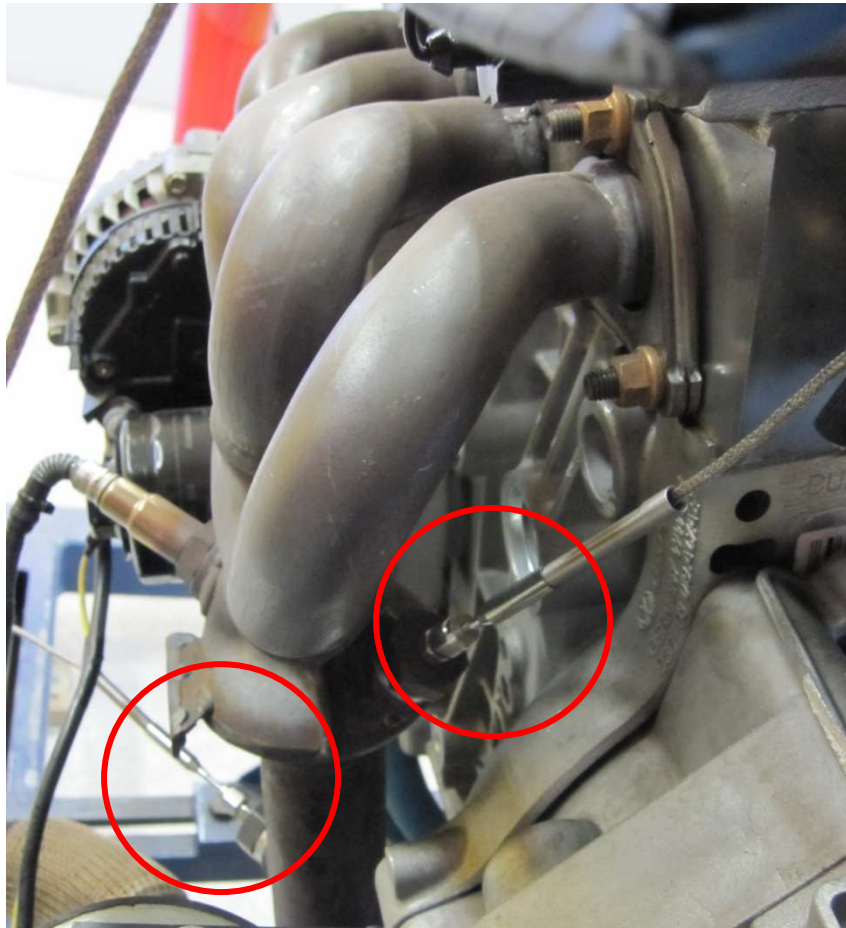
En conjunción con el sensor de presión se ha instalado un encoder Kistler en el eje del cigüeñal. Estos dos elementos permiten obtener el ciclo de presión referenciada de forma precisa al punto muerto superior.

Para la obtención de la temperatura en el escape se han utilizado sendos termopares Motec Thermocouple K-type exposed y sus correspondientes amplificadores Motec Thermo Couple Amplifier.





**Figura 6.5.7. Imagen Motec Thermocouple**



**Figura 6.5.8. Situación de los termopares**

Se dispone además de un medidor de caudal másico de gas Bronkhorst con un rango de medida entre 0.014 ml<sub>n</sub>/min y 1670 l<sub>n</sub>/min mediante el cual se conoce el flujo de combustible que entra al motor.

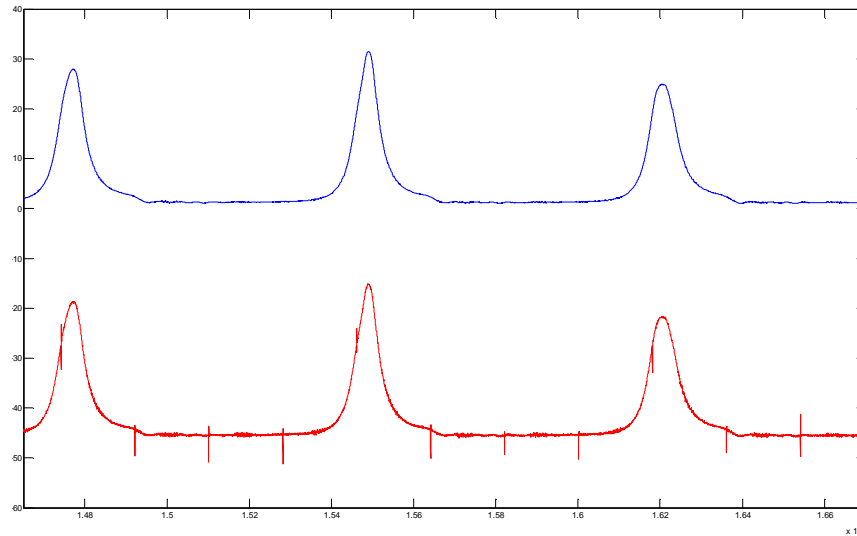


**Figura 6.5.9. Caudalímetro de flujo másico de gas Bronkhorst**

En los siguientes ensayos se han registrado 100 ciclos consecutivos de 720° cada 0.2°, lo que suponen 360 000 puntos por cada punto de operación del motor ensayada. Para la adquisición y captura de tal cantidad de datos en un tiempo muy pequeño se ha elaborado un programa en LabView que captura y guarda cada ensayo en un archivo del ordenador. Adicionalmente se guardan datos del banco como par motor, régimen y caudal de combustible.

Así mismo, se ha elaborado un programa en Matlab que procesa los datos capturados en cada punto del motor ensayado y elabora el ciclo indicado. A partir de ahí calcula también valores como potencia indicada, potencia en el eje, rendimiento mecánico, consumo específico y rendimiento efectivo. El programa se muestra en el Anexo B.1.

El programa realiza un tratamiento para el suavizado de los 100 ciclos y un tratamiento de filtrado de las interferencias producidas por las chispas de las bujías. Los ciclos en continuo originales y filtrados de interferencias se exponen a continuación.



**Figura 6.5.10. Efecto del filtrado de la señal**

Posteriormente se referencian las medidas relativas de presión en función de la presión inicial en el cilindro calculada a partir del flujo másico de combustible que entra al mismo, obteniendo así una presión absoluta en el interior del cilindro. Así se puede ya representar una medida absoluta de la presión en el cilindro.

Esta presión de referencia se calcula como la cantidad de aire-combustible que entra al cilindro dividida entre la cantidad que entraría idealmente si el rendimiento volumétrico fuera del 100%:

$$p_{ini} = \frac{\dot{m}_f \left[ 1 + \frac{\lambda}{2} \left( 1 + \frac{79}{21} \right) \right]}{S \pi R^2 \frac{\omega}{2} Z} \quad (\text{Ec. 6.5.1})$$

donde:

$\dot{m}_f$  - flujo de combustible en l / min

$\lambda$  - dosado relativo

S - carrera en dm

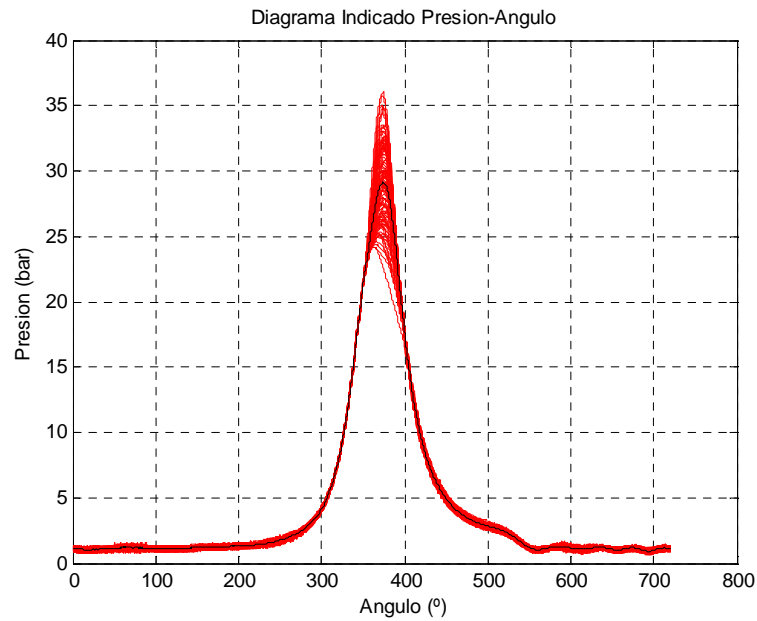
R - radio del cilindro en dm

$\omega$  - rpm

Z - número de cilindros

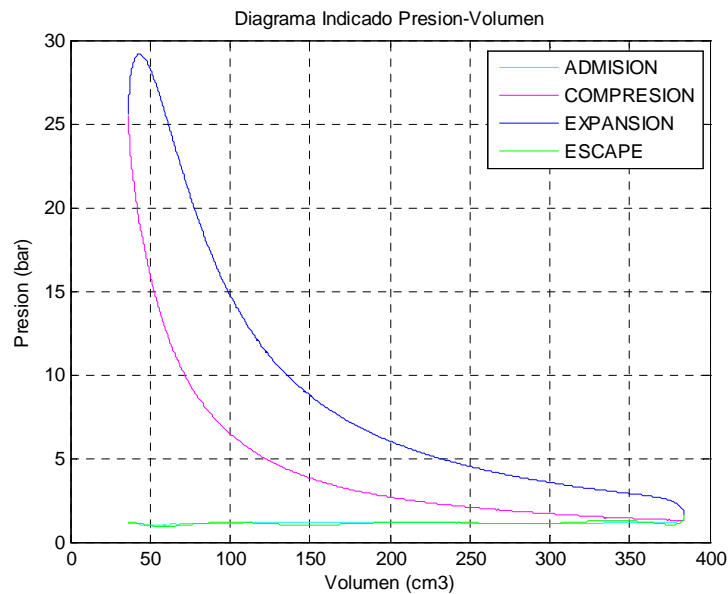
Por tanto, la veracidad de los datos obtenidos depende enormemente de la fiabilidad del caudalímetro de gas.

A continuación se expone un ejemplo de la representación de 100 ciclos ya tratados junto con el ciclo medio de los 100 ciclos originales en función del ángulo del ciclo del motor. Esto da una idea de la dispersión producida en el interior del cilindro.



**Figura6.5.11. Dispersión cíclica: variación de presión**

Se representa también la presión en el interior del cilindro 1 en función del volumen de la cámara de combustión. A continuación se observa la figura del ciclo indicado donde se representan cada una de las cuatro etapas del ciclo del motor: admisión, compresión, expansión y escape.



**Figura 6.5.11. Diagrama indicado**

Por último se realizan los cálculos de trabajo del ciclo para cada uno de los ciclos, y se calcula la potencia indicada y rendimiento mecánico del ciclo medio. Finalmente se guarda el resumen del ciclo medio y los datos calculados en un archivo Excel.

## 7. MODELO TÉRMICO

En este capítulo se va a realizar un análisis termodinámico del motor, hecho que implica el estudio de un sistema en el que tiene lugar una reacción química. Aunque el principio de conservación de la energía sigue siendo válido independientemente de que exista o no una reacción química dentro del sistema, es necesario modificar el método de evaluación de algunas propiedades termodinámicas introduciendo el método de cálculo de la variación de energía interna química debida a un cambio de composición.

### 7.1. CONSERVACIÓN DE LA ENERGÍA EN SISTEMAS REACTIVOS

El objeto de esta sección es ilustrar la aplicación del principio de conservación de la energía en los sistemas reactivos y su empleo para modelizar térmicamente el motor de combustión.

#### 7.1.1. CÁLCULO DE LA ENTALPÍA DE FORMACIÓN PARA SISTEMAS REACTIVOS

Cuando ocurre una reacción química, los reactivos desaparecen y se forman los productos, de manera que el cálculo de las variaciones en las propiedades entre estados no se pueden calcular para todas las sustancias implicadas. Para los sistemas reactivos es necesario evaluar la energía interna ( $u$ ), la entalpía ( $h$ ) y la entropía ( $s$ ) de manera que no haya ambigüedades o inconsistencias al calcular las propiedades.

Se puede establecer una referencia para la entalpía en el estudio de sistemas reactivos asignando arbitrariamente un valor nulo a la entalpía de los elementos estables en un estado llamado estado de referencia estándar definido por  $T_{\text{ref}} = 298,15 \text{ K}$  ( $25 \text{ °C}$ ) y  $p_{\text{ref}} = 1 \text{ atm}$ . Nótese que sólo se asigna un valor cero de entalpía en el estado estándar a los elementos estables. El término estable significa simplemente que el elemento al que se le aplica es químicamente estable. Por ejemplo, en el estado estándar las formas estables del hidrógeno, oxígeno y nitrógeno son  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$  y  $\text{N}_2$  y no las monoatómicas H, O y N. Con esta elección de la referencia no existe ningún conflicto o ambigüedad.

Utilizando la referencia antes comentada, se pueden asignar valores entálpicos a los compuestos para uso en el estudio de los sistemas reactivos. La entalpía de un compuesto en el estado estándar es igual a su entalpía de formación, simbolizada por  $\bar{h}_f^\circ$ . La entalpía de formación es la energía liberada o absorbida cuando el compuesto se forma a partir de sus elementos y tanto el compuesto como los elementos están a  $T_{\text{ref}}$  y  $p_{\text{ref}}$ . La entalpía de formación se determina habitualmente aplicando los procedimientos de la termodinámica estadística y utilizando valores espectroscópicos medidos. También se puede encontrar midiendo el calor transferido en una reacción en la que se forma el compuesto a partir de sus elementos.

La entalpía específica de un compuesto en un estado distinto del estándar se encuentra sumando a la entalpía de formación la variación de entalpía específica  $\Delta\bar{h}$  entre el estado estándar y el de interés.

$$\bar{h}(T, p) = \bar{h}_f^0 + [\bar{h}(T, p) - \bar{h}(T_{ref}, p_{ref})] = \bar{h}_f^0 + \Delta\bar{h} \quad (\text{Ec. 7.1.1})$$

Es decir, la entalpía de un compuesto se compone de  $\bar{h}_f^0$ , asociada a su formación a partir de sus elementos, y  $\Delta\bar{h}$ , asociada con el cambio de estado a composición constante. Se puede utilizar una elección arbitraria de referencia para determinar  $\Delta\bar{h}$  ya que es una diferencia a composición constante. Por tanto,  $\Delta\bar{h}$  se puede evaluar a partir de datos tabulados como las tablas de vapor, las tablas de los gases ideales, etc. Nótese que como consecuencia del valor de referencia de la entalpía adoptado para los elementos estables, la entalpía específica determinada en la ecuación 7.1.1 es, a menudo, negativa.

### 7.1.2. BALANCES DE ENERGÍA PARA SISTEMAS REACTIVOS

La ecuación de la energía para un sistema de flujo químicamente reactivo es

$$\dot{Q} + \dot{W} = \sum_{prod} \dot{N}_i (\bar{h} + e_c + e_p)_i - \sum_{reac} \dot{N}_i (\bar{h} + e_c + e_p)_i \quad (\text{Ec. 7.1.2})$$

donde  $\bar{h}_i$  es la entalpía molar a una temperatura y presión dadas, y  $\dot{N}_i$  el flujo molar de un producto o reactante cualquiera.

Deben tenerse presentes varias consideraciones al escribir los balances de energía para los sistemas que incluyen combustión. Algunas de ellas son generales, tenga lugar o no la combustión. Por ejemplo, es necesario considerar si se producen transferencias significativas de calor y trabajo y si sus valores respectivos se conocen no. También deben valorarse los efectos de las energías cinética y potencial. Otras consideraciones, sin embargo, están ligadas directamente a la existencia de la combustión. Por ejemplo, es importante conocer el estado del combustible antes de que se realice la combustión, es necesario considerar si el combustible está premezclado con el aire de combustión o si ambos entran por separado al reactor, etc. El estado de los productos de la combustión también debe fijarse. Es importante saber si los productos de la combustión son una mezcla gaseosa o si se ha condensado parte del agua formada en la combustión.

Si se combina definida en la ecuación 7.1.1 con la ecuación 7.1.2, el balance de energía aplicado a sistemas químicamente reactivos en régimen estacionario, referido a la unidad de tiempo, se convierte en

$$\dot{Q} + \dot{W} = \sum_{prod} \dot{N}_i (\bar{h}_f^0 + \Delta\bar{h})_i - \sum_{reac} \dot{N}_i (\bar{h}_f^0 + \Delta\bar{h})_i \quad (\text{Ec. 7.1.3})$$

donde  $\bar{h}_f^0$  representa la entalpía de formación a la temperatura y presión estándar y  $\Delta\bar{h}$  es la variación de la entalpía sensible. Tal como se ha hecho en la ecuación anterior, en

muchas aplicaciones pueden despreciarse las variaciones de las energías cinética y potencial de las corrientes fluidas. Los valores numéricos de  $\dot{Q}$  y  $\dot{W}$  pueden ser, en general, positivos o negativos, dependiendo del sentido del flujo de energía en la frontera del sistema.

Para estudiar los procesos de combustión, con frecuencia resulta útil disponer de la ecuación anterior expresada en base molar. Como los cálculos en combustión se suelen basar en la cantidad de combustible que está presente, es habitual reescribir dicha ecuación en función del flujo molar de combustible

$$\dot{Q} + \dot{W} = \dot{N}_{comb} \left[ \sum_{prod} \left( \frac{\dot{N}_i}{\dot{N}_{comb}} \right) (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_i - \sum_{reac} \left( \frac{\dot{N}_i}{\dot{N}_{comb}} \right) (\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_i \right] \quad (\text{Ec. 7.1.4})$$

Esta ecuación se puede escribir de una forma más compacta definiendo un nuevo símbolo para los cocientes de flujos molares y empleando el símbolo estándar para la entalpía de un compuesto. Una vez hecho esto, la ecuación 7.1.4 se convierte en

$$\dot{Q} + \dot{W} = \dot{N}_{comb} [\sum_{prod} n_i \bar{h}_i - \sum_{reac} n_i \bar{h}_i] \quad (\text{Ec. 7.1.5})$$

donde  $n_i$  es el cociente entre el flujo molar del componente  $i$  que entra o sale del sistema y el flujo molar de combustible, y  $\bar{h}_i$  es la entalpía del componente  $i$  calculada con respecto a la entalpía de los elementos estables en el estado de referencia estándar.

Los valores numéricos de  $n_i$  son los coeficientes de la reacción química ajustada escrita para un mol de combustible en la que aparecen todos los compuestos que entran y salen del sistema. Por tanto,  $n_{comb}$  siempre es igual a la unidad.

Una vez escrito el balance de energía, la próxima etapa es evaluar los términos individuales de entalpía. Puesto que se considera que cada componente de los productos de combustión se comporta como un gas ideal, su contribución a la entalpía de los productos depende solamente de la temperatura de los mismos,  $T_p$ . en consecuencia, para cada componente de los productos, la ecuación 7.1.1 toma la forma

$$\bar{h} = \bar{h}_f^o + [\bar{h}(T_p) - \bar{h}(T_{ref})] \quad (\text{Ec. 7.1.6})$$

donde  $\bar{h}_f^o$  es la entalpía de formación y el segundo término representa la variación de entalpía desde la temperatura  $T_{ref}$  a la temperatura  $T_p$ . Este término se puede calcular a partir de los valores tabulados de la entalpía respecto a la temperatura en las tablas de los apéndices de los libros de termodinámica o mediante integración del calor específico del gas ideal  $\bar{c}_p$ .



Para evaluar las entalpías del oxígeno y del nitrógeno en el aire de combustión se puede emplear un enfoque similar. Para estos elementos

$$\bar{h} = [\bar{h}(T_A) - \bar{h}(T_{ref})] \quad (\text{Ec. 7.1.7})$$

donde  $T_A$  es la temperatura del aire que entra al volumen de control. Nótese que la entalpía de formación del oxígeno y del nitrógeno es cero por definición y por tanto desaparece de la ecuación.

### 7.1.3. RELACIÓN ENTRE TEMPERATURA EN EL ESCAPE, POTENCIA TÉRMICA Y CALOR PERDIDO

Para proceder al análisis del motor objeto de estudio en el presente Proyecto Fin de Carrera, es necesario hacer las siguientes consideraciones iniciales:

1. Estado estacionario
2. Combustión completa

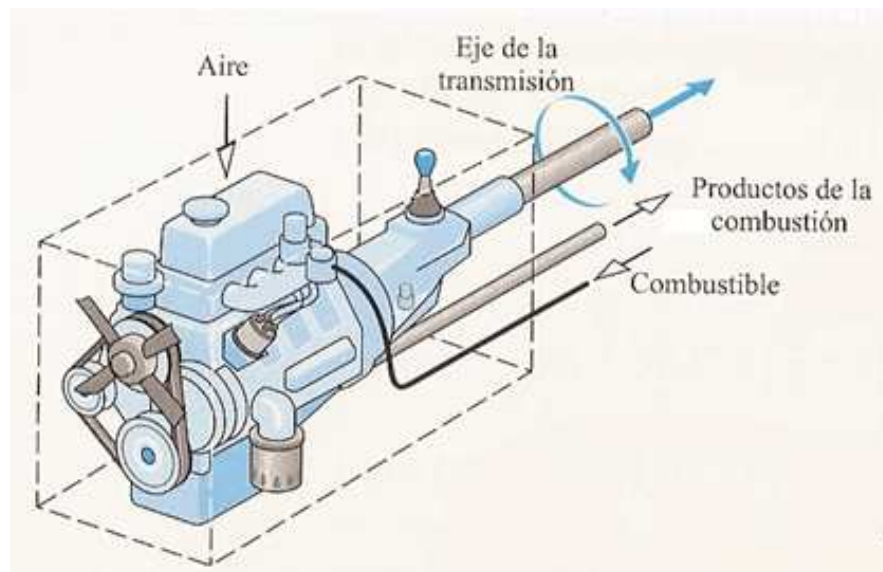
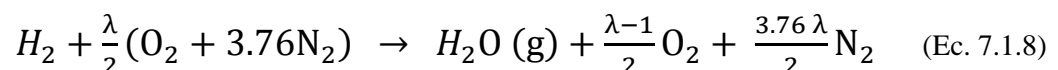


Figura 7.1.1. Volumen de Control

La ecuación química ajustada de la combustión del hidrógeno con aire viene dada como



Si se parte de la ecuación 7.1.5 y atendiendo a dichas consideraciones, el balance de energía para el motor se expresa como

$$\dot{Q} + \dot{W} = \dot{N}_{comb} \left\{ \left[ 1\bar{h}_{H_2O(g)} + \frac{\lambda-1}{2}\bar{h}_{O_2} + \frac{3.76\lambda}{2}\bar{h}_{N_2} \right] - \left[ 1\bar{h}_{H_2} + \frac{\lambda}{2}\bar{h}_{O_2} + \frac{3.76\lambda}{2}\bar{h}_{N_2} \right] \right\} \quad (\text{Ec. 7.1.9})$$

donde  $\bar{h}_i = \bar{h}_f^o + \Delta\bar{h}$ , de tal forma que se convierte en

$$\dot{Q} + \dot{W} = \dot{N}_{comb} \left\{ \left[ 1(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{H_2O(g)} + \frac{\lambda-1}{2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76\lambda}{2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{N_2} \right] - \left[ 1(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{H_2} + \frac{\lambda}{2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76\lambda}{2}(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{N_2} \right] \right\} \quad (\text{Ec. 7.1.10})$$

Como se ha visto en el apartado anterior, las entalpías de formación de los elementos estables  $H_2$ ,  $O_2$  y  $N_2$  es igual a cero, por tanto, la ecuación 7.1.10 se convierte en

$$\dot{Q} + \dot{W} = \dot{N}_{comb} \left\{ \left[ 1(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{H_2O(g)} + \frac{\lambda-1}{2}(\Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76\lambda}{2}(\Delta\bar{h})_{N_2} \right] - \left[ 1(\Delta\bar{h})_{H_2} + \frac{\lambda}{2}(\Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76\lambda}{2}(\Delta\bar{h})_{N_2} \right] \right\} \quad (\text{Ec. 7.1.11})$$

donde

- $\dot{Q}$  (W), calor cedido a refrigeración y al ambiente
- $\dot{W}$  (W), potencia indicada del ciclo, calculado a partir del diagrama presión-volumen
- $\dot{N}_{comb}$  (moles de  $H_2$  quemados/s), obtenidos del caudalímetro de hidrógeno
- $(\Delta\bar{h})_i = \bar{h}(T, p) - \bar{h}(T_{ref}, p_{ref})$ , calculada mediante las tablas de los anexos del Moran-Shapiro[7] en base a la temperatura en el escape

## 7.2. DATOS EXPERIMENTALES

Se han realizado un total de 30 ensayos en el banco para un rango de revoluciones de giro del motor entre las 1000 rpm y las 5000 rpm, para plena carga y carga parcial al 50% de apertura de la válvula de mariposa y para dosados normales ( $\lambda=2$  y  $\lambda=1.6$ ) y dosado pobre ( $\lambda=2.5$ ). Los resultados obtenidos de interés para este capítulo se analizan a continuación.

### 7.2.1. POTENCIA, PAR Y TRABAJO DEL CICLO

En la siguiente tabla se muestran los datos de potencia efectiva ( $N_e$ ) y par motor ( $M_e$ ) obtenidos en el banco de ensayos en función de las variables de control.

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	$N_e$ (kW)	$M_e$ (N.m)
2.5	50	999.548	0.88542327	8.459
2.5	50	2000.697	5.2210471	24.92
2.5	50	3002.356	7.0577796	22.448
2.5	50	4001.306	8.8077044	21.02
2.5	50	5000.713	8.521207	16.272
2.5	100	1000.486	1.7239996	16.455
2.5	100	2001.103	5.5993053	26.72
2.5	100	3001.685	8.659313	27.548
2.5	100	4001.522	12.111876	28.904
2.5	100	5001.116	14.467632	27.625
2	50	1001.283	3.1256984	29.81
2	50	2000.581	7.9025561	37.721
2	50	3003.072	10.296098	32.74
2	50	4001.049	13.588217	32.431
2	50	5001.25	13.901345	26.543
2	100	1001.141	3.4855873	33.247
2	100	2001.029	8.2031399	39.147
2	100	3002.249	12.317977	39.18
2	100	4001.219	17.269345	41.215
2	100	5001.262	20.443296	39.034
1.6	50	1000.955	4.5181472	43.104
1.6	50	2000.595	10.254896	48.949
1.6	50	3001.536	14.174882	45.097
1.6	50	4001.487	19.590277	46.751
1.6	50	5001.665	21.039949	40.17
1.6	100	1001.184	4.6529614	44.38
1.6	100	2001.082	10.754032	51.319
1.6	100	3001.458	15.707726	49.975
1.6	100	4001.111	22.927407	54.72
1.6	100	5000.519	27.664048	52.829

**Tabla 7.2.1. Datos de potencia efectiva y par motor**

Con los datos de la tabla anterior se calculan, mediante las relaciones del apartado 7.1.3, los valores de potencia indicada ( $N_i$ ), potencia de las pérdidas mecánicas ( $N_{pm}$ ), y por tanto el rendimiento mecánico, y trabajo indicado del ciclo ( $W_i$ ).

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	$N_i$ (kW)	$W_i$ (J)	$N_{pm}$ (kW)	$\eta_m$
2.5	50	999.548	1.997242	59.944355	1.11181873	0.44332297
2.5	50	2000.697	7.5942464	113.87401	2.3731993	0.68750035
2.5	50	3002.356	10.955119	109.46523	3.8973394	0.64424488
2.5	50	4001.306	14.476317	108.53694	5.6686126	0.60842164
2.5	50	5000.713	17.182092	103.07785	8.660885	0.49593536
2.5	100	1000.486	2.6858805	80.537274	0.9618809	0.64187501
2.5	100	2001.103	7.6310157	114.40214	2.0317104	0.73375623
2.5	100	3001.685	12.446598	124.39611	3.787285	0.69571724
2.5	100	4001.522	17.670201	132.4761	5.558325	0.68544076
2.5	100	5001.116	23.027565	138.13456	8.559933	0.62827453
2	50	1001.283	4.374702	131.07289	1.2490036	0.71449402
2	50	2000.581	10.038338	150.53134	2.1357819	0.78723752
2	50	3003.072	14.34464	143.29966	4.048542	0.71776624
2	50	4001.049	19.412013	145.55193	5.823796	0.69999008
2	50	5001.25	22.108013	132.61492	8.206668	0.62879216
2	100	1001.141	4.1845071	125.39214	0.6989198	0.8329744
2	100	2001.029	10.321433	154.74188	2.1182931	0.79476754
2	100	3002.249	16.055915	160.43888	3.737938	0.76719245
2	100	4001.219	23.484965	176.08358	6.21562	0.73533622
2	100	5001.262	28.841396	173.00471	8.3981	0.70881784
1.6	50	1000.955	4.8715727	146.00774	0.3534255	0.92745146
1.6	50	2000.595	12.373752	185.55108	2.118856	0.82876202
1.6	50	3001.536	18.005905	179.96691	3.831023	0.78723519
1.6	50	4001.487	25.545631	191.52103	5.955354	0.76687386
1.6	50	5001.665	29.35831	176.09122	8.318361	0.71666076
1.6	100	1001.184	5.5419107	166.06071	0.8889493	0.83959516
1.6	100	2001.082	12.596073	188.83894	1.842041	0.85376065
1.6	100	3001.458	19.439836	194.30393	3.73211	0.80801743
1.6	100	4001.111	28.781692	215.80275	5.854285	0.79659692
1.6	100	5000.519	36.599441	219.57386	8.935393	0.75585983

**Tabla 7.2.2. Datos de potencia indicada, trabajo indicado, potencia de pérdidas mecánicas y rendimiento mecánico**

### 7.2.2. FLUJO DE COMBUSTIBLE Y TEMPERATURA DE ENTRADA

Para poder aplicar la ecuación 7.1.11, se necesita conocer el flujo molar de combustible que entra al motor. El caudal de hidrógeno se obtiene mediante el caudalímetro de gas, y se calculan tanto el flujo molar como el flujo másico empleando las siguientes expresiones:

$$\dot{n}_{H_2} = Q_{H_2} \frac{l_n}{\text{min}} \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \frac{0.082 \frac{\text{l} \cdot \text{atm}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}^{273 \text{ K}}}{1 l_n} \frac{1 \text{ kmol}}{1000 \text{ mol}} \quad (\text{Ec. 7.2.1})$$

$$\dot{m}_{H_2} = Q_{H_2} \frac{l_n}{\text{min}} \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \frac{0.082 \frac{\text{l} \cdot \text{atm}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}^{273 \text{ K}}}{1 l_n} \frac{2.016 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \quad (\text{Ec. 7.2.2})$$

Así mismo, es necesario conocer la temperatura de la corriente de entrada al motor, que se obtiene directamente mediante el termopar situado en el colector de admisión.

Los datos de caudal, flujo molar, flujo másico y temperatura de entrada del aire se muestran en la siguiente tabla:

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	Q <sub>H<sub>2</sub></sub> (l/min)	$\dot{n}_{H_2}$ (kmol/s)	$\dot{m}_{H_2}$ (g/s)	T <sub>aire</sub> (K)
2.5	50	999.548	33.503	2.4943E-05	0.05028593	321.25
2.5	50	2000.697	83.889	6.2456E-05	0.1259122	319.35
2.5	50	3002.356	131	9.7531E-05	0.19662289	316.75
2.5	50	4001.306	185.037	0.00013776	0.27772908	315.35
2.5	50	5000.713	224.62	0.00016723	0.33714071	314.15
2.5	100	1000.486	38.719	2.8827E-05	0.05811482	322.85
2.5	100	2001.103	89.309	6.6492E-05	0.13404728	320
2.5	100	3001.685	144.418	0.00010752	0.21676248	317.45
2.5	100	4001.522	217.818	0.00016217	0.32693133	316
2.5	100	5001.116	282.054	0.00020999	0.42334559	314
2	50	1001.283	47.521	3.538E-05	0.07132608	319.25
2	50	2000.581	114.633	8.5346E-05	0.17205704	317.95
2	50	3003.072	174.006	0.00012955	0.26117223	316.05
2	50	4001.049	244.694	0.00018218	0.36727054	314.45
2	50	5001.25	293.271	0.00021834	0.44018161	313.85
2	100	1001.141	53.321	3.9698E-05	0.08003152	319.95
2	100	2001.029	122.887	9.1491E-05	0.18444578	317.15
2	100	3002.249	191.526	0.00014259	0.28746867	315.15
2	100	4001.219	286.496	0.0002133	0.43001276	313.55
2	100	5001.262	366.663	0.00027299	0.55033846	312.35
1.6	50	1000.955	65.103	4.847E-05	0.09771557	322.75
1.6	50	2000.595	147.033	0.00010947	0.22068743	320.15
1.6	50	3001.536	221.748	0.00016509	0.33283002	317.175
1.6	50	4001.487	320.231	0.00023842	0.4806469	315.95
1.6	50	5001.665	381.499	0.00028403	0.57260638	314.75
1.6	100	1001.184	69.774	5.1948E-05	0.10472645	322.55
1.6	100	2001.082	153.353	0.00011417	0.23017336	321.05
1.6	100	3001.458	233.573	0.0001739	0.35057861	318.65
1.6	100	4001.111	355.864	0.00026495	0.53412983	316.65
1.6	100	5000.519	457.162	0.00034036	0.68617186	314.95

Tabla 7.2.3. Datos de flujo de combustible y temperatura de entrada del aire



### 7.2.3. TEMPERATURA DE SALIDA

La temperatura de salida de los gases de escape se mide directamente con los termopares. Sin embargo, ante la imposibilidad de colocar dichos termopares más cerca del cilindro, la temperatura medida será más baja debido a las pérdidas producidas en el colector de escape. Como lo que se quiere calcular es la potencia de las pérdidas de calor a través de las paredes y la potencia de las pérdidas de calor en el escape, el error cometido si se consideran las temperaturas obtenidas en los termopares es significativo.

Para evitar dicho error, se realiza una aproximación para calcular la temperatura real de los gases en la salida del cilindro considerando la hipótesis de que el colector de escape se comporta como una tobera por la que circula un flujo isoentrópico.



Figura 7.2.1.- Colector de escape

Se conoce la presión en el cilindro en el instante de la apertura de las válvulas de escape, y si se supone que en la posición donde se encuentran los termopares la presión es la atmosférica, se puede calcular la temperatura del flujo de los productos de la combustión a la salida del cilindro.

El primer caso es comprobar si el flujo de la tobera está estrangulado. Para ello, con  $k=1.4$  y número de Mach  $M=1.0$ , se obtiene la presión crítica:

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{k-1}{2} M^2\right)^{\frac{k}{k-1}} \rightarrow p^* = 0.52828p_0 \quad (\text{Ec. 7.2.3})$$

Para una contrapresión (en este caso 1 atm) menor que  $p^*$ , el número de Mach a la salida es la unidad y la tobera está estrangulada. En caso contrario, la tobera no está estrangulada y el número de Mach se calcula como:

$$M = \left\{ \frac{2}{k-1} \left[ \left( \frac{p_0}{p} \right)^{(k-1)/k} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Ec. 7.2.4})$$

Finalmente, la temperatura se halla de la siguiente manera:

$$T_0 = T \left[ 1 + \frac{k-1}{2} M^2 \right] \quad (\text{Ec. 7.2.5})$$

Los resultados obtenidos al aplicar estas expresiones se muestran en la siguiente tabla, donde  $t_{\text{gases}}$  (K) es la temperatura medida por el termopar,  $p_{\text{apertura}}$  (bar) es la presión en el cilindro en el momento de apertura de las válvulas de escape medida en el sensor de presión:

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	T_gases(K)	p_apertura (bar)	T_apertura(K)
2.5	50	999.548	565	1.38	593.3256281
2.5	50	2000.697	578	1.49	614.9964798
2.5	50	3002.356	608	1.6	656.3479015
2.5	50	4001.306	640	1.8	707.3341853
2.5	50	5000.713	657	1.84	730.310945
2.5	100	1000.486	563	1.3	585.7477132
2.5	100	2001.103	563	1.45	595.6645012
2.5	100	3001.685	594	1.68	645.4932515
2.5	100	4001.522	622	2.09	691.95
2.5	100	5001.116	645	2.14	719.55
2	50	1001.283	570	1.4	600.15099
2	50	2000.581	644	1.79	711.367661
2	50	3003.072	703	2.02	789.15
2	50	4001.049	731	2.25	822.75
2	50	5001.25	753	2.27	849.15
2	100	1001.141	564	1.38	592.2291362
2	100	2001.029	643	1.92	717.15
2	100	3002.249	676	1.96	756.75
2	100	4001.219	717	2.49	805.95
2	100	5001.262	739	2.7	832.35
1.6	50	1000.955	588	1.47	624.8426657
1.6	50	2000.595	709	2.08	796.35
1.6	50	3001.536	785	2.25	887.55
1.6	50	4001.487	819	2.55	928.35
1.6	50	5001.665	853	2.6	969.15
1.6	100	1001.184	602	1.61	650.1558581
1.6	100	2001.082	712	2.16	799.95
1.6	100	3001.458	781	2.4	882.75
1.6	100	4001.111	827	2.9	937.95
1.6	100	5000.519	864	3.12	982.35

**Tabla 7.2.4. Datos de temperatura de salida**

## 7.3. MODELO TÉRMICO H<sub>2</sub> - MEP

Una vez presentados los datos experimentales obtenidos en el banco de ensayos, se van a calcular los valores necesarios para la modelización térmica del motor que se está analizando en el presente Proyecto Fin de Carrera.

Para ello se van a emplear las expresiones del apartado 7.1 y los ya citados datos experimentales expuestos en el apartado 7.2.

### 7.3.1. POTENCIA CALORÍFICA APORTADA POR EL COMBUSTIBLE

El poder calorífico de un combustible es la cantidad de energía desprendida en la reacción de combustión, referida a la unidad de masa de combustible. Se distinguen dos poderes caloríficos: el **poder calorífico superior** (PCS) se obtiene cuando todo el agua formada en la combustión es líquida; el **poder caloríficos inferior** (PCI) se obtiene cuando todo el agua formada en la combustión es gaseosa. El poder calorífico superior excede al inferior en la energía necesaria para evaporar el agua formada.

En el caso del hidrógeno, éste dispone de un PCS de 141.86 MJ/kg (a una temperatura de 25°C y una presión de 1 atm.); y de un PCI de 119.93 MJ/kg (en las mismas condiciones anteriores).

El hidrógeno dispone de la relación peso–energía más alta que cualquier combustible, al ser el elemento más ligero y ya que no dispone de ningún átomo de carbón pesado. La cantidad de energía liberada durante la reacción del hidrógeno, es cerca de 2.5 veces el calor producido en la combustión de los hidrocarburos más comunes (gasolina, diesel, metano, propano, etc.)

En el caso que se está analizando, el agua obtenida en la combustión se encuentra en fase gaseosa, por lo que se emplea el PCI para calcular el poder calorífico del combustible mediante

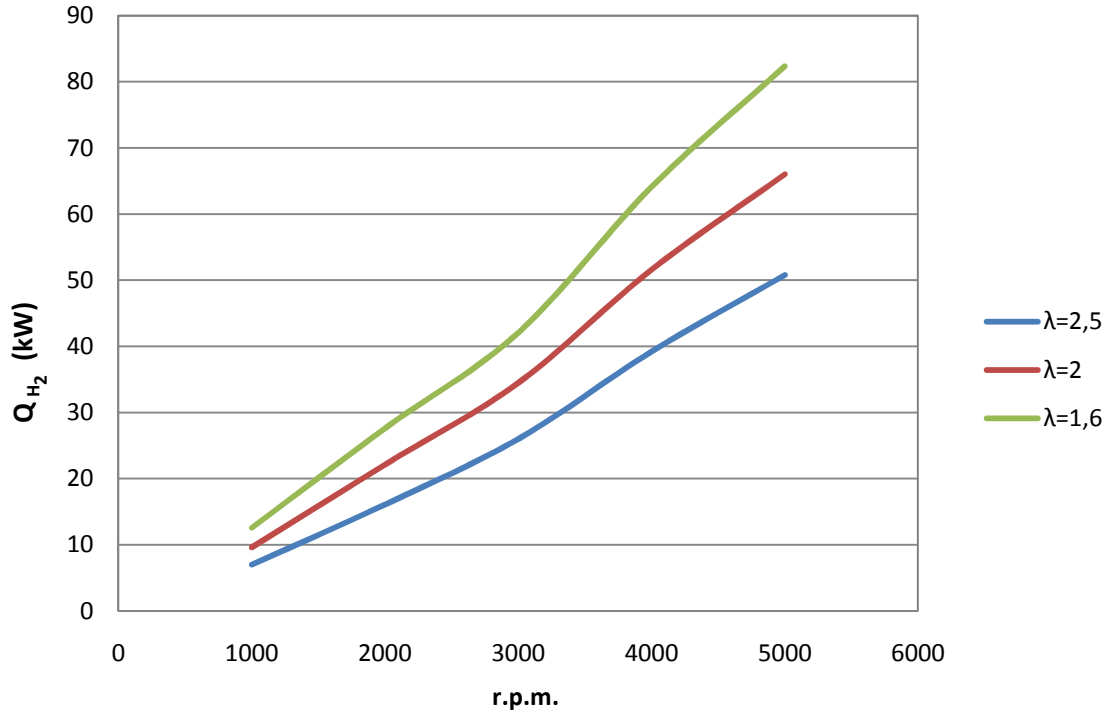
$$\dot{Q}_{H_2} = \dot{m}_f H_c \quad (\text{Ec. 7.3.1})$$

siendo  $\dot{m}_f$  el flujo másico de combustible y  $H_c$  el poder calorífico inferior (119.93 MJ/kg).

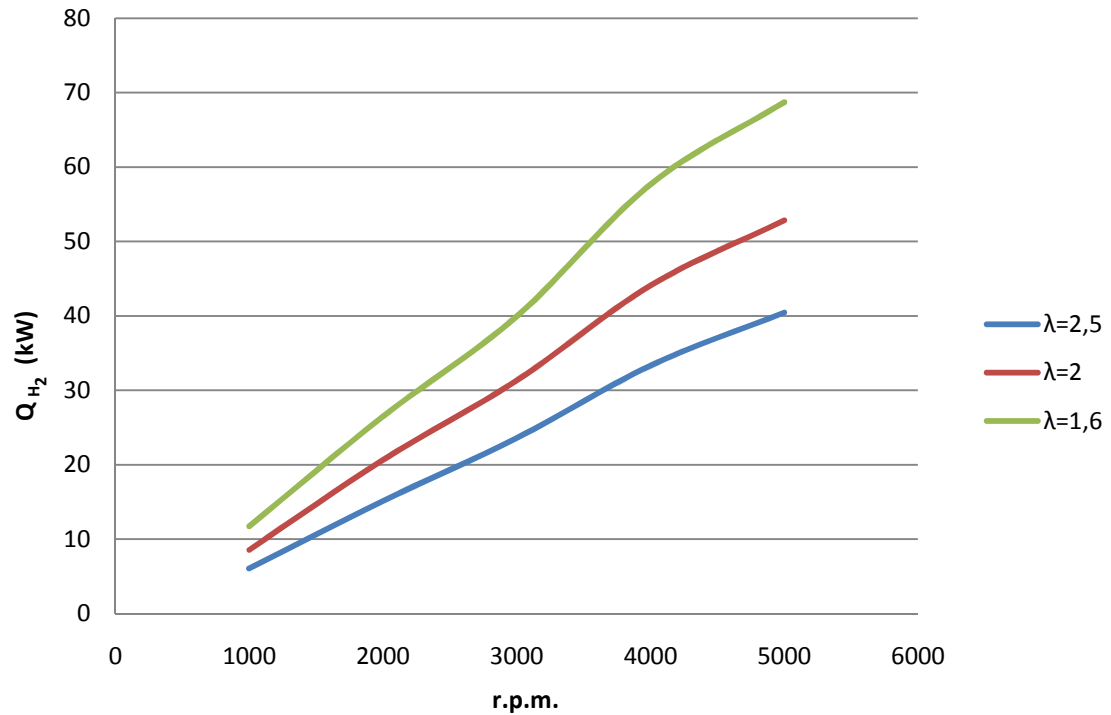
Se obtienen de esta forma los siguientes valores de potencia calorífica en función del dosado, las revoluciones y el grado de apertura de la válvula de mariposa:

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	$\dot{Q}_{H_2}$ (kW)
2.5	50	999.548	6.034311445
2.5	50	2000.697	15.10946341
2.5	50	3002.356	23.59474672
2.5	50	4001.306	33.32748968
2.5	50	5000.713	40.45688555
2.5	100	1000.486	6.973778612
2.5	100	2001.103	16.08567355
2.5	100	3001.685	26.01149719
2.5	100	4001.522	39.23175985
2.5	100	5001.116	50.80147092
2	50	1001.283	8.559129456
2	50	2000.581	20.64684428
2	50	3003.072	31.34066792
2	50	4001.049	44.07246529
2	50	5001.25	52.82179362
2	100	1001.141	9.603782364
2	100	2001.029	22.13349343
2	100	3002.249	34.49624015
2	100	4001.219	51.60153096
2	100	5001.262	66.04061538
1.6	50	1000.955	11.72586867
1.6	50	2000.595	26.48249156
1.6	50	3001.536	39.93960225
1.6	50	4001.487	57.67762852
1.6	50	5001.665	68.71276548
1.6	100	1001.184	12.56717448
1.6	100	2001.082	27.620803
1.6	100	3001.458	42.0694334
1.6	100	4001.111	64.09557974
1.6	100	5000.519	82.34062289

**Tabla 7.3.1. Potencia calorífica aportada por el combustible**



Gráfica 7.3.1. Evolución de la potencia calorífica aportada por el combustible a plena carga



Gráfica 7.3.2. Evolución de la potencia calorífica aportada por el combustible a 50% de mariposa

### 7.3.2. POTENCIA DE PÉRDIDAS CALORÍFICAS

Aplicando la ecuación 7.1.11 se calculan las potencias de las pérdidas caloríficas en el motor. Se van a calcular tanto la potencia de pérdidas caloríficas a través de las paredes de los cilindros, despejando  $\dot{Q}$  (W) de la ecuación, como la potencia de pérdidas en el escape, calculada como el producto del flujo molar de los productos de la combustión en el escape por la temperatura a la que salen.

Despejando de la ecuación 7.1.11 se tiene que

$$\dot{Q} = \dot{N}_{comb} \left\{ \left[ 1(\bar{h}_f^o + \Delta\bar{h})_{H_2O(g)} + \frac{\lambda - 1}{2} (\Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76 \lambda}{2} (\Delta\bar{h})_{N_2} \right] - \left[ 1(\Delta\bar{h})_{H_2} + \frac{\lambda}{2} (\Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76 \lambda}{2} (\Delta\bar{h})_{N_2} \right] \right\} - \dot{W}$$

(Ec. 7.3.2)

donde

$$\dot{N}_{comb} \left[ (\Delta\bar{h})_{H_2O(g)} + \frac{\lambda - 1}{2} (\Delta\bar{h})_{O_2} + \frac{3.76 \lambda}{2} (\Delta\bar{h})_{N_2} \right] = \dot{Q}_{escape}$$

(Ec. 7.3.3)

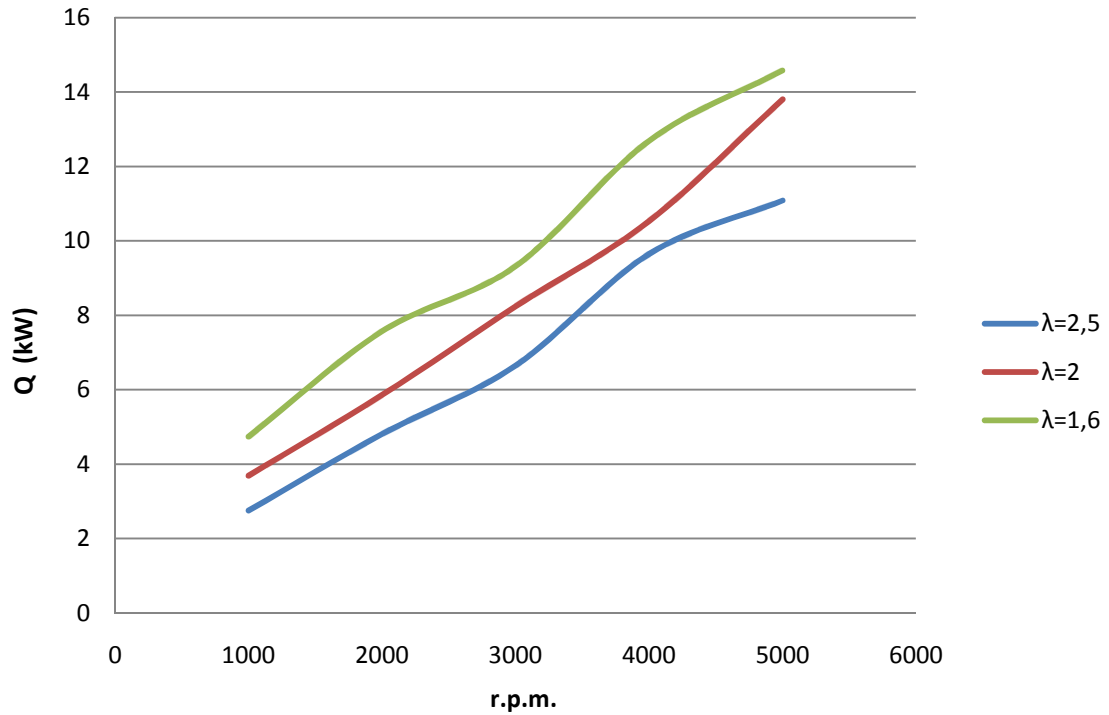
es la potencia de pérdidas caloríficas en el escape.

Si se sustituyen los datos para los distintos valores de revoluciones por minuto, dosado y grado de apertura de mariposa, se obtienen los siguientes valores de potencia de pérdidas caloríficas:

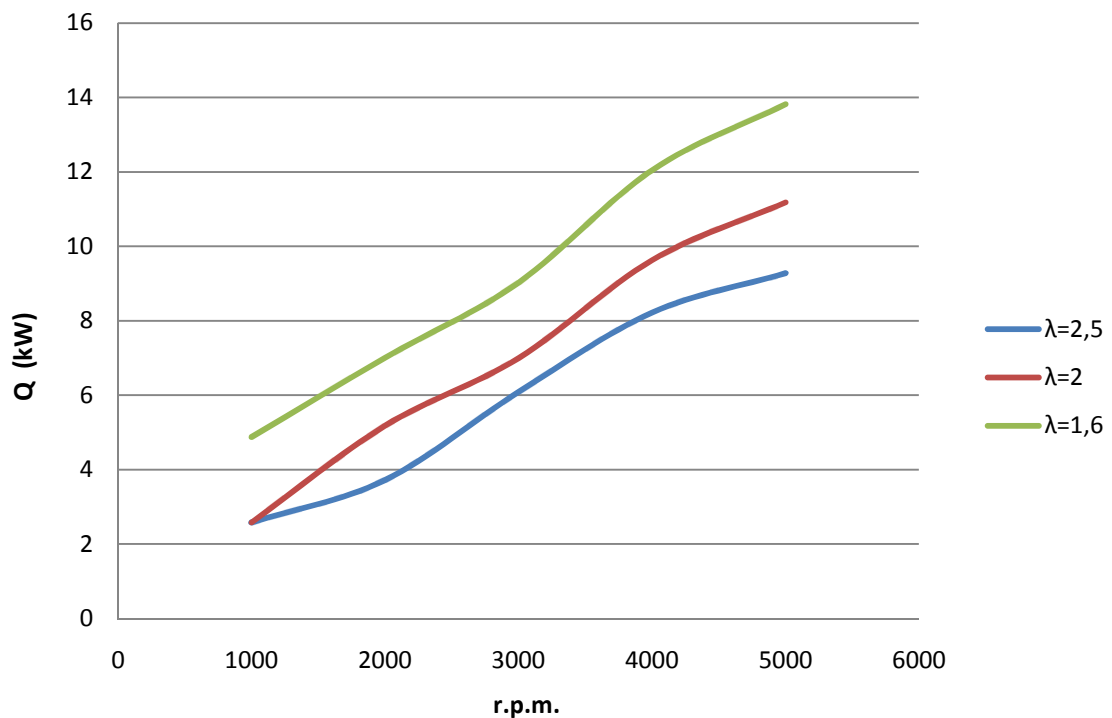
Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	$\dot{Q}$ (kW)	$\dot{Q}_{\text{escape}}$ (kW)
2.5	50	999.548	2.58	1.43
2.5	50	2000.697	3.72	3.89
2.5	50	3002.356	6.09	6.96
2.5	50	4001.306	8.22	11.28
2.5	50	5000.713	9.28	14.34
2.5	100	1000.486	2.75	1.65
2.5	100	2001.103	4.81	3.94
2.5	100	3001.685	6.65	7.49
2.5	100	4001.522	9.65	12.57
2.5	100	5001.116	11.087	17.6
2	50	1001.283	2.58	1.71
2	50	2000.581	5.18	5.72
2	50	3003.072	7	10.46
2	50	4001.049	9.63	15.65
2	50	5001.25	11.18	19.88
2	100	1001.141	3.69	1.86
2	100	2001.029	5.86	6.29
2	100	3002.249	8.24	10.8
2	100	4001.219	10.53	17.94
2	100	5001.262	13.8	23.94
1.6	50	1000.955	4.87	2.14
1.6	50	2000.595	7	7.45
1.6	50	3001.536	9.025	13.37
1.6	50	4001.487	12.045	20.69
1.6	50	5001.665	13.82	26.37
1.6	100	1001.184	4.74	2.43
1.6	100	2001.082	7.57	7.75
1.6	100	3001.458	9.32	13.85
1.6	100	4001.111	12.69	23.43
1.6	100	5000.519	14.58	32.078

Tabla 7.3.2. Potencia de pérdidas caloríficas por las paredes y en el escape

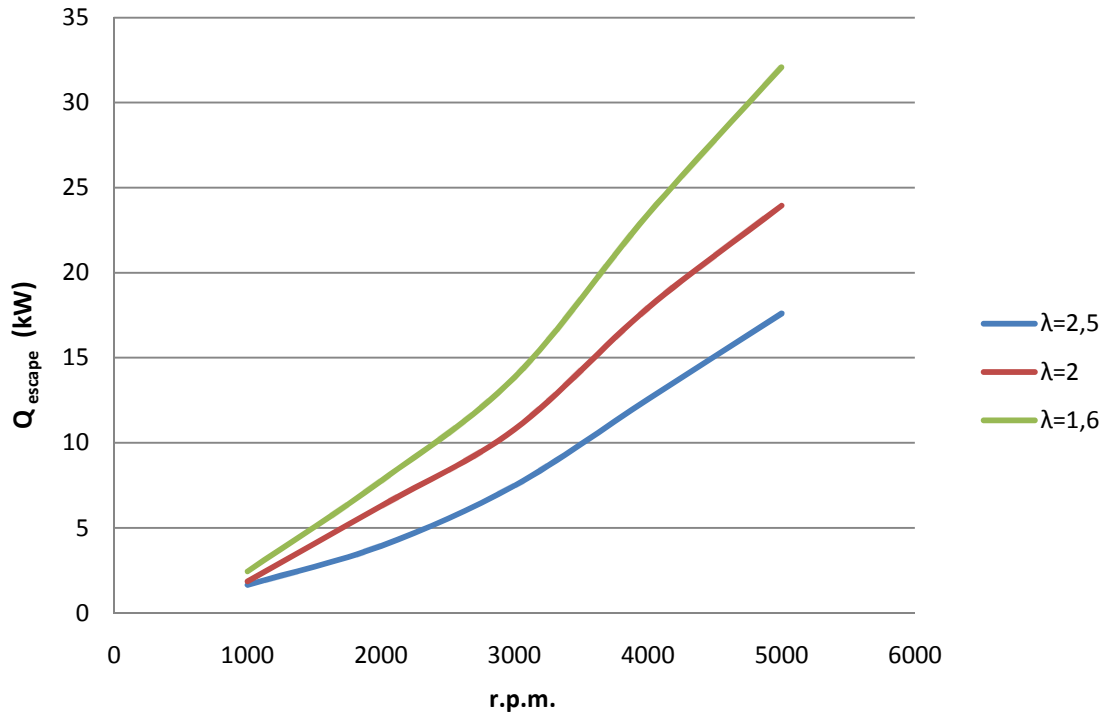




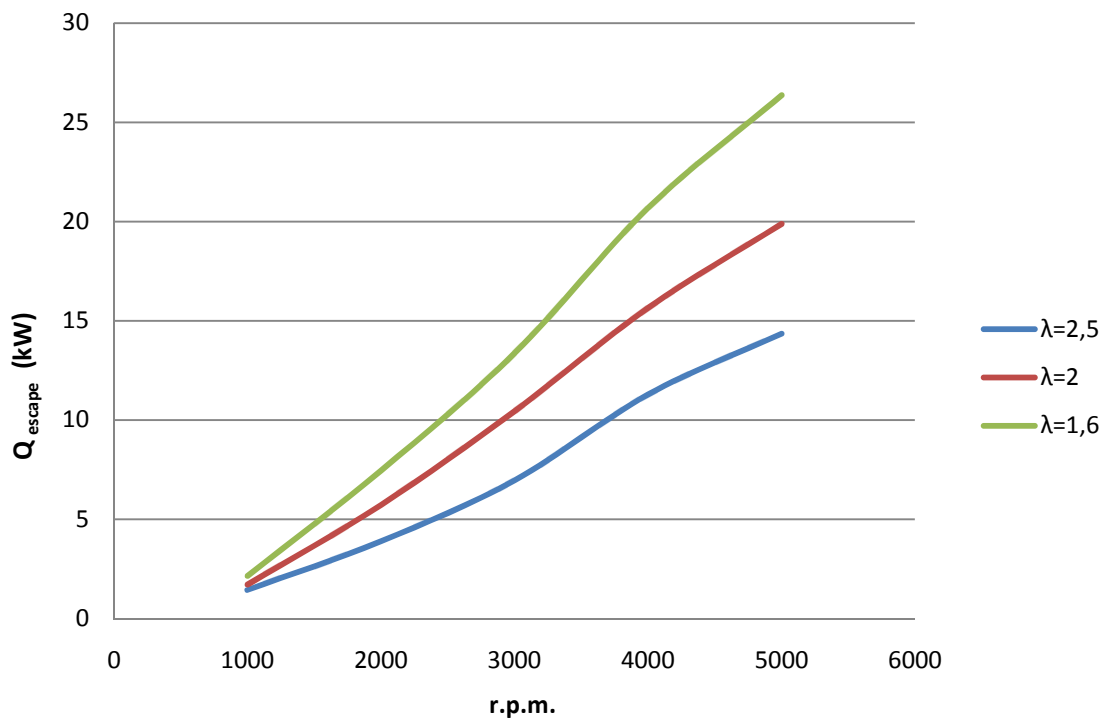
Gráfica 7.3.3. Evolución de la potencia de pérdidas caloríficas por las paredes a plena carga



Gráfica 7.3.4. Evolución de la potencia de pérdidas caloríficas por las paredes a 50% de mariposa



Gráfica 7.3.5. Evolución de la potencia de pérdidas caloríficas en el escape a plena carga



Gráfica 7.3.6. Evolución de la potencia de pérdidas caloríficas en el escape a 50% de mariposa

### 7.3.3. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Si se analizan tanto las tablas de resultados como la representación de la evolución de la potencia de pérdidas caloríficas, se puede ver cómo tanto las pérdidas por las paredes del cilindro como las pérdidas en el escape aumentan conforme aumenta la velocidad de giro del motor, tal y como se esperaba.

No obstante, para poder analizar los resultados obtenidos en mayor profundidad, se van a calcular los porcentajes de la potencia indicada y de las potencias de pérdidas con respecto a la potencia calorífica aportada por el combustible, para, de esta manera, poder hacer una comparación con los datos aportados por la literatura.

Como se vio en el apartado 6.4.3, los valores que se pueden esperar son los siguientes:

- Potencia indicada: 30%
- Potencia de pérdidas caloríficas por las paredes: 17-30%
- Potencia calorífica perdida con los gases de escape: 30-45%

En la tabla 7.3.3 se muestran el porcentaje de la potencia indicada, la potencia de pérdidas totales, la potencia de pérdidas por las paredes y la potencia de pérdidas en el escape:

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	% $N_i$	% $\dot{Q}_{perdidas}$	% $\dot{Q}_{paredes}$	% $\dot{Q}_{escape}$
2.5	50	999.548	33.0980928	66.45331513	42.75549951	23.69781562
2.5	50	2000.697	50.2615228	50.36578594	24.62033163	25.74545431
2.5	50	3002.356	46.430331	55.30892176	25.81083015	29.4980916
2.5	50	4001.306	43.4365658	58.51025741	24.66432389	33.84593352
2.5	50	5000.713	42.4701303	58.38313967	22.93799899	35.44514068
2.5	100	1000.486	38.5139915	63.09348554	39.43342846	23.66005708
2.5	100	2001.103	47.439827	54.39623013	29.90238479	24.49384534
2.5	100	3001.685	47.8503714	54.36057717	25.56561797	28.79495919
2.5	100	4001.522	45.0405515	56.63778552	24.5974181	32.04036742
2.5	100	5001.116	45.3285399	56.46883738	21.82417123	34.64466615
2	50	1001.283	51.1115298	50.12191978	30.14325246	19.97866733
2	50	2000.581	48.6192363	52.79257137	25.08857979	27.70399158
2	50	3003.072	45.770052	55.71036344	22.33519725	33.37516618
2	50	4001.049	44.0456709	57.36007694	21.85037741	35.50969953
2	50	5001.25	41.8539612	58.80148679	21.16550619	37.6359806
2	100	1001.141	43.5714486	57.78973106	38.42236173	19.36736933
2	100	2001.029	46.6326431	54.89418124	26.4757121	28.41846914
2	100	3002.249	46.5439565	55.19442095	23.88666117	31.30775978
2	100	4001.219	45.5121477	55.17278164	20.40637129	34.76641035
2	100	5001.262	43.6722096	57.14665101	20.89623169	36.25041932
1.6	50	1000.955	41.5455165	59.7823513	41.53210426	18.25024704
1.6	50	2000.595	46.7242743	54.56435233	26.43255822	28.13179411
1.6	50	3001.536	45.082835	56.07216581	22.59661962	33.47554619
1.6	50	4001.487	44.2903629	56.75510738	20.88331353	35.87179385
1.6	50	5001.665	42.7261365	58.48985952	20.11271109	38.37714843
1.6	100	1001.184	44.0983031	57.0533974	37.71730874	19.33608866
1.6	100	2001.082	45.6035728	55.4654403	27.40687879	28.05856151
1.6	100	3001.458	46.2089323	55.07561697	22.15385197	32.921765
1.6	100	4001.111	44.9043321	56.35334004	19.79855717	36.55478287
1.6	100	5000.519	44.448827	56.66461871	17.7069343	38.9576844

Tabla 7.3.3. Porcentajes de potencia indicada y potencia de pérdidas

Como se puede apreciar en la tabla, los porcentajes de potencia indicada oscilan entre el 33 y el 51%, valores superiores al 30% que dicta la literatura para los motores alimentados con gasolina, hecho que indica que, como también se puede ver en la tabla 7.2.2, se están alcanzado unos rendimientos muy buenos.

Para las pérdidas caloríficas por las paredes, los datos porcentuales están entre el 18 y el 42%. Sin embargo, si se obvian los valores correspondientes a una velocidad de giro del motor de 1000 rpm, el rango está entre el 18 y el 30%, valores exactos a los que marca la literatura.

Por último, al analizar el calor perdido con los gases de escape, los porcentajes comprendidos entre el 18 y el 38% están ligeramente por debajo de los datos típicos presentados por un MEP. No obstante, si se vuelven a eliminar los datos obtenidos para 1000 rpm, el rango pasa a estar entre el 25 y el 38%, valores mucho más cercanos a los ya comentados.

Por tanto, se puede concluir que, a la vista de los resultados, se ha obtenido un modelo térmico para el motor alimentado por hidrógeno muy satisfactorio, con el que poder estudiar los flujos de calor que se producen en el mismo.

## 8. MODELO DE COMBUSTIÓN

El propósito de este capítulo es la obtención de un modelo de combustión para el motor de combustión de hidrógeno objeto de estudio en el presente Proyecto Fin de Carrera.

### 8.1. GEOMETRÍA Y MALLADO

El principal objetivo a la hora de elegir una geometría para la simulación ha sido la obtención de un volumen del modelo lo más ajustado posible a la realidad, prestándose especial atención al volumen de la cámara de combustión ya que éste resulta de vital importancia para la evolución de la presión en el cilindro.

El volumen total del cilindro es la cilindrada unitaria más el volumen de la cámara de combustión. Estos valores se calculan empleando los datos de la ficha técnica del motor expuesta en el apartado anterior.

La cilindrada unitaria del motor es:

$$V_D = \frac{\pi D^2}{4} S = \frac{\pi (7.65)^2}{4} 7.56 = 347.48 \text{ cm}^3 \quad (\text{Ec. 8.1.1})$$

El volumen de la cámara de combustión se puede expresar en función de la relación de compresión del motor:

$$r = \frac{V_C + V_D}{V_C} \implies V_C = \frac{V_D}{r-1} \quad (\text{Ecs. 8.1.2})$$

$$V_C = \frac{347.48}{10.5-1} = 36.58 \text{ cm}^3 \quad (\text{Ec. 8.1.3})$$

Por lo tanto, el volumen total del cilindro es:

$$V_D + V_C = 347.48 + 36.58 = 384.06 \text{ cm}^3 \quad (\text{Ec. 8.1.4})$$

El mallado final, realizado mediante Ansys clásico, se muestra en la figura 8.1.1. El volumen que abarca es de  $380.369 \text{ cm}^3$ , con un total de 33000 elementos en posición de PMI.

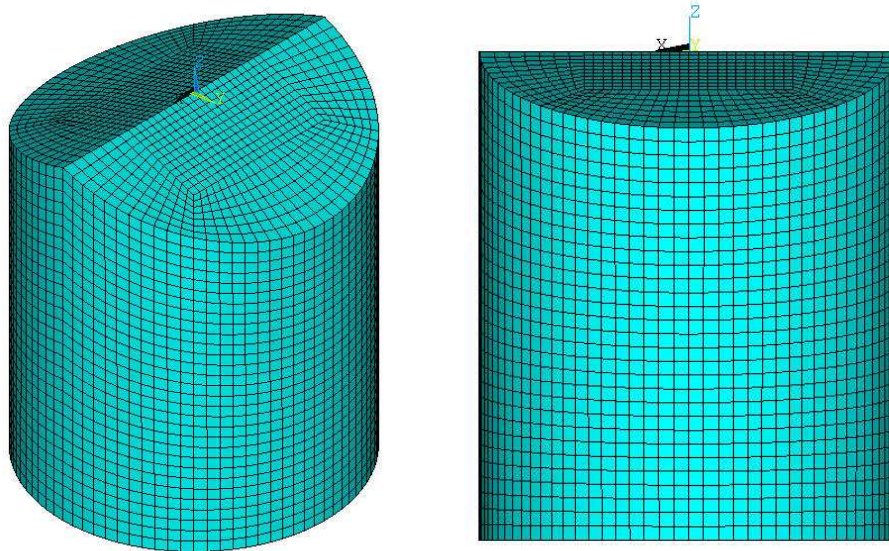


Figura 8.1.1. Mallado del cilindro en PMI

Selected Region:	
Assembly	
Number of Nodes:	35495
Number of Elements:	33000
Hexahedra:	33000
Extents:	
min x, max x:	-0.03825 [m], 0.03825 [m]
min y, max y:	-0.03825 [m], 0.03825 [m]
min z, max z:	-0.089465 [m], 0 [m]
Max Edge Length Ratio:	1.74294
Volume:	0.000380369 [m <sup>3</sup> ]

Figura 8.1.2. Características del mallado

Dadas las características del proceso, es necesaria una variación del volumen de fluido conforme se va desarrollando la simulación. Para ello, se le aplica un desplazamiento a la base del dominio (la cabeza del pistón) de manera que recorra la carrera hasta PMS y de vuelta a PMI.

La parte de la malla que se deforma para representar este movimiento es la comprendida entre la cara inferior o cabeza del pistón, que tiene un movimiento que se comentará a continuación, y la cámara de combustión, que se mantiene fija. La deformación de la malla en distintos instantes del proceso se muestra en la figura 8.1.3.

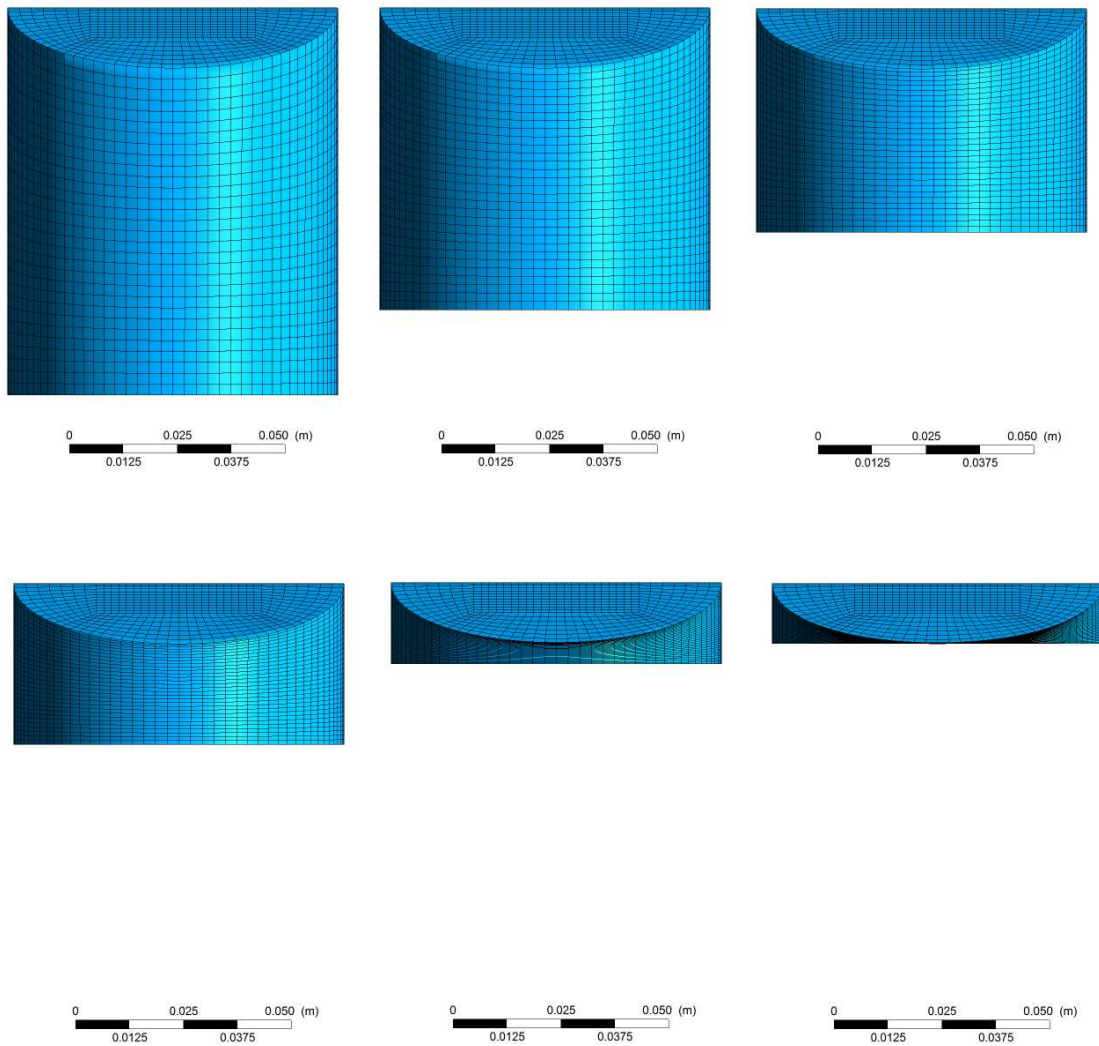


Figura 8.1.3. Mallado para diferentes instantes del proceso

La expresión del movimiento de la cabeza del pistón se puede obtener fácilmente tras estudiar el mecanismo biela-manivela que lo genera, obteniéndose la expresión 8.1.5:

$$Z_{\text{piston}} = -\frac{17}{32}S + \frac{S}{2} \left( \cos \left( \frac{2\pi n}{60} t \right) \right) + \frac{1}{16} \cos \left( \frac{2\pi n}{60} 2t \right) \quad (\text{Ec. 8.1.5})$$

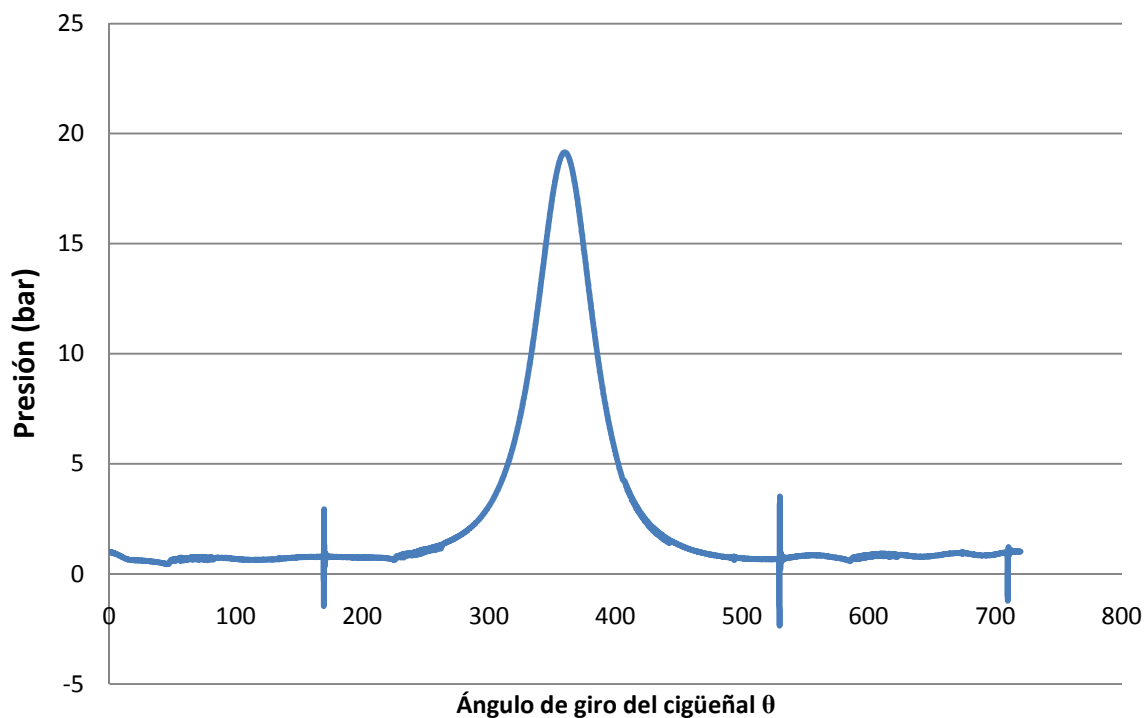


## 8.2. AJUSTE DEL MODELO SIN COMBUSTIÓN

En este apartado se va a desarrollar un primer ajuste del modelo sin combustión para un régimen de giro de 2000 revoluciones por minuto y un dosado relativo de  $\lambda=2$ , es decir, la masa de aire que entra acompañando al hidrógeno es el doble de la mínima necesaria para una combustión completa. De esta manera se puede comprobar el nivel de ajuste de la simulación y los datos experimentales antes de estudiar el ajuste del proceso de combustión.

### 8.2.1. DATOS EXPERIMENTALES

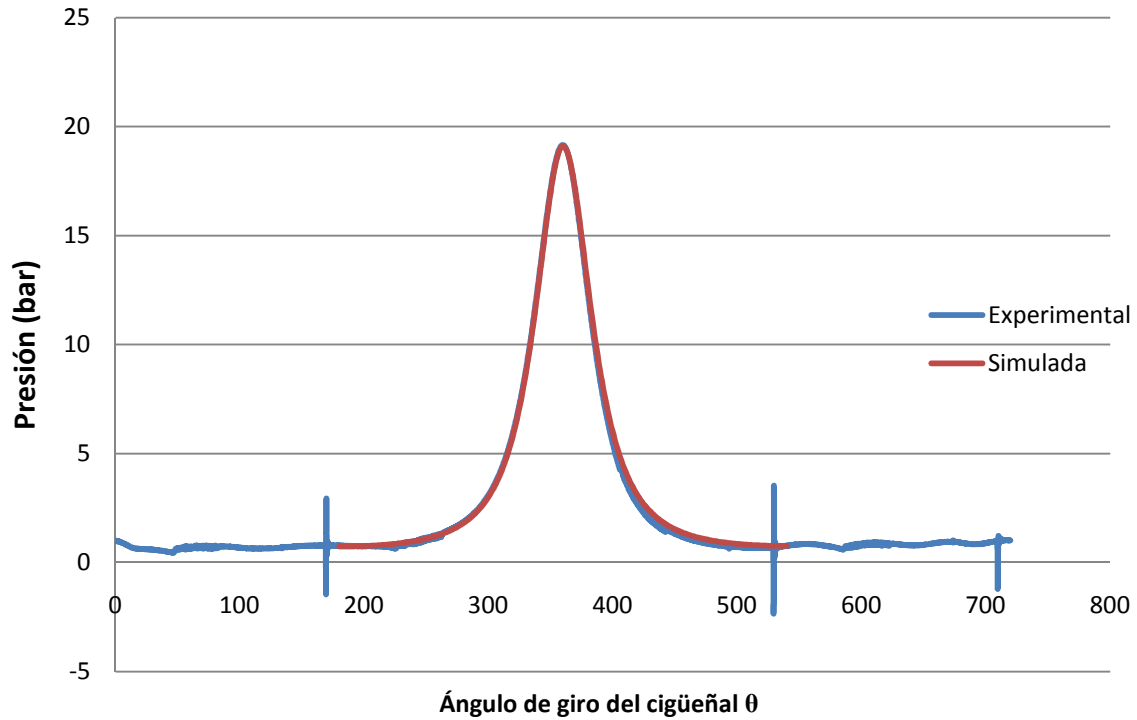
Los datos experimentales de los que se dispone para el régimen de giro descrito son los valores de presión en el cilindro para el caso sin combustión en el cilindro.



Gráfica 8.2.1. Datos experimentales para 2000 rpm y  $\lambda=2$

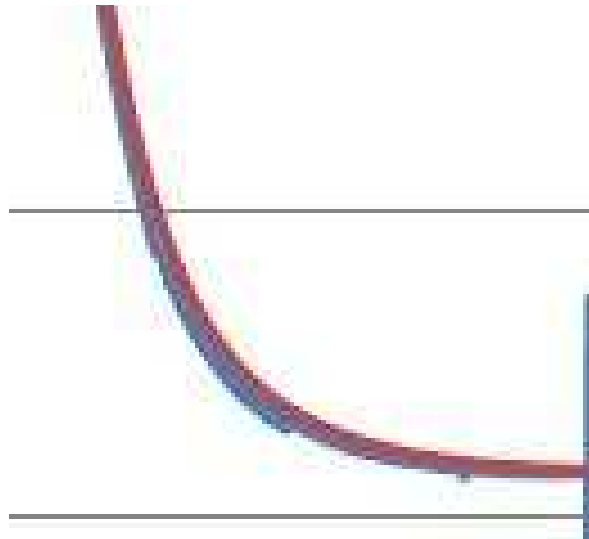
### 8.2.2. COMPARACIÓN CON LOS RESULTADOS SIMULADOS

Se simulan los procesos de compresión y expansión en la geometría modelizada sin reacción química, con unas condiciones iniciales de presión equivalentes a las condiciones iniciales del ciclo de compresión real. A continuación, se muestran los resultados de dicha simulación junto con los datos reales obtenidos de la experimentación:



**Gráfica 8.2.1. Presión media en el cilindro simulada y experimental para un ciclo sin salto de chispa**

Se puede observar que el resultado obtenido en la simulación se ajusta casi a la perfección al caso real, alcanzándose exactamente el mismo pico de presión. Sin embargo, se observa una, en principio, inapreciable diferencia en la parte final de la expansión, quedando la “cola” de la gráfica simulada ligeramente por encima de la real.



**Figura 8.2.1. Diferencia entre la curva simulada (rojo) y la real (azul)  
 al final de la carrera de expansión**

Este hecho puede deberse principalmente a tres posibles causas:

- Debido al avance a la apertura de las válvulas de escape (AAE). Para el motor en estudio, el valor del AAE es, como se puede ver en la tabla 8.2.1, de 20.2° respecto a PMI.

VÁLVULA	DIÁMETRO [mm]	ALZADA [mm]	ÁNGULOS DE LA DISTRIBUCIÓN	
Admisión	29.50	8.40	AAA	19.1°
			RCA	15.1°
Escape	26.00	8.60	AAE	20.2°
			RCE	15.3°

Tabla 8.2.1. Parámetros de las válvulas

Cabe señalar que los valores del diagrama de distribución, ángulos necesarios para mejorar el llenado y disminuir el trabajo de bombeo, se tomaron con una referencia de 1mm desde la posición de reposo de ambos tipos de válvulas. Es decir, los ángulos relativos a los avances a la apertura, AAA y AAE, se miden tras un desplazamiento de magnitud 1mm en la dirección del eje de las respectivas válvulas en su apertura. Por el contrario, los ángulos del retraso al cierre, RCA y RCE, son medidos cuando falta 1mm en la dirección de sus ejes para el cierre de los colectores correspondientes respecto de la cámara de combustión.

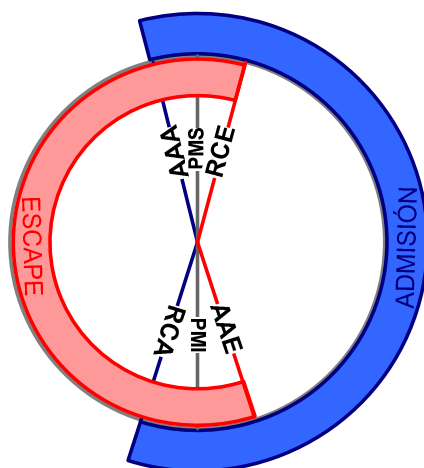


Figura 8.2.2. Diagrama de distribución

Por lo tanto, aunque pueda parecer que 20.2° no son suficientes para explicar la discrepancia existente en el final de la expansión (figura 8.2.1), el AAE puede ser

un factor determinante a la hora de estudiar este fenómeno si analizamos el funcionamiento del mecanismo de accionamiento de las válvulas.

Dicho mecanismo se encuentra alojado en la culata y en la carcasa del árbol de levas. Los árboles de levas son introducidos longitudinalmente en la carcasa y se apoyan en tres cojinetes. La impulsión de las válvulas, compuesta por válvula, balancín flotante de rodillo y elemento hidráulico de apoyo, es un conjunto alojado en la culata. Este tipo de impulsión tiene varias ventajas, entre ellas, menor fricción y menos masas en movimiento. Esto se traduce en que el motor tiene que aplicar menos fuerza para mover los árboles de levas.

Su funcionamiento es sencillo (figura 8.2.3). El elemento de apoyo hace las veces de punto de giro para el movimiento del balancín. La leva actúa sobre el rodillo y oprime el balancín hacia abajo. El otro extremo del balancín acciona la válvula. Debido a que el brazo de palanca entre el rodillo y el elemento de apoyo es más corto que entre la válvula y el elemento de apoyo, se consigue una gran carrera de la válvula, con un lóbulo relativamente pequeño en la leva.

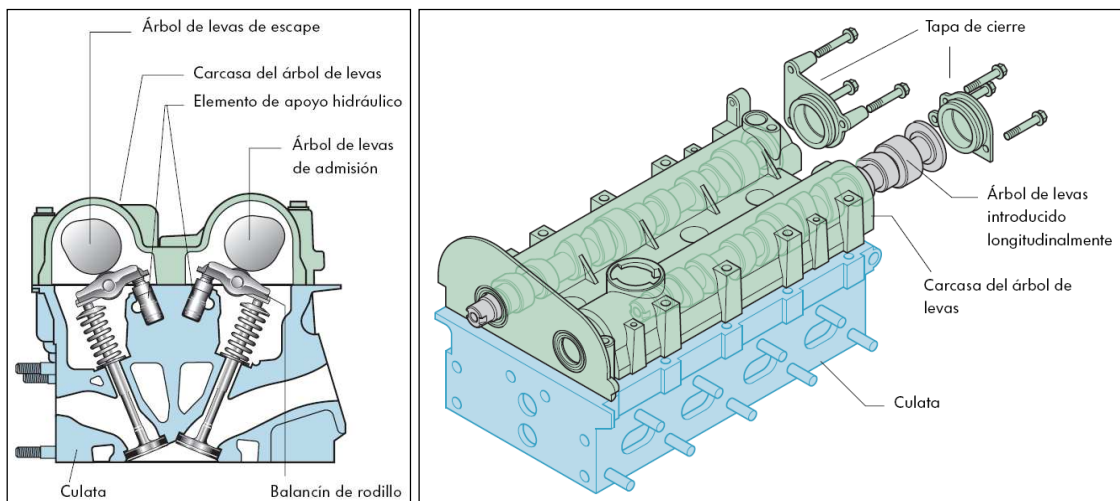


Figura 8.2.3. Mecanismo de accionamiento de las válvulas.

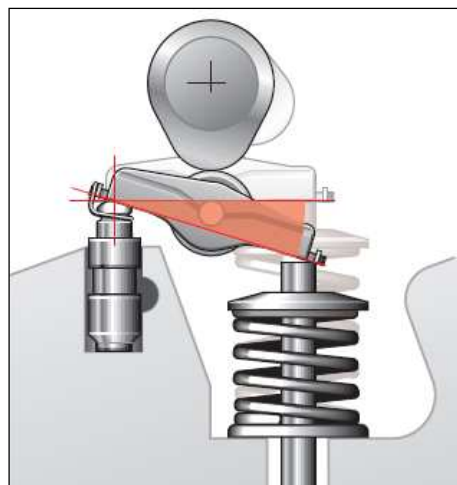


Figura 8.2.4. Accionamiento de las válvulas

El hecho de que el AAE esté medido con una alzada de 1mm de las válvulas, indica que en realidad éstas comienzan a abrirse antes, debido al lóbulo de la leva. Como consecuencia, estamos perdiendo masa en el cilindro desde hasta unos 40-50° antes del PMI, produciéndose una mayor presión en la simulación.

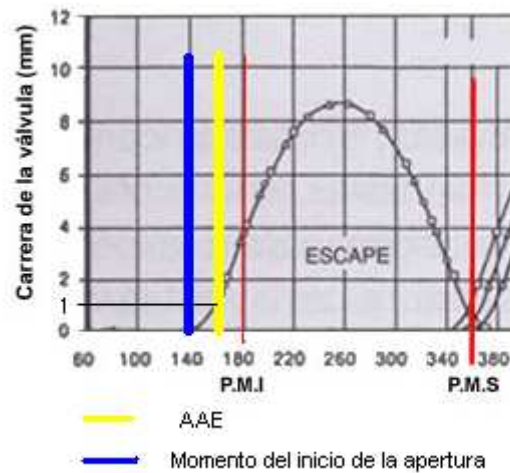


Figura 8.2.5. Ejemplo del movimiento de una válvula de escape

- Existe también una infiltración de gases desde el cilindro al cárter debido al salto de presión, conocida como blow-by. Esta, aunque es pequeña, va a suponer una menor masa en el cilindro que la teórica y por tanto, una presión en la simulación mayor que la real.
- Por último, la simplificación empleada al definir los gases como gases ideales sin duda supondrá cierta desviación con el caso real.

## 8.3. AJUSTE DEL MODELO CON COMBUSTIÓN

En el siguiente apartado se va a explicar la modelación de la combustión. Para ello, se mostrarán las herramientas que posee ANSYS-CFX, y la forma en la que se deben utilizar para definir un proceso como este en ANSYS.

Simular un mecanismo de combustión no es una cosa sencilla. Aunque se pueda describir una llama sin ningún tipo de información química, modelar la propagación de esta requiere conocimientos de velocidades de reacción, concentración de productos y otros parámetros, como veremos más adelante. Es esencial esta información sobre la cinética de reacción para describir un buen modelo de combustión. Así, en una mezcla combustible-oxidante, esta se quemará si la reacción es lo suficientemente rápida como para aguantar, hasta que en ella solo tengamos productos de la combustión. Si es demasiado lenta, se extinguirá y si es demasiado rápida, explotará.

Cuando un usuario desea simular una cierta reacción química o un cierto proceso de combustión, debe definir el fluido como una mezcla reactiva. Se define como una mezcla porque dentro de nuestro volumen de control solo existirán como mezcla, y se define como reactiva para que se rijan por las ecuaciones de combustión, según la reacción que se elija. Una vez que se hace esto, se puede elegir el tipo de reacción que se desea. Al “importar” o “llamar” dicha reacción esta trae consigo implícitamente todos los parámetros que tiene definidos, así como los reactivos necesarios para dicha reacción.

### 8.3.1. ELECCIÓN DEL MODELO DE COMBUSTIÓN

De entre todos los modelos de combustión ofrecidos por la herramienta computacional, el seleccionado para desarrollar el presente Proyecto Fin de Carrera ha sido el Eddy Dissipation model, ya que posiblemente sea el mejor modelo aplicado a los flujos turbulentos, cuando la reacción química es muy rápida en relación con los procesos de transporte en el flujo, además de ser un modelo de combustión sencillo y muy empleado. Este modelo se deriva del trabajo de Magnussen y Hjertager (1976) y se basa en el hecho de que la mayoría de los combustibles se queman rápidamente y la tasa global de reacción es controlada por el mezclado turbulento. En el modelo Eddy Dissipation la tasa neta de producción de cada especie está dada por el menor valor arrojado por dos expresiones en las cuales la tasa química de reacción está gobernada por la turbulencia. En otras palabras, la combustión procede dondequiera que exista turbulencia.

El análisis de la combustión de la mezcla se va a realizar durante las fases de compresión y expansión, simulándose de esta manera una vuelta entera de giro de cigüeñal y la mitad del ciclo completo del motor.

El fluido, dentro de la cámara de combustión se encuentra cerrado por las paredes del cilindro.

Estas paredes que encierran el fluido en la cámara de combustión, sin embargo, estarán sometidas a altísimas temperaturas y presiones del fluido. Modelar, el flujo de calor

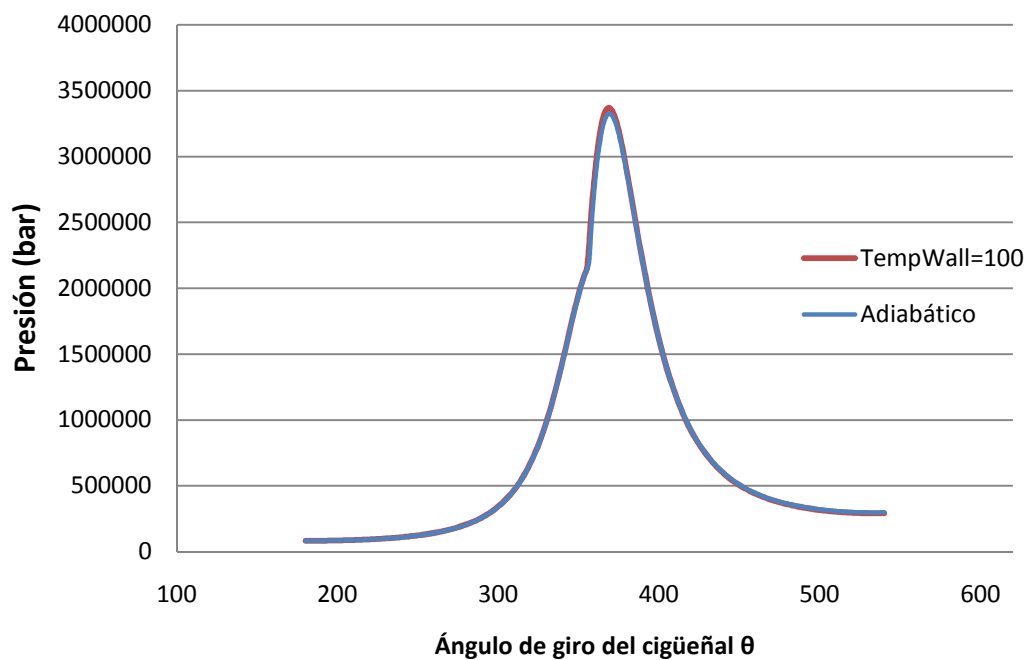
que se realiza a través de estas paredes es muy importante. Es por eso, que habrá que modelar correctamente la transferencia de calor de las paredes al exterior, si se quiere lograr un buen modelo de combustión.

### 8.3.2. TRANSFERENCIA DE CALOR

ANSYS-CFX ofrece la posibilidad de modelar esta transferencia de calor de diferentes maneras: imponiendo una temperatura en las paredes, estableciendo un flujo de calor a través de ellas o definiendo el coeficiente de transferencia de calor y la temperatura que poseen.

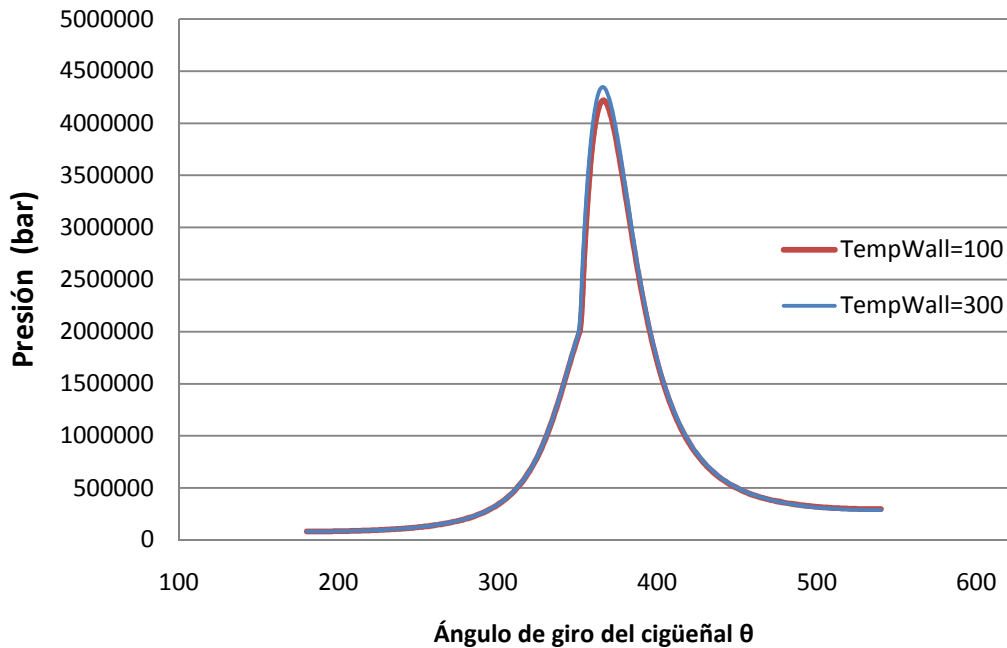
Antes de elegir una opción, se hacen unas simulaciones empleando las diferentes opciones ofrecidas para poder hacer una comparativa entre ellas y ver la influencia que tienen sobre el modelo.

En primer lugar se muestran los resultados obtenidos para una simulación con las paredes adiabáticas y otra en la que a la pared del cilindro se le impone una temperatura fija de 100 °C:



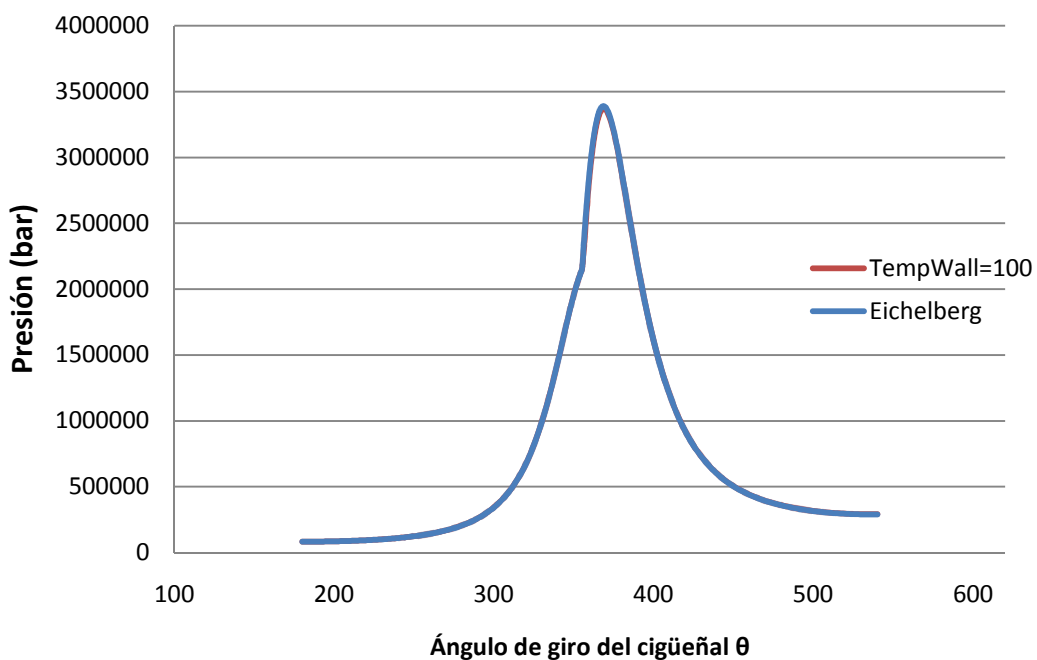
**Gráfica 8.3.1. Presión media en el cilindro para el caso adiabático y para el caso de imponer una temperatura en la pared del mismo**

Para un segundo caso, se hace una comparación entre dos simulaciones a las que se les ha impuesto distintas temperaturas en las paredes del cilindro:



**Gráfica 8.3.2. Presión media en el cilindro para distintas temperaturas de la pared del mismo**

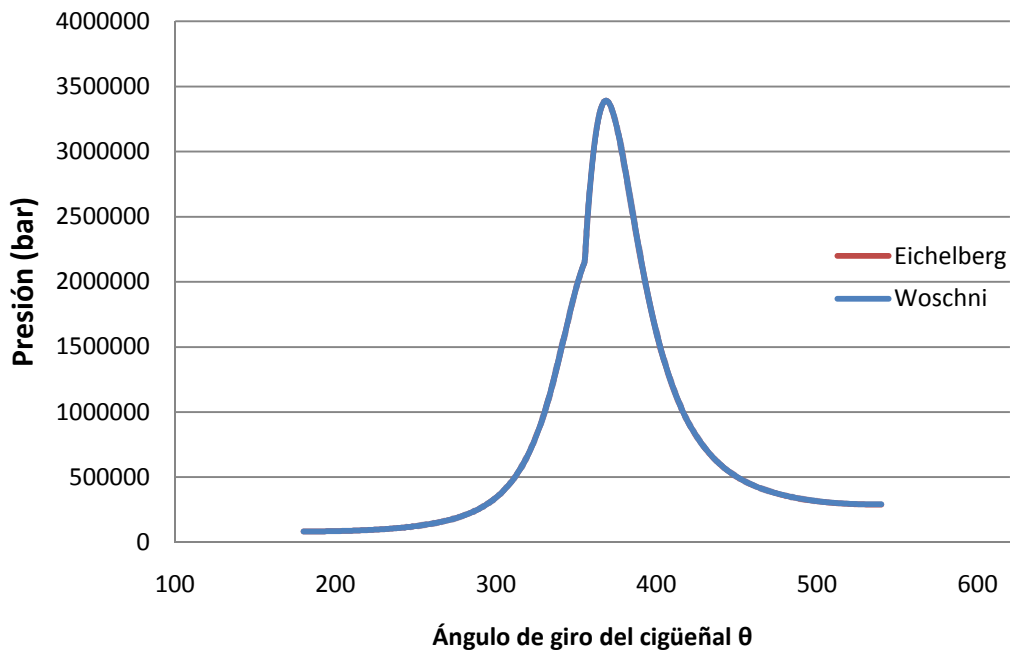
Otro posible caso es el de definir un coeficiente de transferencia de calor a través de las paredes del modelo. En la siguiente gráfica se muestra la diferencia entre imponer una temperatura en las paredes de 100 °C y un coeficiente de transferencia de calor a través de ellas:



**Gráfica 8.3.3. Presión media en el cilindro para distintas modelizaciones de la transferencia de calor**



Por último, se muestra una comparación de las curvas de presión media en el cilindro obtenidas para los dos coeficientes de transmisión de calor presentados en el apartado 6.4 del presente Proyecto Fin de Carrera:



**Gráfica 8.3.4. Presión media en el cilindro para distintos coeficientes de transferencia de calor**

Como se puede apreciar en las gráficas, las diferencias de la presión en el interior del cilindro en función de la modelización de la transferencia de calor no son relevantes.

Sin embargo, se sabe por el capítulo anterior y por la literatura que por las paredes se pierde en torno al 25% de la potencia calorífica aportada por el combustible, por lo que no parece lógico que las curvas de presión no se distingan al variar la modelización de la transferencia de calor por las mismas.

Por este motivo, se va a realizar un estudio de los flujos de calor por las fronteras del cilindro para determinar si el modelo que se está empleando es apropiado. Mediante post-procesado en Ansys-CFX empleando el lenguaje PERL y la ayuda de Matlab (Anexo B), se calcula el trabajo perdido en forma de a través de las paredes para las tres modelizaciones descritas, con  $\lambda=2$ , 2000 rpm y plena carga, obteniéndose los siguientes resultados:

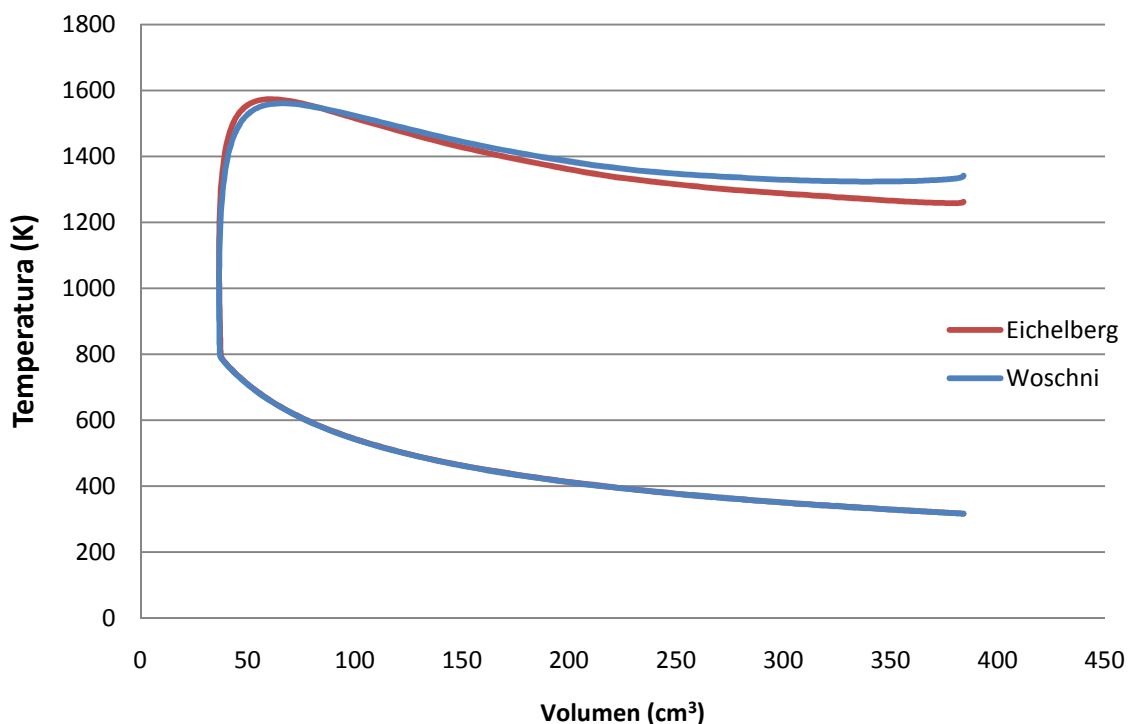
- El trabajo perdido durante la compresión-combustión-expansión imponiendo una temperatura en las paredes de 300 °C es de 21 J, el cual supone en torno al 15 % del trabajo aportado por el combustible por admisión y por cilindro. Dicho trabajo se calcula como:

$$Q_{H_2} \frac{l_n}{\text{min}} \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \frac{0.082 \frac{\text{l} \cdot \text{atm}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}}{1 l_n} \frac{1}{273 \text{ K}} \frac{2.016 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \frac{120 \text{ MJ}}{1000 \text{ g}} \frac{60 \text{ s}}{n \text{ vueltas}} \frac{2 \text{ vueltas}}{1 \text{ admisión}} \frac{1}{4} \quad (\text{Ec. 8.3.1})$$

obteniéndose el resultado en [J/admisión.cilindro].

- Si se modeliza la transferencia de calor mediante la ecuación de Woschni, se obtiene un trabajo perdido de 35J, representando en torno al 20% del total del trabajo aportado por el combustible.
- Por último, empleando la ecuación de Eichelberg, el trabajo que se escapa por las paredes es de 75 J, del orden del 45% del total.

El efecto de los flujos de calor a través de las paredes sí que se puede apreciar en la temperatura a lo largo de la simulación. En la gráfica 8.3.5 se puede ver esta diferencia en las curvas de temperatura para las modelizaciones de la transferencia de calor mediante las ecuaciones semiempíricas de Woschni y Eichelberg:



Gráfica 8.3.5. Diagrama temperatura-volumen para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y plena carga

Es necesario aclarar que estas simulaciones no están ajustadas, y por tanto los valores obtenidos son solo orientativos. No obstante, estos resultados muestran que las variaciones en el flujo de pérdidas por las paredes, aún siendo apreciables en las curvas de temperatura, no se distinguen en las curvas de presión. Para el caso representado en la gráfica anterior, se observa una diferencia al final de la expansión de 80 K en la temperatura y de tan solo  $8.79 \times 10^{-3}$  bar en la presión, valor inapreciable frente a las presiones existentes en el cilindro.

Otro aspecto de gran relevancia es la corroboración mediante datos de la simulación de que, tal como se expone en la tabla 6.4.4, las pérdidas de calor en la compresión y la combustión son solo del orden del 10-15%, produciéndose el resto en la expansión. Por tanto, la localización del pico de presión alcanzado durante la simulación apenas se verá afectado por motivos de modelización de la transferencia de calor.

Como consecuencia de los resultados obtenidos, se ha decidido continuar con la modelización de la transferencia de calor ya empleada en los Proyectos Fin de Carrera que preceden a este. De esta manera, se han impuesto las temperaturas de las tres paredes que existen en la cámara de combustión, a través de las cuales se realiza la transferencia de calor. Las temperaturas de las paredes se han definido de esta manera, basándose en datos típicos para motores de gasolina expuestos en el apartado 6.4 del presente proyecto:

Temperatura de la culata = 250 C°

Temperatura de la pared del cilindro = 200 C°

Temperatura de la cara del pistón = 350 C°

### 8.3.3. PARÁMETROS DEL MODELO

A continuación se analizan los parámetros fundamentales a modelizar para conseguir una combustión lo más cercana posible a la realidad con el modelo Eddy Dissipation.

**Chemical Timescale** (escala de tiempos para la química): El ratio de avance de la reacción se pone a 0 si el tiempo de la turbulencia es menor que este valor. Este es un modelo de predicción de la extinción local de la combustión muy simple, pero debe ser ajustado para obtener los resultados deseados.

**Extinction Temperature:** Deshabilita la reacción de combustión por debajo de esta temperatura.

**Mixing Rate Limit:** Para evitar modelos indeseados de combustión, en lugares donde el ratio  $\epsilon/k$  es muy grande (cerca de las paredes).

**Eddy Dissipation Model Coefficient A/B:** Los valores por defecto de estas constantes son adecuados para la mayoría de los casos de interés general. Sin embargo, a veces estos valores no son los adecuados y se debe realizar una aproximación mediante resultados experimentales. Para regiones de gran confinamiento (el caso que se da en el modelo que se está estudiando) se debe tener cuidado, ya que el ratio  $\epsilon/k$  es muy pequeño. Es en estos casos, cuando se necesita realizar una búsqueda experimental de estos parámetros.

El coeficiente B sirve para activar el limitador de productos. Para el presente PFC se emplea un valor de “-1” de manera que la opción de limitador de producto queda desactivada.

El A, sin embargo, aparece dentro de la ecuación que define la velocidad de reacción:

$$\bar{\omega}_F = A_{EB} \frac{\epsilon}{k} \min \left[ \bar{C}_F, \frac{\bar{C}_O}{\nu}, B_{EB} \frac{\bar{C}_P}{(1 + \nu)} \right] \quad (\text{Ec. 8.3.2})$$

en la que  $\bar{\omega}_F$  es la media del ratio de avance de la reacción.

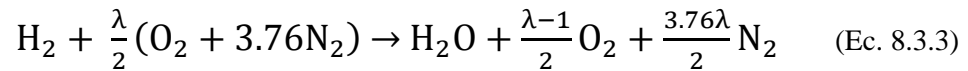
Este parámetro A regula el ratio de avance de la reacción química de combustión. Es decir, define la cinética de la reacción de combustión. Y así, conforme aumenta su valor, la reacción se hace más rápida, más violenta y más potente. Este parámetro es exclusivamente computacional, y es el que cobra mayor importancia a la hora de ajustar el modelo

### 8.3.4. INICIALIZACIÓN Y FUNCIONAMIENTO DEL MODELO

Otro aspecto importante de la simulación es la inicialización del dominio. Se necesita especificar la presión, la temperatura y la velocidad inicial de la mezcla, así como las fracciones másicas de los reactivos.

Los valores de presión y temperatura con los que se inicializan las simulaciones se obtienen experimentalmente y se muestran más adelante, mientras que los valores iniciales de la velocidad de los gases en el cilindro provienen de las simulaciones realizadas por D. Mikel Aldaz Unzu en su Proyecto Fin de Carrera “Simulación del proceso de admisión en un MCI alimentado por hidrógeno”.

Se va a trabajar con tres dosados diferentes de la mezcla en el cilindro:  $\lambda=1.6$ ,  $\lambda=2$  y  $\lambda=2.5$ . Es necesario especificar las fracciones másicas del  $H_2$  y del  $O_2$  presentes en el cilindro en el inicio de la simulación, que se calculan como se muestra a continuación:



Se toma la composición del aire como: 78.9%  $N_2$ , 21%  $O_2$ , 0.1%  $H_2O$ .

$$\begin{aligned} \text{Peso } O_2 &= 32 \frac{g}{mol} \cdot \frac{\lambda}{2} mol = 16\lambda [g] \\ \text{Peso } N_2 &= 28 \frac{g}{mol} \cdot \frac{3.76\lambda}{2} mol = 52.64\lambda [g] \\ \text{Peso } H_2 &= 2 \frac{g}{mol} \cdot 1 mol = 2 [g] \end{aligned} \quad (\text{Ecs. 8.3.4})$$

De esta forma se pueden calcular las fracciones másicas:

$$\begin{aligned} mf_{H_2} &= \frac{2}{2 + 68.64\lambda} \\ mf_{O_2} &= \frac{16\lambda}{2 + 68.64\lambda} \end{aligned} \quad (\text{Ecs. 8.3.5})$$

Para los valores de  $\lambda$  que empleados, se obtienen los siguientes valores:

**$\lambda=1.6$**

$$\begin{aligned} mf_{H_2} &= 0.0179 \\ mf_{O_2} &= 0.229 \end{aligned} \quad (\text{Ecs. 8.3.6})$$

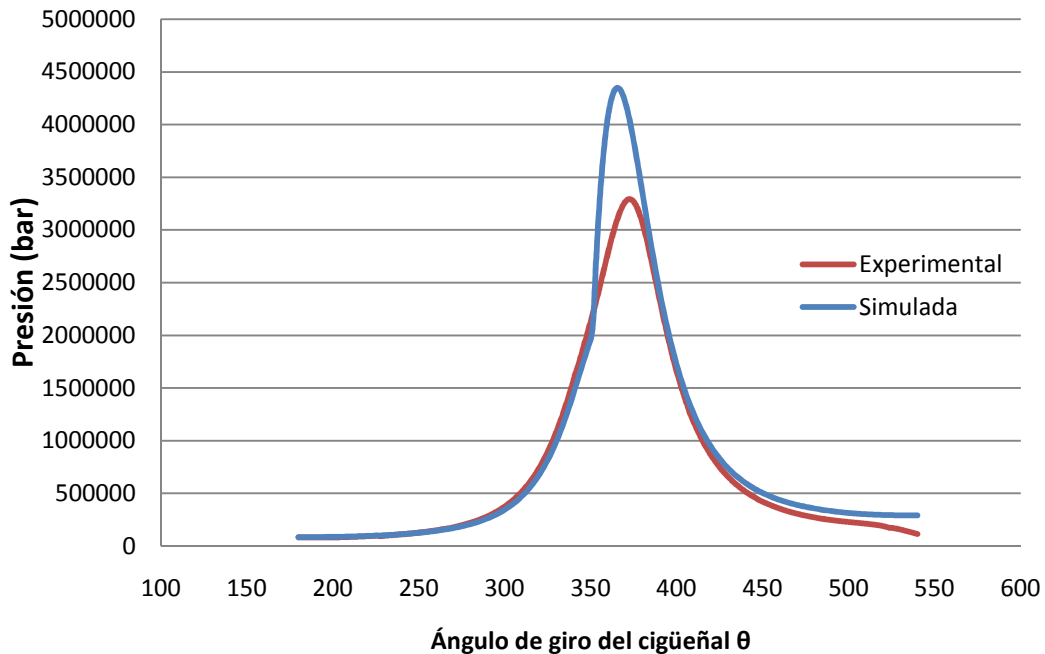
$\lambda=2$

$mf_{H_2} = 0.0145$   
 $mf_{O_2} = 0.2297$  (Ecs. 8.3.7)

$\lambda=2.5$

$mf_{H_2} = 0.0115$   
 $mf_{O_2} = 0.23$  (Ecs. 8.38)

Una vez inicializada correctamente la simulación, se puede verificar el funcionamiento del modelo. A continuación se muestran los valores de presión en el cilindro obtenidos mediante la herramienta computacional comparados con los valores de presión reales:



Gráfica 8.3.6. Presión media en el cilindro simulada y experimental para un ciclo con combustión

Se puede observar perfectamente que el salto de presión debido a la combustión se produce correctamente, a pesar de que el pico de presión es muy superior en la curva simulada debido a que aún no se ha ajustado correctamente.

Se comprueba además que la diferencia en la parte final de la expansión comentada anteriormente es ahora mucho más apreciable, quedando la “cola” de la gráfica simulada por encima de la real. Las posibles explicaciones para este fenómeno siguen siendo las mismas que se comentaron en el apartado anterior.

Como última comprobación del funcionamiento del modelo, en las siguientes imágenes se representa la fracción másica de agua en el cilindro para diferentes instantes del ciclo motor una vez que se ha dado el salto de la chispa:

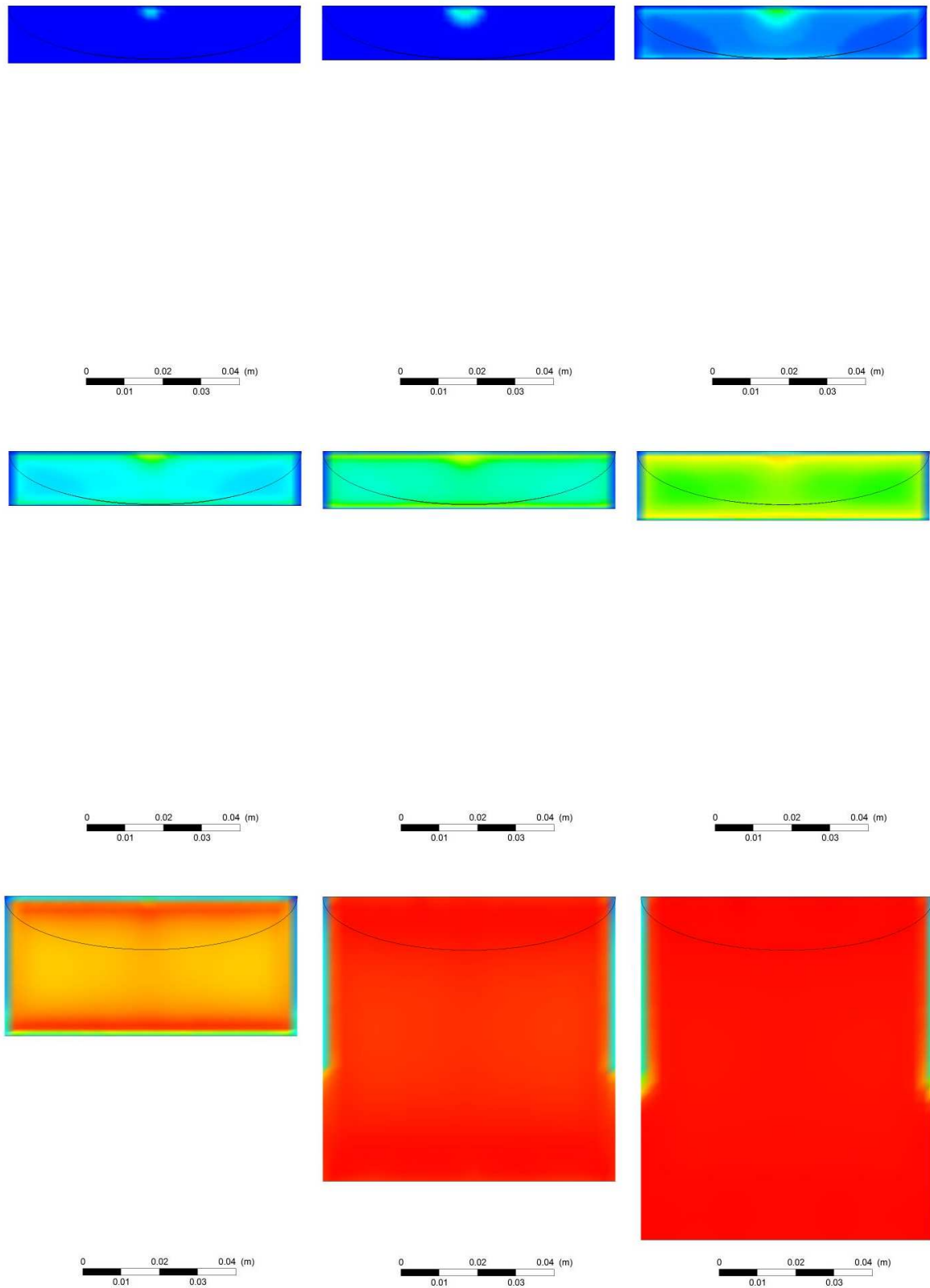


Figura 8.3.1. Mapas de fracción másica de agua para diferentes instantes de la expansión

Cabe señalar que en el modelo Eddy Dissipation, como se ha explicado con anterioridad, la combustión se desarrolla debido a la turbulencia, y por tanto no se crea un frente de llama que separe la mezcla fresca de los productos de la combustión.

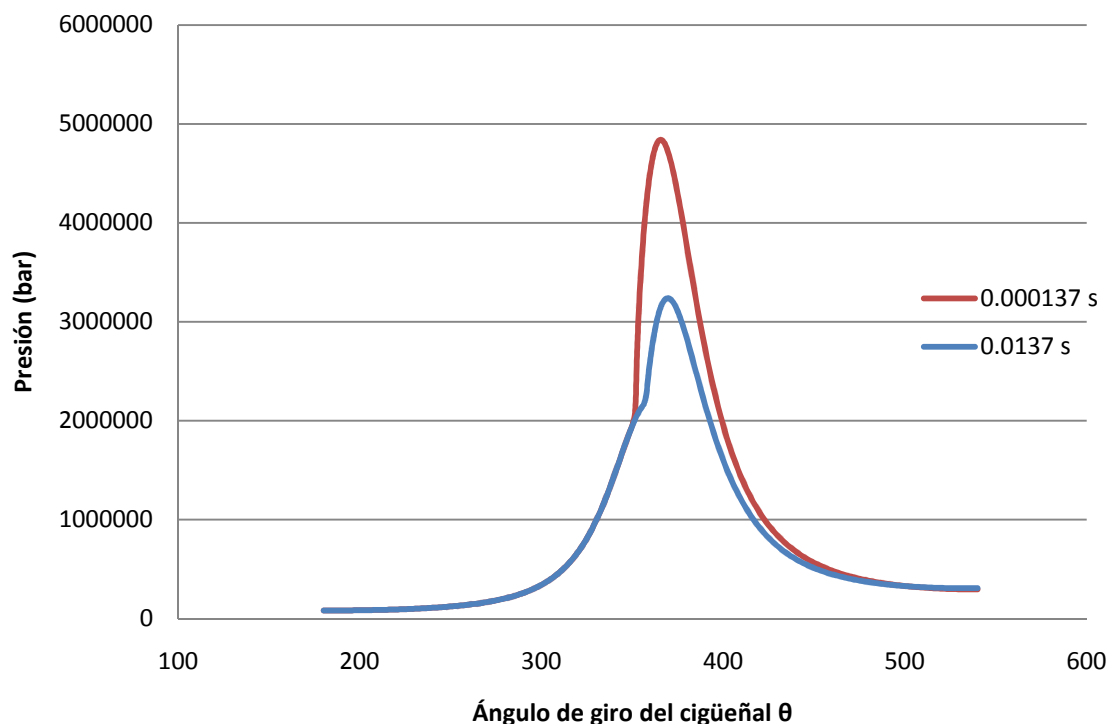
Por tanto, y a la vista de los resultados, se puede concluir que el modelo funciona de forma correcta.

### 8.3.5. INFLUENCIA DE DIVERSOS PARÁMETROS

A continuación se muestra el análisis de sensibilidad realizado a cada uno de los parámetros de definición del modelo, de modo que permita observar de qué forma influye cada uno de ellos en los resultados de las simulaciones.

#### Chemical Timescale

Se han realizado simulaciones con diferentes valores para esta variable del modelo, manteniendo idénticos el resto de parámetros. La evolución de la presión media en el cilindro para los casos de 0.000137 s y 0.0137 s queda representada en la siguiente gráfica:



Gráfica 8.3.7. Presión media en el cilindro para distintos valores de Chemical Timescale

Se observa que las dos simulaciones son idénticas hasta el punto de salto de la chispa, punto en el que la presión en la simulación con menor valor de Chemical Timescale aumenta rápidamente debido a una combustión más violenta, mientras que en la simulación con mayor valor del parámetro la combustión tarda más en iniciarse, observándose claramente el punto de inicio de la misma, y por tanto la presión aumenta más lentamente.



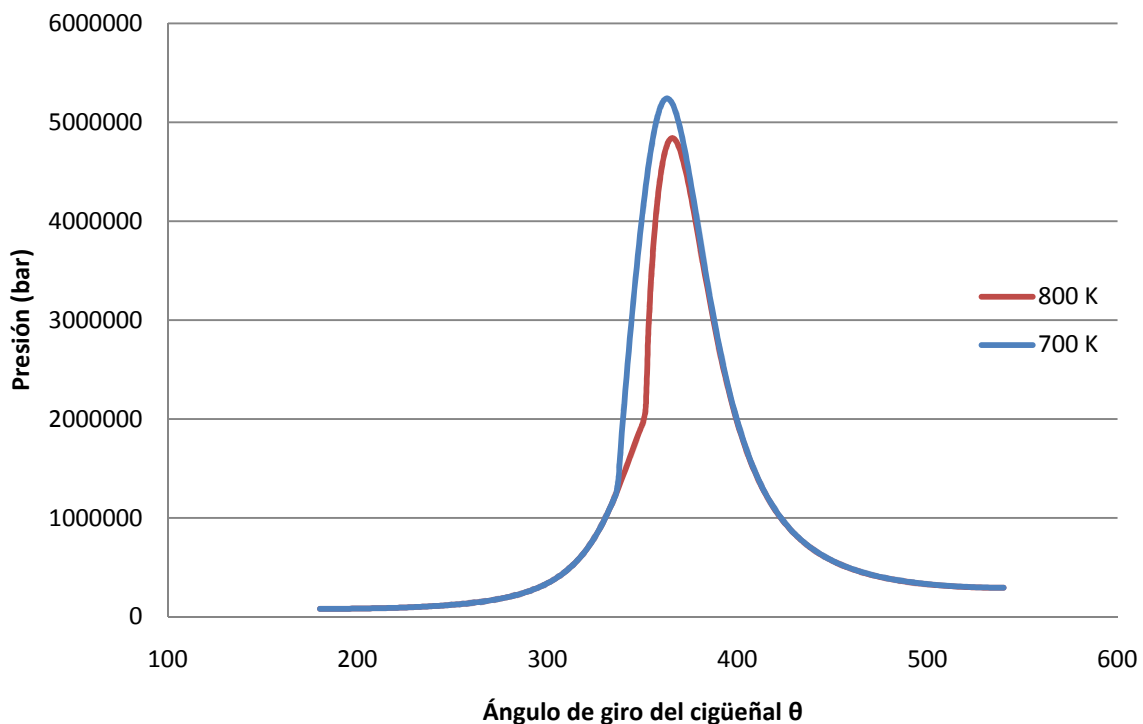
Los picos de presión, aunque no se observe con claridad en la figura, no coinciden de forma exacta: en el caso de 0.000137 s el pico se da para un giro del cigüeñal de  $366^\circ$ , alcanzando la presión un valor de 48,4 bar; en el caso de 0.0137 s se encuentra en los  $369,6^\circ$  y se alcanzan los 32,4bar. En la zona final, los valores de la presión de las dos simulaciones comienzan a converger hasta prácticamente igualarse.

De estos resultados se deduce que la disminución del Chemical Timescale supone las siguientes variaciones:

- Un aumento en el valor de la presión en el instante del pico y sus proximidades.
- Un adelanto del instante en el que se da el pico de presión.
- Un notable aumento en la pendiente de la curva de presión tras el salto de la chispa.

### Extinction Temperature

Para analizar la influencia del parámetro Extinction Temperature, se realizan simulaciones variando los valores del mismo. Se muestran como ejemplo los resultados obtenidos para 700 K y 800 K:



**Gráfica 8.3.8. Presión media en el cilindro para distintos valores de Extinction Temperature**

De nuevo, las diferencias entre las dos simulaciones comienzan tras el salto de la chispa. En este caso, la combustión, representada mediante el salto de presión, empieza

antes cuanto menor es el valor del parámetro Extinction Temperature, tal y como se esperaba.

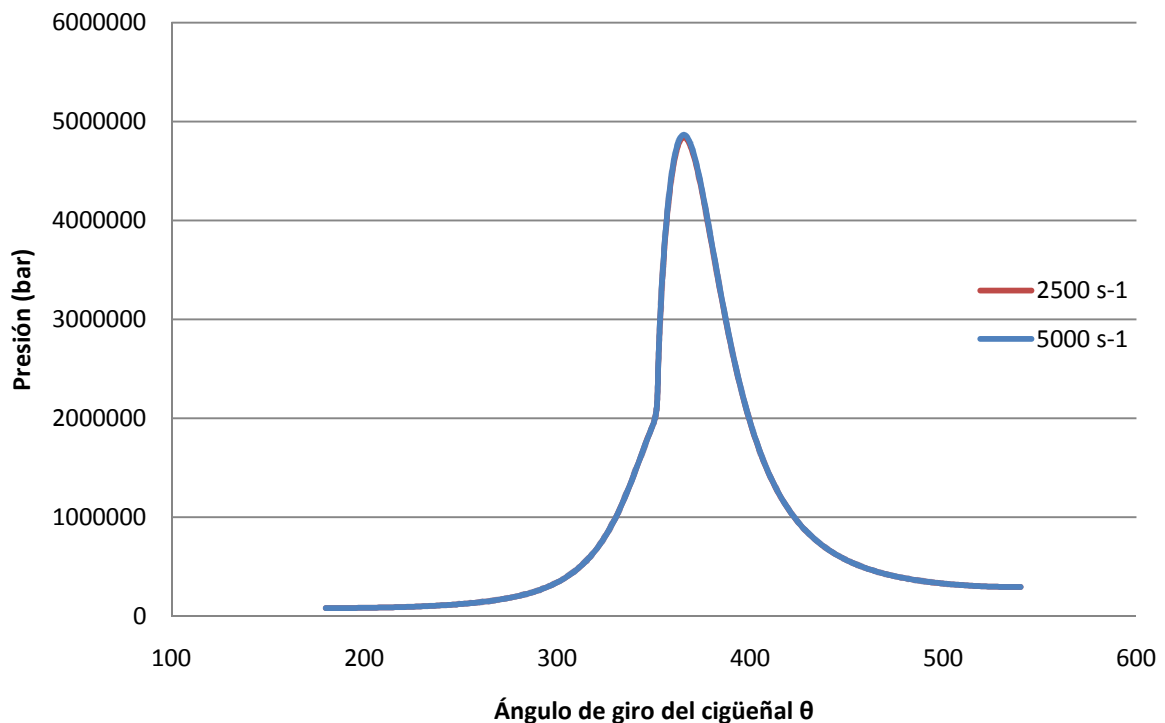
Se observa también que, como en el caso anterior, los picos de presión no coinciden ni en valor ni temporalmente. Para la simulación con menor Extinction Temperature se alcanza el pico de presión en  $362.4^\circ$  con 52.4 bar, mientras que la de mayor Extinction Temperature lo hace en  $366^\circ$  con un valor de 48.4 bar.

De esta forma, las consecuencias de disminuir el parámetro Extinction Temperature, según los resultados, son las siguientes:

- Un aumento en el valor de la presión en el instante del pico y sus proximidades.
- Un apreciable adelanto del instante en el que se da el pico de presión.
- La pendiente de la curva no se modifica de manera importante, sino que simplemente el tiempo que dura su ascenso es mayor.

### Mixing Rate Limit

En este caso, se compara la respuesta de las simulaciones ante la modificación del parámetro Mixing Rate Limit del modelo de combustión Eddy Dissipation, manteniendo el resto de parámetros iguales. Para valores de  $2500 \text{ s}^{-1}$  y  $5000 \text{ s}^{-1}$  se observan los siguientes resultados:

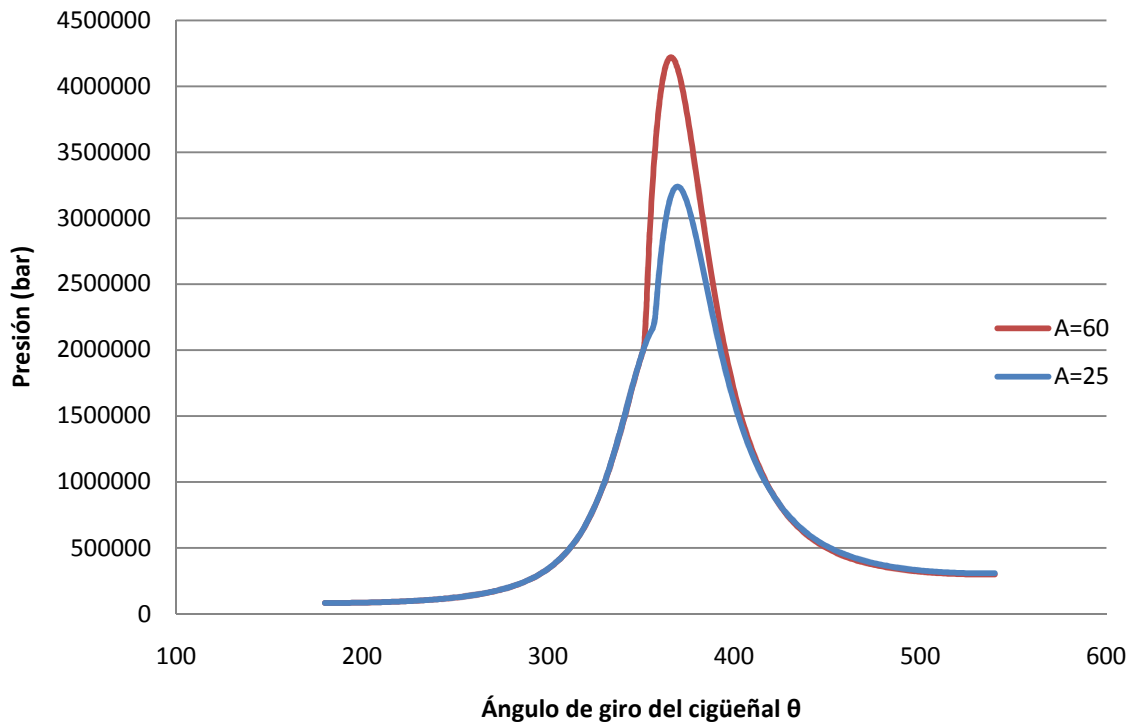


Gráfica 8.3.9. Presión media en el cilindro para distintos valores de Mixing Rate Limit

Se observa de los resultados que el parámetro Mixing Rate Limit no influye en los resultados que se obtienen en el modelo, llegándose a las mismas curvas de presión media en el cilindro para ambos casos.

### Eddy Dissipation Model Coefficient A

Por último, se presentan los resultados obtenidos para dos simulaciones con valores del Eddy Dissipation Model Coefficient A de 25 y 60:



**Gráfica 8.3.108. Presión media en el cilindro para distintos valores de Eddy Dissipation Model Coefficient A**

Una vez más, las diferencias entre las dos simulaciones comienzan tras el salto de la chispa, empezando la combustión antes cuanto mayor es el parámetro Eddy Dissipation Model Coefficient A.

Los picos de presión tampoco coinciden en este caso. Para la simulación con menor Eddy Dissipation Model Coefficient A se alcanza el pico de presión en 369.6° con 32.4 bar, mientras que la de mayor Eddy Dissipation Model Coefficient A lo hace en 366° con un valor de 42.2 bar.

De esta forma, las consecuencias de disminuir este parámetro son:

- Una disminución en el valor de la presión en el instante del pico y sus proximidades.
- Un retraso del instante en el que se da el pico de presión.
- Una ligera variación de la pendiente de la curva.

## 8.4. MODELO DE COMBUSTIÓN H<sub>2</sub> – MEP

Tras haber presentado el modelo y su funcionamiento, en este apartado se va a ajustar dicho modelo con el fin de obtener un modelo propio para la combustión en un cilindro del motor alimentado por hidrógeno.

### 8.4.1. DATOS EXPERIMENTALES

Tal y como ya se ha expuesto en el capítulo anterior, se han realizado un total de 30 ensayos en el banco para un rango de revoluciones de giro del motor entre las 1000 rpm y las 5000 rpm, para plena carga y carga parcial al 50% de apertura de la válvula de mariposa y para dosados normales ( $\lambda=2$  y  $\lambda=1.6$ ) y dosado pobre ( $\lambda=2.5$ ). Sin embargo, los datos de interés para este capítulo son distintos de los presentados en el capítulo previo.

A la hora de modelizar el proceso de combustión y ajustarla lo máximo posible a la realidad, se observan dos datos de suma importancia:

**Inicio de la combustión:** que no el comienzo de la ignición (anterior), que viene representado como el punto en el que una curva se separa de la otra. El proceso de combustión comienza, se libera energía, y esta la absorben los gases para comenzar la expansión y aumentar la presión dentro de la cámara.

**Pico de presiones:** presión máxima que se alcanza en el cilindro. Debido al suave movimiento del pistón cerca del PMS, este pico no tiene porque obtenerse en un momento preciso, sino que posee un margen.

A continuación se muestran los distintos ensayos realizados con sus correspondientes datos de avance al encendido y pico de presiones (los valores de avance al encendido vienen dados en grados de giro del cigüeñal antes de PMS). Se presentan también los valores de presión y temperaturas iniciales, necesarios para inicializar el modelo tal y como se ha comentado anteriormente.

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	Avance al encendido ( $^{\circ}$ APMS)	Pico de presiones (bar)	$p_{ini}$ (bar)	$T_{ini}$ ( $^{\circ}$ C)
2.5	50	999.548	5	20.9	0.5720	48.1
2.5	50	2000.697	30	28.9	0.6813	46.2
2.5	50	3002.356	33	28.8	0.6675	43.6
2.5	50	4001.306	25	29.1	0.8829	42.2
2.5	50	5000.713	25	29.7	0.8987	41
2.5	100	1000.486	5	21.8	0.6334	49.7
2.5	100	2001.103	50	41.4	0.7186	46.8
2.5	100	3001.685	50	40.1	0.7365	44.3
2.5	100	4001.522	40	45.8	1.0803	42.5
2.5	100	5001.116	35	45.8	0.9788	40.8
2	50	1001.283	10	26.2	0.6916	46.1
2	50	2000.581	20	31.0	0.7497	44.8
2	50	3003.072	15	25.1	0.7201	42.9
2	50	4001.049	15	28.5	0.9502	41.3
2	50	5001.25	15	27.9	0.9139	40.7
2	100	1001.141	10	28.5	0.7456	46.8
2	100	2001.029	20	32.9	0.8364	44
2	100	3002.249	25	34.8	0.7829	42
2	100	4001.219	20	39.5	1.1171	40.4
2	100	5001.262	20	39.7	1.1843	39.2
1.6	50	1000.955	10	47.1	0.8571	49.6
1.6	50	2000.595	10	38.8	0.8284	47
1.6	50	3001.536	7.5	30.5	0.7449	44.6
1.6	50	4001.487	10	37.3	0.9476	42.8
1.6	50	5001.665	10	34.6	0.9939	41.6
1.6	100	1001.184	10	49.9	0.9081	49.4
1.6	100	2001.082	10	39.5	0.8798	47.9
1.6	100	3001.458	10	35.3	0.8461	45.5
1.6	100	4001.111	10	41.9	1.1150	43.5
1.6	100	5000.519	10	42.8	1.1511	41.8

**Tala 8.4.1. Valores de avance al encendido, pico de presiones y presiones y temperaturas iniciales**

### 8.4.2. AJUSTE DE LOS DISTINTOS PARÁMETROS

Una vez analizada la influencia de los distintos parámetros en el proceso de combustión, se van a ajustar con el fin de obtener un modelo que reproduzca el proceso del MCIA alimentado con hidrógeno.

Se ha decidido fijar los parámetros chemical timescale, extinction temperature y mixing rate limit en un valor constante que se adapte a las distintas simulaciones, además del ya comentado Eddy Dissipation Model Coefficient B, para poder realizar un ajuste final variando el Eddy Dissipation Model Coefficient A.

Tras varias simulaciones, los valores elegidos para estos parámetros son los siguientes:

**Chemical timescale = 0.0137 s**

**Extinction Temperature = 800 K**

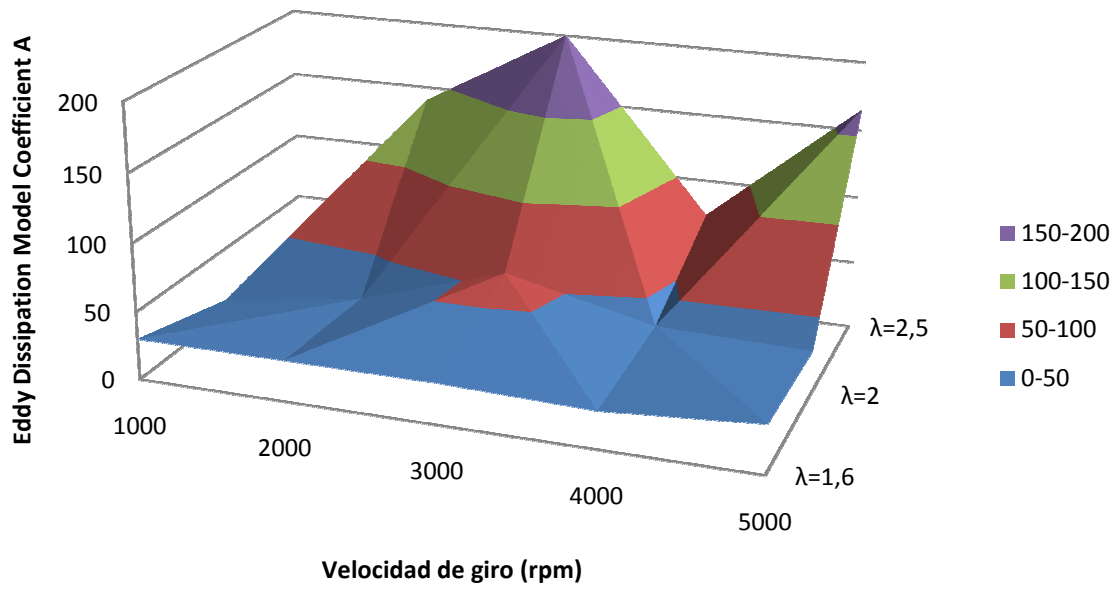
**Mixing Rate Limit = 5000 s<sup>-1</sup>**

**Eddy Dissipation Model Coefficient B = -1**

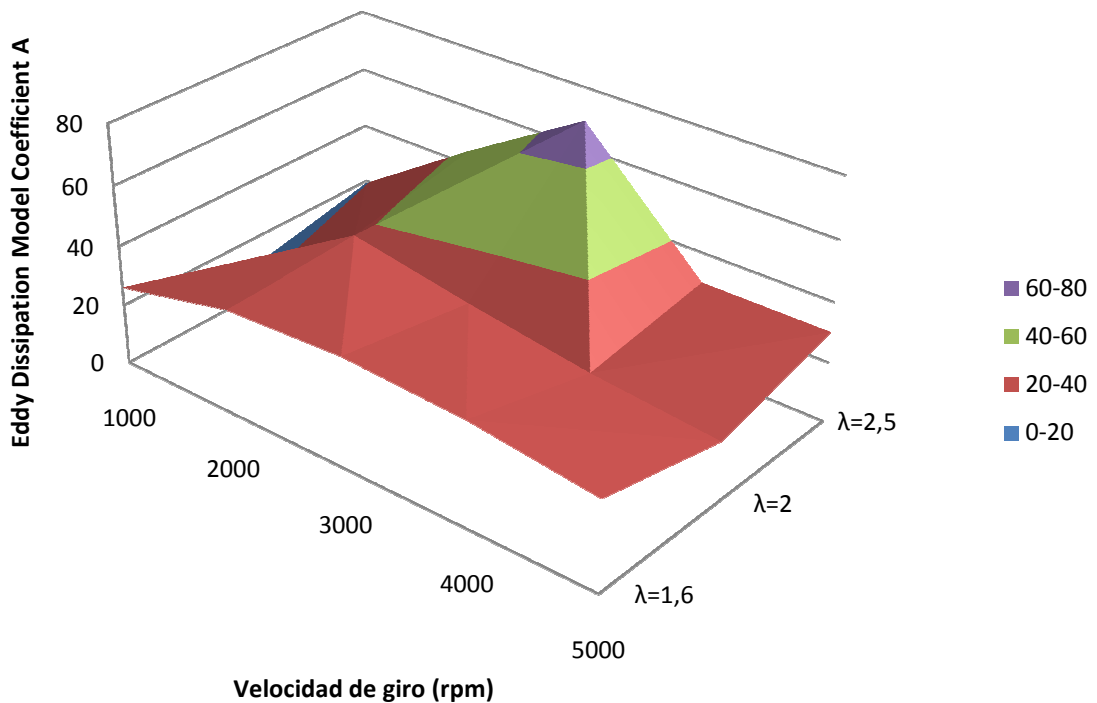
Para obtener el **Eddy Dissipation Model Coefficient A** se han realizado una serie de simulaciones de ajuste con el objetivo mencionado con anterioridad de alcanzar el mismo pico de presiones en la curva real y la simulada, llegando a los siguientes valores en función del número de revoluciones por minuto, dosado de la mezcla y el grado de apertura de la válvula de mariposa:

Dosado $\lambda$	% apertura de mariposa	n (rpm)	Eddy dissipation coefficient A	Pico de presiones simulado (bar)	Pico de presiones real (bar)
2.5	50	999.548	19	21.4	20.9
2.5	50	2000.697	45	29.5	28.9
2.5	50	3002.356	69	28.6	28.8
2.5	50	4001.306	30	29.1	29.1
2.5	50	5000.713	30	29.0	29.7
2.5	100	1000.486	10	21.8	21.8
2.5	100	2001.103	140	41.5	41.4
2.5	100	3001.685	200	38.8	40.1
2.5	100	4001.522	73	45.7	45.8
2.5	100	5001.116	165	45.8	45.8
2	50	1001.283	10	26.1	26.2
2	50	2000.581	37	31.8	31.0
2	50	3003.072	30	24.4	25.1
2	50	4001.049	24	28.8	28.5
2	50	5001.25	20	27.9	27.9
2	100	1001.141	10	28.4	28.5
2	100	2001.029	26	33.1	32.9
2	100	3002.249	60	34.5	34.8
2	100	4001.219	35	39.6	39.5
2	100	5001.262	32	39.7	39.7
1.6	50	1000.955	26	47.3	47.1
1.6	50	2000.595	35	39.4	38.8
1.6	50	3001.536	37	30.63	30.5
1.6	50	4001.487	35	37.0	37.3
1.6	50	5001.665	30	34.9	34.6
1.6	100	1001.184	30	50.0	49.9
1.6	100	2001.082	30	40.4	39.5
1.6	100	3001.458	30	33.6	35.3
1.6	100	4001.111	25	40.9	41.9
1.6	100	5000.519	35	42.4	42.8

**Tala 8.4.2. Valores del Eddy dissipation coefficient A y de los picos de presión simulado y real**



Gráfica 8.4.1. Valores de Eddy Dissipation Model Coefficient A en función del ángulo de giro del motor y del dosado relativo a plena carga

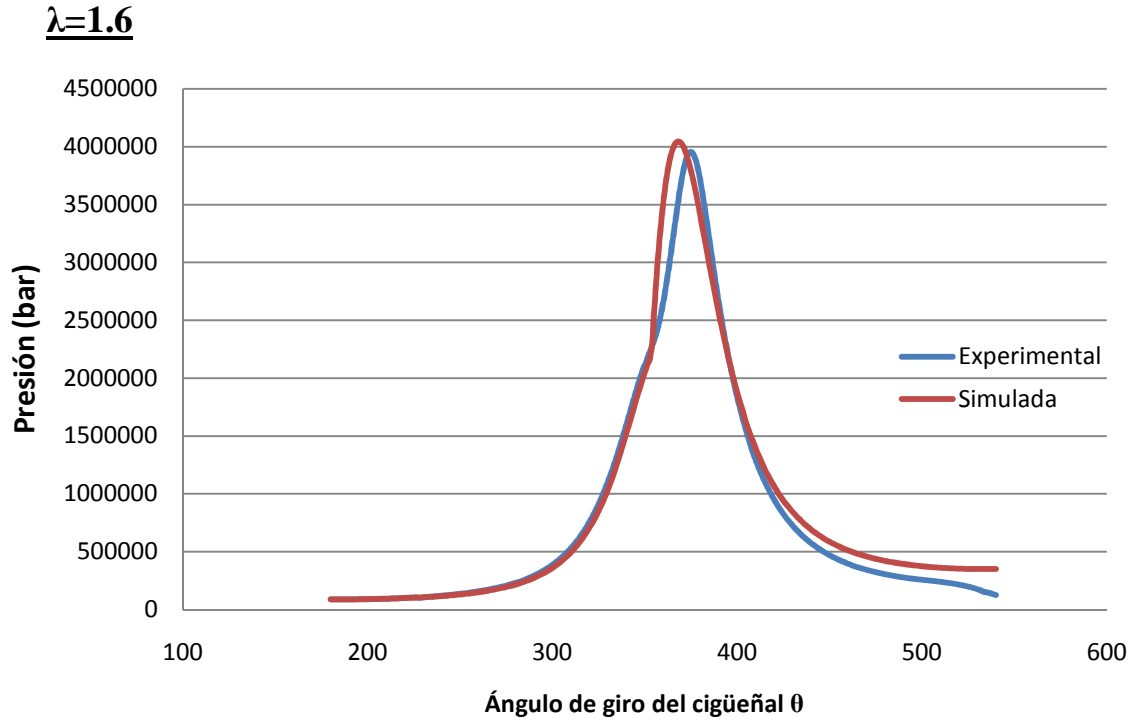


Gráfica 8.4.2. Valores de Eddy Dissipation Model Coefficient A en función del ángulo de giro del motor y del dosado relativo y 50% de apertura de la válvula de mariposa

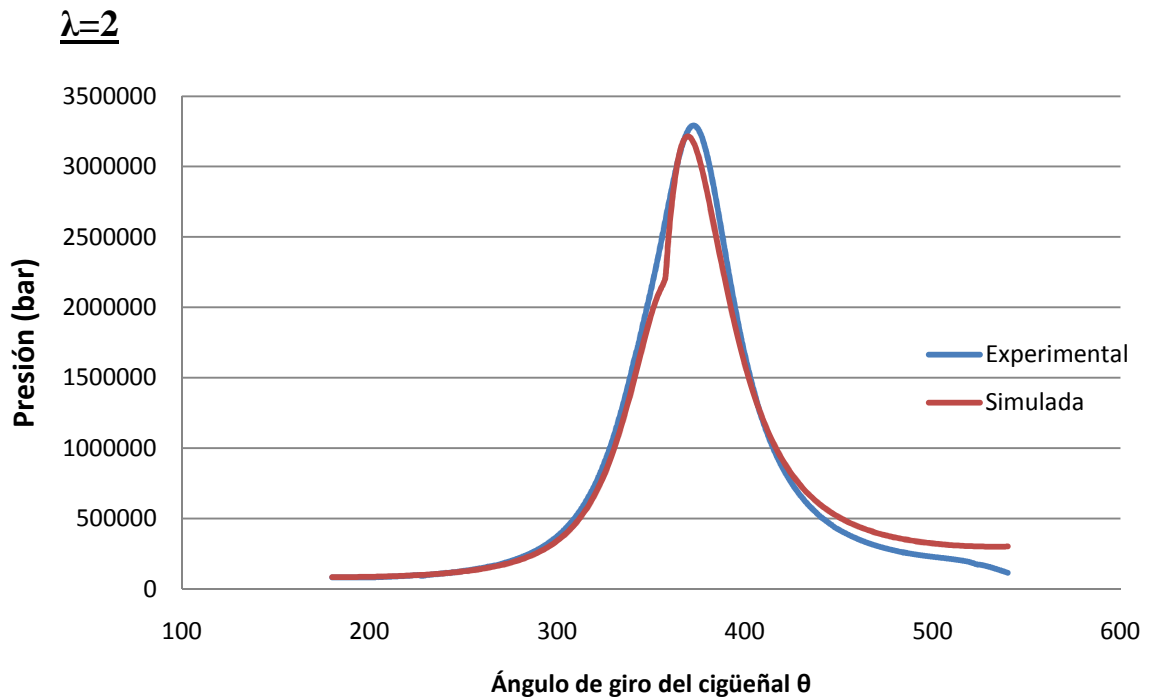


### 8.4.3. ANÁLISIS DE RESULTADOS

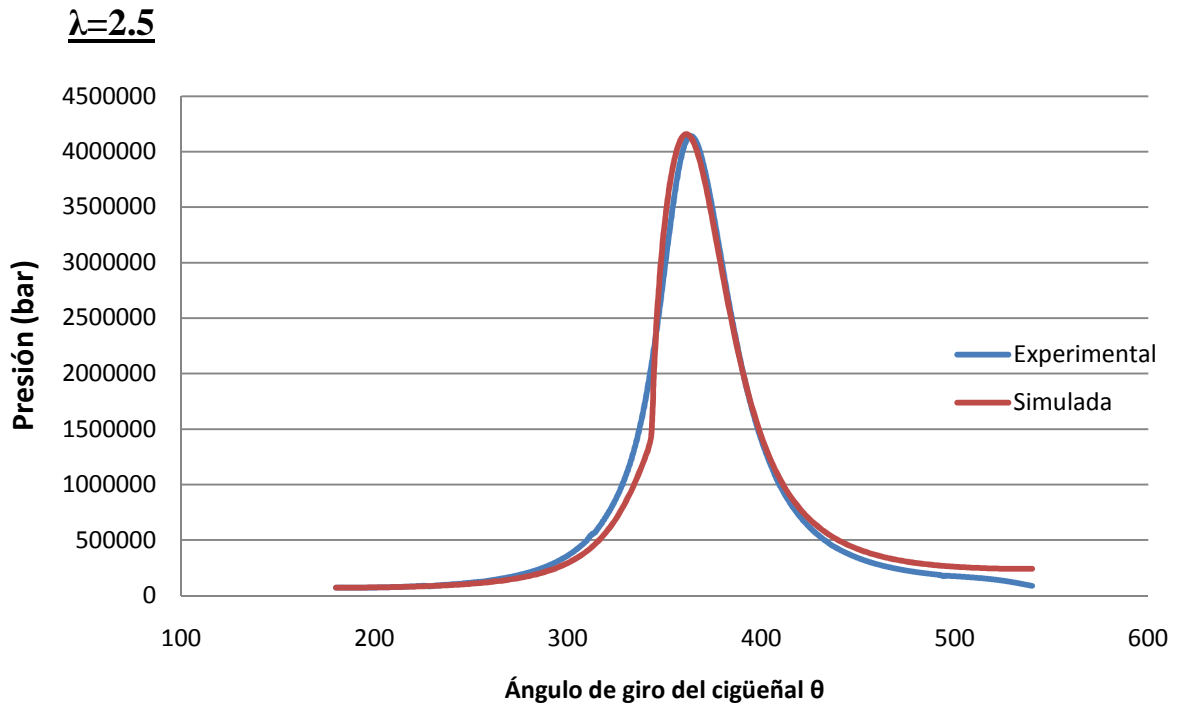
A continuación se muestran los resultados obtenidos para el caso de 2000 rpm y plena carga para los tres dosados relativos empleados (todos los resultados pueden verse en el Anexo A):



Gráfica 8.4.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y plena carga

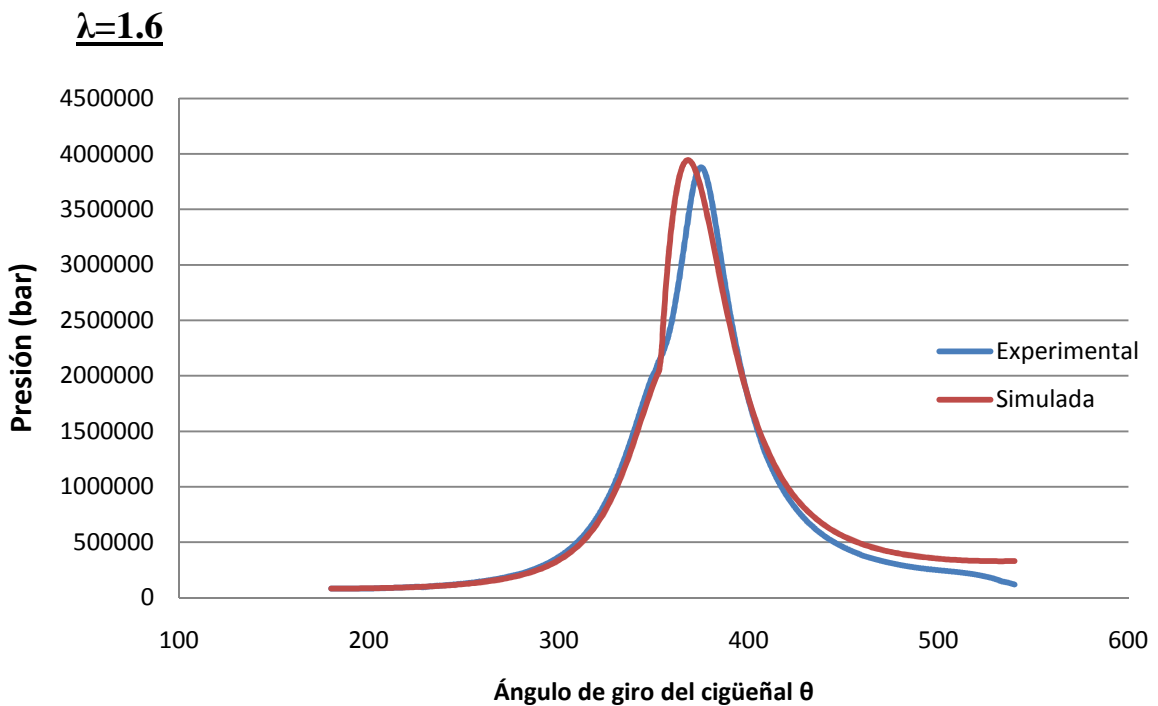


Gráfica 8.4.4. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y plena carga

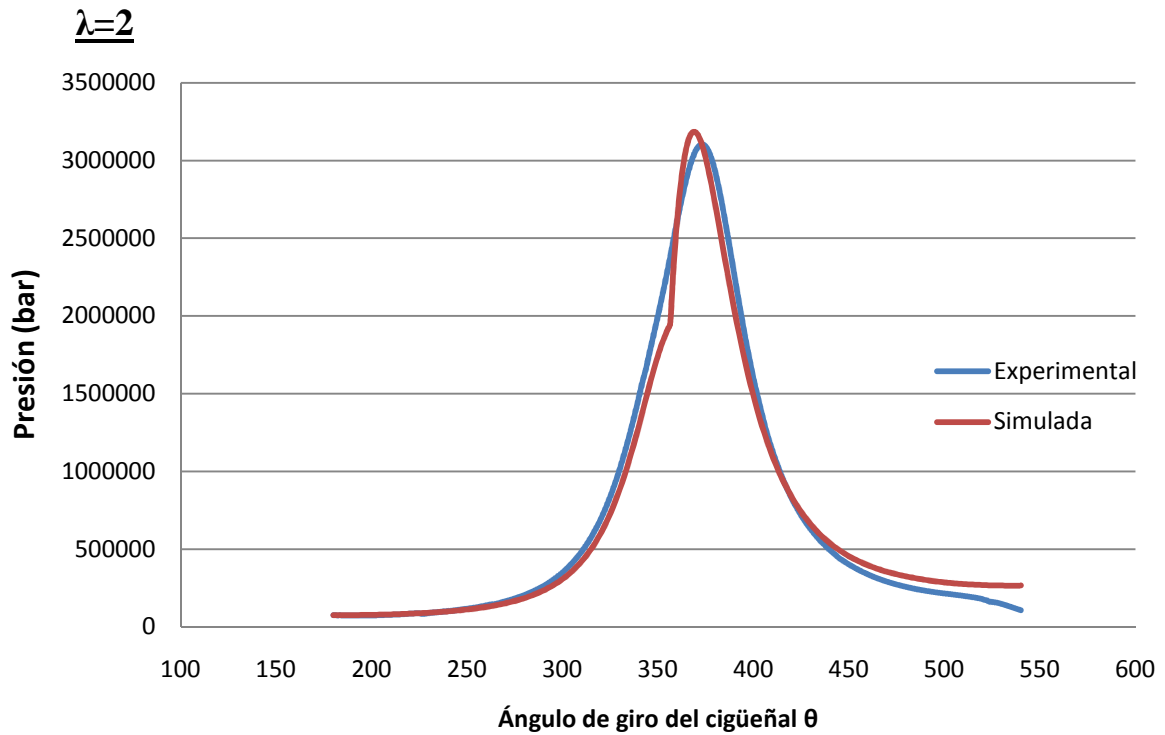


**Gráfica 8.4.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y plena carga**

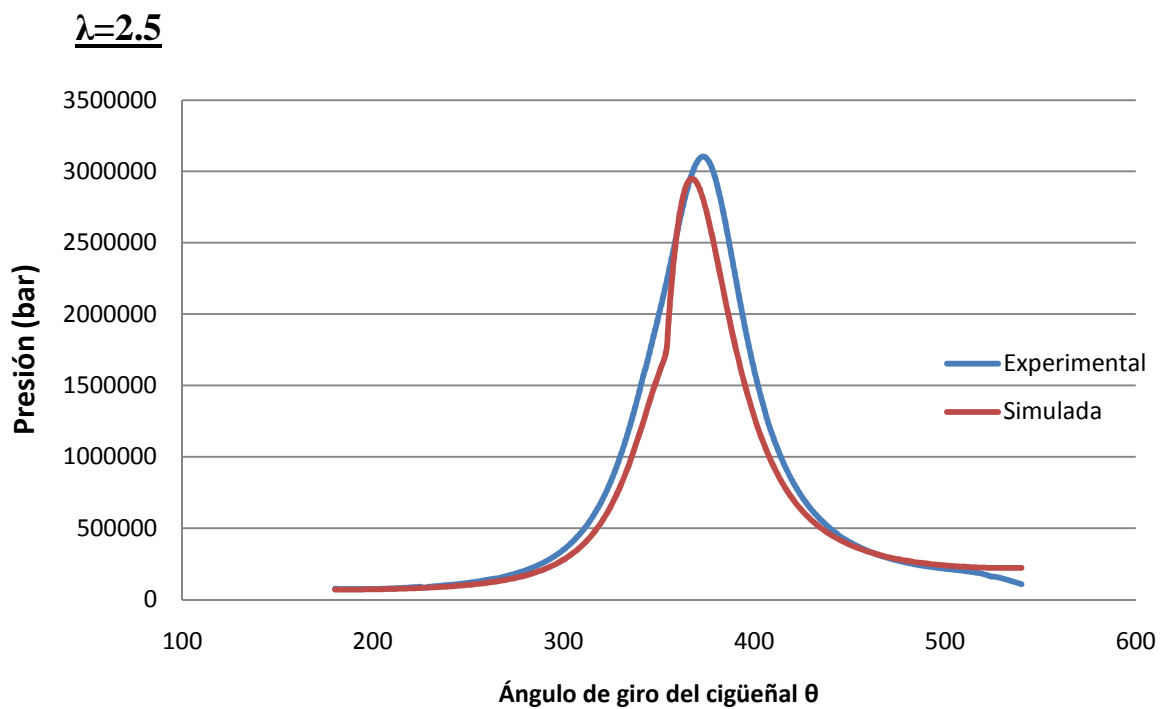
Para una apertura del 50% de la válvula de mariposa, y también para el motor girando a 2000 rpm, se obtienen los siguientes resultados para cada dosado relativo:



**Gráfica 8.4.6. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa**



Gráfica 8.4.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

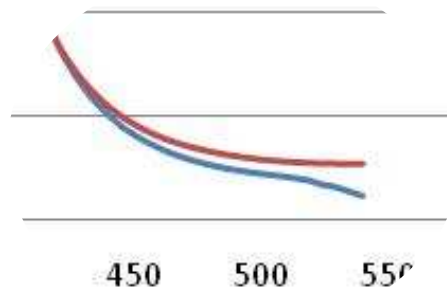


Gráfica 8.4.8. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

En primer lugar, en la tabla 8.4.2 se puede ver cómo los picos de presión obtenidos en la simulación se pueden ajustar a la perfección con el modelo propuesto tan solo variando el Eddy Dissipation Model Coefficient A. No obstante, se aprecia que cuanto más pobre es la mezcla (dosados relativos mayores), más se debe aumentar dicho parámetro para lograr alcanzar los valores pico deseados.

Si se analizan las gráficas, se observa que los datos aportados por la simulación se ajustan bastante bien a los valores experimentales, sobre todo para los dosados relativos más pobres ( $\lambda=2$  y  $\lambda=2.5$ ). Sin embargo, para  $\lambda=1.6$ , los picos de presiones se producen ligeramente antes en las simulaciones que en la realidad, provocando que las gráficas no se ajusten tan bien.

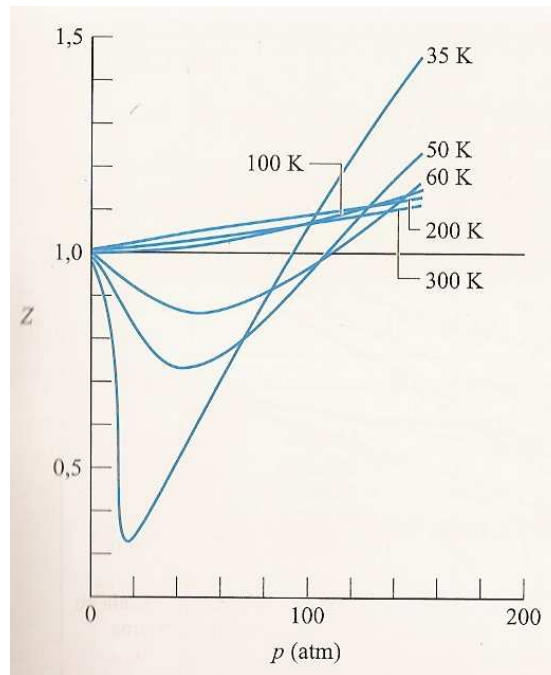
De nuevo, aparecen los aspectos ya comentados en los apartados anteriores, si bien en algunas de las gráficas se aprecia mucho más que en otras. Analizando los resultados detenidamente, se puede concluir que el último cambio en la pendiente de la curva de presiones real es el efecto de la apertura de las válvulas de escape, que, tal como se ha analizado en el apartado 8.2, se produce en los últimos 40-50° (a partir de los 500° de giro del cigüeñal).



**Figura 8.4.1. Efecto de la apertura de las válvulas de escape en la curva de presión**

Sin embargo, en la mayoría de las gráficas la curva simulada se empieza a separar de la real antes de los 450° de giro del cigüeñal. Cobra fuerza por tanto la teoría de que, además de una posible infiltración de gases hacia el cárter, esta divergencia se debe a la definición de los productos de la combustión como una mezcla de gases ideales.

El hecho de que este efecto sea notablemente más visible cuando existe combustión, refuerza este argumento, ya que el modelo de gas ideal es razonable para ciertos intervalos de  $p$  y  $T$ . Solo en los estados en los que la presión  $p$  es pequeña en relación con la presión crítica  $p_c$  y/o la temperatura  $T$  es grande en relación con la temperatura crítica  $T_c$ , el factor de compresibilidad  $Z=pv/RT$  es próximo a 1, y por tanto se puede adoptar con razonable precisión el modelo de gas ideal. En la figura 8.4.2 se muestra la variación del factor de compresibilidad del hidrógeno con la presión a distintas temperaturas.



**Figura 8.4.2. Factor de compresibilidad del hidrógeno**

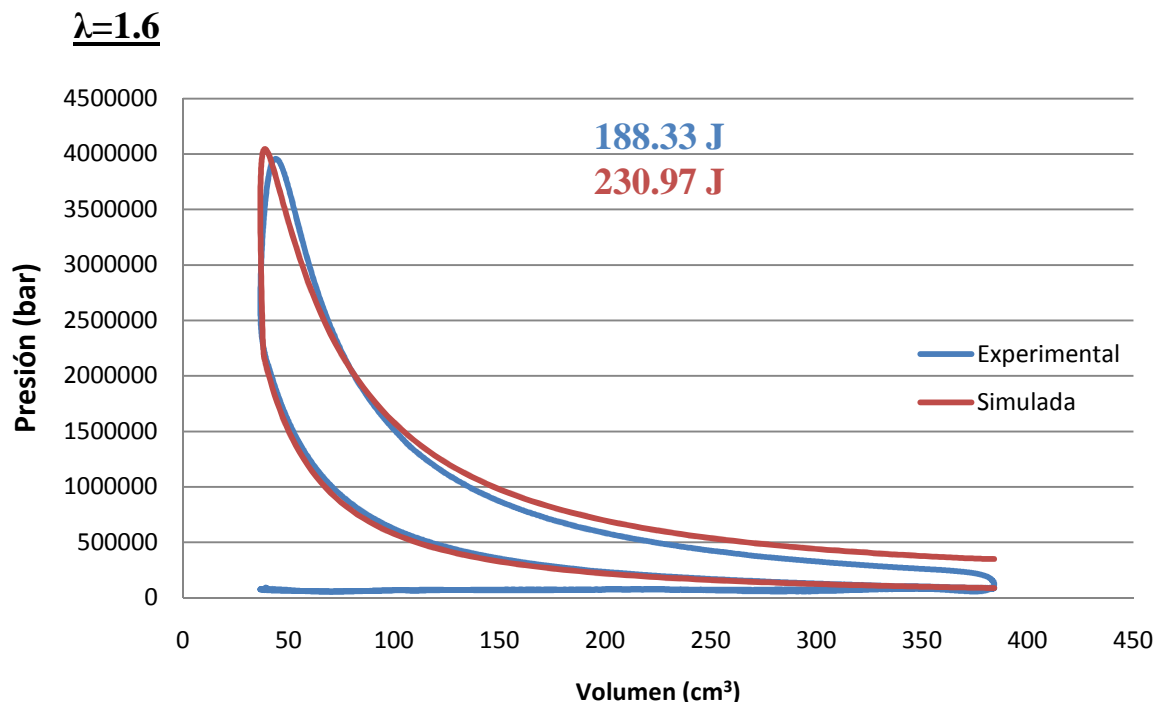
A todo esto hay que añadirle que en el cilindro existe una mezcla de gases idealizados mediante el modelo de Dalton. Este modelo es consistente con el concepto de gas ideal formado por moléculas que ejercen fuerzas despreciables entre ellas y cuyo volumen es despreciable frente al que ocupa el gas. Manteniendo esta descripción sencilla, el modelo de Dalton establece que cada componente de la mezcla se comporta como un gas ideal que ocupará el solo todo el volumen a la temperatura de la mezcla. De ahí se sigue que las componentes individuales ejercerán una presión parcial, y la suma de todas las presiones parciales es igual a la presión de la mezcla.

Dada la complejidad de los fenómenos que ocurren en el interior del cilindro, con la existencia de grandes gradientes de presión y temperatura, es lógico pensar que la ecuación de estado del gas ideal puede no proporcionar una aproximación exacta. En cualquier caso, con este modelo se obtiene una descripción muy aceptable y particularmente simplificada.

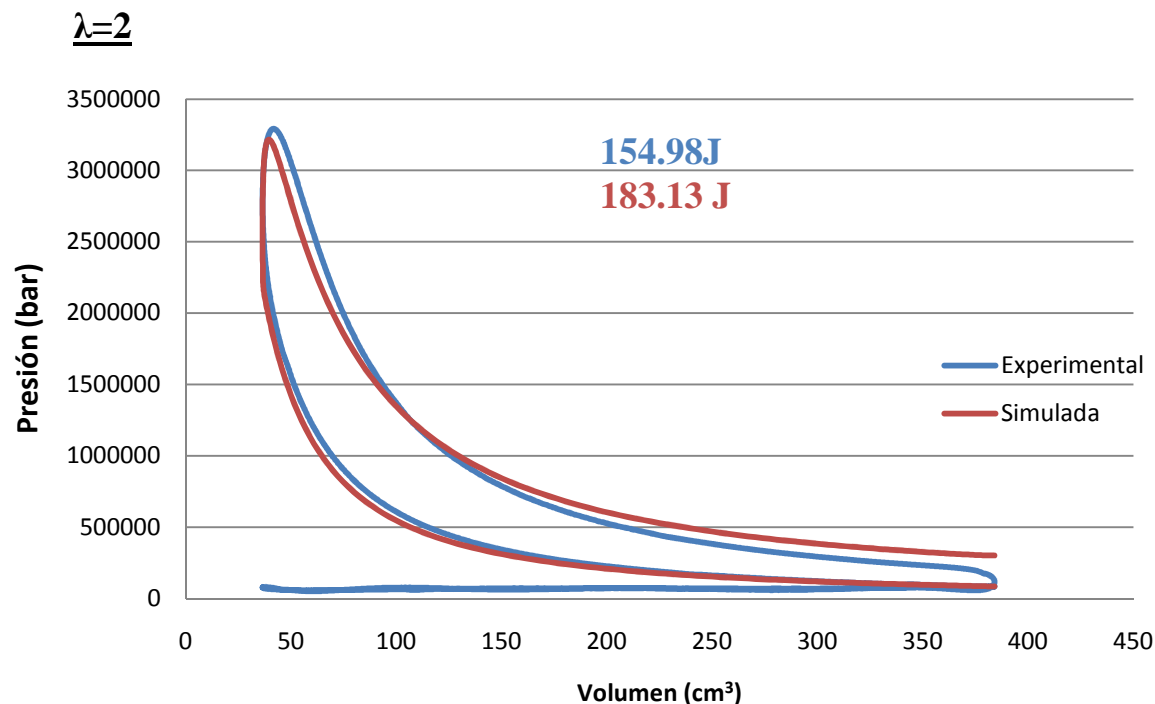
Otro aspecto al que no se le ha prestado demasiada atención hasta el momento y que puede tener también gran influencia en la separación de las “colas” al final de la expansión es la formación de óxidos de nitrógeno a lo largo del proceso. Los  $\text{NO}_x$  se forman en la cámara de combustión al oxidarse el N del aire a alta presión y temperatura, alterándose el número de moles presentes en el cilindro. La formación de  $\text{NO}_x$  no está contemplada en el modelo que se ha empleado finalmente.

Por último, en las curvas de presión simuladas llama también la atención que el salto de presión provocado por el inicio de la combustión se aprecia más claramente que en las curvas de presión reales. Se podría realizar un ajuste más fino para evitar este fenómeno, pero en general en detrimento de la coherencia del resto de la simulación.

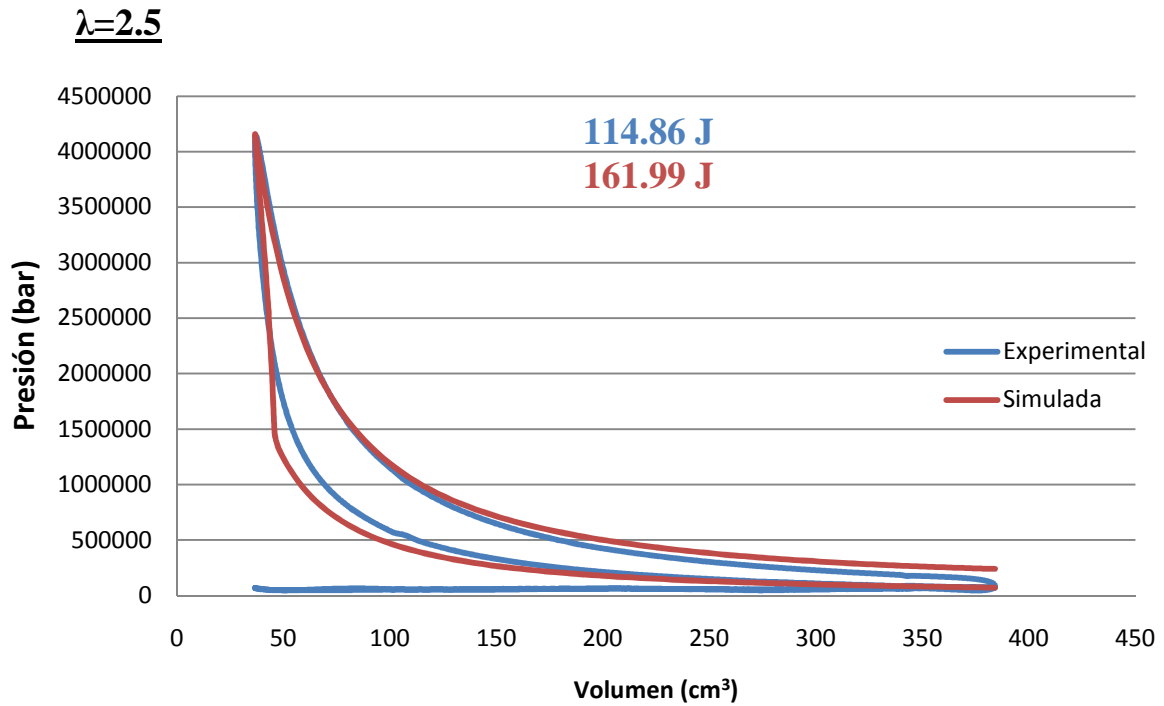
Otro dato importante a la hora de evaluar los resultados es el **ciclo indicado**. Se presentan en las siguientes gráficas los resultados obtenidos, incluyéndose el valor del trabajo indicado obtenido a partir del ciclo sin tener en cuenta el ciclo de bombeo, que no ha sido simulado:



Gráfica 8.4.9. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y plena carga

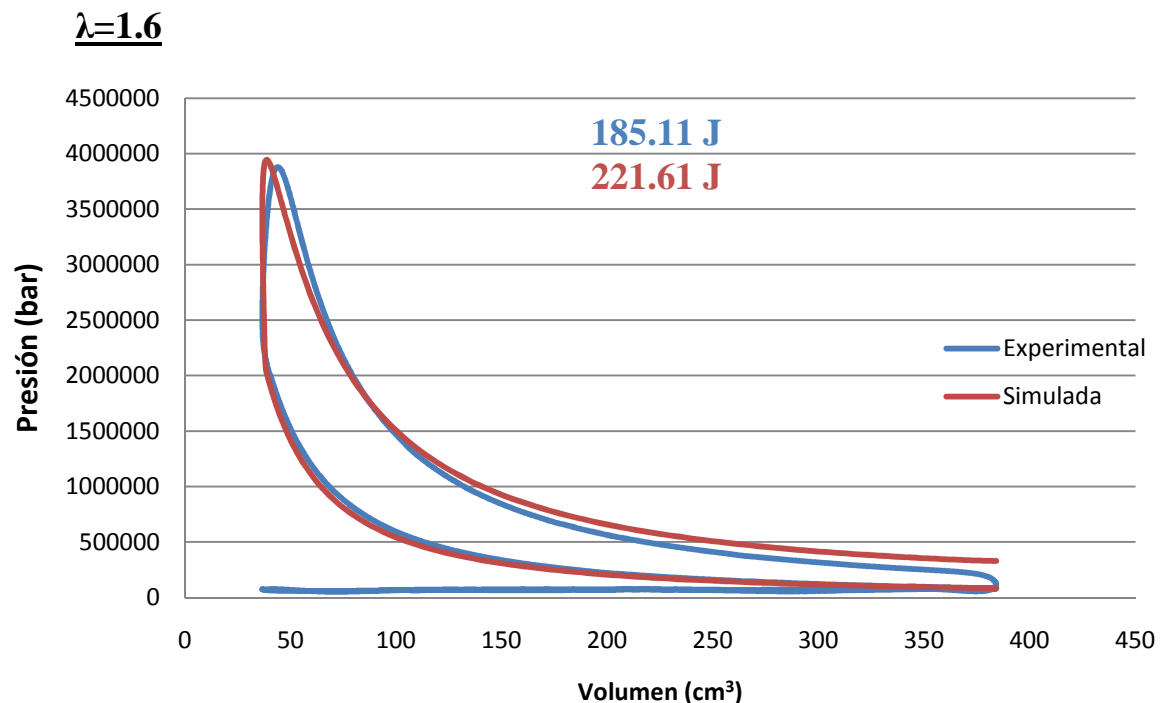


Gráfica 8.4.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y plena carga

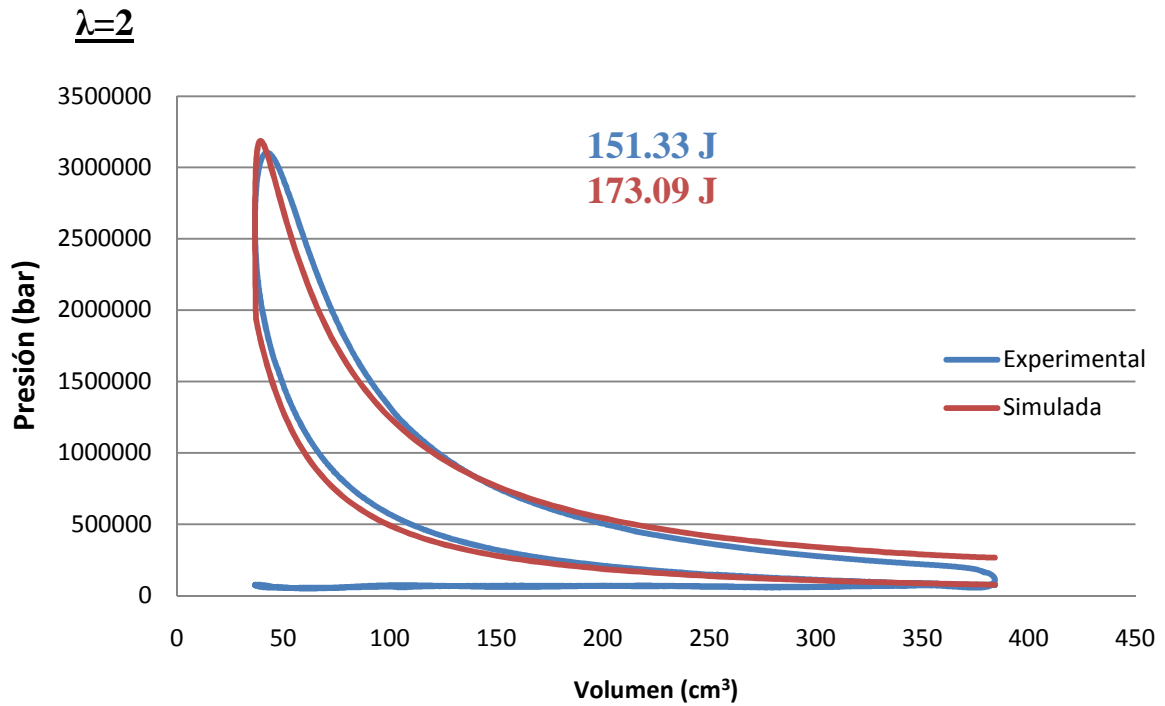


Gráfica 8.4.11. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y plena carga

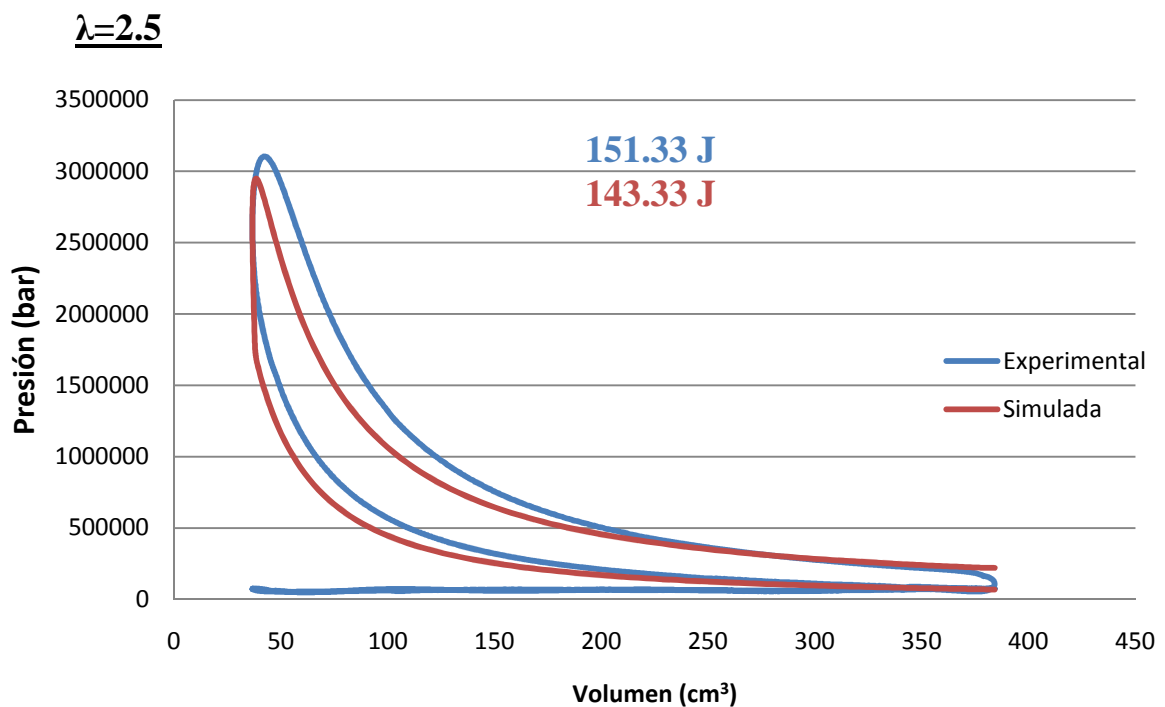
Y por último se muestran los diagramas indicados para media carga:



Gráfica 8.4.12. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



Gráfica 8.4.13. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



Gráfica 8.4.14. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



Aunque la coincidencia de los diagramas presión-volumen es notable, se sigue apreciando la separación de las “colas” de las curvas al final de la expansión, quedando siempre que esto sucede la curva simulada por encima de la real. Este hecho se hace aún más obvio si se observa el trabajo indicado obtenido en los ciclos, ya que por muy poca que sea la diferencia de presión, el área encerrada aumenta considerablemente.

No obstante, es necesario recordar que una característica muy importante del proceso de combustión de los MEP es el fenómeno de la dispersión cíclica (figura 6.5.10), y que la curva de presiones real con la que se están comparando los resultados es la media de 100 ciclos. Como consecuencia, es bastante probable que las curvas simuladas que se obtienen representen a la perfección alguno de esos ciclos, y que el error cometido no sea relevante.

Por todo esto, se puede concluir que el modelo de combustión al que se ha llegado es altamente satisfactorio.

## 9. CONCLUSIONES

El presente Proyecto Fin de Carrera se ha centrado en dos temas principales: el análisis de los fenómenos de transmisión de calor y la modelización del proceso de combustión en un motor de combustión interna alternativo alimentado por hidrógeno.

En el estudio de los fenómenos de transmisión de calor en el motor, se ha realizado un análisis de los modelos de transferencia de calor utilizados en los cálculos de flujos de calor con las condiciones de contorno presentes en motores modernos. Realizado este análisis, se ha llevado a cabo un estudio experimental de la evolución de las temperaturas en el motor para distintos regímenes de giro del mismo, para distintos dosados relativos y distintos grados de carga. Los datos obtenidos han sido empleados para modelar térmicamente el motor mediante la aplicación de balances de energía para sistemas reactivos, obteniéndose un modelo final muy ajustado a los datos existentes en la literatura para este tipo de motores.

Este es un apartado de gran importancia, ya que si se comprenden los fenómenos térmicos que suceden en el motor se pueden tomar medidas y estudiar posibles modificaciones para mejorar su rendimiento.

En segundo lugar, se ha desarrollado un modelo que permite representar el proceso de la combustión del hidrógeno en el interior del cilindro de un motor de combustión interna alternativo alimentado con dicho gas. Se trata de un modelo sencillo, fácil de ajustar empleando un solo parámetro y fijando el resto. El modelo propuesto ha podido ser contrastado y ajustado por medio de datos experimentales provenientes del prototipo de MCIA alimentado por hidrógeno del que dispone la Universidad Pública de Navarra, desarrollado por el Grupo Hidrógeno en su investigación. Para ello, se ha realizado una primera comprobación del modelo sin combustión y posteriormente la comprobación del mismo con combustión, realizándose un análisis de sensibilidad de los diferentes parámetros respecto a los resultados obtenidos para finalmente escoger de entre ellos los más adecuados. Los datos experimentales ofrecidos por el prototipo han permitido ajustar esos parámetros para distintos regímenes de giro, dosados relativos de la mezcla y grados de carga, obteniéndose un modelo de combustión más que aceptable del mismo.

En la comparación entre resultados, los simulados se ajustan de manera notable a los experimentales. Por tanto, se trata de un modelo de mucha utilidad con el que seguir trabajando en el futuro para conseguir un modelo fiable para todo tipo de condiciones de funcionamiento, con el que poder predecir el comportamiento del motor sin necesidad de ensayar en el banco.

Por todo ello, se considera altamente satisfactorio el trabajo realizado en el presente Proyecto Fin de Carrera. Los resultados del mismo no sólo han generado un conocimiento muy interesante respecto a procesos transmisión de calor y combustión, sino que además han dejado abiertas diversas líneas de investigación a desarrollar en el futuro.

## 10. FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

La investigación desarrollada en el presente Proyecto Fin de Carrera ha dado lugar a varias vías de investigación:

- En relación con el modelo térmico, es necesario seguir profundizando en los fenómenos de intercambio de calor presentes en el motor, con el objetivo de llegar a comprenderlos y de esta forma estudiar la forma de aumentar el rendimiento obtenido.
- Continuar el desarrollo del modelo de combustión, de forma que se alcance en un futuro un modelo de combustión con todos los parámetros dependientes del grado de carga, el régimen de giro y el dosado relativo, y de esta forma conseguir ajustes óptimos entre modelo y realidad.
- Profundizar en la modelización de los gases y acercarse más a los resultados reales, evitando los errores provocados al emplear la simplificación del modelo de gases ideales. Una posible solución sería emplear la ecuación de Redlich Kwong.
- Implementar en el modelo la formación de óxidos de nitrógeno.
- Poner en conjunción ambos modelos, profundizando en la modelización de la transferencia de calor en el modelo computacional, obteniéndose un modelo completo capaz de predecir de forma fiable el comportamiento del motor.
- Finalmente, lo ideal sería poder simular el ciclo completo y no solo la compresión y la expansión, empleando la versión más reciente de Ansys-CFX para poder conseguirlo.

## 11. NOMENCLATURA Y ACRÓNIMOS

### NOMENCLATURA

A	Dosado absoluto
$A_e$	Dosado estequiométrico
$\lambda$	Dosado relativo
$H_c$	Poder calorífico inferior del combustible
$m_f$	masa de combustible
$m_a$	masa de aire seco
$M_e$	Par motor efectivo
n	Régimen de giro del motor
$N_e$	Potencia efectiva
$N_i$	Potencia Indicada
$p_{me}$	Presión media efectiva
T	Temperatura
$V_T$	Cilindrada total
$\eta_e$	Rendimiento efectivo
$\eta_i$	Rendimiento indicado
$\eta_m$	Rendimiento mecánico del motor
$\eta_v$	Rendimiento volumétrico
$\rho$	Densidad del aire

### ACRÓNIMOS

AE	Avance al Encendido
CFD	Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics)
$H_2$ -M.E.P	Motor de encendido provocado alimentado con Hidrógeno
MEP	Motor de Encendido Provocado
MEC	Motor de Encendido por Compresión
MCIA	Motor de Combustión Interna Alternativo
PMS	Punto Muerto Superior
PMI	Punto Muerto Inferior
AAA	Avance a la Apertura de la Admisión
RCA	Retraso al Cierre de la Admisión
AAE	Avance a la Apertura del Escape
RCE	Retraso al Cierre del Escape

## 12. BIBLIOGRAFÍA

### LIBROS

- [1] ‘Motores de combustión interna alternativos’. 3ª Edición. Dirigido por N. Muñoz, F. Payri. Sección de publicaciones de la E.T.S. Industriales de Madrid. Tercera Edición (1989).
- [2] Giacosa, Dante. ‘Motori endotermici’. Versión española por José González-Vallés Sánchez; adaptada a la undécima edición italiana por Juan J. Garrido Ibáñez. 3ª ed. Editorial Científico-Médica, (1980).
- [3] Carreras Planells, Ramón. ‘Motores de combustión interna: fundamentos’. 1ª ed. Edicions UPC, (1993).
- [4] Heywood, John B. ‘Internal combustion engine fundamentals’. International ed. New York. McGraw-Hill, (1988).
- [5] Blair, Gordon P. Design and simulation of four-stroke engines. Warrendale (Pa.). Society of Automotive Engineers, (1999).
- [6] Prieto, Ismael; Alonso, Manuela; Luengo, J. Carlos. ‘Fundamentos de máquinas térmicas’. Oviedo: Universidad de Oviedo, Grupo de investigación de Ingeniería Térmica, (2007).
- [7] Moran, Michael J.; Shapiro, Howard N. ‘Fundamentos de termodinámica técnica’, versión española [de la 4ª ed. inglesa] por José A. Turégano y Carmen Velasco. 2ª ed. Barcelona [etc.]: Reverté, (2004).
- [8] Wark, Kenneth. ‘Termodinámica’. Traducción [de la 4ª ed. en inglés], Pablo Alejandro Lonngi Ayala, Efraín Rodríguez Ballesteros ; revisión técnica, José Luis Herce Vigil. 1ª ed. en español. México; Madrid [etc.]: McGraw-Hill, (1984).
- [9] White, Frank M. ‘Fluid mechanics’. 4th ed. Boston; Madrid [etc.]: WCB/McGraw-Hill, (1999).
- [10] Çengel, Yunus A. ‘Transferencia de calor’; traducción [de la 2ª ed. en inglés] José Hernán Pérez; revisión técnica, Ángel Hernández Fernández. 1ª ed. México D.F. McGraw-Hill Interamericana, (2004).
- [11] Holman, J. P. (Jack Philip). ‘Transferencia de calor’. Traducción [de la 8ª ed. en inglés] Pablo de Assas Martínez de Morentín, Teresa J. Leo Mena, Isabel Pérez García; revisión técnica Pedro Pérez del Notario Martínez de Marañón, Antonio Sánchez Sánchez. 1ª ed. en español. Madrid. McGraw-Hill Interamericana de España, (1998).
- [12] Keating, Eugene L. ‘Applied combustión’. New York [etc.] Marcel Dekker, cop. (1993).

- [13] Aguer Hortal, Mario; Miranda Barreras, Angel L. 'El Hidrógeno : fundamento de un futuro equilibrado'. 2ª ed. Madrid. Díaz de Santos, (2007).
- [14] Prades, Carlos A. 'Hidrógeno hoy: una alternativa energética y ambiental'. Buenos Aires : Cathedra Jurídica, (2006).
- [15] Rifkin, Jeremy. 'La Economía del hidrógeno : la creación de la red energética mundial y la redistribución del poder en la Tierra'. Traducción de Ramón Vilà Vernis. Barcelona. Paidós, (2002).
- [16] Petrucci, Ralph H., Harwood, William S., Herring, F. Geoffrey (2003). 'Química general. Octava edición.' Ed. Prentice-Hall, Madrid.

### ARTÍCULOS CONSULTADOS

- [17] Hakan Özcan, M.S. Söylemez. 'Thermal balance of a LPG fuelled, four stroke SI engine with water addition'. Energy Conversion and Management 47 (2006) 570–581.
- [18] O. Durgun, Z. Sahin. 'Theoretical investigation of heat balance in direct injection (DI) diesel engines for neat diesel fuel and gasoline fumigation'. Energy Conversion and Management.
- [19] Noboru Yamada, Md Nor Anuar Mohamad. 'Efficiency of hydrogen internal combustion engine combined with open steam Rankine cycle recovering water and waste heat'. International journal of hydrogen energy 35 (2010) 1430–1442.
- [20] E.A. Ajava, Bachchan Singh, T.K. Bhattacharya. 'Thermal balance of a single cylinder diesel engine operating on alternative fuels'. Energy Conversion & Management 41 (2000) 1533±1541.
- [21] Shuofeng Wang, Changwei Ji, Bo Zhang. 'Effects of hydrogen addition and cylinder cutoff on combustion and emissions performance of a spark-ignited gasoline engine under a low operating condition'. Energy 35 (2010) 4754e4760.
- [22] Mohand Said Lounici, Khaled Loubar, Mourad Balistrout, Mohand Tazerout. 'Investigation on heat transfer evaluation for a more efficient two-zone combustion model in the case of natural gas SI engines'. Applied Thermal Engineering 31 (2011) 319e328.
- [23] Sebastian Verhelst, Thomas Wallner. 'Hydrogen-fueled internal combustion engines'. Progress in Energy and Combustion Science 35 (2009) 490–527.
- [24] Tien, J.H., Stalker, R.J. (2002) 'Release of Chemical Energy by Combustion in a Supersonic Mixing Layer of Hydrogen and Air', Combustion and Flame 130, 329-348.

## **OTROS**

- [25] Idareta Erro, I. (2010) 'Simulación CFD de procesos de combustión de hidrógeno', Proyecto Fin de Carrera, Universidad Pública de Navarra.
- [26] Iriarte Labalde, I. (2007) 'Simulación del proceso de combustión en un MCIa alimentado con hidrógeno', Proyecto Fin de Carrera, Universidad Pública de Navarra.
- [27] Aldaz Unzu, M. (2007) 'Simulación del proceso de admisión en un MCIa alimentado con hidrógeno', Proyecto Fin de Carrera, Universidad Pública de Navarra.
- [28] ANSYS, Inc. (2006) 'ANSYS-CFX Solver Theory Guide' (de [www.ansys.com](http://www.ansys.com)).

## **PÁGINAS WEB**

- [29] [www.grupohidrogeno.es](http://www.grupohidrogeno.es)
- [30] [www.ansys.com](http://www.ansys.com)
- [31] [www.kistler.com](http://www.kistler.com)
- [32] [www.motec.com](http://www.motec.com)
- [33] [www.bronkhorst.com](http://www.bronkhorst.com)



Pamplona, a 28 de julio de 2011.

Fdo. Jorge Trobajo San Martín



## ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

Titulación:

**INGENIERÍA INDUSTRIAL**

Título del proyecto:

**SIMULACIÓN Y ANÁLISIS EXPERIMENTAL SOBRE  
COMBUSTIÓN Y BALANCES TÉRMICOS EN UN H<sub>2</sub>-MEP**

**ANEXO A: RESULTADOS**

Jorge Trobajo San Martín

Tutor: Pedro M<sup>a</sup> Diéguez Elizondo

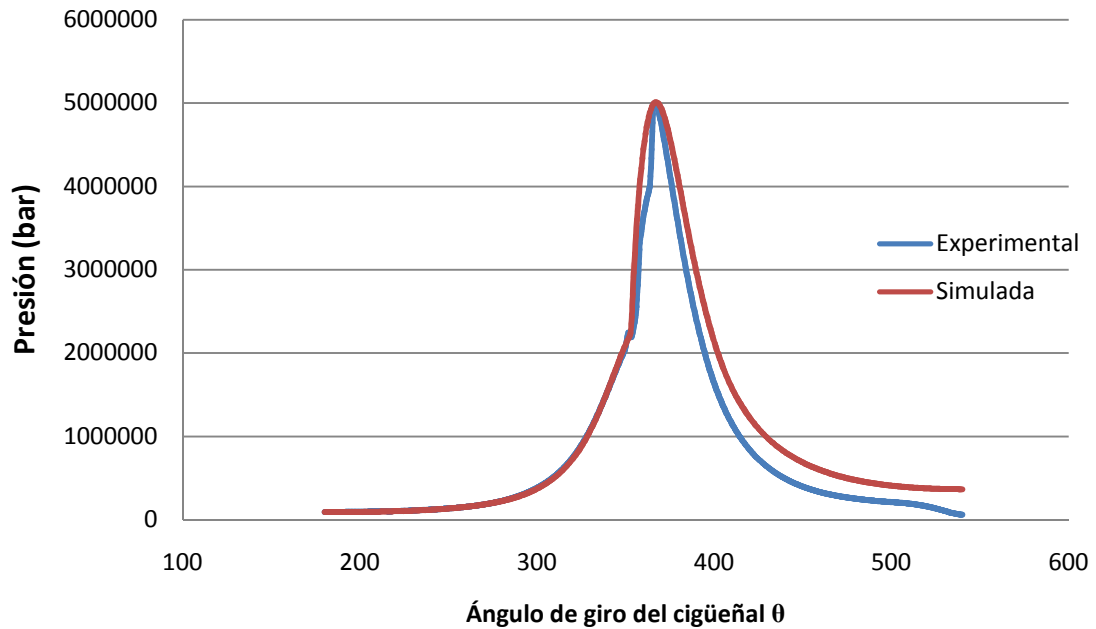
Pamplona, 28 de julio de 2011

## ÍNDICE

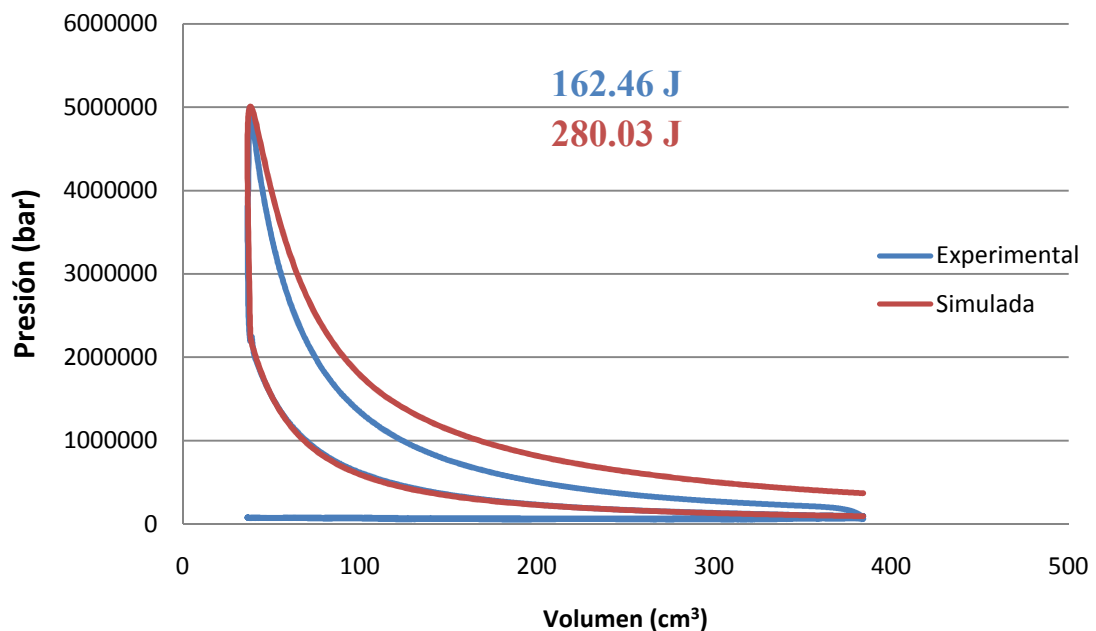
A.1. Resultados para $\lambda=1.6$ y plena carga.....	2
A.2. Resultados para $\lambda=2$ y plena carga.....	7
A.3. Resultados para $\lambda=2.5$ y plena carga.....	12
A.4. Resultados para $\lambda=1.6$ y carga parcial.....	17
A.5. Resultados para $\lambda=2$ y carga parcial.....	22
A.6. Resultados para $\lambda=2.5$ y carga parcial.....	27

## A.1. RESULTADOS PARA $\lambda=1.6$ Y PLENA CARGA

1000 rpm

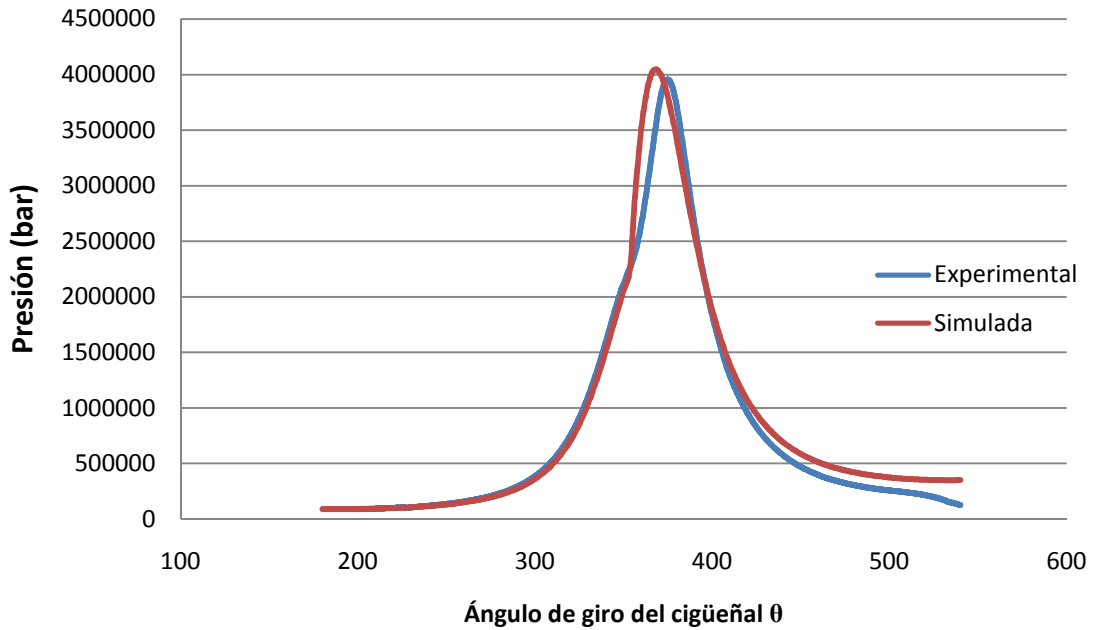


Gráfica A.1.1. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 1000 rpm y plena carga

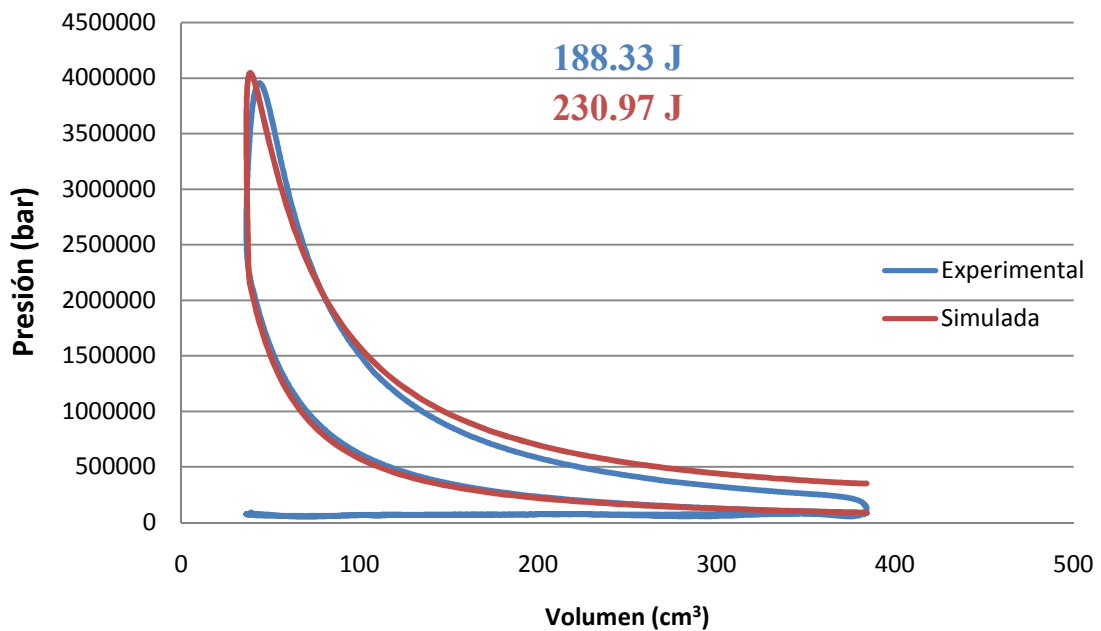


Gráfica A.1.2. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 1000 rpm y plena carga

2000 rpm

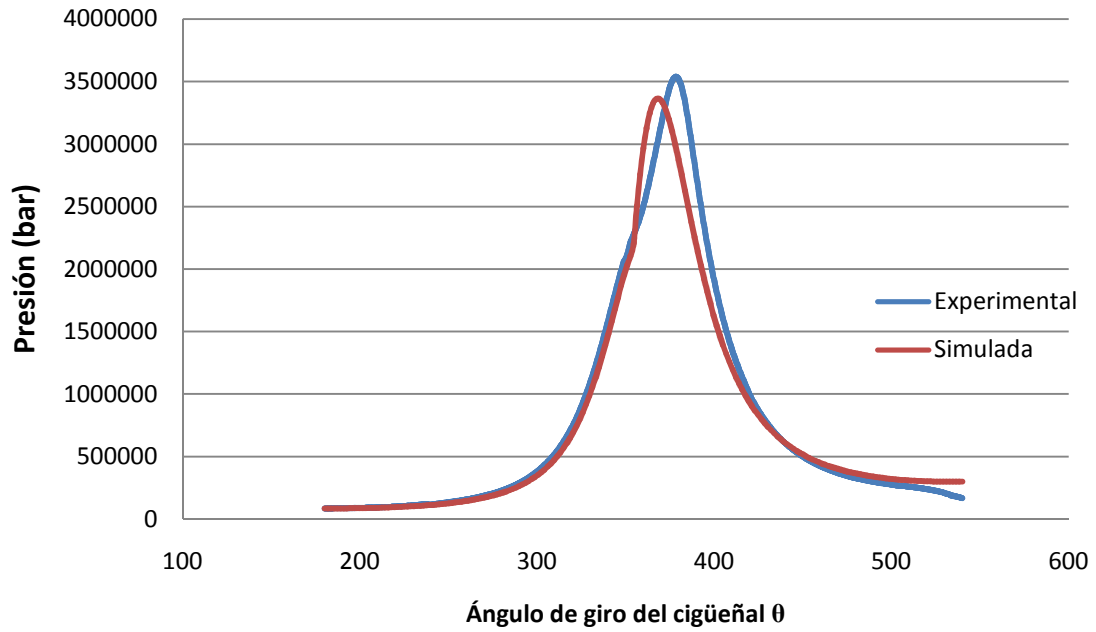


Gráfica A.1.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y plena carga

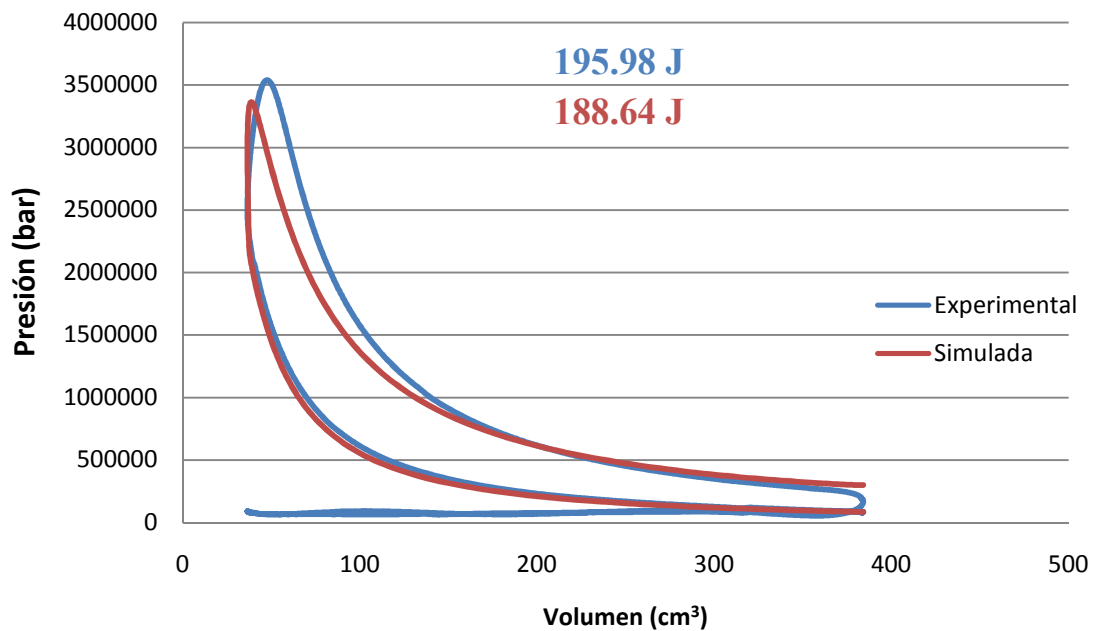


Gráfica A.1.4. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y plena carga

### 3000 rpm

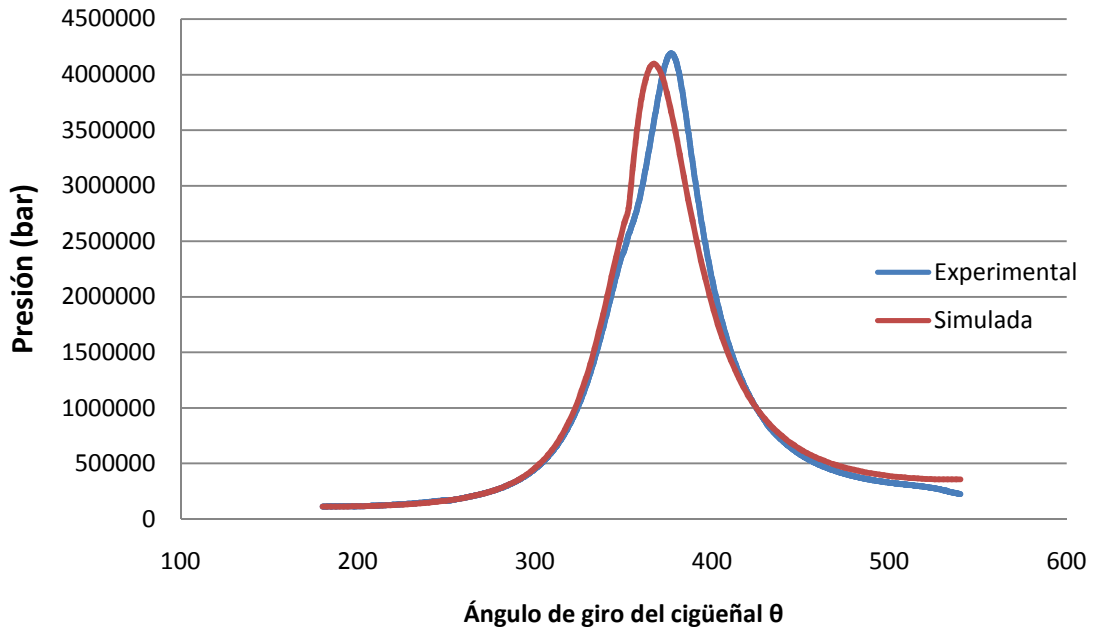


Gráfica A.1.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 3000 rpm y plena carga

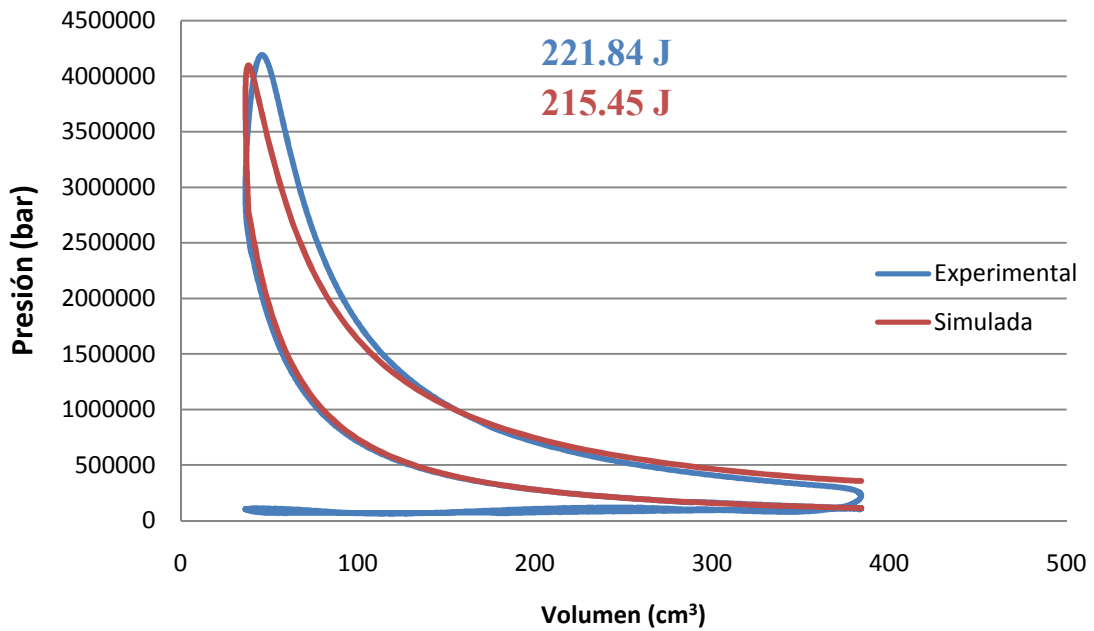


Gráfica A.1.6. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 3000 rpm y plena carga

4000 rpm

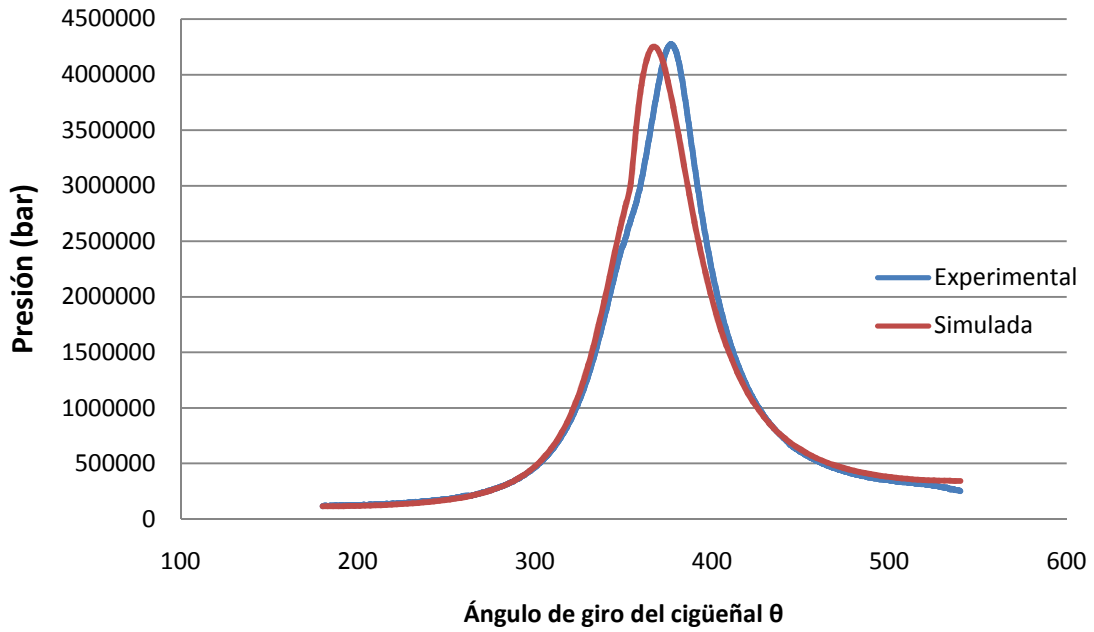


Gráfica A.1.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 4000 rpm y plena carga

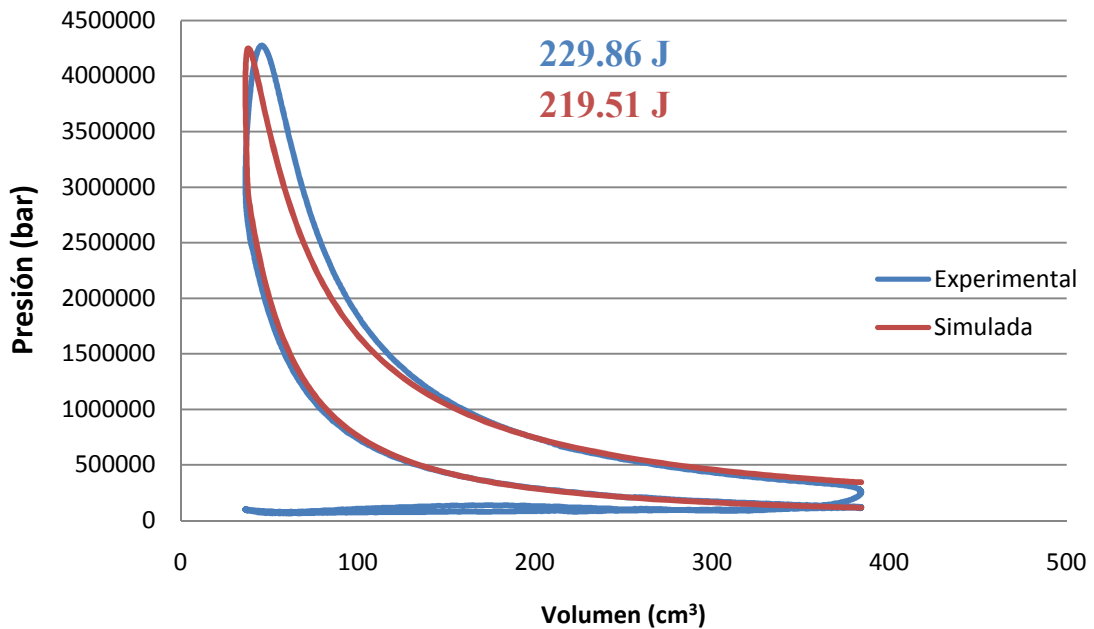


Gráfica A.1.8. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 4000 rpm y plena carga

5000 rpm



Gráfica A.1.9. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 5000 rpm y plena carga

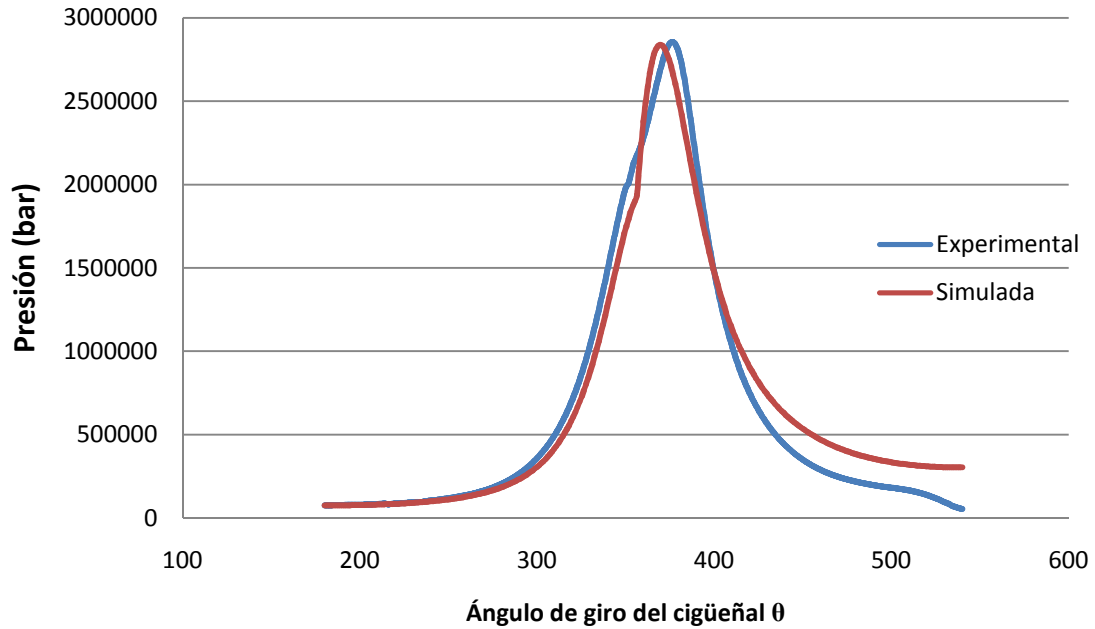


Gráfica A.1.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 5000 rpm y plena carga

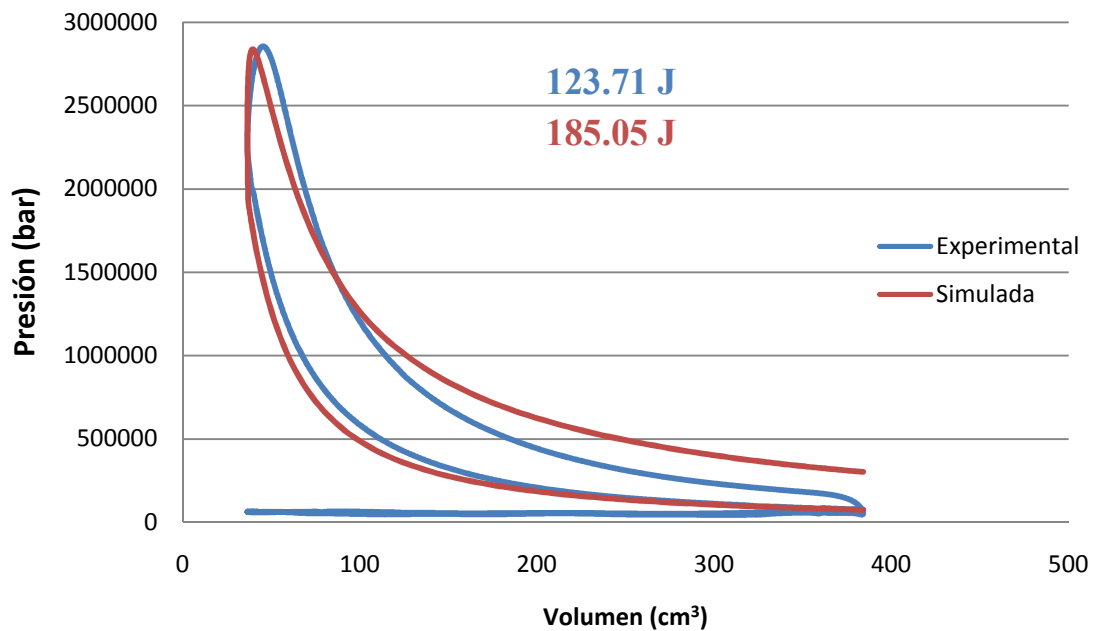


## A.2. RESULTADOS PARA $\lambda=2$ Y PLENA CARGA

1000 rpm

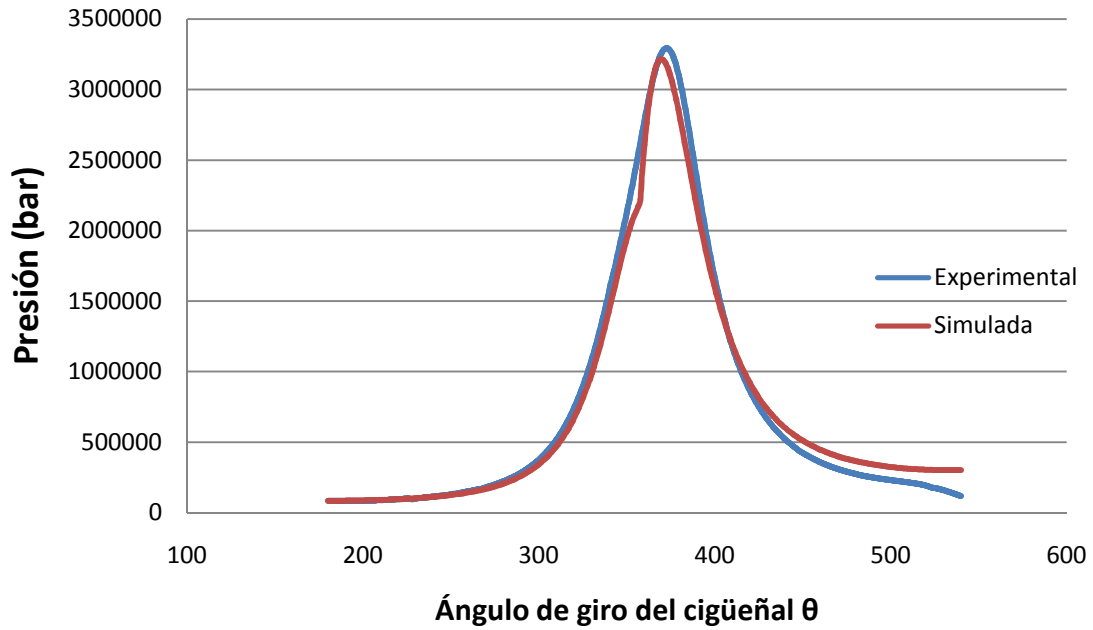


Gráfica A.2.1. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 1000 rpm y plena carga

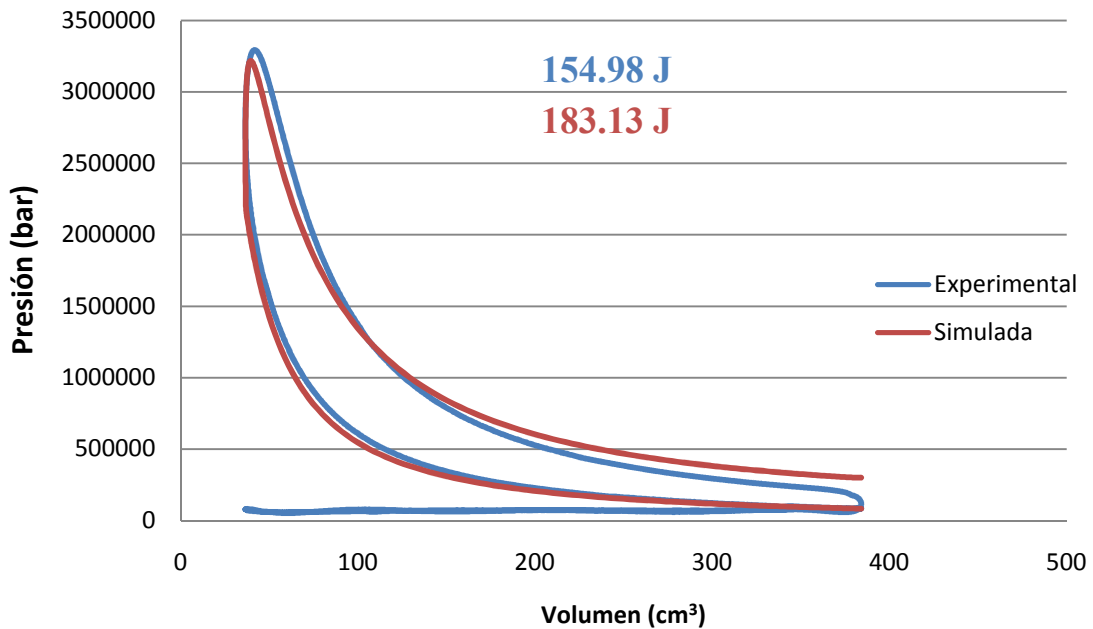


Gráfica A.2.2. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 1000 rpm y plena carga

2000 rpm

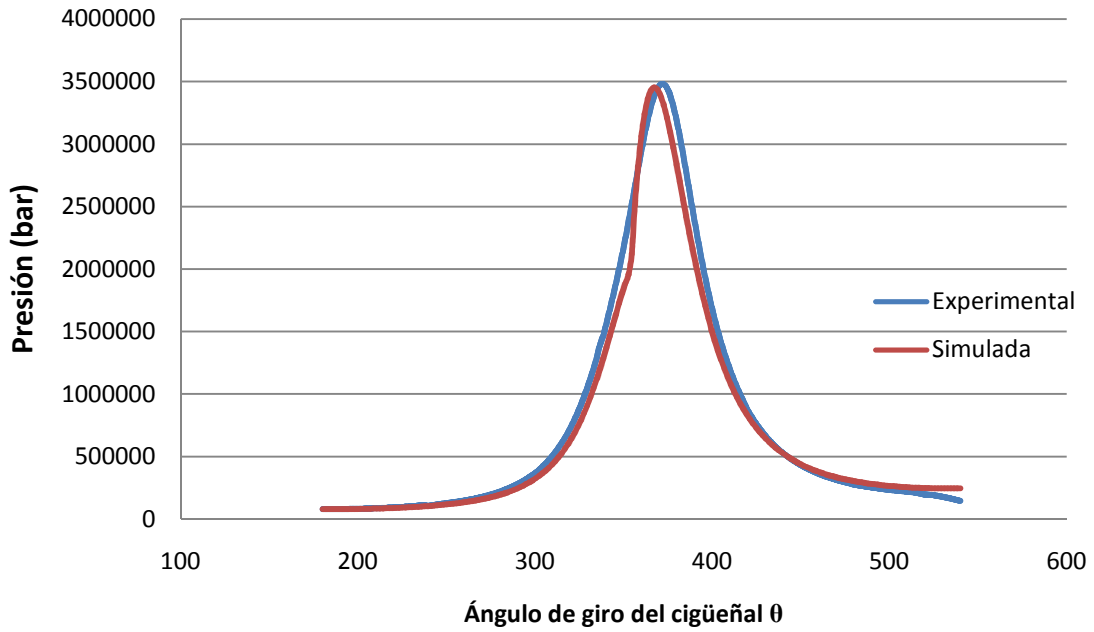


Gráfica A.2.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y plena carga

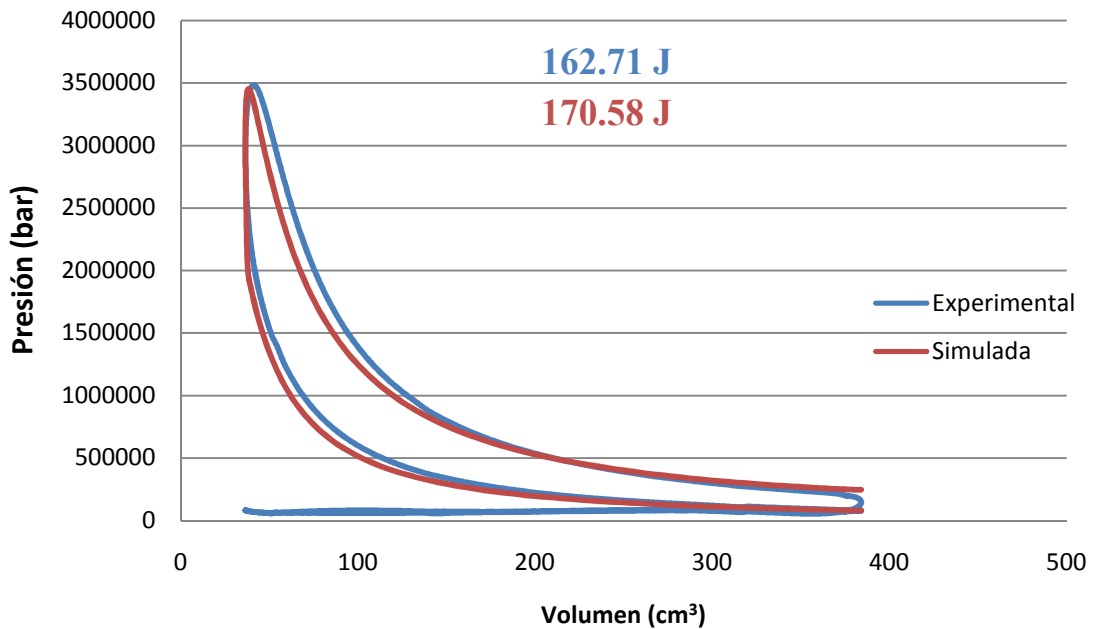


Gráfica A.2.4. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y plena carga

**3000 rpm**

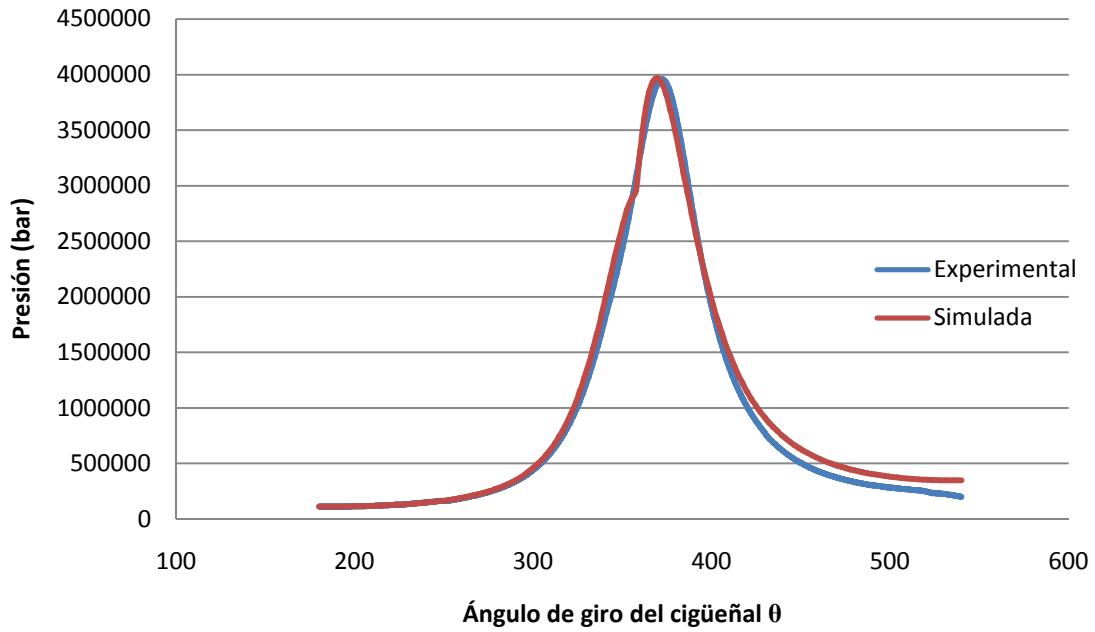


**Gráfica A.2.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 3000 rpm y plena carga**

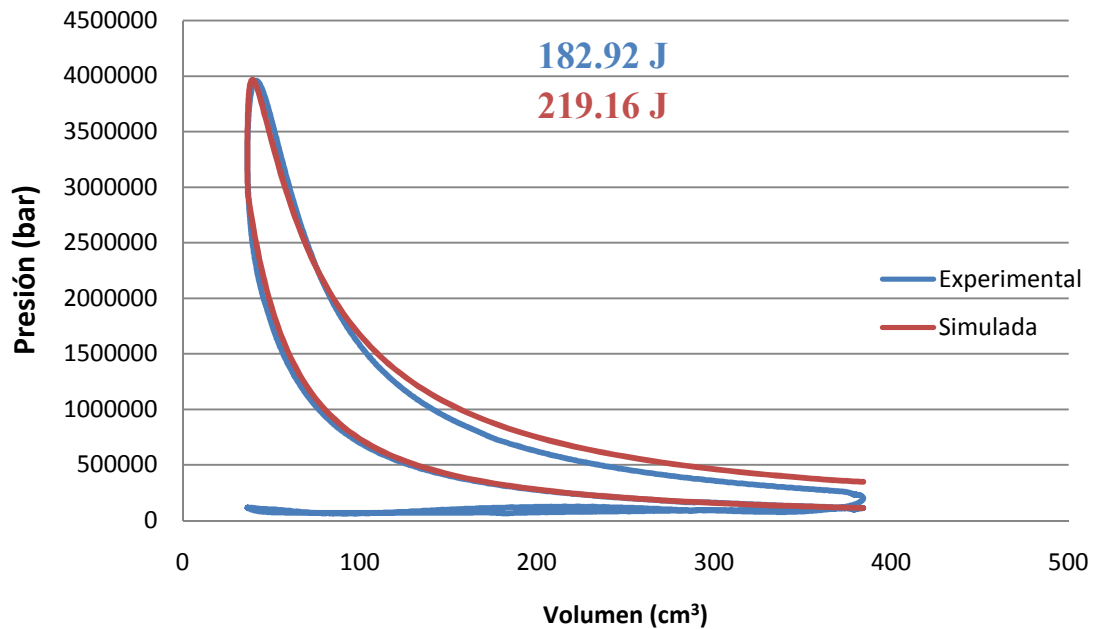


**Gráfica A.2.6. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 3000 rpm y plena carga**

4000 rpm

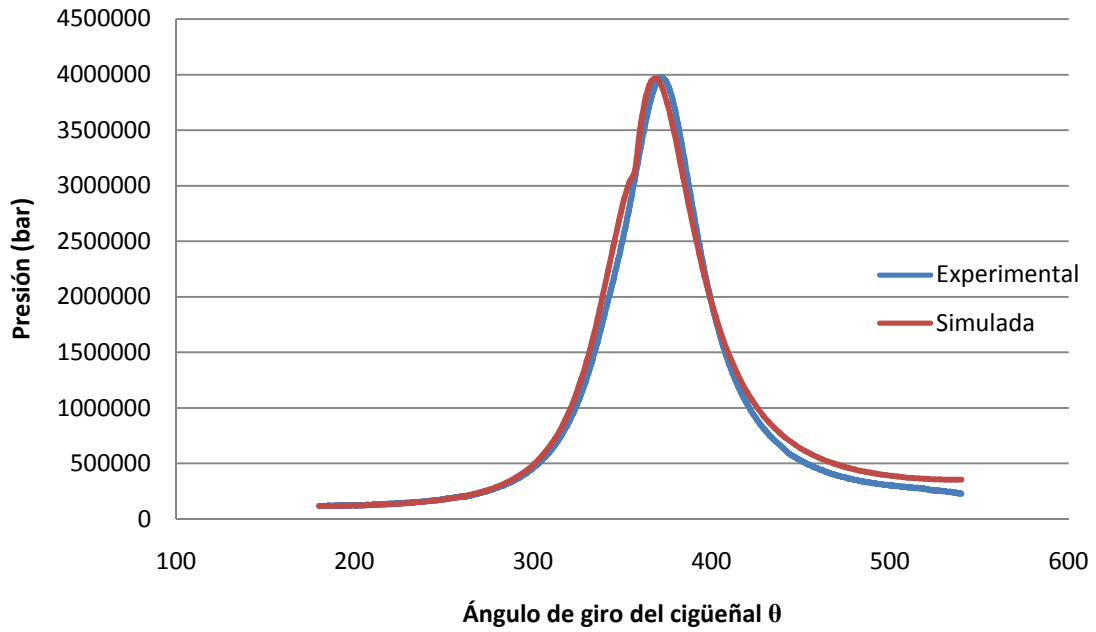


Gráfica A.2.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 4000 rpm y plena carga

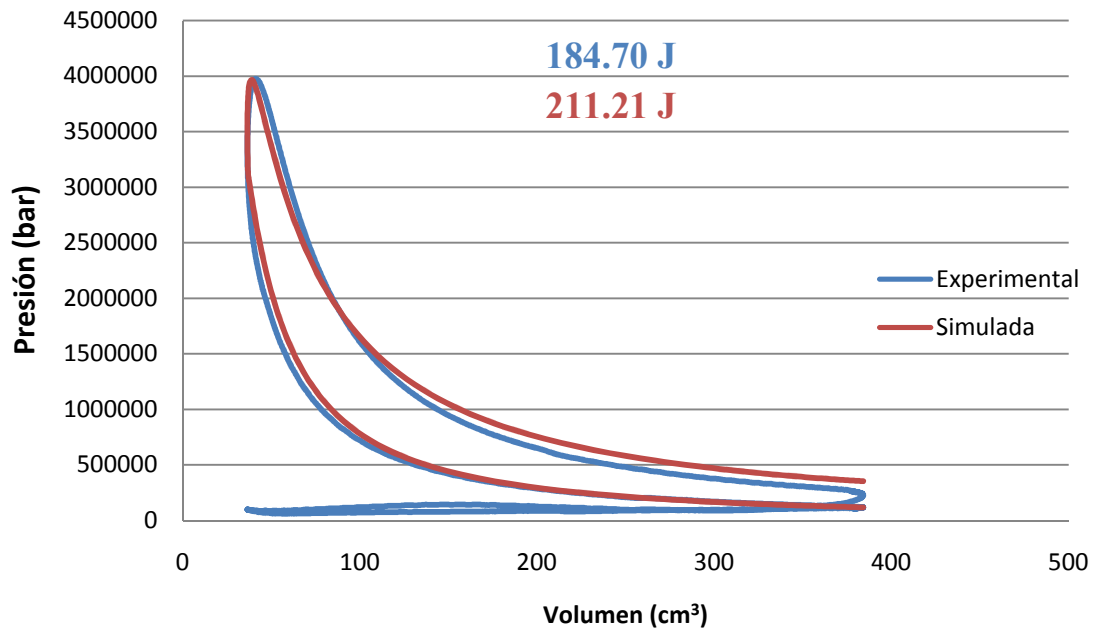


Gráfica A.2.8. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 4000 rpm y plena carga

5000 rpm



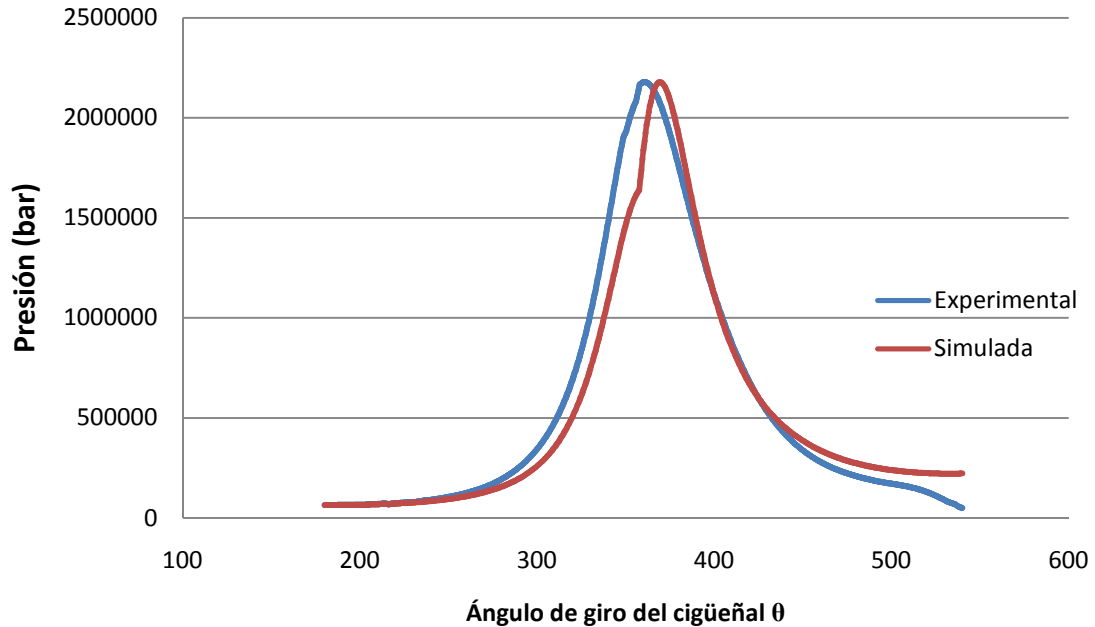
Gráfica A.2.9. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 5000 rpm y plena carga



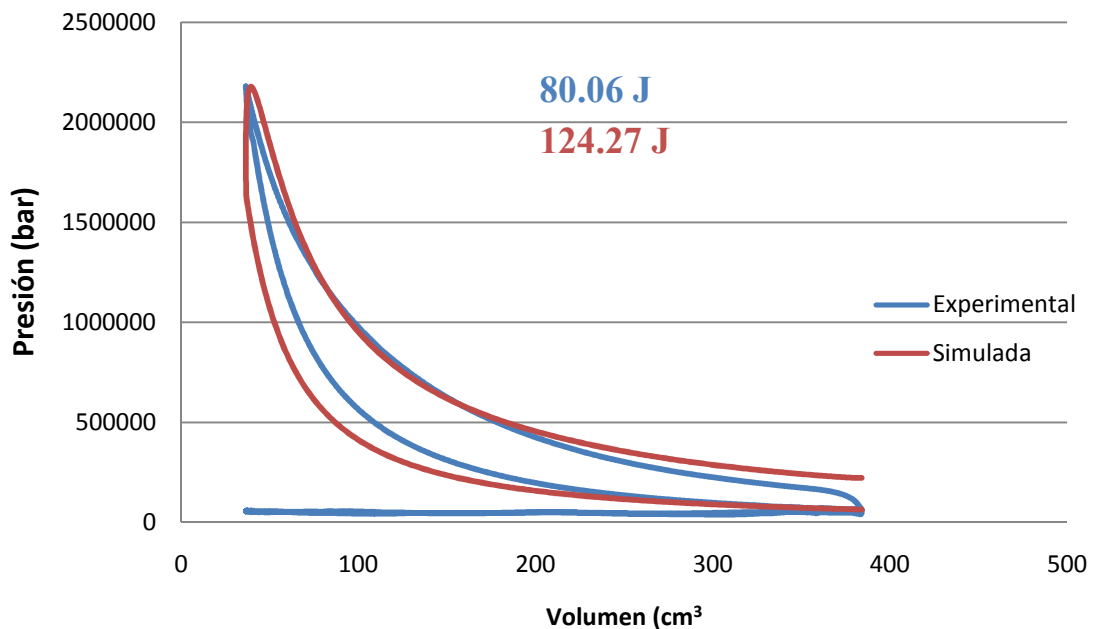
Gráfica A.2.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 5000 rpm y plena carga

## A.3. RESULTADOS PARA $\lambda=2.5$ Y PLENA CARGA

1000 rpm

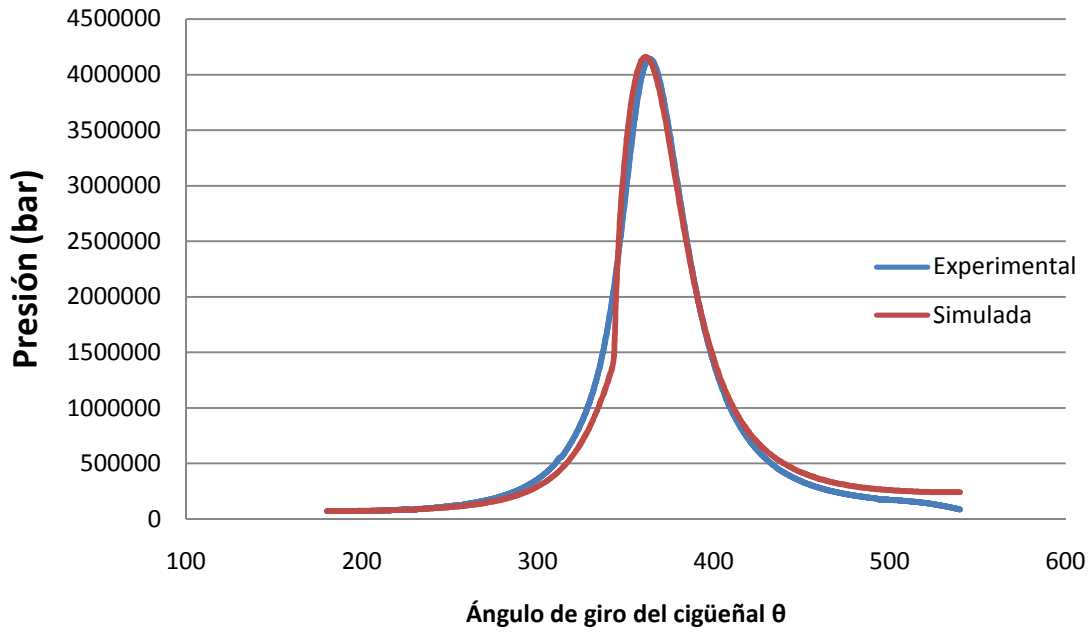


Gráfica A.3.1. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 1000 rpm y plena carga

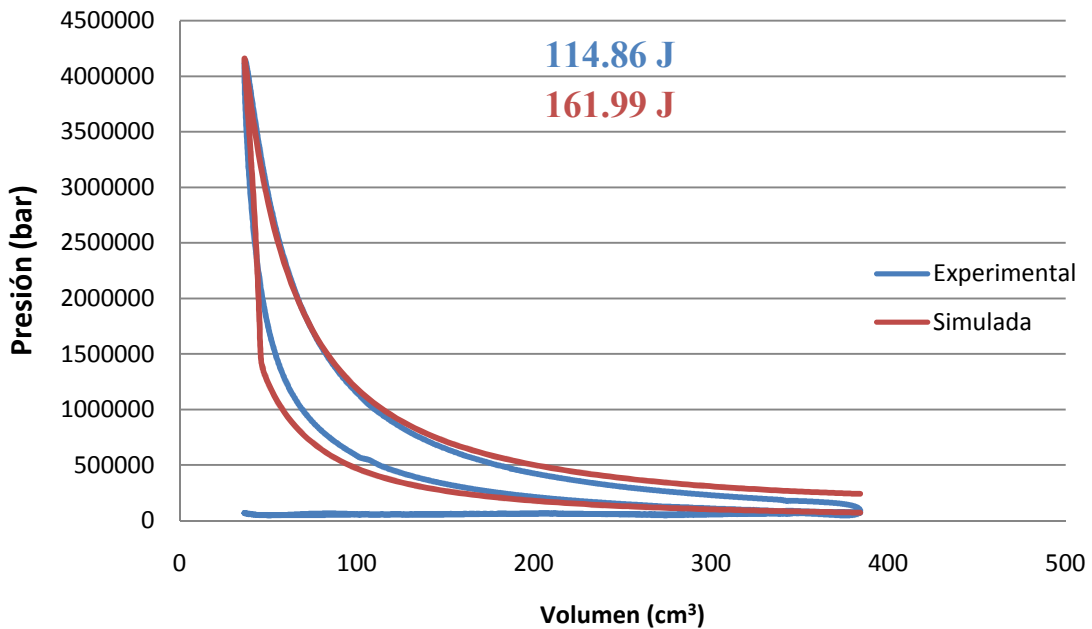


Gráfica A.3.2. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 1000 rpm y plena carga

2000 rpm

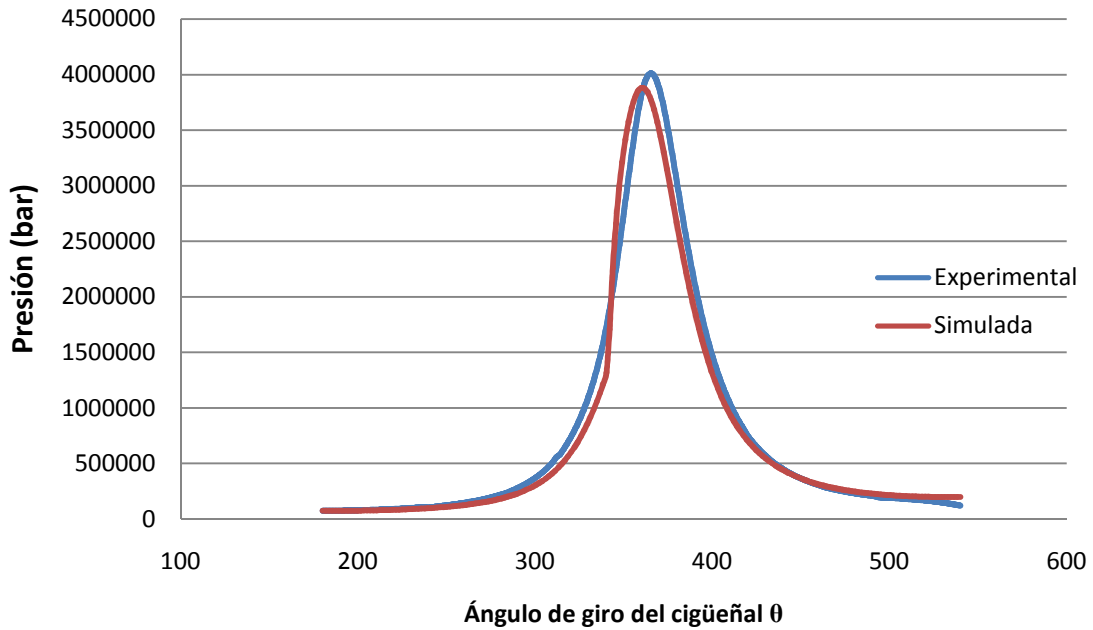


Gráfica A.3.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y plena carga

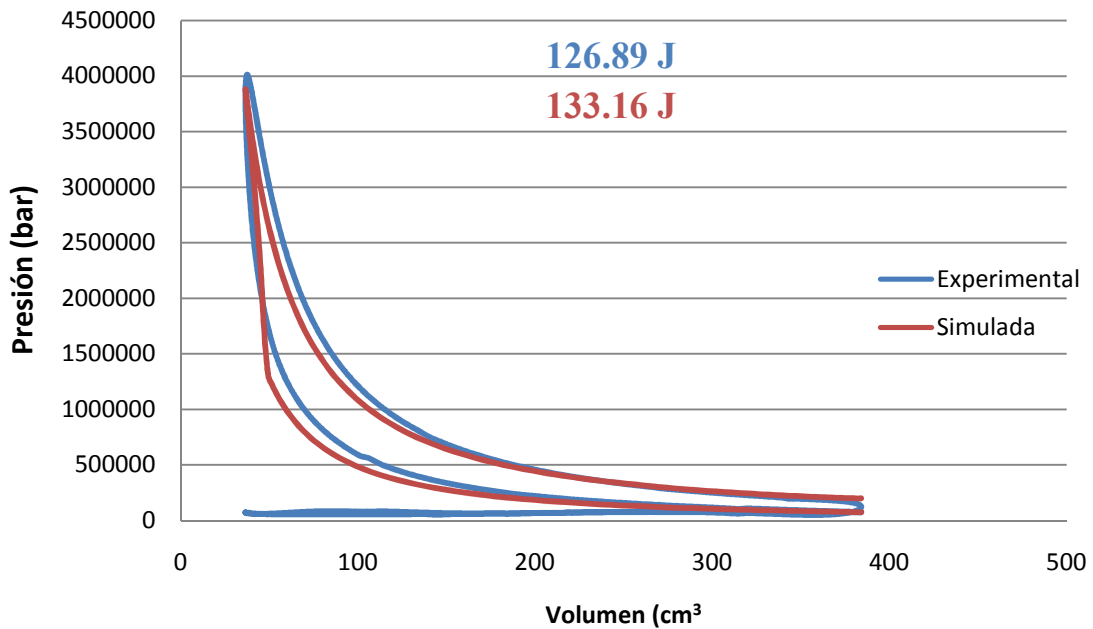


Gráfica A.3.4. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y plena carga

3000 rpm



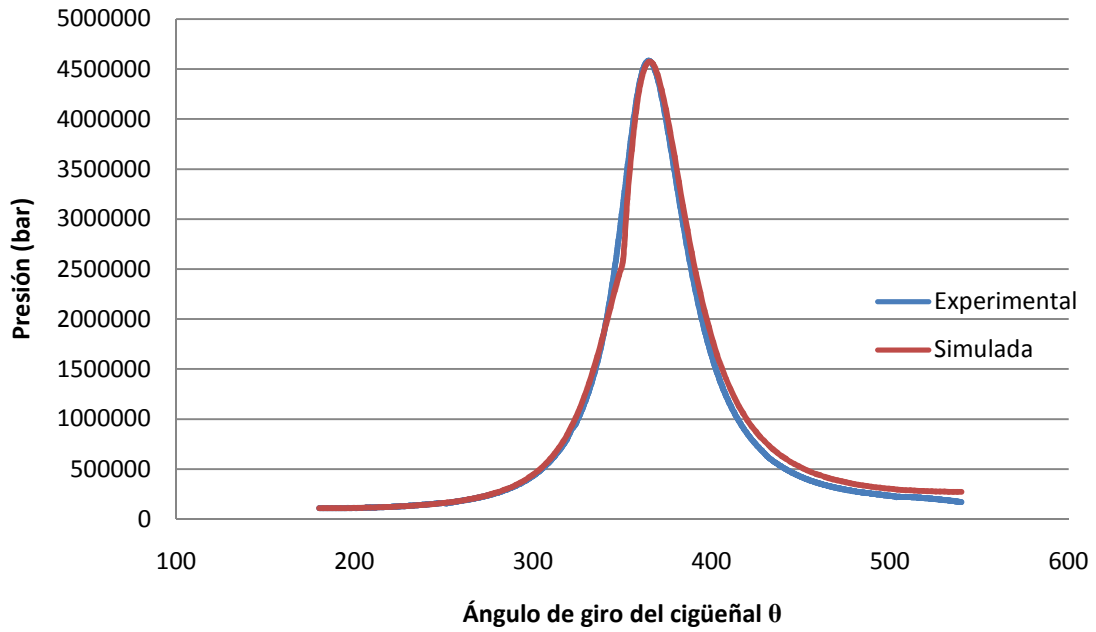
Gráfica A.3.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 3000 rpm y plena carga



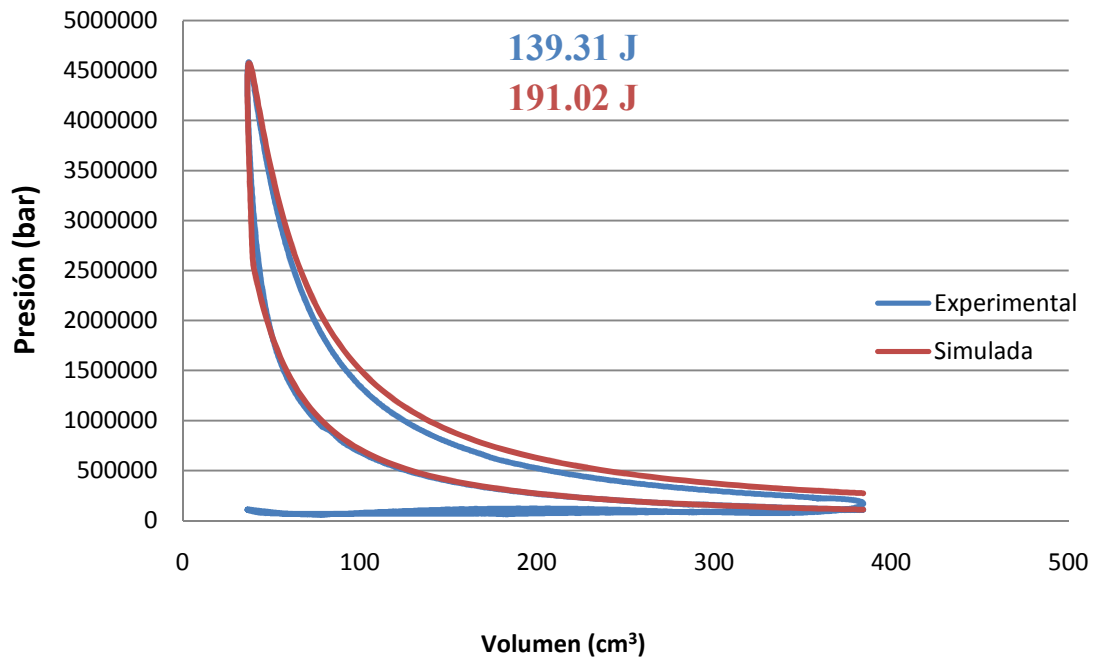
Gráfica A.3.6. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 3000 rpm y plena carga



4000 rpm

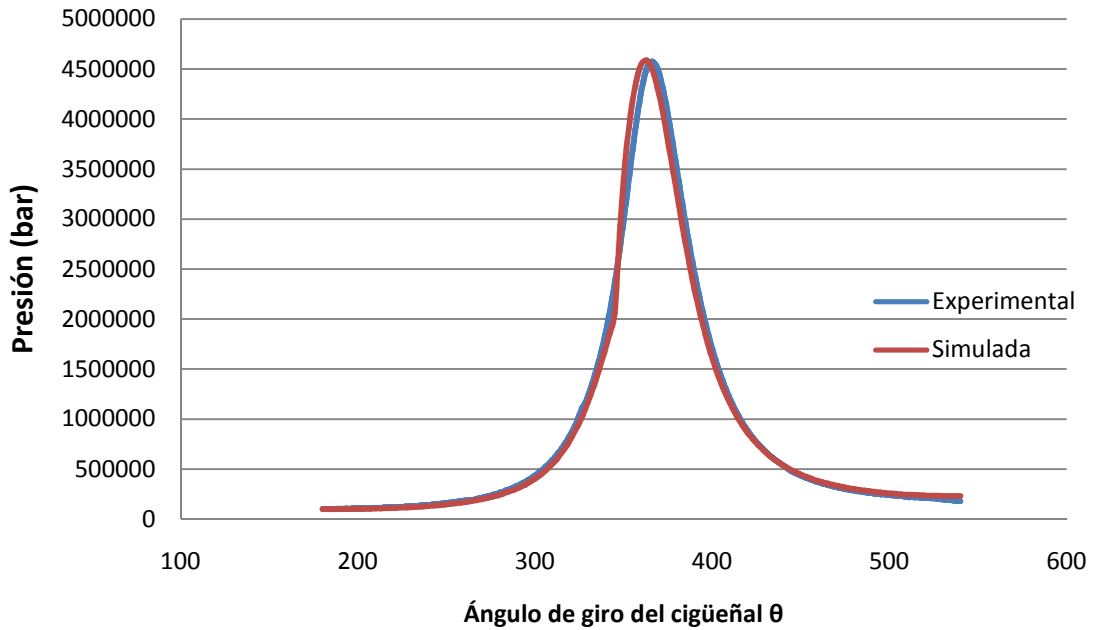


Gráfica A.3.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 4000 rpm y plena carga

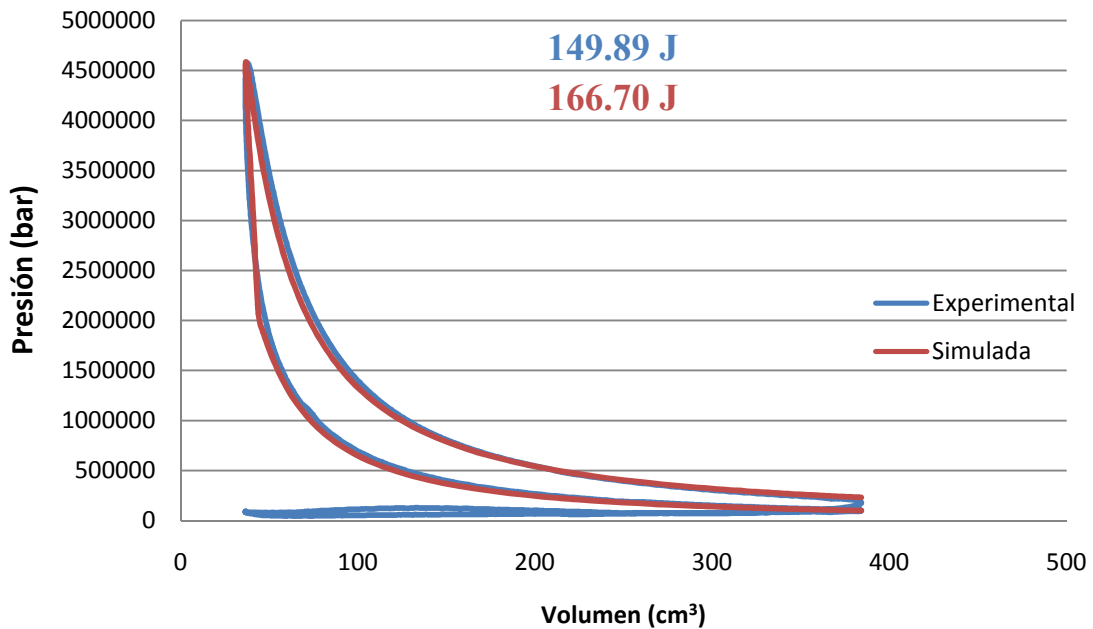


Gráfica A.3.8. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 4000 rpm y plena carga

5000 rpm



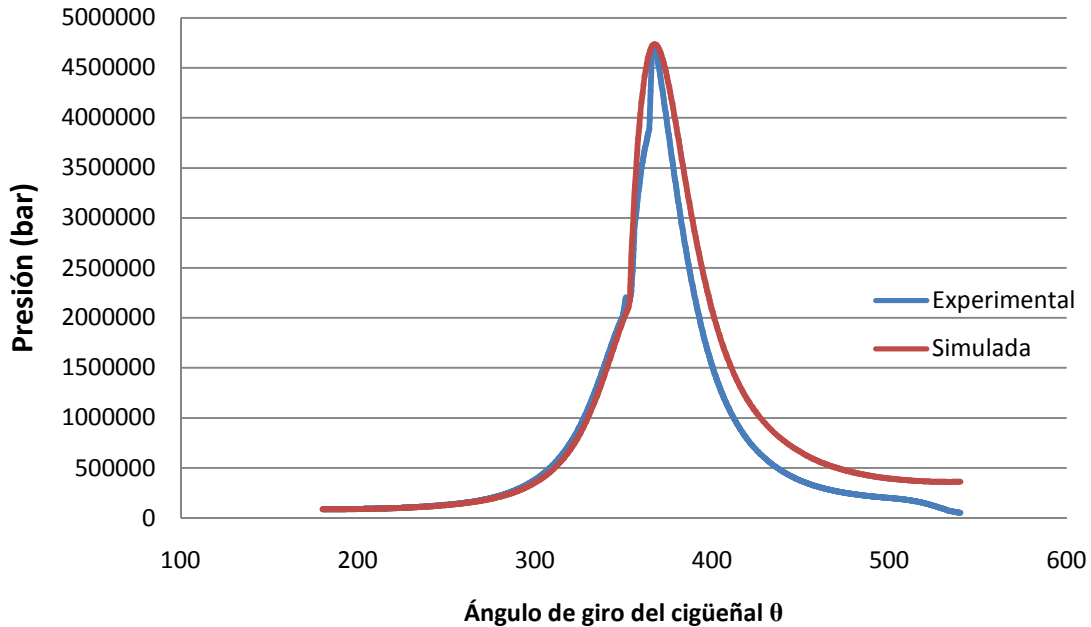
Gráfica A.3.9. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 5000 rpm y plena carga



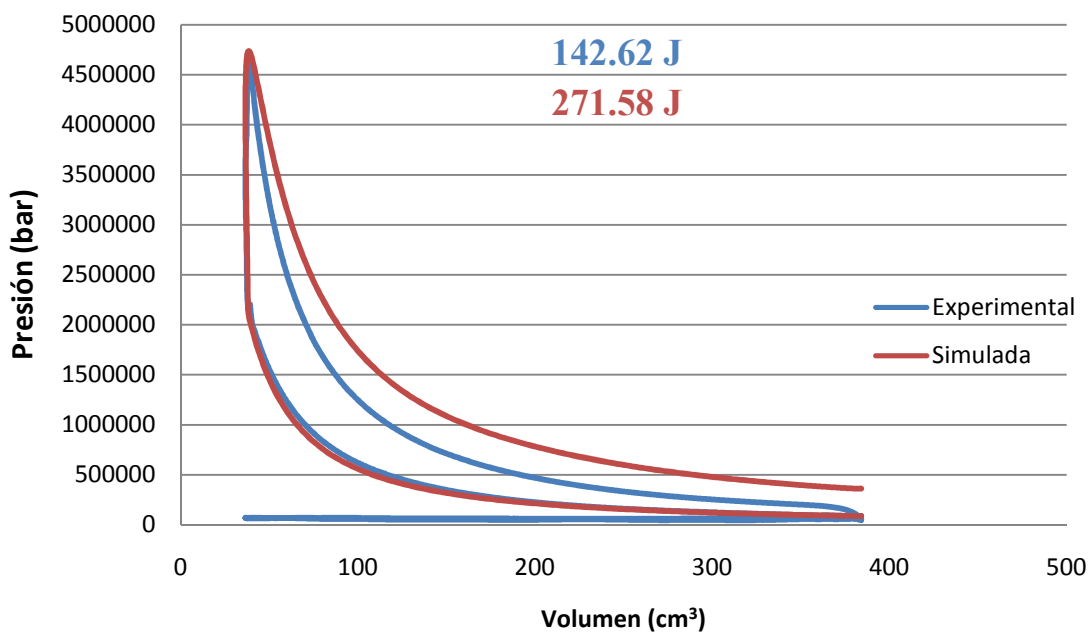
Gráfica A.3.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 5000 rpm y plena carga

## A.4. RESULTADOS PARA $\lambda=1.6$ Y CARGA PARCIAL

1000 rpm

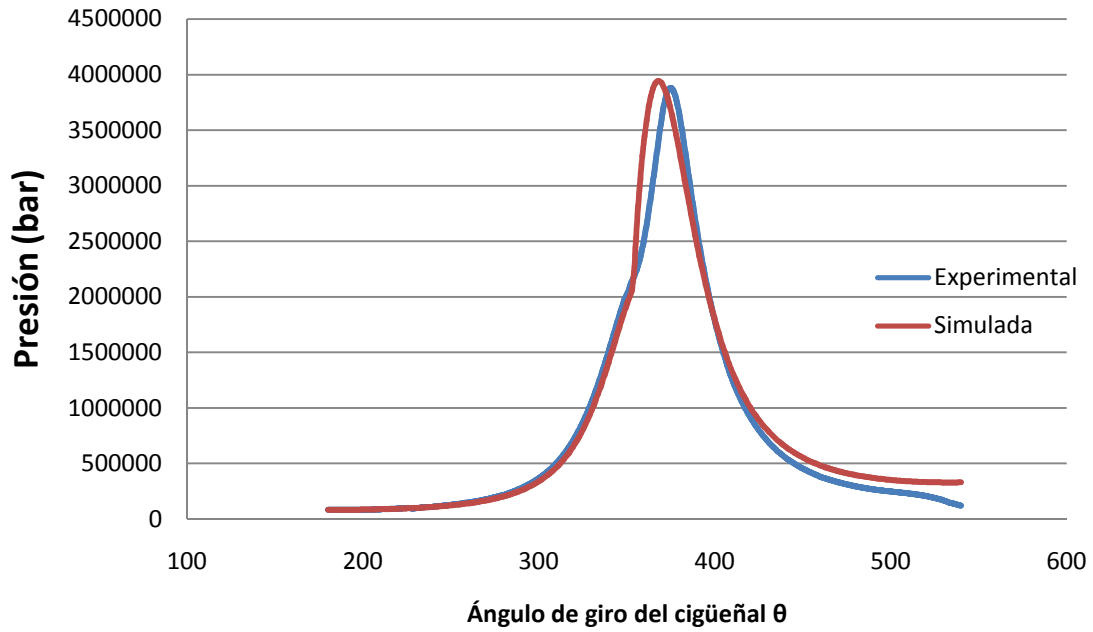


Gráfica A.4.1. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 1000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

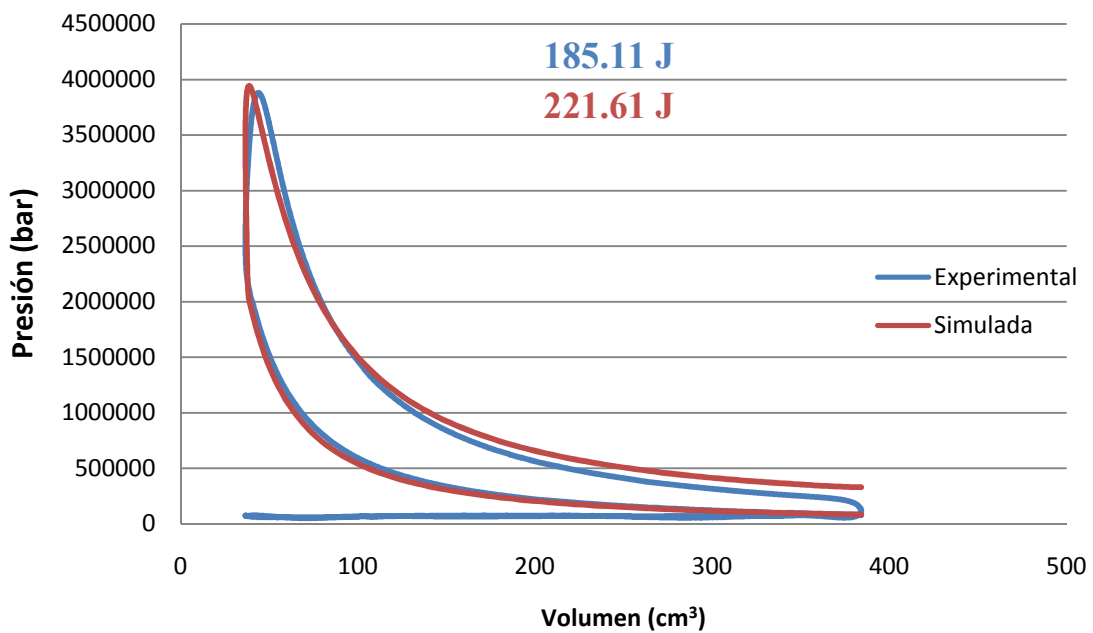


Gráfica A.4.2. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 1000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

2000 rpm

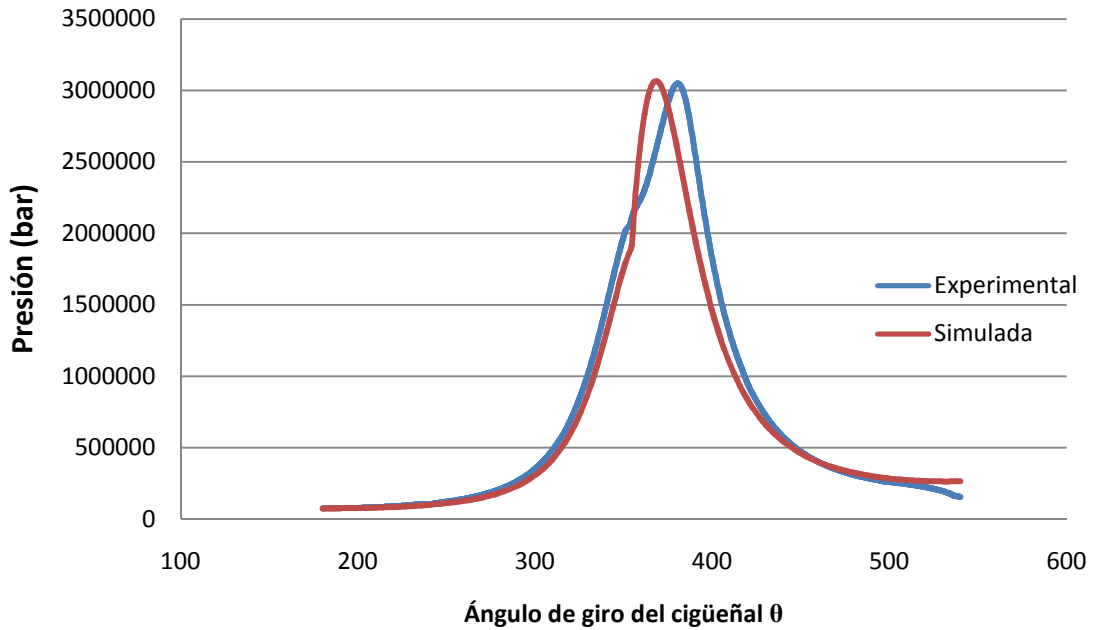


Gráfica A.4.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

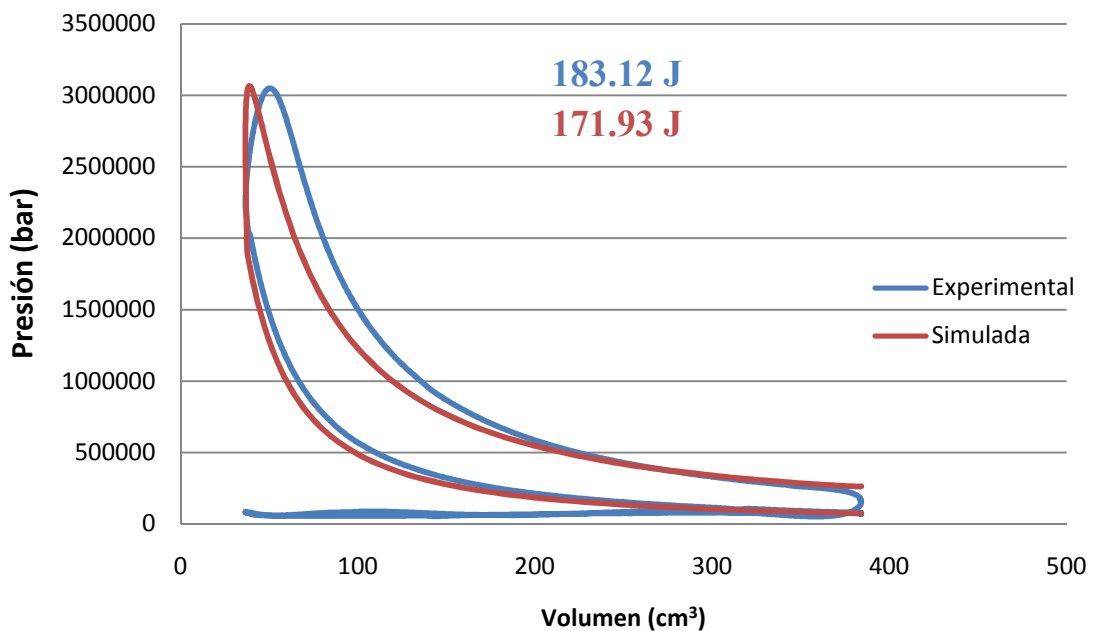


Gráfica A.4.4. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

3000 rpm

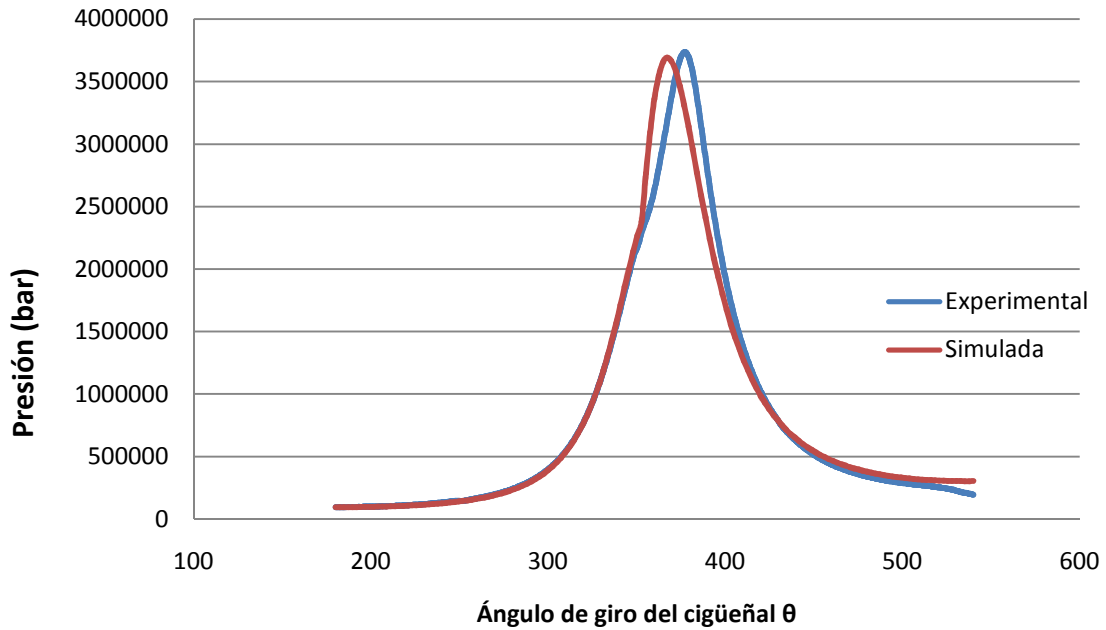


Gráfica A.4.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 3000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

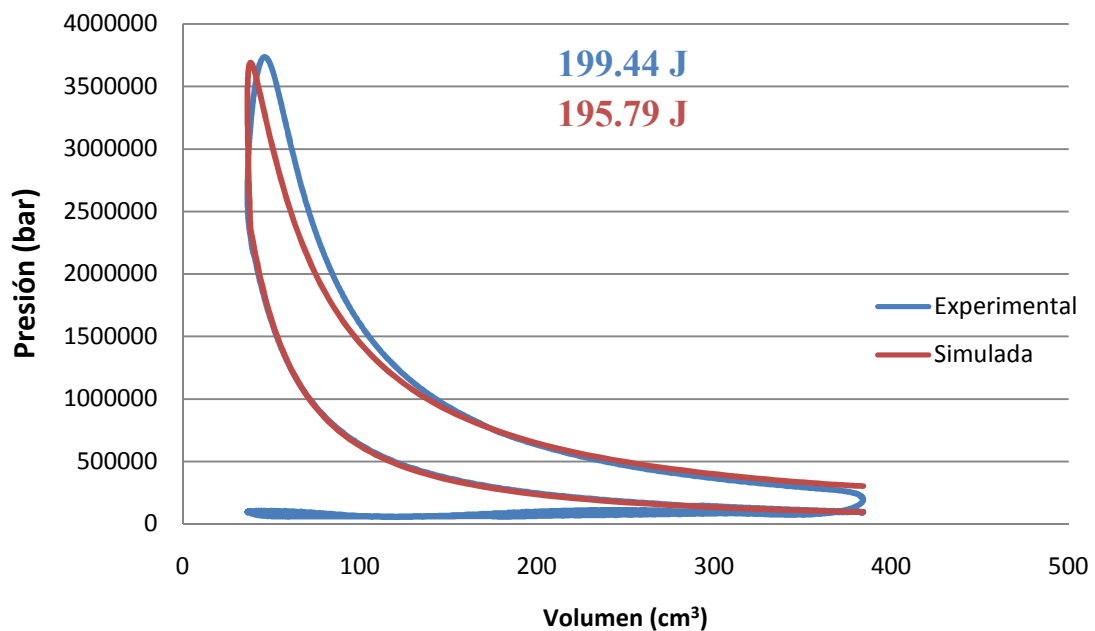


Gráfica A.4.6. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 3000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

4000 rpm

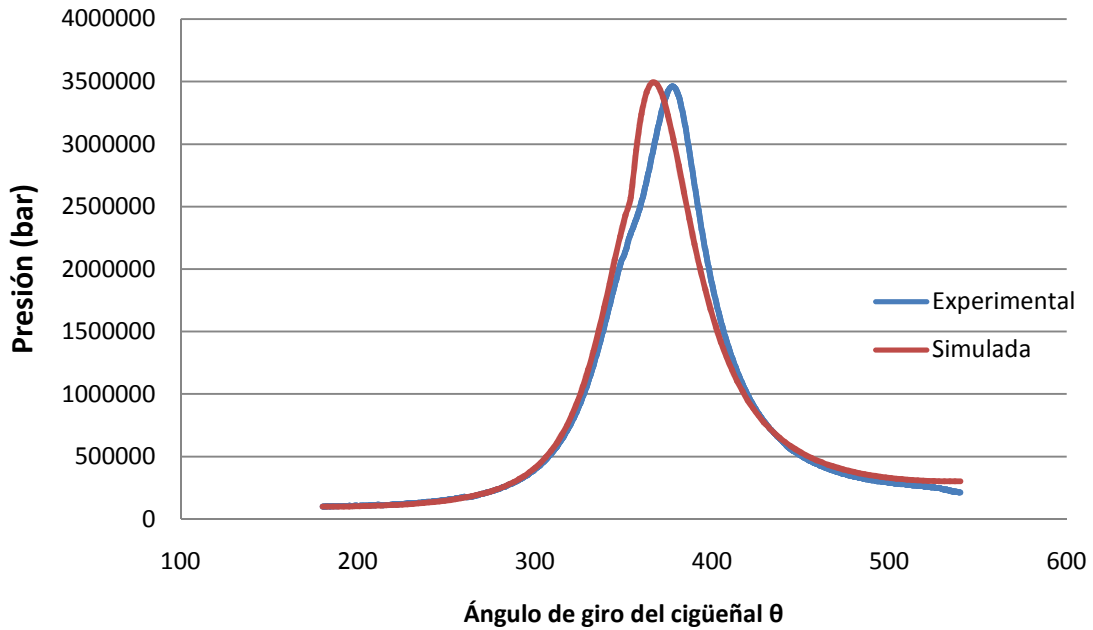


Gráfica A.4.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 4000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

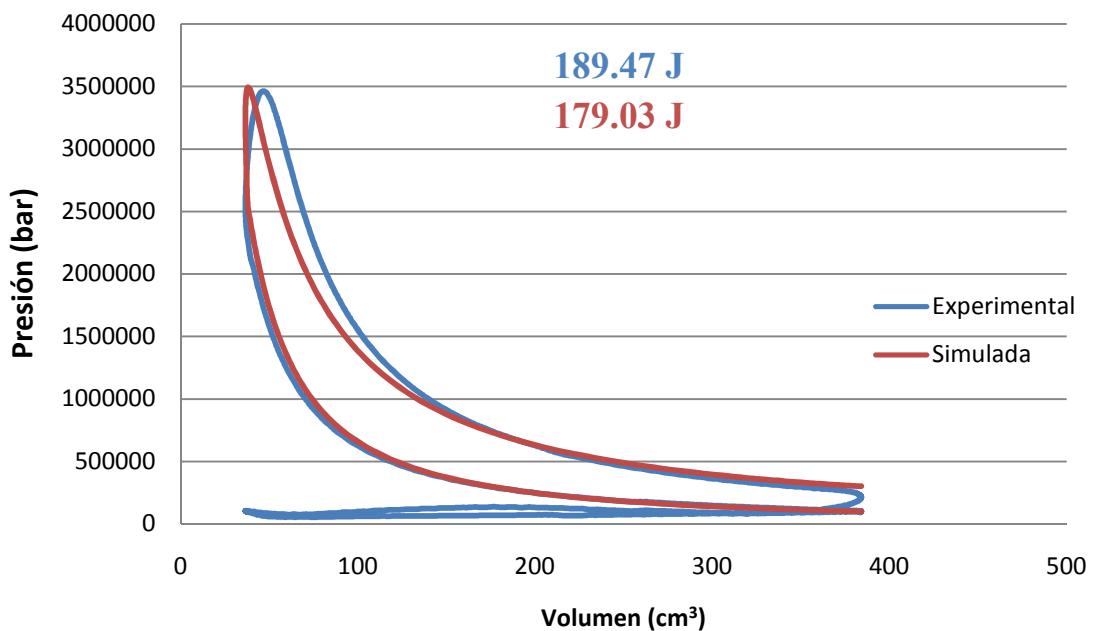


Gráfica A.4.8. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 4000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

5000 rpm



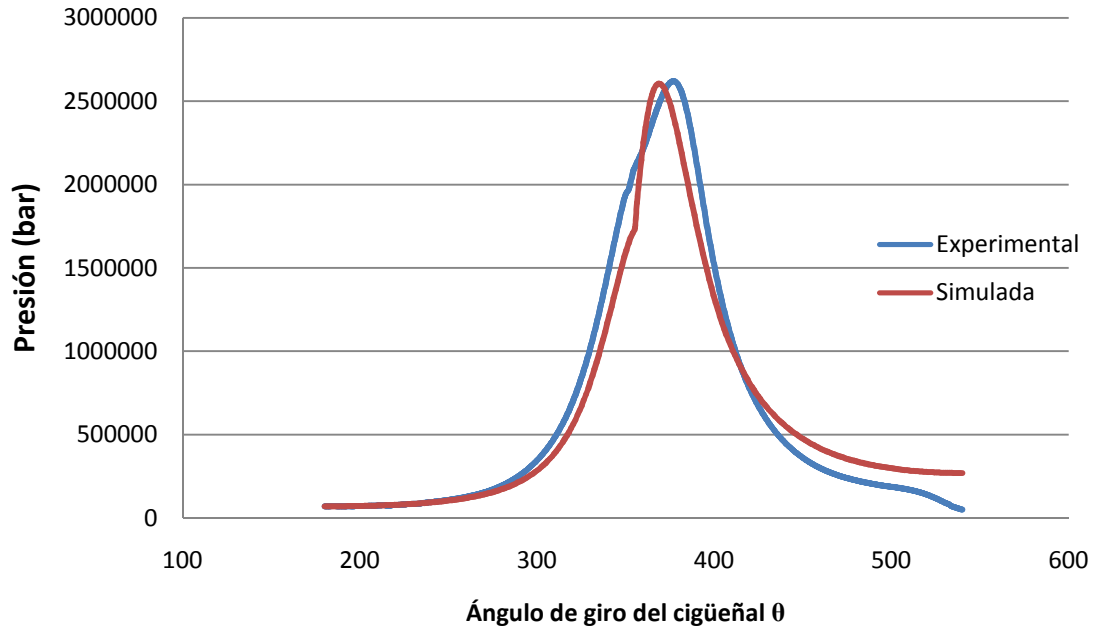
Gráfica A.4.9. Presión media en el cilindro para  $\lambda=1.6$ , 5000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



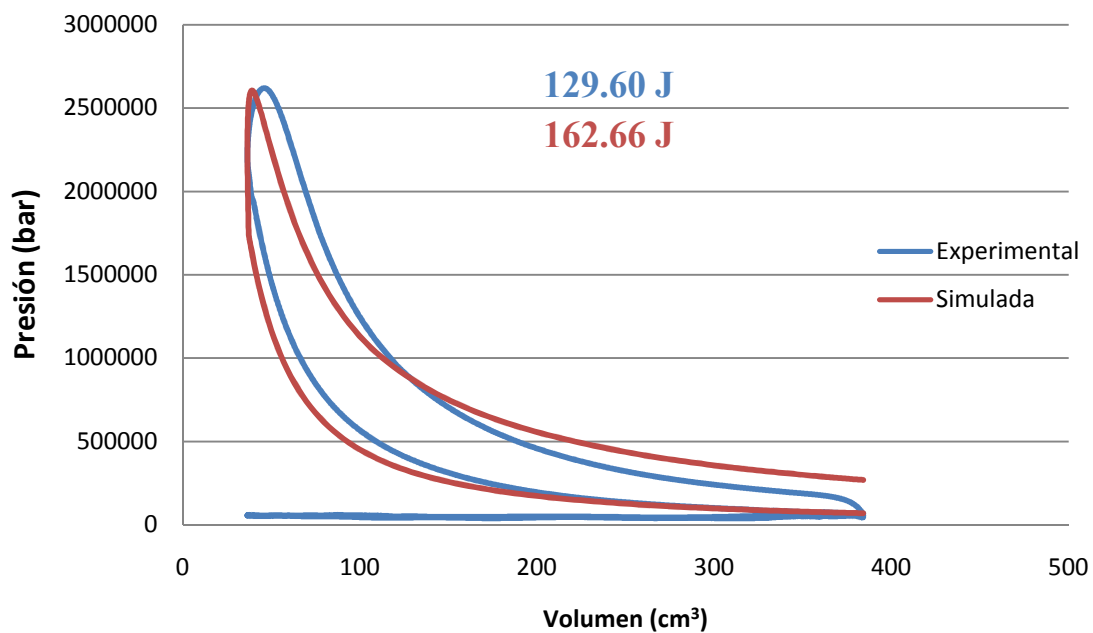
Gráfica A.4.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=1.6$ , 5000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

## A.5. RESULTADOS PARA $\lambda=2$ Y CARGA PARCIAL

1000 rpm



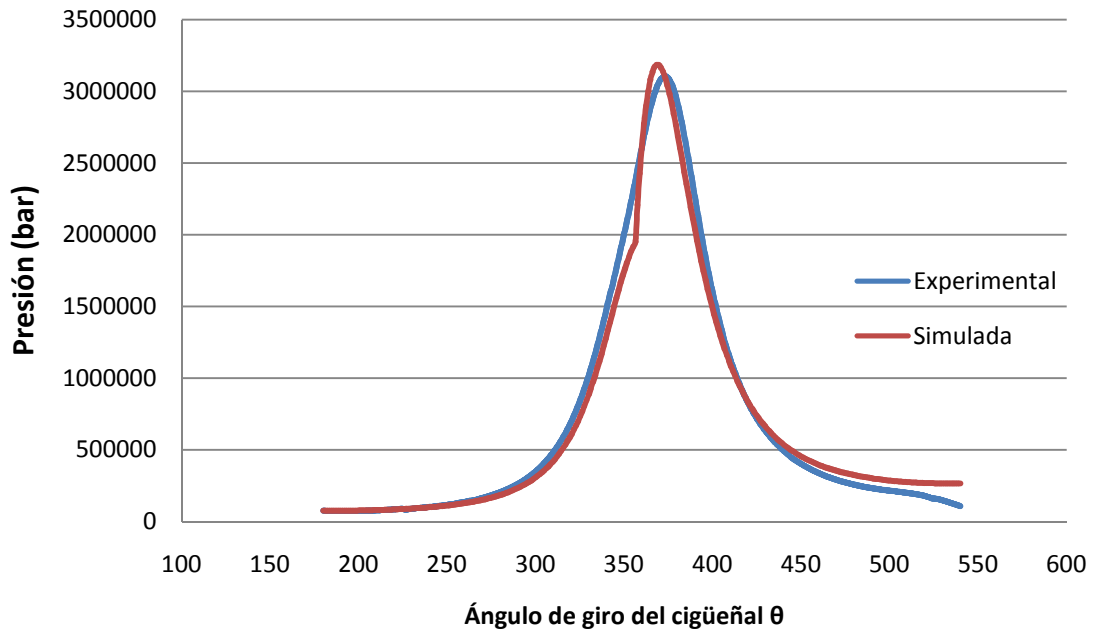
Gráfica A.5.1. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 1000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



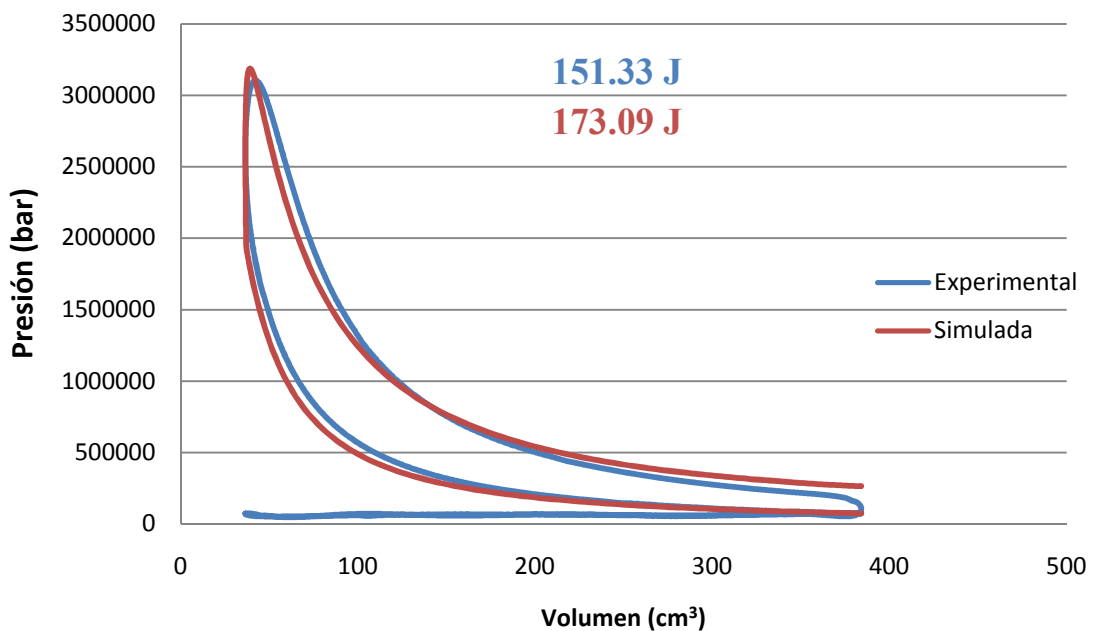
Gráfica A.5.2. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 1000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



2000 rpm

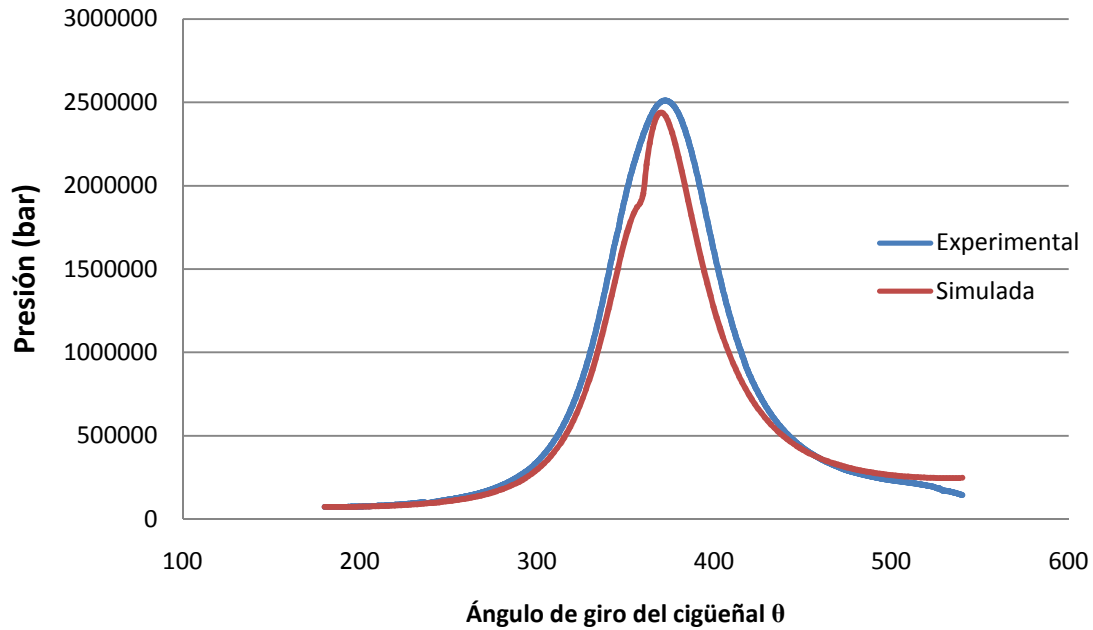


Gráfica A.5.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

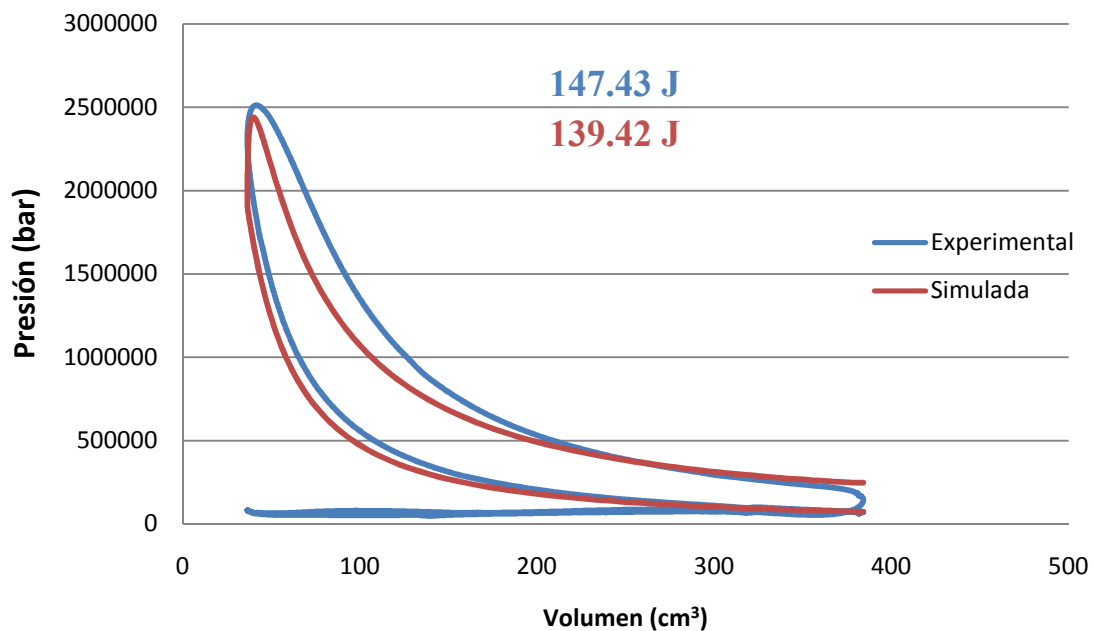


Gráfica A.5.4. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

**3000 rpm**

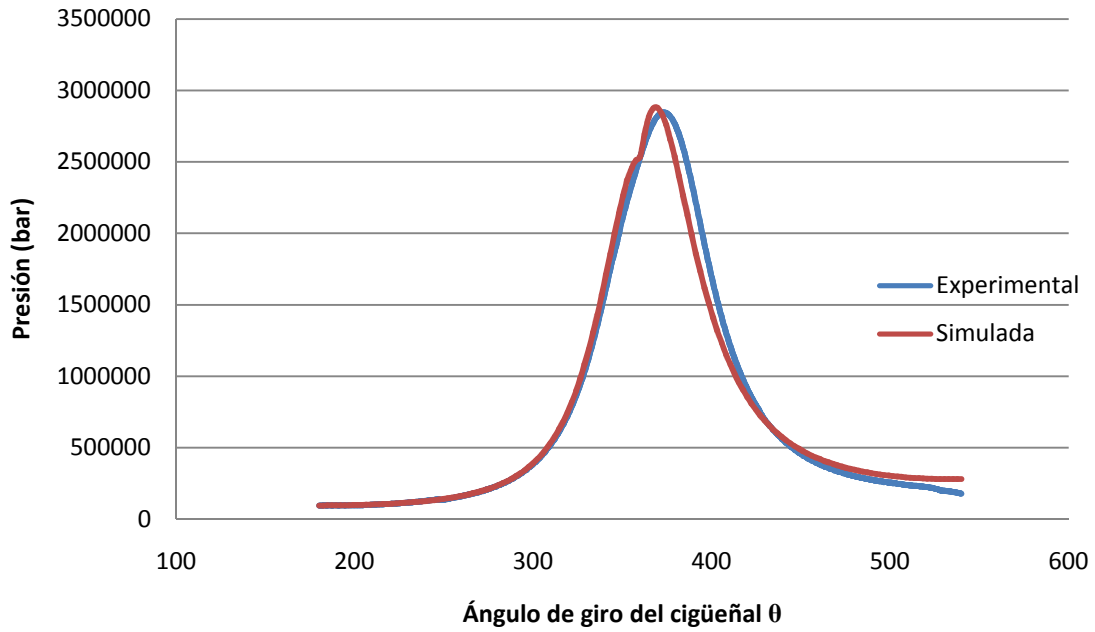


**Gráfica A.5.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 3000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa**

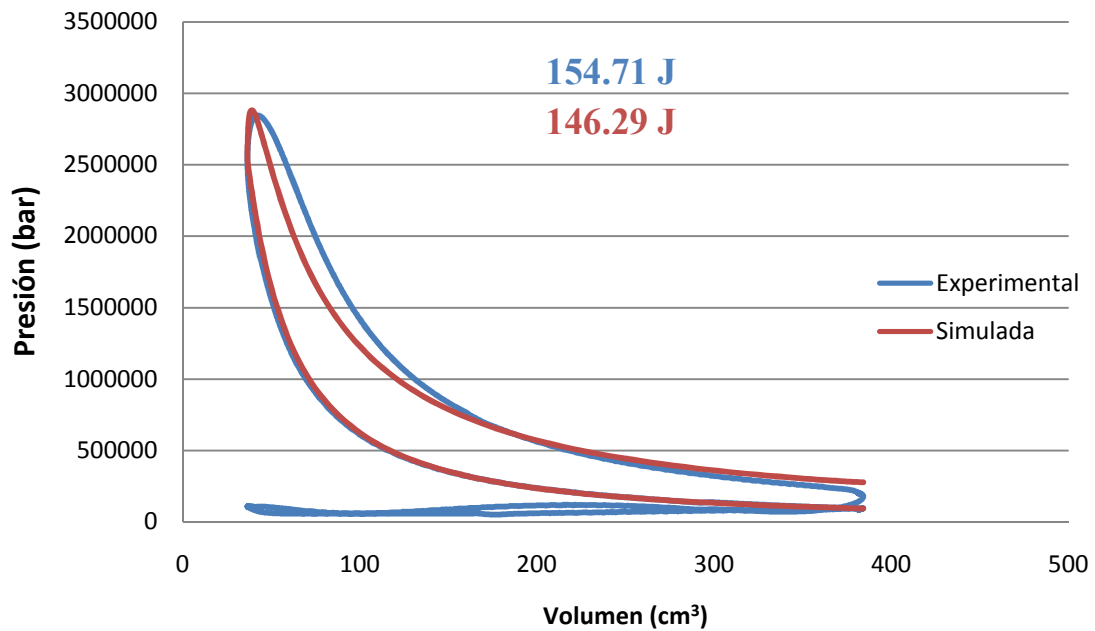


**Gráfica A.5.6. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 3000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa**

4000 rpm

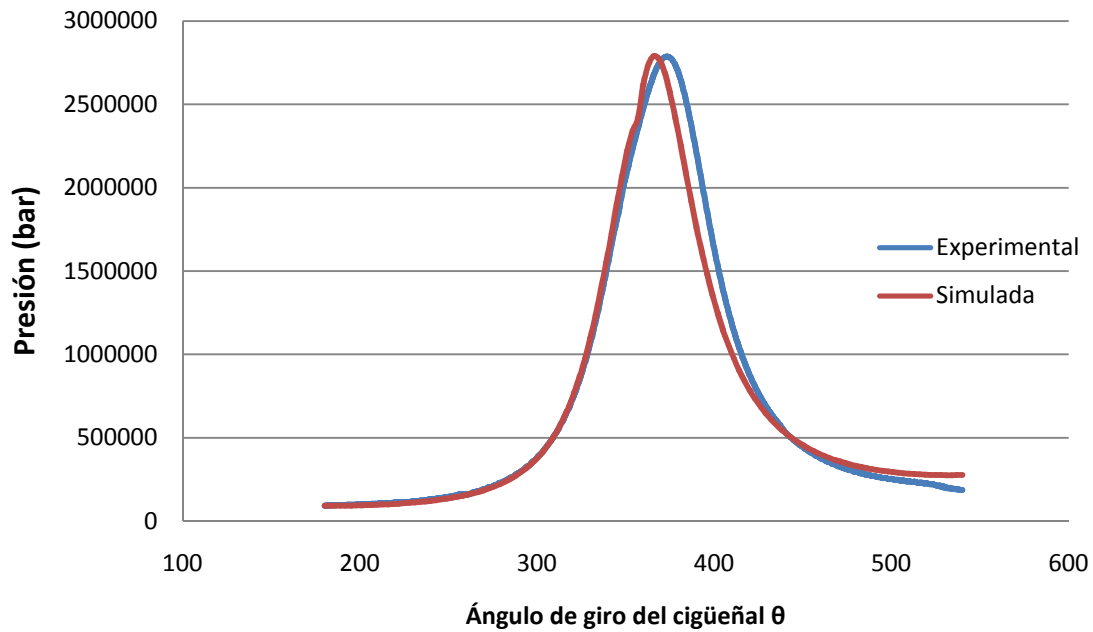


Gráfica A.5.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 4000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

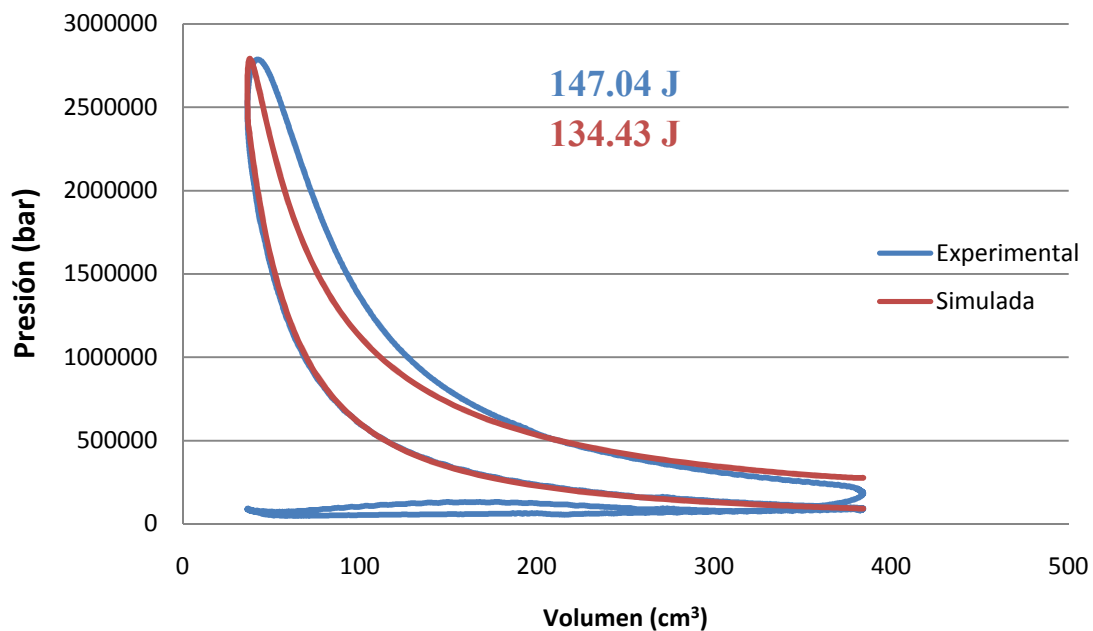


Gráfica A.5.8. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 4000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

### 5000 rpm



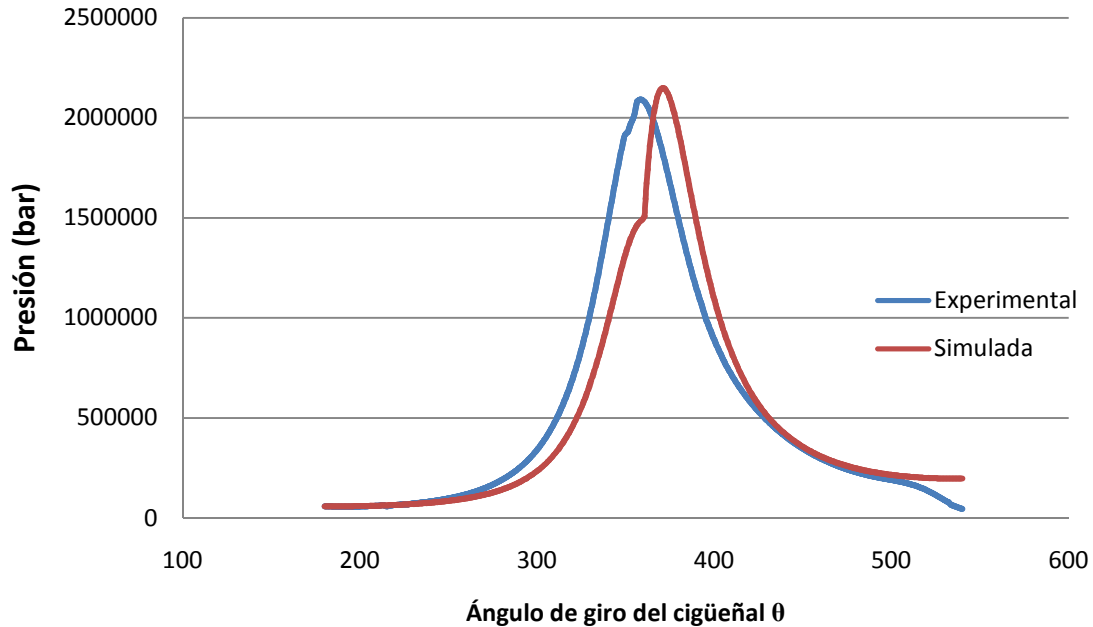
Gráfica A.5.9. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2$ , 5000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



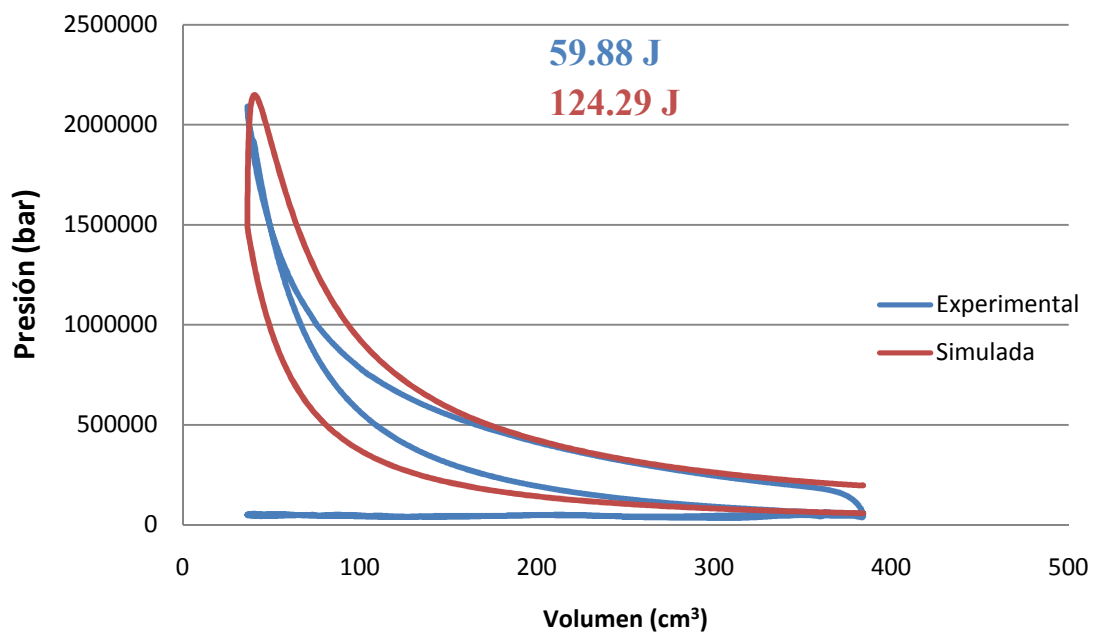
Gráfica A.5.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2$ , 5000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

## A.6. RESULTADOS PARA $\lambda=2.5$ Y CARGA PARCIAL

1000 rpm

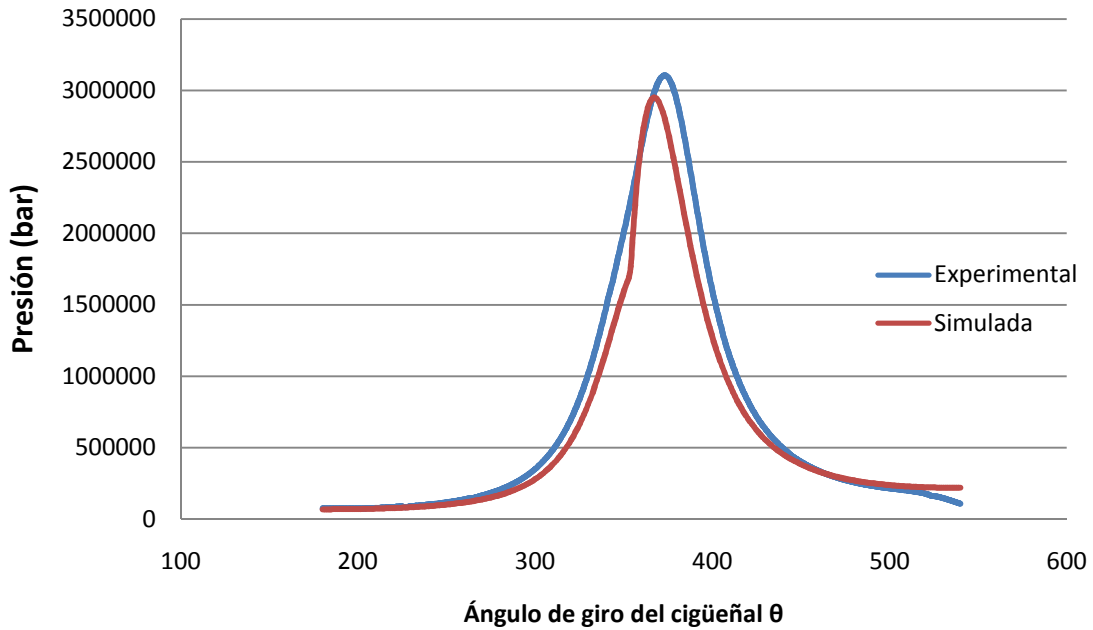


Gráfica A.6.1. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 1000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

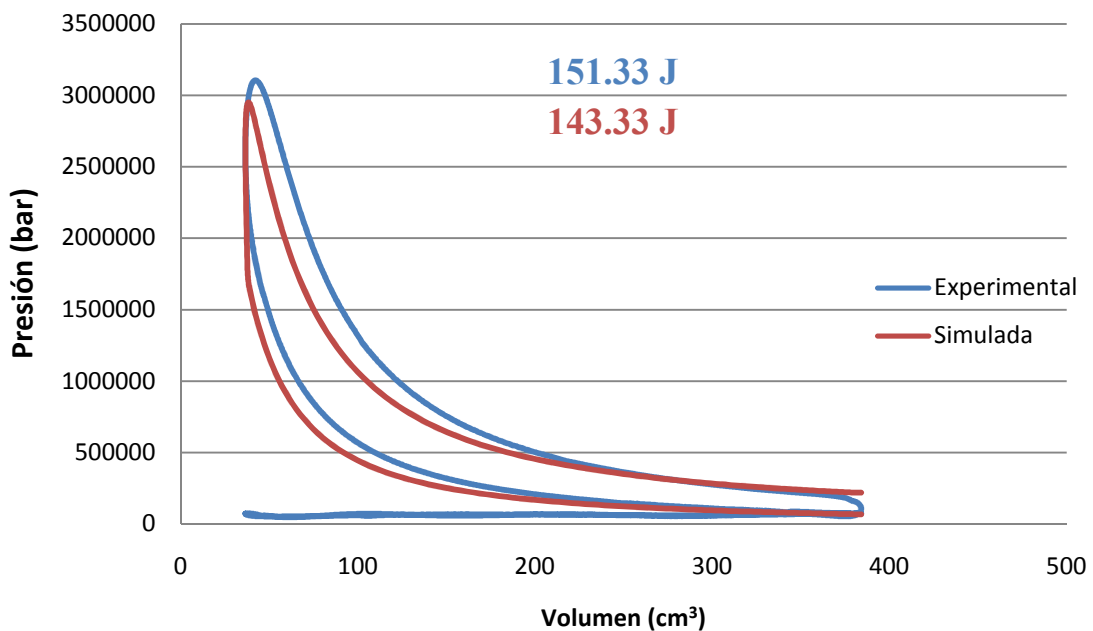


Gráfica A.6.2. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 1000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

2000 rpm

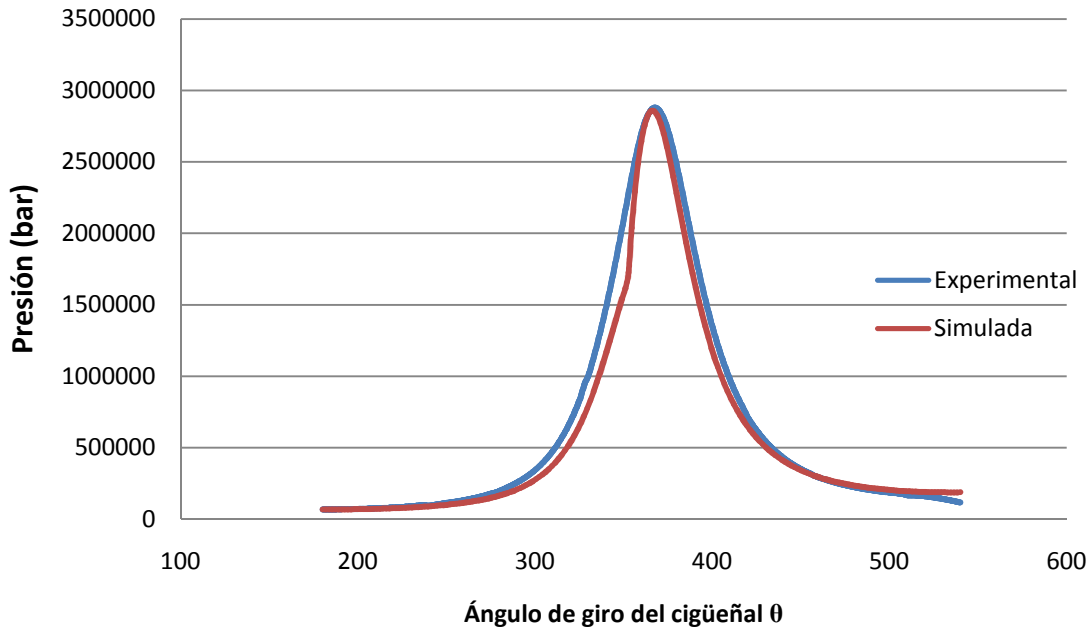


Gráfica A.6.3. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

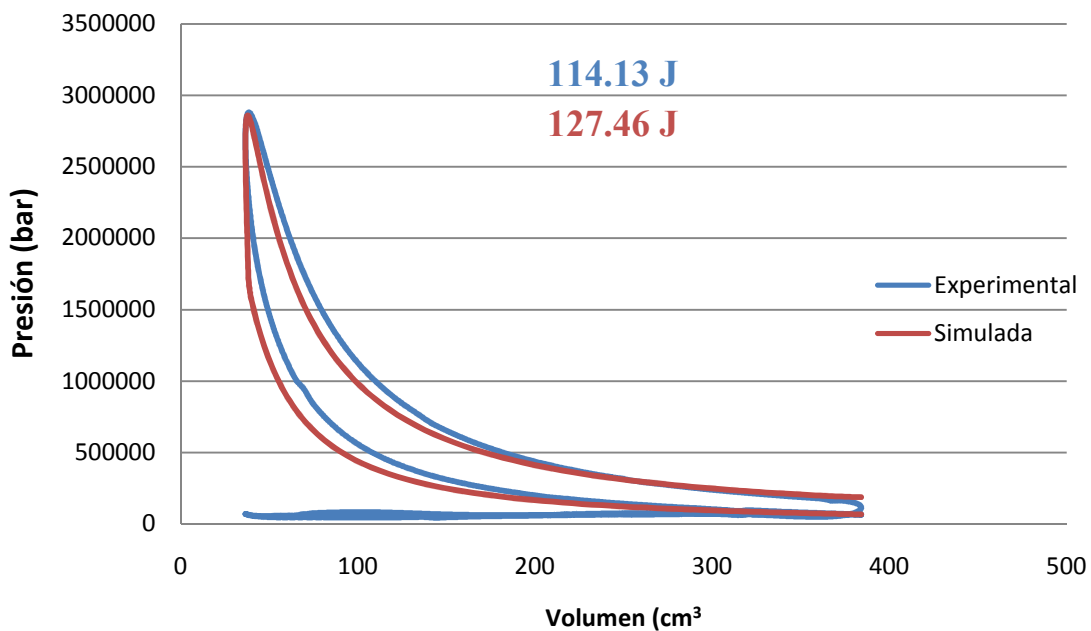


Gráfica A.6.4. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 2000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

3000 rpm

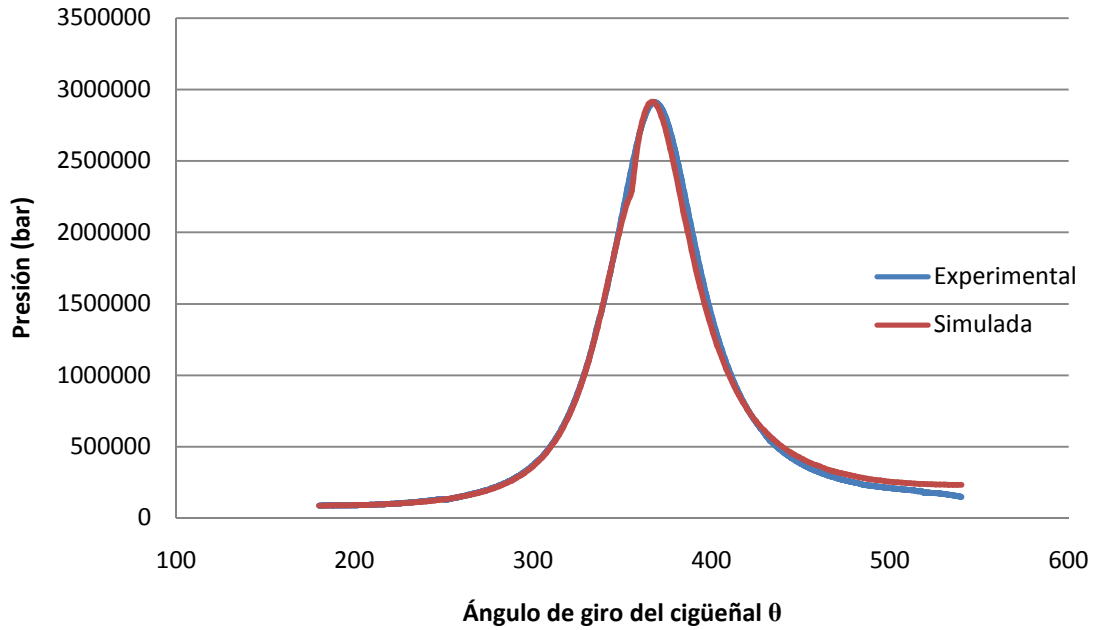


Gráfica A.6.5. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 3000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

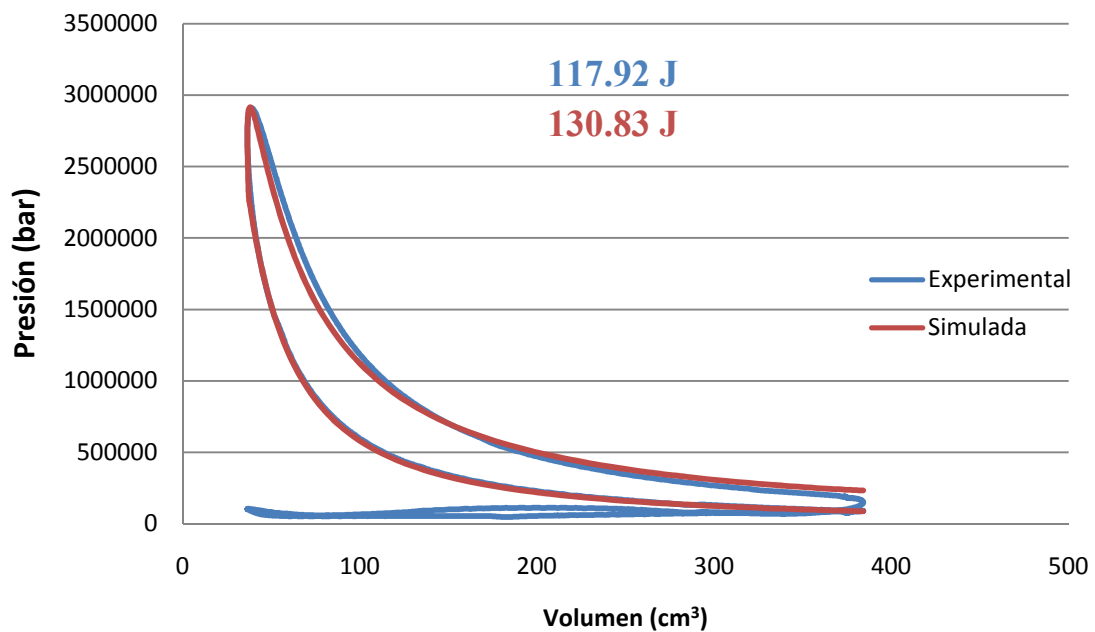


Gráfica A.6.6. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 3000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa

4000 rpm



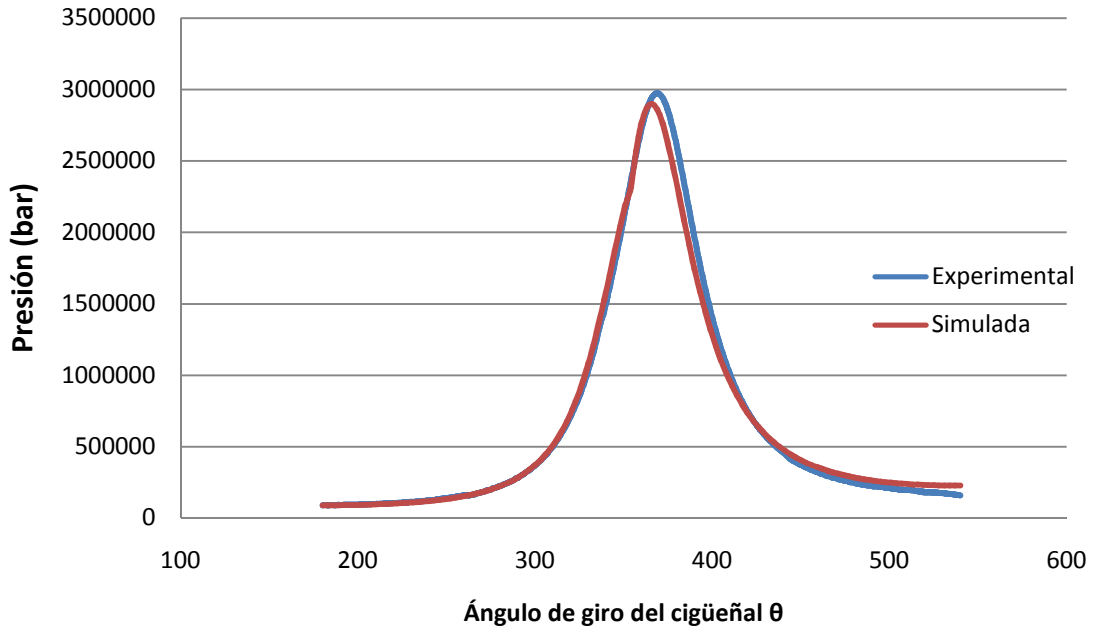
Gráfica A.6.7. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 4000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



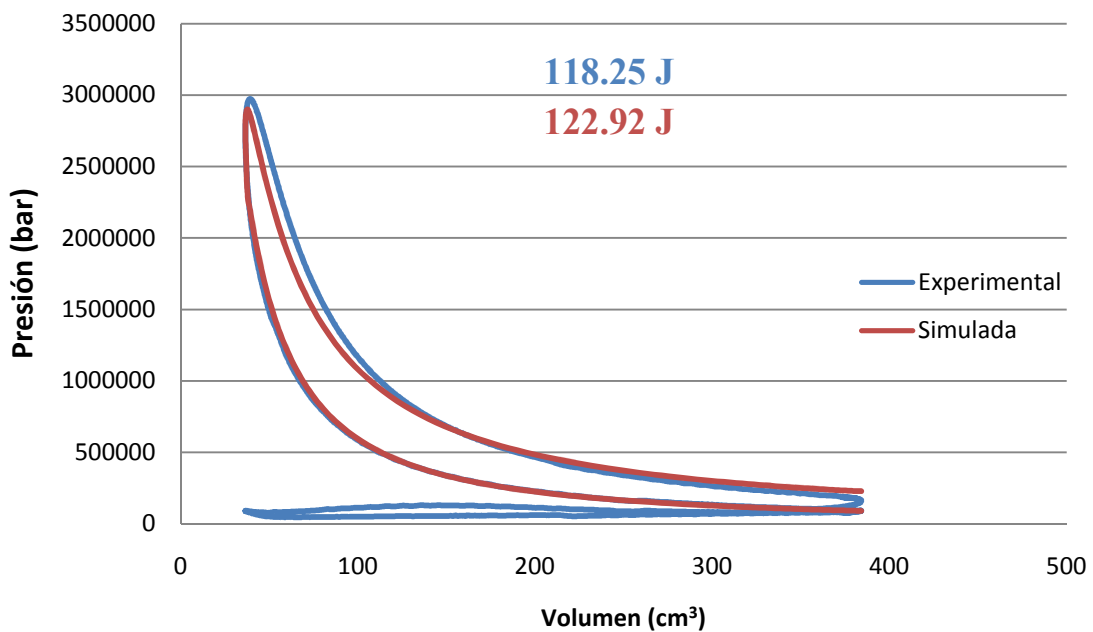
Gráfica A.6.8. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 4000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



5000 rpm



Gráfica A.6.9. Presión media en el cilindro para  $\lambda=2.5$ , 5000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



Gráfica A.6.10. Diagrama presión-volumen para  $\lambda=2.5$ , 5000 rpm y 50% de apertura de la válvula de mariposa



## ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

Titulación:

**INGENIERÍA INDUSTRIAL**

Título del proyecto:

**SIMULACIÓN Y ANÁLISIS EXPERIMENTAL SOBRE  
COMBUSTIÓN Y BALANCES TÉRMICOS EN UN H<sub>2</sub>-MEP**

**ANEXO B: CÓDIGOS COMPUTACIONALES**

Jorge Trobajo San Martín

Tutor: Pedro M<sup>a</sup> Diéguez Elizondo

Pamplona, 28 de julio de 2011

## ÍNDICE

B.1. Programa Matlab de procesamiento de datos.....	2
B.2. Código computacional del modelo de combustión.....	8
B.3. Modificaciones del modelo.....	23
Ecuación de Eichelberg.....	23
Ecuación de Woschni.....	39
B.4. Post-procesamiento de los flujos de calor.....	55

## **B.1. PROGRAMA MATLAB DE PROCESAMIENTO DE DATOS**

```
% Datos presion-grado ciguenal MOTOR;

% Lectura desde archivo excel

clear all

[filename, pathname] = uigetfile('*.xls', 'Seleccione hasta 18 archivos
excel a procesar', 'MultiSelect', 'on');

[zzz max_ficheros]=size(filename);

for contador=1:max_ficheros;

fichero=char(filename(1,contador));
quitaextension=size(fichero)-4;
hoja=fichero(1:quitaextension(1,2));

B=xlsread(fichero,hoja,'A2:CW3602'); % Lee directamente del excel,
definido para 100 ciclos

% Datos del ciclo experimental

n=B(1,1);

Par=B(1,2);

NOx=B(1,3);

Qh2=B(1,4);

MAP=B(1,5)/100;

[k,s]=size(B);

A=B(2:k,:);

% Datos del ciclo experimental
```

```

[k,s]=size(A);

AS=zeros(k,s);

WK=zeros(k+80,s-1);           % WK matriz ampliada de ciclos de presión

WK2=zeros(k+80,1);           % WK2 matriz intermedia para ciclo de
presión suavizada

WK3=zeros(k+80,s);

WK4=zeros(k,s);               % WK3 matriz de los ciclos y el ciclo medio
filtradas

P=zeros(k+80,1);              % P matriz para pendientes

M=zeros(k+80,1);              % M matriz para ciclo medio

for c=2:s;

WK(1:40,c-1)=A((k-39):k,c);    % WK matriz ampliada 40 ptos a cada lado de
todos los ciclos excepto la columna de ángulo

WK(41:k+40,c-1)=A(1:k,c);      % a partir de la matriz original A

WK(k+41:k+80,c-1)=A(1:40,c);

end

M(:,1)=mean(WK,2);            % media de todos los ciclos en M(:,2)

for f=2:k+80;                  % bucle para calcular las derivada del
ciclo medio

    P(f,1)=(M(f,1)-M(f-1,1))/0.2;

end

umbral=4*std(P(:,1));          % umbral de pendiente para eliminación
de picos

```

```

for c=1:s;                                % bucle de eliminación de picos.

for f=31:k+50;

    if (abs(P(f-4,1))>umbral | abs(P(f-3,1))>umbral | abs(P(f-
2,1))>umbral | abs(P(f-
1,1))>umbral | abs(P(f,1))>umbral | abs(P(f+1,1))>umbral | abs(P(f+2,1))>umbral |
abs(P(f+3,1))>umbral | abs(P(f+4,1))>umbral)

        if (c~=s) WK2(f,1)=(mean(WK(f-30:f-
20,c))+mean(WK(f+20:f+30,c)))/2;

        else WK2(f,1)=(mean(M(f-30:f-20,1))+mean(M(f+20:f+30,1)))/2;

        end

    else

        if (c~=s) WK2(f,1)=WK(f,c);

        else WK2(f,1)=M(f,1);

        end

    end

end

WK3(:,c)=WK2(:,1);

end

% ciclos medios suavizados ahora se guardan en WK4

for c=1:s;

for f=5:k+76;

    WK2(f,1)=mean(WK3(f-4:f+4,c));

end

WK4(:,c)=WK2(41:k+40,1);

end

%Referenciamos presiones al sensor de presión absoluta en el colector
(MAP)

```

```

minP=min(WK4(:,s));

for c=1:s;      %Suavizado de ciclos en WK3 y recorte a tamaño 3600 de WK4
    WK4(:,c)=WK4(:,c)-minP+MAP;
end

ST=zeros(2,s);
[ST(2,s),ST(1,s)]=max(WK4(:,s));

%Estadísticas max , ángulo,....

for c=1:s;
    [ST(2,c),ST(1,c)]=max(WK4(:,c));
end

%Datos del motor

Zp=zeros(k,1);

rc=10.5;

di=7.65;

S=7.56;

Ar=pi*((di/2)^2);

Vd=Ar*S;

Vc=Vd/(rc-1);

a=S/2;

l=14.4;

Zp(:,1)=a+(a^2/(4*l))-a*(cosd(A(:,1))+(a/(4*l))*cosd(2*A(:,1)));

%Volumen de los gases:

AS(:,1)=Vc.*ones(k,1)+Ar.*Zp(:,1);

%Controles:

[mmax,imax]=max(AS(:,1));

[mmin,imin]=min(AS(:,1));

```

```

% Calculo de las areas de los ciclos de potencia y de bombeo; (J/ciclo)

areas=zeros(3,s);

for c=1:s;

for t=1:3599;    %Calcula trabajo neto

    areas(1,c)=areas(1,c)+(WK4(t+1,c)+WK4(t,c))/2*(AS(t+1,1)-AS(t,1));

end

if ST(1,s)>1801 && ST(1,s)<2000    % Calcula el trabajo de bombeo si TDC
está desplazado 360°

    for t=1:899;

        areas(2,c)=areas(2,c)+(WK4(t+1,c)+WK4(t,c))/2*(AS(t+1,1)-AS(t,1));

areas(2,c)=areas(2,c)+(WK4(2700+t+1,c)+WK4(2700+t,c))/2*(AS(2700+t+1,1)-
AS(2700+t,1));

    end

else for t=901:2699;                % Calcula el trabajo de bombeo si TDC
está en 0°

    areas(2,c)=areas(2,c)+(WK4(t+1,c)+WK4(t,c))/2*(AS(t+1,1)-AS(t,1));

end

end

areas(1,c)=areas(1,c)/10;    % J/ciclo

areas(2,c)=areas(2,c)/10;    % J/ciclo de bombeo

areas(3,c)=areas(1,c)*n*4/2/60/1000;    %Potencia en kW de 4 cilindros a n
vueltas

end

desv_trabajo_neto=std(areas(1,1:s-1));

desv_trabajo_bombeo=std(areas(2,1:s-1));

desv_Potencia_indicada=std(areas(3,1:s-1));

desv_Pmax=std(ST(2,1:s-1));

desv_Ang_Pmax=std(A(ST(1,1:s-1)));

```



```
Pot=2*3.14159*n/60*Par/1000;

rend_mec=Pot/areas(3,s);

Pot_ind=areas(3,s);

% Se guardan resultados en fichero

datos=[n Par NOx Qh2 MAP Pot Pot_ind desv_Potencia_indicada rend_mec
ST(2,s) desv_Pmax A(ST(1,s)) desv_Ang_Pmax areas(1,s) desv_trabajo_netto
areas(2,s) desv_trabajo_bombeo];

ciclo_medio=[A(:,1) AS(:,1) WK4(:,s)];

fichero_resumen=strcat('resumen_',fichero)

%fichero=strcat('resumen_',num2str(n,'%4.0f'),'rpm_',num2str(MAP,'%4.2f'),
'bar.xls')

save(fichero_resumen,'-ascii','-tabs','datos','ciclo_medio')

end

beep
```

## B.2. CÓDIGO COMPUTACIONAL DEL MODELO DE COMBUSTIÓN

**NOTA:** los valores en **negrita** son los que se modifican en función de los datos aportados en la memoria del presente Proyecto Fin de Carrera para las distintas simulaciones en función del dosado relativo, la velocidad de giro del motor y la carga. El código computacional que se muestra a continuación es el correspondiente a 2000 rpm, plena carga y dosado relativo  $\lambda=2$ .

LIBRARY:

CEL:

EXPRESSIONS:

CoeffA = **26**

CoeffB = -1

Pgas = volumeAve(Absolute Pressure )@Gases

Pini = **0.8364** [bar]

Pmaxhis = maxVal(Pav.Trnmax )@Gases

TempChamber = 250[C]

TempPiston = 350[C]

TempWall = 200[C]

Tgas = volumeAve(Temperature )@Gases

Tini = (**44**+273.15) [K]

n = **2000**

omega = n\*2\*pi/60\*1[s^-1]

angulo = omega\*t+pi

ZPiston = \

-0.0402[m]+0.0378[m]\*cos(angulo)+0.0024[m]\*cos(2\*angulo)+0.0756[m]

avance = **20**

sparktime = (0.8\*10^-3)[s]

spark = (0.05[kg m^2 \

s^-2]/sparktime)\*step((t-(pi-avance/180\*pi)/omega)/1[s])\*step(((pi-av

ance/180\*pi)/omega+sparktime-t)/1[s])

tFinal = (60/n)[s]

tStepMin = 0.0001[s]

END

END

ADDITIONAL VARIABLE: Pav

Option = Definition

Tensor Type = SCALAR

Units = [Pa]

Variable Type = Specific

END

COORDINATE FRAME DEFINITIONS:

COORDINATE FRAME: Coord 1

Centroid Type = Absolute

Invert Normal Axis Direction = On

Location = PISTON

Option = Point and Normal

Origin = -3.26085e-018 [m], -1.75233e-017 [m], -0.089465 [m]

Point on Axis 3 = -1.44447e-006 [m], -1.75233e-017 [m], 0.910535 [m]

Point on Plane 13 = 0 [m], 0 [m], 0 [m]

```
Reference Coord Frame = Coord 0
END
END
MATERIAL: H2
Material Description = Hydrogen H2
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 2.016 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03298124E+02 []
NASA a2 = 0.08249442E-02 [K^-1]
NASA a3 = -0.08143015E-05 [K^-2]
NASA a4 = -0.09475434E-09 [K^-3]
NASA a5 = 0.04134872E-11 [K^-4]
NASA a6 = -0.01012521E+05 [K]
NASA a7 = -0.03294094E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.02991423E+02 []
NASA a2 = 0.07000644E-02 [K^-1]
NASA a3 = -0.05633829E-06 [K^-2]
NASA a4 = -0.09231578E-10 [K^-3]
NASA a5 = 0.01582752E-13 [K^-4]
NASA a6 = -0.08350340E+04 [K]
NASA a7 = -0.01355110E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 8.8E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 1.809E-01 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
```

```
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: H2O
Material Description = Water Vapour
Material Group = Gas Phase Combustion, Interphase Mass Transfer
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 18.02 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03386842E+02 []
NASA a2 = 0.03474982E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.06354696E-04 [K^-2]
NASA a4 = 0.06968581E-07 [K^-3]
NASA a5 = -0.02506588E-10 [K^-4]
NASA a6 = -0.03020811E+06 [K]
NASA a7 = 0.02590233E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.02672146E+02 []
NASA a2 = 0.03056293E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.08730260E-05 [K^-2]
NASA a4 = 0.01200996E-08 [K^-3]
NASA a5 = -0.06391618E-13 [K^-4]
NASA a6 = -0.02989921E+06 [K]
NASA a7 = 0.06862817E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
```

```
Dynamic Viscosity = 9.4E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 193E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: Material 1
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Reacting Mixture
Reactions List = Hydrogen Air
Thermodynamic State = Gas
MIXTURE PROPERTIES:
Option = Ideal Mixture
ABSORPTION COEFFICIENT:
Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0. [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0
END
END
END
MATERIAL: N2
Material Description = Nitrogen N2
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 28.01 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
```

```
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03298677E+02 []
  NASA a2 = 0.01408240E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.03963222E-04 [K^-2]
  NASA a4 = 0.05641515E-07 [K^-3]
  NASA a5 = -0.02444855E-10 [K^-4]
  NASA a6 = -0.01020900E+05 [K]
  NASA a7 = 0.03950372E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.02926640E+02 []
  NASA a2 = 0.01487977E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.05684761E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01009704E-08 [K^-3]
  NASA a5 = -0.06753351E-13 [K^-4]
  NASA a6 = -0.09227977E+04 [K]
  NASA a7 = 0.05980528E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 17.7E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 259E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: NO
  Material Description = Nitric Oxide NO
  Material Group = Gas Phase Combustion
  Option = Pure Substance
```

```

Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 30.01 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03376542E+02 []
NASA a2 = 0.01253063E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.03302751E-04 [K^-2]
NASA a4 = 0.05217810E-07 [K^-3]
NASA a5 = -0.02446263E-10 [K^-4]
NASA a6 = 0.09817961E+05 [K]
NASA a7 = 0.05829590E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03245435E+02 []
NASA a2 = 0.01269138E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.05015890E-05 [K^-2]
NASA a4 = 0.09169283E-09 [K^-3]
NASA a5 = -0.06275419E-13 [K^-4]
NASA a6 = 0.09800840E+05 [K]
NASA a7 = 0.06417294E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 17.8E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 238E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:

```

```

Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: O
Material Description = Atomic Oxygen O
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 16.00 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.02946429E+02 []
NASA a2 = -0.01638166E-01 [K^-1]
NASA a3 = 0.02421032E-04 [K^-2]
NASA a4 = -0.01602843E-07 [K^-3]
NASA a5 = 0.03890696E-11 [K^-4]
NASA a6 = 0.02914764E+06 [K]
NASA a7 = 0.02963995E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.02542060E+02 []
NASA a2 = -0.02755062E-03 [K^-1]
NASA a3 = -0.03102803E-07 [K^-2]
NASA a4 = 0.04551067E-10 [K^-3]
NASA a5 = -0.04368052E-14 [K^-4]
NASA a6 = 0.02923080E+06 [K]
NASA a7 = 0.04920308E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 17.7E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 470E-04 [W m^-1 K^-1]
END

```



```
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: O2
  Material Description = Oxygen O2
  Material Group = Gas Phase Combustion
  Option = Pure Substance
  Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
  Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 31.99 [kg kmol^-1]
  Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
  Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03212936E+02 []
  NASA a2 = 0.01127486E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.05756150E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01313877E-07 [K^-3]
  NASA a5 = -0.08768554E-11 [K^-4]
  NASA a6 = -0.01005249E+05 [K]
  NASA a7 = 0.06034738E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03697578E+02 []
  NASA a2 = 0.06135197E-02 [K^-1]
  NASA a3 = -0.01258842E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01775281E-09 [K^-3]
  NASA a5 = -0.01136435E-13 [K^-4]
  NASA a6 = -0.01233930E+05 [K]
  NASA a7 = 0.03189166E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
```

```
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 19.2E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 266E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
REACTION: Hydrogen Air
  Additional Materials List = H2,O2,H2O,N2
  Option = Multi Step
  Reaction Description = Hydrogen Air Single Step Eddy Dissipation
  Reactions List = Hydrogen Oxygen
END
REACTION: Hydrogen Oxygen
  Option = Single Step
COMBUSTION MODEL:
  Chemical Timescale = 0.0137 [s]
  Eddy Dissipation Model Coefficient A = CoeffA
  Eddy Dissipation Model Coefficient B = CoeffB
  Extinction Temperature = 800 [K]
  Mixing Rate Limit = 5000 [s^-1]
  Option = Eddy Dissipation
END
PRODUCTS:
  Materials List = H2O
  Option = Child Materials
  CHILD MATERIAL: H2O
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
END
REACTANTS:
  Materials List = H2,O2
  Option = Child Materials
  CHILD MATERIAL: H2
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
  CHILD MATERIAL: O2
```

```
Option = Stoichiometric
Stoichiometric Coefficient = 0.5
END
END
END
END
FLOW: Flow Analysis 1
SOLUTION UNITS:
Angle Units = [rad]
Length Units = [m]
Mass Units = [kg]
Solid Angle Units = [sr]
Temperature Units = [K]
Time Units = [s]
END
ANALYSIS TYPE:
Option = Transient
EXTERNAL SOLVER COUPLING:
Option = None
END
INITIAL TIME:
Option = Automatic with Value
Time = 0 [s]
END
TIME DURATION:
Option = Total Time
Total Time = tFinal
END
TIME STEPS:
Option = Timesteps
Timesteps = tStepMin
END
END
DOMAIN: Gases
Coord Frame = Coord 0
Domain Type = Fluid
Location = Assembly
BOUNDARY: camara
Boundary Type = WALL
Location = CAMARA
BOUNDARY CONDITIONS:
HEAT TRANSFER:
Fixed Temperature = TempChamber
Option = Fixed Temperature
END
MASS AND MOMENTUM:
Option = No Slip Wall
END
MESH MOTION:
Option = Stationary
END
THERMAL RADIATION:
Diffuse Fraction = 1.
Emissivity = 1.
Option = Opaque
```

```
END
WALL ROUGHNESS:
  Option = Smooth Wall
END
END
END
BOUNDARY: piston
Boundary Type = WALL
Coord Frame = Coord 1
Location = PISTON
BOUNDARY CONDITIONS:
HEAT TRANSFER:
  Fixed Temperature = TempPiston
  Option = Fixed Temperature
END
MASS AND MOMENTUM:
  Option = No Slip Wall
END
MESH MOTION:
  Option = Specified Displacement
DISPLACEMENT:
  Displacement X Component = 0 [m]
  Displacement Y Component = 0 [m]
  Displacement Z Component = ZPiston
  Option = Cartesian Components
END
END
THERMAL RADIATION:
  Diffuse Fraction = 1.
  Emissivity = 1.
  Option = Opaque
END
WALL ROUGHNESS:
  Option = Smooth Wall
END
END
END
BOUNDARY: wall
Boundary Type = WALL
Coord Frame = Coord 1
Location = Primitive 2D
BOUNDARY CONDITIONS:
HEAT TRANSFER:
  Fixed Temperature = TempWall
  Option = Fixed Temperature
END
MASS AND MOMENTUM:
  Option = No Slip Wall
END
MESH MOTION:
  Option = Unspecified
END
THERMAL RADIATION:
  Diffuse Fraction = 1.
  Emissivity = 1.
```

```
Option = Opaque
END
WALL ROUGHNESS:
Option = Smooth Wall
END
END
END
DOMAIN MODELS:
BUOYANCY MODEL:
Option = Non Buoyant
END
DOMAIN MOTION:
Option = Stationary
END
MESH DEFORMATION:
Option = Regions of Motion Specified
MESH MOTION MODEL:
Option = Displacement Diffusion
MESH STIFFNESS:
Mesh Stiffness = 1 [m^2 s^-1]
Option = Value
END
END
END
REFERENCE PRESSURE:
Reference Pressure = 0 [atm]
END
END
FLUID DEFINITION: Material 1
Option = Material Library
Material = Material 1
MORPHOLOGY:
Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID MODELS:
ADDITIONAL VARIABLE: Pav
Additional Variable Value = Pgas
Option = Algebraic Equation
END
COMBUSTION MODEL:
Chemical Timescale = 0.0137 [s]
Eddy Dissipation Model Coefficient A = 26
Eddy Dissipation Model Coefficient B = -1.0
Extinction Temperature = 800 [K]
Mixing Rate Limit = 5000 [s^-1]
Option = Eddy Dissipation
END
COMPONENT: H2
Option = Automatic
END
COMPONENT: H2O
Option = Automatic
END
COMPONENT: N2
```

```

Option = Constraint
END
COMPONENT: NO
  Option = Automatic
END
COMPONENT: O
  Option = Automatic
END
COMPONENT: O2
  Option = Automatic
END
HEAT TRANSFER MODEL:
  Option = Total Energy
END
THERMAL RADIATION MODEL:
  Option = Discrete Transfer
  Radiation Transfer Mode = Participating Media
SCATTERING MODEL:
  Option = None
END
SPECTRAL MODEL:
  Option = Gray
END
END
TURBULENCE MODEL:
  Option = k epsilon
END
TURBULENT WALL FUNCTIONS:
  Option = Scalable
END
END
SOURCE POINT: Source Point 1
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]
  Option = Cartesian Coordinates
SOURCES:
  EQUATION SOURCE: energy
  Option = Total Source
  Total Source = spark
  END
  END
  END
  END
INITIALISATION:
  Option = Automatic
INITIAL CONDITIONS:
  Velocity Type = Cartesian
  CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:
  Option = Automatic with Value
  U = 0.5 [m s^-1]
  V = 2 [m s^-1]
  W = 1 [m s^-1]
  END
  COMPONENT: H2
  Mass Fraction = 0.0145
  Option = Automatic with Value
  
```

```
END
COMPONENT: H2O
  Mass Fraction = 0.0
  Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: O2
  Mass Fraction = 0.2297
  Option = Automatic with Value
END
RADIATION INTENSITY:
  Option = Automatic with Value
END
STATIC PRESSURE:
  Option = Automatic with Value
  Relative Pressure = Pini
END
TEMPERATURE:
  Option = Automatic with Value
  Temperature = Tini
END
TURBULENCE INITIAL CONDITIONS:
  Option = k and Epsilon
EPSILON:
  Option = Automatic
END
K:
  Option = Automatic
END
END
END
OUTPUT CONTROL:
MONITOR OBJECTS:
MONITOR BALANCES:
  Option = Full
END
MONITOR FORCES:
  Option = Full
END
MONITOR PARTICLES:
  Option = Full
END
MONITOR POINT: Chispa
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]
  Option = Cartesian Coordinates
  Output Variables List = Temperature
END
MONITOR POINT: Presion
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]
  Option = Cartesian Coordinates
  Output Variables List = Pressure
END
MONITOR RESIDUALS:
  Option = Full
END
```

```
MONITOR TOTALS:
  Option = Full
END
RESULTS:
  File Compression Level = Default
  Option = Standard
END
TRANSIENT RESULTS: Transient Results 1
  File Compression Level = Default
  Include Mesh = On
  Option = Selected Variables
  Output Boundary Flows = None
  Output Variables List = Absolute Pressure,H2.Mass Fraction,H2.Molar \
  Fraction,H2O.Mass Fraction,H2O.Molar Fraction,N2.Mass \
  Fraction,N2.Molar Fraction,NO.Mass Fraction,NO.Molar \
  Fraction,O2.Mass Fraction,O2.Molar \
  Fraction,Pressure,Temperature,Total Pressure,Total \
  Temperature,Velocity,Wall Heat Flux,Wall Heat Transfer Coefficient
OUTPUT FREQUENCY:
  Option = Time Interval
  Time Interval = tStepMin
END
TRANSIENT STATISTICS: Pmax
  Option = Maximum
  Output Variables List = Pav
END
SOLVER CONTROL:
ADVECTION SCHEME:
  Option = High Resolution
END
CONVERGENCE CONTROL:
  Maximum Number of Coefficient Loops = 25
  Timescale Control = Coefficient Loops
END
CONVERGENCE CRITERIA:
  Residual Target = 0.0001
  Residual Type = RMS
END
TRANSIENT SCHEME:
  Option = First Order Backward Euler
END
EXPERT PARAMETERS:
  max continuity loops = 2
  solve volfr = t
  tbulk for htc = 300.0
  transient initialisation override = t
END
COMMAND FILE:
  Version = 11
END
```



## B.3. MODIFICACIONES DEL MODELO

A continuación se adjuntan los códigos computacionales para las distintas modelizaciones de la transferencia de calor.

- ECUACIÓN DE EICHELBERG

LIBRARY:

CEL:

EXPRESSIONS:

CoeffA = 26

CoeffB = -1

PUnidad = 1 [Pa]

Pgas = volumeAve(Absolute Pressure )@Gases

Pgases = (volumeAve(Pressure )@Gases)\*10<sup>(-5)</sup>\*(PUnidad<sup>(-1)</sup>)

Pini = 0.8364 [bar]

Pmaxhis = maxVal(Pav.Trnmax )@Gases

TUnidad = 1 [K]

TempChamber = 385[C]

TempPiston = 280[C]

TempWall = 200[C]

Tgas = volumeAve(Temperature )@Gases

Tgases = (volumeAve(T )@Gases) \*(TUnidad<sup>(-1)</sup>)

Tini = (44+273.15) [K]

ZPiston = \

-0.0402[m]+0.0378[m]\*cos(angulo)+0.0024[m]\*cos(2\*angulo)+0.0756[m]

angulo = omega\*t+pi

avance = 20

hc = kh \*( Tgases\* Pgases)<sup>(1/2)</sup>

kh = (2.43\*(2\*0.076\*(n/60))<sup>(1/3)</sup>) [W m<sup>(-2)</sup> K<sup>(-1)</sup>]

n = 2000

omega = n\*2\*pi/60\*1[s<sup>(-1)</sup>]

spark = (0.05[kg m<sup>(-2)</sup> \

s<sup>(-2)</sup>/sparktime)\*step(((t-(pi-avance/180\*pi)/omega)/1[s])\*step(((pi-av

ance/180\*pi)/omega+sparktime-t)/1[s])

sparktime = (0.8\*10<sup>(-3)</sup>)[s]

tFinal = (60/n)[s]

tStepMin = 0.0001[s]

END

END

ADDITIONAL VARIABLE: Pav

Option = Definition

Tensor Type = SCALAR

Units = [Pa]

Variable Type = Specific

END

COORDINATE FRAME DEFINITIONS:

COORDINATE FRAME: Coord 1

Centroid Type = Absolute

Invert Normal Axis Direction = On

Location = PISTON

Option = Point and Normal

Origin = -2.89197e-018 [m], -1.75233e-017 [m], -0.089465 [m]

Point on Axis 3 = -2.89197e-018 [m], -1.75233e-017 [m], 0.910535 [m]

```

Point on Plane 13 = 0 [m], 0 [m], 0 [m]
Reference Coord Frame = Coord 0
END
END
MATERIAL: H2
Material Description = Hydrogen H2
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 2.016 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03298124E+02 []
NASA a2 = 0.08249442E-02 [K^-1]
NASA a3 = -0.08143015E-05 [K^-2]
NASA a4 = -0.09475434E-09 [K^-3]
NASA a5 = 0.04134872E-11 [K^-4]
NASA a6 = -0.01012521E+05 [K]
NASA a7 = -0.03294094E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.02991423E+02 []
NASA a2 = 0.07000644E-02 [K^-1]
NASA a3 = -0.05633829E-06 [K^-2]
NASA a4 = -0.09231578E-10 [K^-3]
NASA a5 = 0.01582752E-13 [K^-4]
NASA a6 = -0.08350340E+04 [K]
NASA a7 = -0.01355110E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 8.8E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 1.809E-01 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:

```

```

Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: H2O
Material Description = Water Vapour
Material Group = Gas Phase Combustion, Interphase Mass Transfer
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 18.02 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03386842E+02 []
NASA a2 = 0.03474982E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.06354696E-04 [K^-2]
NASA a4 = 0.06968581E-07 [K^-3]
NASA a5 = -0.02506588E-10 [K^-4]
NASA a6 = -0.03020811E+06 [K]
NASA a7 = 0.02590233E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.02672146E+02 []
NASA a2 = 0.03056293E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.08730260E-05 [K^-2]
NASA a4 = 0.01200996E-08 [K^-3]
NASA a5 = -0.06391618E-13 [K^-4]
NASA a6 = -0.02989921E+06 [K]
NASA a7 = 0.06862817E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
  
```

```
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 9.4E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 193E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: Material 1
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Reacting Mixture
Reactions List = Hydrogen Air,Thermal NO O Radical PDF
Thermodynamic State = Gas
MIXTURE PROPERTIES:
Option = Ideal Mixture
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0. [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0
END
END
END
MATERIAL: N2
Material Description = Nitrogen N2
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 28.01 [kg kmol^-1]
  Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
```

```
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03298677E+02 []
  NASA a2 = 0.01408240E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.03963222E-04 [K^-2]
  NASA a4 = 0.05641515E-07 [K^-3]
  NASA a5 = -0.02444855E-10 [K^-4]
  NASA a6 = -0.01020900E+05 [K]
  NASA a7 = 0.03950372E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.02926640E+02 []
  NASA a2 = 0.01487977E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.05684761E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01009704E-08 [K^-3]
  NASA a5 = -0.06753351E-13 [K^-4]
  NASA a6 = -0.09227977E+04 [K]
  NASA a7 = 0.05980528E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 17.7E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 259E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: NO
  Material Description = Nitric Oxide NO
  Material Group = Gas Phase Combustion
```

Option = Pure Substance  
 Thermodynamic State = Gas  
 PROPERTIES:  
 Option = General Material  
 EQUATION OF STATE:  
 Molar Mass = 30.01 [kg kmol<sup>-1</sup>]  
 Option = Ideal Gas  
 END  
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:  
 Option = NASA Format  
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:  
 NASA a1 = 0.03376542E+02 []  
 NASA a2 = 0.01253063E-01 [K<sup>-1</sup>]  
 NASA a3 = -0.03302751E-04 [K<sup>-2</sup>]  
 NASA a4 = 0.05217810E-07 [K<sup>-3</sup>]  
 NASA a5 = -0.02446263E-10 [K<sup>-4</sup>]  
 NASA a6 = 0.09817961E+05 [K]  
 NASA a7 = 0.05829590E+02 []  
 END  
 TEMPERATURE LIMITS:  
 Lower Temperature = 300 [K]  
 Midpoint Temperature = 1000 [K]  
 Upper Temperature = 5000 [K]  
 END  
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:  
 NASA a1 = 0.03245435E+02 []  
 NASA a2 = 0.01269138E-01 [K<sup>-1</sup>]  
 NASA a3 = -0.05015890E-05 [K<sup>-2</sup>]  
 NASA a4 = 0.09169283E-09 [K<sup>-3</sup>]  
 NASA a5 = -0.06275419E-13 [K<sup>-4</sup>]  
 NASA a6 = 0.09800840E+05 [K]  
 NASA a7 = 0.06417294E+02 []  
 END  
 END  
 REFERENCE STATE:  
 Option = NASA Format  
 Reference Pressure = 1 [atm]  
 Reference Temperature = 25 [C]  
 END  
 DYNAMIC VISCOSITY:  
 Dynamic Viscosity = 17.8E-06 [kg m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>]  
 Option = Value  
 END  
 THERMAL CONDUCTIVITY:  
 Option = Value  
 Thermal Conductivity = 238E-04 [W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]  
 END  
 ABSORPTION COEFFICIENT:  
 Absorption Coefficient = 1.0 [m<sup>-1</sup>]  
 Option = Value  
 END  
 SCATTERING COEFFICIENT:  
 Option = Value  
 Scattering Coefficient = 0.0 [m<sup>-1</sup>]  
 END

```

REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: O
Material Description = Atomic Oxygen O
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
  Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 16.00 [kg kmol^-1]
  Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
  Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.02946429E+02 []
  NASA a2 = -0.01638166E-01 [K^-1]
  NASA a3 = 0.02421032E-04 [K^-2]
  NASA a4 = -0.01602843E-07 [K^-3]
  NASA a5 = 0.03890696E-11 [K^-4]
  NASA a6 = 0.02914764E+06 [K]
  NASA a7 = 0.02963995E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.02542060E+02 []
  NASA a2 = -0.02755062E-03 [K^-1]
  NASA a3 = -0.03102803E-07 [K^-2]
  NASA a4 = 0.04551067E-10 [K^-3]
  NASA a5 = -0.04368052E-14 [K^-4]
  NASA a6 = 0.02923080E+06 [K]
  NASA a7 = 0.04920308E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 17.7E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 470E-04 [W m^-1 K^-1]
  
```

```
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: O2
Material Description = Oxygen O2
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
  Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 31.99 [kg kmol^-1]
  Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
  Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03212936E+02 []
  NASA a2 = 0.01127486E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.05756150E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01313877E-07 [K^-3]
  NASA a5 = -0.08768554E-11 [K^-4]
  NASA a6 = -0.01005249E+05 [K]
  NASA a7 = 0.06034738E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03697578E+02 []
  NASA a2 = 0.06135197E-02 [K^-1]
  NASA a3 = -0.01258842E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01775281E-09 [K^-3]
  NASA a5 = -0.01136435E-13 [K^-4]
  NASA a6 = -0.01233930E+05 [K]
  NASA a7 = 0.03189166E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
```



```

Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 19.2E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 266E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
REACTION: Hydrogen Air
Additional Materials List = H2,O2,H2O,N2
Option = Multi Step
Reaction Description = Hydrogen Air Single Step Eddy Dissipation
Reactions List = Hydrogen Oxygen
END
REACTION: Hydrogen Oxygen
Option = Single Step
COMBUSTION MODEL:
  Eddy Dissipation Model Coefficient A = CoeffA
  Eddy Dissipation Model Coefficient B = CoeffB
  Option = Eddy Dissipation
END
PRODUCTS:
  Materials List = H2O
  Option = Child Materials
  CHILD MATERIAL: H2O
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
  END
END
REACTANTS:
  Materials List = H2,O2
  Option = Child Materials
  CHILD MATERIAL: H2
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
  END
  CHILD MATERIAL: O2
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 0.5
  
```

```
END
END
END
REACTION: Thermal NO O Radical PDF
Option = Single Step
Reaction Description = Thermal NO Formation based on O Radicals with \
Temperature PDF
COMBUSTION MODEL:
Option = Finite Rate Chemistry
END
FORWARD REACTION RATE:
Lower Temperature = 300 [K]
Option = Arrhenius with Temperature PDF
Pre Exponential Factor = 1.8E+11 [kmol-1 m3 s-1]
Temperature Exponent = 0
Upper Temperature = 2300 [K]
REACTION ACTIVATION:
Activation Temperature = 38370 [K]
Option = Activation Temperature
END
END
PRODUCTS:
Materials List = NO
Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: NO
Option = Stoichiometric
Stoichiometric Coefficient = 2.0
END
END
REACTANTS:
Materials List = N2,O
Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: N2
Option = Stoichiometric
Reaction Order = 1.0
Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
CHILD MATERIAL: O
Option = Stoichiometric
Reaction Order = 1.0
Stoichiometric Coefficient = 2.0
END
END
END
END
FLOW: Flow Analysis 1
SOLUTION UNITS:
Angle Units = [rad]
Length Units = [m]
Mass Units = [kg]
Solid Angle Units = [sr]
Temperature Units = [K]
Time Units = [s]
END
ANALYSIS TYPE:
```

```
Option = Transient
EXTERNAL SOLVER COUPLING:
  Option = None
END
INITIAL TIME:
  Option = Automatic with Value
  Time = 0 [s]
END
TIME DURATION:
  Option = Total Time
  Total Time = tFinal
END
TIME STEPS:
  Option = Timesteps
  Timesteps = tStepMin
END
END
DOMAIN: Gases
Coord Frame = Coord 0
Domain Type = Fluid
Location = Assembly
BOUNDARY: camara
Boundary Type = WALL
Location = CAMARA
BOUNDARY CONDITIONS:
HEAT TRANSFER:
  Heat Transfer Coefficient = hc
  Option = Heat Transfer Coefficient
  Outside Temperature = TempChamber
END
MASS AND MOMENTUM:
  Option = No Slip Wall
END
MESH MOTION:
  Option = Stationary
END
THERMAL RADIATION:
  Diffuse Fraction = 1.
  Emissivity = 1.
  Option = Opaque
END
WALL ROUGHNESS:
  Option = Smooth Wall
END
END
END
BOUNDARY: piston
Boundary Type = WALL
Coord Frame = Coord 1
Location = PISTON
BOUNDARY CONDITIONS:
HEAT TRANSFER:
  Fixed Temperature = TempPiston
  Option = Fixed Temperature
END
```

```
MASS AND MOMENTUM:
  Option = No Slip Wall
END
MESH MOTION:
  Option = Specified Displacement
DISPLACEMENT:
  Displacement X Component = 0 [m]
  Displacement Y Component = 0 [m]
  Displacement Z Component = ZPiston
  Option = Cartesian Components
END
END
THERMAL RADIATION:
  Diffuse Fraction = 1.
  Emissivity = 1.
  Option = Opaque
END
WALL ROUGHNESS:
  Option = Smooth Wall
END
END
END
BOUNDARY: wall
  Boundary Type = WALL
  Coord Frame = Coord 1
  Location = Primitive 2D
BOUNDARY CONDITIONS:
  HEAT TRANSFER:
    Heat Transfer Coefficient = hc
    Option = Heat Transfer Coefficient
    Outside Temperature = TempWall
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = No Slip Wall
  END
  MESH MOTION:
    Option = Unspecified
  END
  THERMAL RADIATION:
    Diffuse Fraction = 1.
    Emissivity = 1.
    Option = Opaque
  END
  WALL ROUGHNESS:
    Option = Smooth Wall
  END
END
END
DOMAIN MODELS:
  BUOYANCY MODEL:
    Option = Non Buoyant
  END
  DOMAIN MOTION:
    Option = Stationary
  END
END
```

```
MESH DEFORMATION:  
  Option = Regions of Motion Specified  
MESH MOTION MODEL:  
  Option = Displacement Diffusion  
MESH STIFFNESS:  
  Mesh Stiffness = 1 [m^2 s^-1]  
  Option = Value  
END  
END  
END  
REFERENCE PRESSURE:  
  Reference Pressure = 0 [atm]  
END  
END  
FLUID DEFINITION: Material 1  
  Material = Material 1  
  Option = Material Library  
MORPHOLOGY:  
  Option = Continuous Fluid  
END  
END  
FLUID MODELS:  
  ADDITIONAL VARIABLE: Pav  
  Additional Variable Value = Pgas  
  Option = Algebraic Equation  
END  
COMBUSTION MODEL:  
  Chemical Timescale = 0.0137 [s]  
  Eddy Dissipation Model Coefficient A = 40  
  Eddy Dissipation Model Coefficient B = -1.0  
  Extinction Temperature = 800 [K]  
  Mixing Rate Limit = 2500 [s^-1]  
  Option = Eddy Dissipation  
END  
COMPONENT: H2  
  Option = Automatic  
END  
COMPONENT: H2O  
  Option = Automatic  
END  
COMPONENT: N2  
  Option = Constraint  
END  
COMPONENT: NO  
  Option = Automatic  
END  
COMPONENT: O  
  Option = Automatic  
END  
COMPONENT: O2  
  Option = Automatic  
END  
HEAT TRANSFER MODEL:  
  Option = Total Energy  
END
```

```
THERMAL RADIATION MODEL:
  Option = Discrete Transfer
  Radiation Transfer Mode = Participating Media
SCATTERING MODEL:
  Option = None
END
SPECTRAL MODEL:
  Option = Gray
END
TURBULENCE MODEL:
  Option = k epsilon
END
TURBULENT WALL FUNCTIONS:
  Option = Scalable
END
END
SOURCE POINT: Source Point 1
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]
  Option = Cartesian Coordinates
SOURCES:
  EQUATION SOURCE: energy
  Option = Total Source
  Total Source = spark
  END
  END
  END
  END
INITIALISATION:
  Option = Automatic
INITIAL CONDITIONS:
  Velocity Type = Cartesian
CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:
  Option = Automatic with Value
  U = 0.5 [m s^-1]
  V = 2 [m s^-1]
  W = 1 [m s^-1]
END
COMPONENT: H2
  Mass Fraction = 0.0145
  Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: H2O
  Mass Fraction = 0.001
  Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: NO
  Mass Fraction = 0.0
  Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: O
  Mass Fraction = 0.001
  Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: O2
```

```
Mass Fraction = 0.2297
Option = Automatic with Value
END
RADIATION INTENSITY:
Option = Automatic
END
STATIC PRESSURE:
Option = Automatic with Value
Relative Pressure = Pini
END
TEMPERATURE:
Option = Automatic with Value
Temperature = Tini
END
TURBULENCE INITIAL CONDITIONS:
Option = k and Epsilon
EPSILON:
Option = Automatic
END
K:
Option = Automatic
END
END
END
END
OUTPUT CONTROL:
MONITOR OBJECTS:
MONITOR BALANCES:
Option = Full
END
MONITOR FORCES:
Option = Full
END
MONITOR PARTICLES:
Option = Full
END
MONITOR POINT: Chispa
Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]
Option = Cartesian Coordinates
Output Variables List = Temperature
END
MONITOR POINT: Presion
Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]
Option = Cartesian Coordinates
Output Variables List = Pressure
END
MONITOR RESIDUALS:
Option = Full
END
MONITOR TOTALS:
Option = Full
END
END
RESULTS:
File Compression Level = Default
```

```
Option = Standard
END
TRANSIENT RESULTS: Transient Results 1
File Compression Level = Default
Include Mesh = On
Option = Selected Variables
Output Boundary Flows = None
Output Variables List = Absolute Pressure,H2.Mass Fraction,H2.Molar \
Fraction,H2O.Mass Fraction,H2O.Molar Fraction,N2.Mass \
Fraction,N2.Molar Fraction,NO.Mass Fraction,NO.Molar \
Fraction,O2.Mass Fraction,O2.Molar \
Fraction,Pressure,Temperature,Total Pressure,Total \
Temperature,Velocity,Wall Heat Flux,Wall Heat Transfer Coefficient
OUTPUT FREQUENCY:
Option = Time Interval
Time Interval = tStepMin
END
END
TRANSIENT STATISTICS: Pmax
Option = Maximum
Output Variables List = Pav
END
END
SOLVER CONTROL:
Turbulence Numerics = First Order
ADVECTION SCHEME:
Option = High Resolution
END
CONVERGENCE CONTROL:
Maximum Number of Coefficient Loops = 25
Minimum Number of Coefficient Loops = 1
Timescale Control = Coefficient Loops
END
CONVERGENCE CRITERIA:
Residual Target = 0.0001
Residual Type = RMS
END
TRANSIENT SCHEME:
Option = First Order Backward Euler
END
END
EXPERT PARAMETERS:
max continuity loops = 2
solve volfr = t
tbulk for htc = 300.0
transient initialisation override = t
END
END
COMMAND FILE:
Version = 11
END
```



• ECUACIÓN DE WOSCHNI

LIBRARY:

CEL:

EXPRESSIONS:

CoeffA = 26

CoeffB = -1

PUnidad = 1 [Pa]

Pgas = volumeAve(Absolute Pressure )@Gases

Pgases = (volumeAve(Pressure )@Gases)\*10<sup>-5</sup>\*(PUnidad<sup>-1</sup>)

Pini = 0.8364 [bar]

Pmaxhis = maxVal(Pav.Trnmax )@Gases

TUnidad = 1 [K]

TempChamber = 385[C]

TempPiston = 280[C]

TempWall = 200[C]

Tgas = volumeAve(Temperature )@Gases

Tgases = (volumeAve(T )@Gases) \*(TUnidad<sup>-1</sup>)

Tini = (44+273.15) [K]

ZPiston = \

-0.0402[m]+0.0378[m]\*cos(angulo)+0.0024[m]\*cos(2\*angulo)+0.0756[m]

angulo = omega\*t+pi

avance = 20

hc = kh \* Tgases<sup>(-0.55)</sup> \* Pgases<sup>(0.8)</sup>

kh = (129.8\*(0.077)<sup>(-0.2)</sup>\*(2.28\*2\*0.076\*(n/60)<sup>(0.8)</sup>) [W m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>]

n = 2000

omega = n\*2\*pi/60\*1[s<sup>-1</sup>]

spark = (0.05[kg m<sup>2</sup> \

s<sup>-2</sup>]/sparktime)\*step((t-(pi-avance/180\*pi)/omega)/1[s])\*step(((pi-avance/180\*pi)/omega+sparktime-t)/1[s])

sparktime = (0.8\*10<sup>-3</sup>)[s]

tFinal = (60/n)[s]

tStepMin = 0.0001[s]

END

END

ADDITIONAL VARIABLE: Pav

Option = Definition

Tensor Type = SCALAR

Units = [Pa]

Variable Type = Specific

END

COORDINATE FRAME DEFINITIONS:

COORDINATE FRAME: Coord 1

Centroid Type = Absolute

Invert Normal Axis Direction = On

Location = PISTON

Option = Point and Normal

Origin = -2.89197e-018 [m], -1.75233e-017 [m], -0.089465 [m]

Point on Axis 3 = -2.89197e-018 [m], -1.75233e-017 [m], 0.910535 [m]

Point on Plane 13 = 0 [m], 0 [m], 0 [m]

Reference Coord Frame = Coord 0

END

END

MATERIAL: H2

Material Description = Hydrogen H2

Material Group = Gas Phase Combustion  
 Option = Pure Substance  
 Thermodynamic State = Gas  
 PROPERTIES:  
 Option = General Material  
 EQUATION OF STATE:  
 Molar Mass = 2.016 [kg kmol<sup>-1</sup>]  
 Option = Ideal Gas  
 END  
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:  
 Option = NASA Format  
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:  
 NASA a1 = 0.03298124E+02 []  
 NASA a2 = 0.08249442E-02 [K<sup>-1</sup>]  
 NASA a3 = -0.08143015E-05 [K<sup>-2</sup>]  
 NASA a4 = -0.09475434E-09 [K<sup>-3</sup>]  
 NASA a5 = 0.04134872E-11 [K<sup>-4</sup>]  
 NASA a6 = -0.01012521E+05 [K]  
 NASA a7 = -0.03294094E+02 []  
 END  
 TEMPERATURE LIMITS:  
 Lower Temperature = 300 [K]  
 Midpoint Temperature = 1000 [K]  
 Upper Temperature = 5000 [K]  
 END  
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:  
 NASA a1 = 0.02991423E+02 []  
 NASA a2 = 0.07000644E-02 [K<sup>-1</sup>]  
 NASA a3 = -0.05633829E-06 [K<sup>-2</sup>]  
 NASA a4 = -0.09231578E-10 [K<sup>-3</sup>]  
 NASA a5 = 0.01582752E-13 [K<sup>-4</sup>]  
 NASA a6 = -0.08350340E+04 [K]  
 NASA a7 = -0.01355110E+02 []  
 END  
 END  
 REFERENCE STATE:  
 Option = NASA Format  
 Reference Pressure = 1 [atm]  
 Reference Temperature = 25 [C]  
 END  
 DYNAMIC VISCOSITY:  
 Dynamic Viscosity = 8.8E-06 [kg m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>]  
 Option = Value  
 END  
 THERMAL CONDUCTIVITY:  
 Option = Value  
 Thermal Conductivity = 1.809E-01 [W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]  
 END  
 ABSORPTION COEFFICIENT:  
 Absorption Coefficient = 1.0 [m<sup>-1</sup>]  
 Option = Value  
 END  
 SCATTERING COEFFICIENT:  
 Option = Value  
 Scattering Coefficient = 0.0 [m<sup>-1</sup>]

```
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: H2O
Material Description = Water Vapour
Material Group = Gas Phase Combustion, Interphase Mass Transfer
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
  Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 18.02 [kg kmol^-1]
  Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
  Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03386842E+02 []
  NASA a2 = 0.03474982E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.06354696E-04 [K^-2]
  NASA a4 = 0.06968581E-07 [K^-3]
  NASA a5 = -0.02506588E-10 [K^-4]
  NASA a6 = -0.03020811E+06 [K]
  NASA a7 = 0.02590233E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.02672146E+02 []
  NASA a2 = 0.03056293E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.08730260E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01200996E-08 [K^-3]
  NASA a5 = -0.06391618E-13 [K^-4]
  NASA a6 = -0.02989921E+06 [K]
  NASA a7 = 0.06862817E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 9.4E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
```

```

  Thermal Conductivity = 193E-04 [W m^-1 K^-1]
  END
  ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
  END
  SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
  END
  REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
  END
  END
  MATERIAL: Material 1
  Material Group = Gas Phase Combustion
  Option = Reacting Mixture
  Reactions List = Hydrogen Air,Thermal NO O Radical PDF
  Thermodynamic State = Gas
  MIXTURE PROPERTIES:
  Option = Ideal Mixture
  ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
  END
  SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0. [m^-1]
  END
  REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0
  END
  END
  MATERIAL: N2
  Material Description = Nitrogen N2
  Material Group = Gas Phase Combustion
  Option = Pure Substance
  Thermodynamic State = Gas
  PROPERTIES:
  Option = General Material
  EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 28.01 [kg kmol^-1]
  Option = Ideal Gas
  END
  SPECIFIC HEAT CAPACITY:
  Option = NASA Format
  LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03298677E+02 []
  NASA a2 = 0.01408240E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.03963222E-04 [K^-2]
  NASA a4 = 0.05641515E-07 [K^-3]
  
```

```
NASA a5 = -0.02444855E-10 [K^-4]
NASA a6 = -0.01020900E+05 [K]
NASA a7 = 0.03950372E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.02926640E+02 []
  NASA a2 = 0.01487977E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.05684761E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.01009704E-08 [K^-3]
  NASA a5 = -0.06753351E-13 [K^-4]
  NASA a6 = -0.09227977E+04 [K]
  NASA a7 = 0.05980528E+02 []
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 17.7E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 259E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
MATERIAL: NO
  Material Description = Nitric Oxide NO
  Material Group = Gas Phase Combustion
  Option = Pure Substance
  Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
  Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Molar Mass = 30.01 [kg kmol^-1]
```

```
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03376542E+02 []
  NASA a2 = 0.01253063E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.03302751E-04 [K^-2]
  NASA a4 = 0.05217810E-07 [K^-3]
  NASA a5 = -0.02446263E-10 [K^-4]
  NASA a6 = 0.09817961E+05 [K]
  NASA a7 = 0.05829590E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Midpoint Temperature = 1000 [K]
  Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
  NASA a1 = 0.03245435E+02 []
  NASA a2 = 0.01269138E-01 [K^-1]
  NASA a3 = -0.05015890E-05 [K^-2]
  NASA a4 = 0.09169283E-09 [K^-3]
  NASA a5 = -0.06275419E-13 [K^-4]
  NASA a6 = 0.09800840E+05 [K]
  NASA a7 = 0.06417294E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 17.8E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 238E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
```

MATERIAL: O

Material Description = Atomic Oxygen O  
Material Group = Gas Phase Combustion  
Option = Pure Substance  
Thermodynamic State = Gas

PROPERTIES:

Option = General Material

EQUATION OF STATE:

Molar Mass = 16.00 [kg kmol<sup>-1</sup>]  
Option = Ideal Gas

END

SPECIFIC HEAT CAPACITY:

Option = NASA Format

LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:

NASA a1 = 0.02946429E+02 []  
NASA a2 = -0.01638166E-01 [K<sup>-1</sup>]  
NASA a3 = 0.02421032E-04 [K<sup>-2</sup>]  
NASA a4 = -0.01602843E-07 [K<sup>-3</sup>]  
NASA a5 = 0.03890696E-11 [K<sup>-4</sup>]  
NASA a6 = 0.02914764E+06 [K]  
NASA a7 = 0.02963995E+02 []

END

TEMPERATURE LIMITS:

Lower Temperature = 300 [K]  
Midpoint Temperature = 1000 [K]  
Upper Temperature = 5000 [K]

END

UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:

NASA a1 = 0.02542060E+02 []  
NASA a2 = -0.02755062E-03 [K<sup>-1</sup>]  
NASA a3 = -0.03102803E-07 [K<sup>-2</sup>]  
NASA a4 = 0.04551067E-10 [K<sup>-3</sup>]  
NASA a5 = -0.04368052E-14 [K<sup>-4</sup>]  
NASA a6 = 0.02923080E+06 [K]  
NASA a7 = 0.04920308E+02 []

END

END

REFERENCE STATE:

Option = NASA Format  
Reference Pressure = 1 [atm]  
Reference Temperature = 25 [C]

END

DYNAMIC VISCOSITY:

Dynamic Viscosity = 17.7E-06 [kg m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>]  
Option = Value

END

THERMAL CONDUCTIVITY:

Option = Value  
Thermal Conductivity = 470E-04 [W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>]

END

ABSORPTION COEFFICIENT:

Absorption Coefficient = 1.0 [m<sup>-1</sup>]  
Option = Value

END

SCATTERING COEFFICIENT:

```

Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: O2
Material Description = Oxygen O2
Material Group = Gas Phase Combustion
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Molar Mass = 31.99 [kg kmol^-1]
Option = Ideal Gas
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = NASA Format
LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03212936E+02 []
NASA a2 = 0.01127486E-01 [K^-1]
NASA a3 = -0.05756150E-05 [K^-2]
NASA a4 = 0.01313877E-07 [K^-3]
NASA a5 = -0.08768554E-11 [K^-4]
NASA a6 = -0.01005249E+05 [K]
NASA a7 = 0.06034738E+02 []
END
TEMPERATURE LIMITS:
Lower Temperature = 300 [K]
Midpoint Temperature = 1000 [K]
Upper Temperature = 5000 [K]
END
UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
NASA a1 = 0.03697578E+02 []
NASA a2 = 0.06135197E-02 [K^-1]
NASA a3 = -0.01258842E-05 [K^-2]
NASA a4 = 0.01775281E-09 [K^-3]
NASA a5 = -0.01136435E-13 [K^-4]
NASA a6 = -0.01233930E+05 [K]
NASA a7 = 0.03189166E+02 []
END
END
REFERENCE STATE:
Option = NASA Format
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 19.2E-06 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
  
```



```
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 266E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
REACTION: Hydrogen Air
  Additional Materials List = H2,O2,H2O,N2
  Option = Multi Step
  Reaction Description = Hydrogen Air Single Step Eddy Dissipation
  Reactions List = Hydrogen Oxygen
END
REACTION: Hydrogen Oxygen
  Option = Single Step
COMBUSTION MODEL:
  Eddy Dissipation Model Coefficient A = CoeffA
  Eddy Dissipation Model Coefficient B = CoeffB
  Option = Eddy Dissipation
END
PRODUCTS:
  Materials List = H2O
  Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: H2O
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
END
REACTANTS:
  Materials List = H2,O2
  Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: H2
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
CHILD MATERIAL: O2
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 0.5
END
END
REACTION: Thermal NO O Radical PDF
  Option = Single Step
  Reaction Description = Thermal NO Formation based on O Radicals with \
```

```

Temperature PDF
COMBUSTION MODEL:
  Option = Finite Rate Chemistry
END
FORWARD REACTION RATE:
  Lower Temperature = 300 [K]
  Option = Arrhenius with Temperature PDF
  Pre Exponential Factor = 1.8E+11 [kmol-1 m3 s-1]
  Temperature Exponent = 0
  Upper Temperature = 2300 [K]
REACTION ACTIVATION:
  Activation Temperature = 38370 [K]
  Option = Activation Temperature
END
END
PRODUCTS:
  Materials List = NO
  Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: NO
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 2.0
END
END
REACTANTS:
  Materials List = N2,O
  Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: N2
  Option = Stoichiometric
  Reaction Order = 1.0
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
CHILD MATERIAL: O
  Option = Stoichiometric
  Reaction Order = 1.0
  Stoichiometric Coefficient = 2.0
END
END
END
FLOW: Flow Analysis 1
SOLUTION UNITS:
  Angle Units = [rad]
  Length Units = [m]
  Mass Units = [kg]
  Solid Angle Units = [sr]
  Temperature Units = [K]
  Time Units = [s]
END
ANALYSIS TYPE:
  Option = Transient
EXTERNAL SOLVER COUPLING:
  Option = None
END
INITIAL TIME:
  Option = Automatic with Value
  
```

```
Time = 0 [s]
END
TIME DURATION:
  Option = Total Time
  Total Time = tFinal
END
TIME STEPS:
  Option = Timesteps
  Timesteps = tStepMin
END
DOMAIN: Gases
Coord Frame = Coord 0
Domain Type = Fluid
Location = Assembly
BOUNDARY: camara
  Boundary Type = WALL
  Location = CAMARA
BOUNDARY CONDITIONS:
  HEAT TRANSFER:
    Heat Transfer Coefficient = hc
    Option = Heat Transfer Coefficient
    Outside Temperature = TempChamber
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = No Slip Wall
  END
  MESH MOTION:
    Option = Stationary
  END
  THERMAL RADIATION:
    Diffuse Fraction = 1.
    Emissivity = 1.
    Option = Opaque
  END
  WALL ROUGHNESS:
    Option = Smooth Wall
  END
END
END
BOUNDARY: piston
  Boundary Type = WALL
  Coord Frame = Coord 1
  Location = PISTON
BOUNDARY CONDITIONS:
  HEAT TRANSFER:
    Fixed Temperature = TempPiston
    Option = Fixed Temperature
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = No Slip Wall
  END
  MESH MOTION:
    Option = Specified Displacement
  DISPLACEMENT:
```

```
Displacement X Component = 0 [m]
Displacement Y Component = 0 [m]
Displacement Z Component = ZPiston
Option = Cartesian Components
END
END
THERMAL RADIATION:
  Diffuse Fraction = 1.
  Emissivity = 1.
  Option = Opaque
END
WALL ROUGHNESS:
  Option = Smooth Wall
END
END
BOUNDARY: wall
  Boundary Type = WALL
  Coord Frame = Coord 1
  Location = Primitive 2D
BOUNDARY CONDITIONS:
  HEAT TRANSFER:
    Heat Transfer Coefficient = hc
    Option = Heat Transfer Coefficient
    Outside Temperature = TempWall
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = No Slip Wall
  END
  MESH MOTION:
    Option = Unspecified
  END
  THERMAL RADIATION:
    Diffuse Fraction = 1.
    Emissivity = 1.
    Option = Opaque
  END
  WALL ROUGHNESS:
    Option = Smooth Wall
  END
END
END
DOMAIN MODELS:
  BUOYANCY MODEL:
    Option = Non Buoyant
  END
  DOMAIN MOTION:
    Option = Stationary
  END
  MESH DEFORMATION:
    Option = Regions of Motion Specified
  MESH MOTION MODEL:
    Option = Displacement Diffusion
  MESH STIFFNESS:
    Mesh Stiffness = 1 [m^2 s^-1]
```

```
Option = Value
END
END
END
REFERENCE PRESSURE:
  Reference Pressure = 0 [atm]
END
END
FLUID DEFINITION: Material 1
  Material = Material 1
  Option = Material Library
MORPHOLOGY:
  Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID MODELS:
  ADDITIONAL VARIABLE: Pav
    Additional Variable Value = Pgas
    Option = Algebraic Equation
  END
  COMBUSTION MODEL:
    Chemical Timescale = 0.0137 [s]
    Eddy Dissipation Model Coefficient A = 40
    Eddy Dissipation Model Coefficient B = -1.0
    Extinction Temperature = 800 [K]
    Mixing Rate Limit = 2500 [s^-1]
    Option = Eddy Dissipation
  END
  COMPONENT: H2
    Option = Automatic
  END
  COMPONENT: H2O
    Option = Automatic
  END
  COMPONENT: N2
    Option = Constraint
  END
  COMPONENT: NO
    Option = Automatic
  END
  COMPONENT: O
    Option = Automatic
  END
  COMPONENT: O2
    Option = Automatic
  END
  HEAT TRANSFER MODEL:
    Option = Total Energy
  END
  THERMAL RADIATION MODEL:
    Option = Discrete Transfer
    Radiation Transfer Mode = Participating Media
  SCATTERING MODEL:
    Option = None
  END
```

```
SPECTRAL MODEL:  
  Option = Gray  
END  
TURBULENCE MODEL:  
  Option = k epsilon  
END  
TURBULENT WALL FUNCTIONS:  
  Option = Scalable  
END  
SOURCE POINT: Source Point 1  
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]  
  Option = Cartesian Coordinates  
SOURCES:  
  EQUATION SOURCE: energy  
  Option = Total Source  
  Total Source = spark  
END  
END  
END  
INITIALISATION:  
  Option = Automatic  
INITIAL CONDITIONS:  
  Velocity Type = Cartesian  
  CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:  
  Option = Automatic with Value  
  U = 0.5 [m s-1]  
  V = 2 [m s-1]  
  W = 1 [m s-1]  
END  
COMPONENT: H2  
  Mass Fraction = 0.0145  
  Option = Automatic with Value  
END  
COMPONENT: H2O  
  Mass Fraction = 0.001  
  Option = Automatic with Value  
END  
COMPONENT: NO  
  Mass Fraction = 0.0  
  Option = Automatic with Value  
END  
COMPONENT: O  
  Mass Fraction = 0.001  
  Option = Automatic with Value  
END  
COMPONENT: O2  
  Mass Fraction = 0.2297  
  Option = Automatic with Value  
END  
RADIATION INTENSITY:  
  Option = Automatic  
END
```

```
STATIC PRESSURE:  
  Option = Automatic with Value  
  Relative Pressure = Pini  
END  
TEMPERATURE:  
  Option = Automatic with Value  
  Temperature = Tini  
END  
TURBULENCE INITIAL CONDITIONS:  
  Option = k and Epsilon  
EPSILON:  
  Option = Automatic  
END  
K:  
  Option = Automatic  
END  
END  
END  
END  
OUTPUT CONTROL:  
MONITOR OBJECTS:  
MONITOR BALANCES:  
  Option = Full  
END  
MONITOR FORCES:  
  Option = Full  
END  
MONITOR PARTICLES:  
  Option = Full  
END  
MONITOR POINT: Chispa  
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]  
  Option = Cartesian Coordinates  
  Output Variables List = Temperature  
END  
MONITOR POINT: Presion  
  Cartesian Coordinates = 0 [m], 0 [m], -0.005 [m]  
  Option = Cartesian Coordinates  
  Output Variables List = Pressure  
END  
MONITOR RESIDUALS:  
  Option = Full  
END  
MONITOR TOTALS:  
  Option = Full  
END  
END  
RESULTS:  
  File Compression Level = Default  
  Option = Standard  
END  
TRANSIENT RESULTS: Transient Results 1  
  File Compression Level = Default  
  Include Mesh = On  
  Option = Selected Variables
```

```
Output Boundary Flows = None
Output Variables List = Absolute Pressure,H2.Mass Fraction,H2.Molar \
  Fraction,H2O.Mass Fraction,H2O.Molar Fraction,N2.Mass \
  Fraction,N2.Molar Fraction,NO.Mass Fraction,NO.Molar \
  Fraction,O2.Mass Fraction,O2.Molar \
  Fraction,Pressure,Temperature,Total Pressure,Total \
  Temperature,Velocity,Wall Heat Flux,Wall Heat Transfer Coefficient
OUTPUT FREQUENCY:
  Option = Time Interval
  Time Interval = tStepMin
END
END
TRANSIENT STATISTICS: Pmax
  Option = Maximum
  Output Variables List = Pav
END
END
SOLVER CONTROL:
  Turbulence Numerics = First Order
ADVECTION SCHEME:
  Option = High Resolution
END
CONVERGENCE CONTROL:
  Maximum Number of Coefficient Loops = 5
  Minimum Number of Coefficient Loops = 1
  Timescale Control = Coefficient Loops
END
CONVERGENCE CRITERIA:
  Residual Target = 0.0001
  Residual Type = RMS
END
TRANSIENT SCHEME:
  Option = First Order Backward Euler
END
END
EXPERT PARAMETERS:
  max continuity loops = 2
  solve volfr = t
  tbulk for htc = 300.0
  transient initialisation override = t
END
END
COMMAND FILE:
  Version = 11
END
```



## B.4. POST-PROCESAMIENTO DE LOS FLUJOS DE CALOR

### PROGRAMA LENGUAJE PERL

```
!sub Expresion{
!open(OUT,">H:/Flujo_PERL/T.txt");
!for ($i=0;$i<301;$i+=1)
!{
>load timestep=$i
!@ca=evaluate("t");
!print (OUT $ca[0] ."\t");
!@cb=evaluate("arealnt(hc*(Tgas-TempWall))\@wall");
!print (OUT $cb[0] ."\t");
!@cc=evaluate("arealnt(hc*(Tgas-TempChamber))\@camara");
!print (OUT $cc[0] ."\n");
!}
!close(OUT);
!}
!Expresion();

!@cd=evaluate("arealnt(Wall Convective Heat Flux)\@wall");
!print (OUT $cd[0] ."\t");
!@ce=evaluate("arealnt(Wall Convective Heat Flux)\@camara");
!print (OUT $ce[0] ."\n");
```

### PROGRAMA MATLAB

```
% Datos Potencia convectiva (W); resultado perdida de calor (J)
clear all
load -ascii T.txt
[k,s]=size(T);
P=zeros(k-1,s+2);
for i=2:k
    P(i-1,1)=T(i,1);
    P(i-1,2)=abs((T(i-1,2)+T(i,2))/2);
    P(i-1,3)=abs(((T(i-1,2)+T(i,2))/2)*(-T(i-1,1)+T(i,1)));
    P(i-1,4)=abs((T(i-1,3)+T(i,3))/2);
    P(i-1,5)=abs(((T(i-1,3)+T(i,3))/2)*(-T(i-1,1)+T(i,1)));
end
for i=1:(k-1)
    if (i==1)
        P(i,3)=P(i,3);
        P(i,5)=P(i,5);
    else
        P(i,3)=P(i,3)+P(i-1,3);
        P(i,5)=P(i,5)+P(i-1,5);
    end
end
```