

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA



ESTUDIO DE LOS EFECTOS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE Y
TERMO-FÍSICAS DEL BODIESEL DERIVADO DEL ACEITE USADO DE
COCINA SOBRE LA ESTRUCTURA DINÁMICA DE UN CHORRO DIÉSEL

POR
ING. ADOLFO BENÍTEZ MOLINA

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

NOVIEMBRE, 2015

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



TESIS

**ESTUDIO DE LOS EFECTOS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE
Y TERMO-FÍSICAS DEL BIODIESEL DERIVADO DEL ACEITE USADO DE
COCINA SOBRE LA ESTRUCTURA DINÁMICA DE UN CHORRO DIÉSEL**

POR

ING. ADOLFO BENÍTEZ MOLINA

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

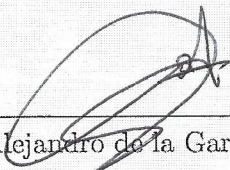
**ASESOR: DR. OSCAR ALEJANDRO DE LA GARZA DE LEÓN
CO-ASESOR: DR. SIMÓN MARTÍNEZ MARTÍNEZ**

NOVIEMBRE, 2015

Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica
Subdirección de Estudios de Posgrado

Los miembros del Comité de Tesis recomendamos que la Tesis «Estudio de los efectos de las propiedades de transporte y termo-físicas del biodiesel derivado del aceite usado de cocina sobre la estructura dinámica de un chorro diesel», realizada por el estudiante Adolfo Benítez Molina, con número de matrícula 1315010, sea aceptada para su defensa como requisito para obtener el grado de Maestría en Ciencias de la Ingeniería con Orientación en Energías Térmica y Renovables.


El Comité de Tesis



Dr. Oscar Alejandro de la Garza de León
Asesor



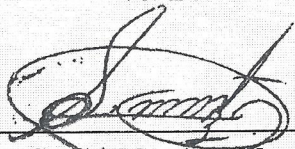
Dr. Simón Martínez Martínez
Co-Asesor



Dr. Fausto A. Sánchez Cruz
Revisor



Dr. Alberto Cantú Pérez
Revisor

Vo. Bo.


Dr. Simón Martínez Martínez
Subdirección de Estudios de Posgrado

San Nicolás de los Garza, Nuevo León, noviembre 2015

*It is true, that which I have
revealed to you; there is no God, no
universe, no human race, no
earthly life, no heaven, no hell. It is
all a dream a grotesque and foolish
dream. Nothing exists but you. And
you are but a thought a vagrant
thought, a useless thought, a
homeless thought, wandering
forlorn among the empty eternities.
Dream other dreams and better.*

*Mark Twain, The Mysterious
Stranger*

AGRADECIMIENTOS

A la memoria de mi Padre Adolfo Benítez Rodríguez para que sus enseñanzas guíen mi camino, a mi madre Osvelia Molina Duarte por demostrarme el valor del coraje y la perseverancia y a mi hermano Antonio Benítez Molina, ya que su cariño y apoyo me acompañó durante este periodo de mi vida. A mi familia agradezco las enseñanzas de dedicación y disciplina que me transmitieron. Gracias a ellos y al cariño dado he podido triunfar en lo que me proponga.

A mi querida novia Daniela Lozano, por su paciencia en estos tiempos de necesidad y carencias, por sus consejos y sueños que me motivaron día con día a soñar con un mejor mañana.

Al cuerpo académico: Al grupo de Modelado y Optimización de Máquinas Térmicas y al grupo de Nuevos Sistemas Energéticos, en especial al Dr. Oscar de la Garza, director de mi tesis, por su labor de tutor durante mi permanencia en el posgrado y por los consejos y guía para la realización de este trabajo. Al Dr. Jaime Armendáriz por su apoyo, enseñanzas y amistad. Al Dr. Fausto Sánchez por su apoyo como coordinador del programa de maestría, por sus consejos que permitieron asistir a eventos internacionales y nacionales que permitieron mi crecimiento académico. Al Dr. Simón Martínez por su soporte como Subdirector de Estudios de Posgrado y por su comprensión y apoyo en las etapas finales del posgrado. A los profesores del cuerpo académico, Dr. Santos Méndez, Dr. Arturo Morales, Dra. Elvira Martínez, M.C. Miguel García y al Dr. Max Salvador por sus enseñanzas y consejos

A mis compañeros y amigos, que junto conmigo vivimos una experiencia más de la vida durante estos dos años, Víctor Madrid, César Ramírez, Mario Chapa, Luis Valdez, Carlos Uder, Rosario Rodríguez, Ricardo Delgado, René Mondragón, Jesús Juárez, Yonathan Loredo, Jessica Casanova, Jose Camacho, Hugo Ramírez y a todos mis demás compañeros por sus aportaciones y apoyo.

A la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica por el apoyo brindado a lo largo de este programa académico.

Al CONACyT por el apoyo otorgado a través de la beca número 372542 desde Agosto 2013 a Julio 2015.

ÍNDICE GENERAL

Nomenclatura	xxvii
Resumen	xxxiii
Abstract	xxxv
1. Motivación	1
1.1. Biodiesel en el Mundo	1
1.2. Biodiesel en México	2
1.3. Estímulos socio-económicos	3
Bibliografía	5
2. El biodiesel y el proceso de inyección	7
2.1. Introducción	8
2.2. Características macroscópicas de un biodiesel y un diesel	8
2.3. Composición química	15
2.3.1. Propiedades termo-físicas y de transporte	19

2.4. Fundamentos del proceso de mezcla en motores diesel	22
2.5. Modelado del chorro	30
2.5.1. Propiedades termo-físicas y de transporte	33
2.5.2. Ecuaciones de gobierno	40
2.5.3. Modelado del chorro y la formación de la mezcla.	83
Bibliografía	102
3. Planteamiento de la tesis	113
3.1. Introducción	113
3.2. Síntesis del marco teórico	114
3.3. Objetivos.	117
3.3.1. Objetivo general.	117
3.3.2. Objetivos específicos.	117
3.4. Metodología de la tesis	118
Bibliografía	122
4. Composición química del biodiesel	123
4.1. Selección del combustible	123
4.2. Determinación de la composición química	124
4.2.1. Cromatografía de gases	125
4.3. Perfil de ácidos grasos y composición	133
4.4. Conclusiones	137

Bibliografía	138
5. Propiedades de transporte y termo-físicas	141
5.1. Propiedades de transporte y termo-físicas	142
5.1.1. Propiedades usadas en el código CFD OpenFOAM	144
5.2. Correlaciones de grupos funcionales	145
5.2.1. Propiedades críticas	145
5.2.2. Factor acéntrico	146
5.2.3. Propiedades de mezcla	147
5.2.4. Densidad	149
5.2.5. Presión de vapor	150
5.2.6. Entalpía de vaporización	153
5.2.7. Capacidad calorífica del líquido	154
5.2.8. Capacidad calorífica del gas	154
5.2.9. Segundo coeficiente virial	156
5.2.10. Viscosidad líquida	162
5.2.11. Viscosidad de vapor	162
5.2.12. Conductividad térmica líquida	164
5.2.13. Conductividad térmica de vapor	165
5.2.14. Tensión superficial	166
5.2.15. Difusividad de vapor	168

5.3. Análisis de las propiedades de los ácidos grasos y del biodiesel	172
5.3.1. Correlaciones empíricas de grupos funcionales para los ácidos grasos	172
5.3.2. Regresiones no lineales	189
5.3.3. Propiedades de transporte del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	204
5.3.4. Generación de la librería del biodiesel para el código CFD OpenFOAM	219
5.4. Conclusiones	225
Bibliografía	227
6. Simulación del chorro de biocombustible	233
6.1. Introducción	234
6.2. Condiciones de trabajo de las mezclas de combustible objeto de estudio	237
6.2.1. Geometría de la tobera y condiciones de la cámara de combustión	238
6.2.2. Determinación de los ángulos de chorro	246
6.2.3. Determinación del coeficiente de descarga	252
6.2.4. Determinación de las presiones de inyección	255
6.3. Método numérico	262
6.3.1. Método de volúmenes finitos (FVM)	263
6.3.2. Código CFD OpenFOAM	271
6.4. Simulación de un chorro diesel	291

6.4.1. Simulación del chorro diesel puro <i>B0</i>	291
6.4.2. Simulación del chorro empleando biodiesel puro derivado de aceite usado de cocina, <i>B100</i>	299
6.4.3. Simulación del chorro empleando una mezcla <i>B20</i>	304
6.4.4. Simulación del chorro empleando una mezcla <i>B50</i>	308
6.5. Análisis de la penetración para las diversas mezclas	312
6.6. Conclusiones	317
Bibliografía	319
Apéndice C6: Componentes de la maqueta de visualización a volumen cons- tante	324
7. Trabajos Futuros	329

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. Consumo global estimado de energías renovables	2
2.1. (a) Determinación de la penetración mediante el uso de simulación y (b) determinación de la penetración mediante experimentación entre un biodiesel y un diesel	9
2.2. (a) Pérdida en la potencia del motor y (b) disminución del poder calorífico entre un biodiesel y un diesel [14]	12
2.3. Aumento en el consumo de combustible	13
2.4. (a) Variación de la temperatura y (b) densidad de los gases de escape entre un biodiesel y un diesel [14]	14
2.5. (a) Ácido saturado ,(b) Ácido insaturado y (c) Hidrocarburo lineal . .	16
2.6. Mecanismo de reacción para la transesterificación asistida por un ca- talizador básico	17
2.7. Proceso general de transesterificación	17
2.8. Proceso de formación de ruptura	22
2.9. Ruptura del cono completo de un chorro diesel	24
2.10. Representación de la formación de ligamentos y su desintegración . .	25

2.11. Desarrollo de un chorro diesel y aumento en la penetración [48], $P_{inj}=70\text{ MPa}, P_{back}= 5\text{ MPa}, T_{N_2}=710\text{ K}$	26
2.12. Evolución temporal de la penetración correspondiente a un chorro de biocombustible y combustible fósil	28
2.13. Esquema de la propagación de un chorro en la cámara de combustión	29
2.14. Formulación de la formación de un chorro Euleriano-Lagrangiano . .	33
2.15. Balance de masas	41
2.16. Flujo de masa de entrada y salida en un elemento fluido	42
2.17. Código empleado en la resolución de la continuidad para la densidad .	43
2.18. Código empleado en la resolución de la ecuación de conservación de especies	46
2.19. Balance de fuerzas	47
2.20. Componentes de esfuerzo en la dirección x	48
2.21. Código empleado en la resolución de la conservación de la cantidad de movimiento	50
2.22. Balance de energía	53
2.23. Balance de energía en un volumen de control	54
2.24. Código empleado en la resolución de la conservación de la energía como la suma de la energía sensible y cinética	56
2.25. Transición de un flujo tipo jet o chorro diesel	58
2.26. Volumen de control bidimensional con flujo cortante turbulento . . .	59
2.27. Flujo turbulento inestable	61

2.28. Código empleado en la resolución de ecuación de la energía cinética turbulenta	74
2.29. Código empleado en la resolución de ecuación de disipación de energía cinética turbulenta (ϵ)	76
2.30. Idea básica del método de Monte Carlo	79
2.31. Código empleado en la resolución de la velocidad de la partícula	82
2.32. Código empleado en la resolución de la posición de la partícula	83
2.33. Método de blob para break-up primario	86
2.34. Código empleado para la determinación de la velocidad de inyección	86
2.35. Modelo de la analogía de Taylor para el Brek-up (TAB)	88
2.36. Figura esquemática de la formación de gotas por el proceso de inestabilidad KH	91
2.37. Código empleado para la resolución del diámetro y el tiempo de break-up KH	92
2.38. Código empleado para la resolución del crecimiento de onda en la superficie Ω y longitud de onda Λ para las inestabilidades KH	92
2.39. Figura esquemática de la formación de gotas por el proceso de inestabilidad RT	94
2.40. Código empleado para la resolución crecimiento de onda en la superficie Ω y longitud de onda Λ para las inestabilidades RT	95
2.41. Diagrama esquemático de un mecanismo de break-up en régimen castrófico	96
2.42. Método combinado Blob-KHRT	97

2.43. Mecanismo de colisión con coalescencia	99
2.44. Calculo para el modelo de colisión de trayectoria	99
2.45. Variables para dar de alta α y β	100
2.46. Posible colisión para un paso de tiempo	101
2.47. Cálculo de la probabilidad de colisión	101
3.1. Metodología general	119
4.1. Cromatógrafo de gases Bruker 450-GC	126
4.2. (a) Técnica de inyección y (b) Jeringa de inyección usada	127
4.3. Septa de inyección de muestra de biodiesel	128
4.4. Columna tubular abierta Bruker BR-S WAX	128
4.5. Mapa de potencial electrostático de un ácido graso y un éter	129
4.6. Esquema de tiempo de retención para una muestra dentro de la columna	130
4.7. Detector de flama ionizada FID	131
4.8. (a) 50 miligramos de biodiesel y (b) Doble vial	132
4.9. Cromatograma del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	135
4.10. (a) Ácido oléico y (b) Trans del ácido oléico, ácido elaídico	137
5.1. (a) Ácido saturado y (b) Ácido insaturado	143
5.2. Electronegatividad de los elementos químicos	159
5.3. (a) Comparativa de electronegatividad para el ácido caprónico/C6:0 y (b) ácido palmítico/C16:0	160

5.4. Momento dipolo para los ácidos grasos	161
5.5. Densidad de los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	177
5.6. Presiones de vapor de los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	178
5.7. Entalpía de vaporización molar para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	179
5.8. Entalpía de vaporización específica para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	180
5.9. Capacidad calorífica del líquido para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	181
5.10. Capacidad calorífica del gas para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	182
5.11. Segundo coeficiente virial para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	183
5.12. Viscosidad líquida para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	184
5.13. Viscosidad de vapor para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	185
5.14. Conductividad térmica líquida para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	186
5.15. Potencial electrostático	186
5.16. Conductividad térmica del vapor para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	187

5.17. (a) Atracciones magnéticas moleculares y (b) Balance de cargas en las moléculas centrales y superficiales	188
5.18. Tensión superficial para los ácido grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina	189
5.19. Propiedades de transporte y termo-físicas para el ácido oléico (a) densidad, (b) presión de vapor, (c) entalpía de vaporización y (d) capacidad calorífica del líquido	201
5.20. Propiedades de transporte y termo-físicas para el ácido oléico (e) capacidad calorífica del vapor, (f) segundo coeficiente virial, (g) viscosidad del líquido y (h) viscosidad del vapor	202
5.21. Propiedades de transporte y termo-físicas para el ácido oléico (i) conductividad térmica del líquido, (j) conductividad térmica del vapor y (k) tensión superficial	203
5.22. Densidad del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	205
5.23. Presión de vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	206
5.24. Entalpía de vaporización del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	207
5.25. Capacidad calorífica del líquido del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	208
5.26. Capacidad calorífica del vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	209
5.27. Segundo coeficiente virial del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	210
5.28. Viscosidad del líquido del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	211

5.29. Viscosidad del vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	212
5.30. Conductividad térmica del líquido del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	214
5.31. Conductividad térmica del vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	215
5.32. Tensión superficial del biodiesel derivado del aceite usado de cocina .	216
5.33. Difusividad de vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	219
5.34. Diagrama de colaboración para el tetradecano	220
5.35. Ubicación de las propiedades	222
5.36. Códigos	223
5.37. Propiedades críticas y coeficientes de densidad para: (a) tetradecano y (b) biodiesel	223
6.1. Impactos promedio en emisiones al emplear biodiesel en un motor . .	235
6.2. Sección transversal de un inyector	239
6.3. (a) Técnica empleada para el molde de silicona (b) Vista general del interior de la tobera [11]	240
6.4. Maqueta de visualización a volumen constante	242
6.5. Maqueta de visualización a volumen constante.	243
6.6. Placa circular sujeta bajo una carga uniformemente distribuida . .	244
6.7. Máxima deformación para la ventana de zafiro	245
6.8. Geometría de la tobera y condiciones de la maqueta de visualización .	247

6.9. Ángulo completo del cono de un chorro diesel	248
6.10. Cálculo del ángulo del chorro	248
6.11. Ángulo del chorro. Gimeno et al.[10]	250
6.12. Zona estable del ángulo del chorro	250
6.13. Eficiencia en el proceso de mezcla, debida al ángulo del chorro	252
6.14. Coeficiente de descarga en función del número de Reynolds	254
6.15. Zona estable del coeficiente de descarga	255
6.16. (a) Esquema del sistema para la medición del flujo másico y (b) Es- quema del sistema para la medición de la cantidad de movimiento [19]	256
6.17. Evolución temporal de la tasa de inyección. $P_{inj}=80 MPa$, $P_{back}=3.5$ MPa	257
6.18. Zona estable de la velocidad de inyección	258
6.19. Tasa de inyección para el biodiesel y sus mezclas con diesel	259
6.20. Volumen de control unidimensional	264
6.21. Volumen de control A	266
6.22. Esquema de discretización de la variación de la temperatura con el tiempo	268
6.23. Código empleado en la resolución de la continuidad para la densidad.	272
6.24. Representación de la geometría en el código CFD OpenFOAM.	274
6.25. (a) Refinamiento de la malla a lo largo del borde del bloque (b) Vérti- ces del dominio computacional	275

6.26. Dominio computacional. Malla completa y celdas computacionales. . .	276
6.27. Predicción de ϕ_p para los diversos tipos de esquemas en un rango de números de Peclet.	281
6.28. Algoritmo PIMPLE	286
6.29. Fichero fvSolution para la densidad, la velocidad y la energía total. . .	288
6.30. Penetración del chorro a una $P_{inj} = 80MPa$ y una contrapresión de 3.53 MPa.	292
6.31. Penetración expuesta en el fichero log.	293
6.32. Evolución temporal de la penetración experimentada y modelada . .	295
6.33. (a) Propiedades de transporte del diesel (b) Condiciones en la cámara de combustión. I contornos de velocidad, II campos de presión y III contornos de temperatura	297
6.34. Velocidad del chorro y del gas circundante para el B0	298
6.35. Evolución temporal del chorro para B100	299
6.36. Evolución temporal del chorro para un B100 y un B0	301
6.37. (a) Propiedades de transporte del Biodiesel (b) Condiciones en la cámara de combustión. I contornos de velocidad, II campos de presión y III contornos de temperatura	302
6.38. Velocidad del chorro y del gas circundante para un B100	303
6.39. Evolución temporal del chorro para un B20	305
6.40. (a) Propiedades de transporte del B20 (b) Fracción masa de diesel y biodiesel en el chorro	306
6.41. Condiciones de la cámara de combustión para un B20	307

6.42. Evolución temporal del chorro para un <i>B50</i>	309
6.43. (a) Propiedades de transporte del B50 (b) Fracción masa de diesel y biodiesel en el chorro	310
6.44. Condiciones en la cámara de combustión para un <i>B50</i>	311
6.45. Morfología de cuatro diversos chorros de biocombustible	313
6.46. Evolución temporal de la penetración del chorro correspondiente a las cuatro mezclas de combustible, objeto de estudio	314
6.47. Velocidad de la punta del chorro para el diesel y para sus diversas mezclas con biodiesel	315
6.48. Variación en la presión de la cámara por el avance del chorro y vectores de alta velocidad para 1 <i>ms</i> de inyección	316

ÍNDICE DE TABLAS

2.1. <i>Emisiones promedio de biodiesel en comparativa con un diesel fósil [8]</i>	11
2.2. <i>Composición de ácidos grasos de esteres de un aceite usado de cocina [22]</i>	18
2.3. <i>Composición de ácidos grasos para varias fuentes de aceite</i>	19
2.4. <i>Métodos de estimación y datos experimentales para las propiedades termo-físicas y de transporte</i>	21
4.1. <i>Tiempos de retención obtenidos para el estándar SUPELCO</i>	134
4.2. <i>Tiempos de retención y perfil de ácidos grasos del biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	136
4.3. <i>Composición y porcentaje del biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	138
5.1. <i>Contribución de grupos funcionales para la temperatura, presión y volumen crítico usados en el método de Ambrose [3]</i>	147
5.2. <i>Contribución de grupos funcionales para la determinación de la capacidad calorífica del gas a través del método de Joback [3]</i>	156

5.3. <i>Momento dipolo para los ácidos grasos en función del número de carbonos presentes en la molécula</i>	161
5.4. <i>Contribución de grupos funcionales para el modelo de Reichenberg [5]</i>	164
5.5. <i>Contribución de grupos funcionales para el modelo de Allen [5]</i>	167
5.6. <i>Volumenes de difusión atómica [29]</i>	170
5.7. <i>Métodos propuestos para la estimación de las propiedades de transporte y termo-físicas de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	173
5.8. <i>Propiedades críticas de los ácidos grasos caprico, mirístico, palmítico, palmitoléico, esteárico, oléico, linoléico, linolénico, araquídico y behénico</i>	174
5.9. <i>Propiedades críticas del biodiesel empleadas en el código CFD Open-FOAM</i>	176
5.10. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de densidad</i>	190
5.11. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la presión de vapor</i>	191
5.12. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la entalpía de vaporización</i>	192
5.13. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la capacidad calorífica del líquido</i>	193
5.14. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la capacidad calorífica del vapor</i>	194
5.15. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación del segundo coeficiente virial</i>	194
5.16. <i>Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la viscosidad líquida</i>	195

5.17. <i>Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la viscosidad del vapor</i>	196
5.18. <i>Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la conductividad térmica del líquido</i>	197
5.19. <i>Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la conductividad térmica del vapor</i>	198
5.20. <i>Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de tensión superficial</i>	199
5.21. <i>Coefficientes para la ecuación de densidad de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	205
5.22. <i>Coefficientes para la ecuación de la presión de vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	206
5.23. <i>Coefficientes para la ecuación de la entalpía de vaporización de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	207
5.24. <i>Coefficientes para la ecuación de la capacidad calorífica del líquido de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	209
5.25. <i>Coefficientes para la ecuación de la capacidad calorífica del vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	210
5.26. <i>Coefficientes para la ecuación del segundo coeficiente virial de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	211
5.27. <i>Coefficientes para la viscosidad líquida de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	212
5.28. <i>Coefficientes para la viscosidad de vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	213

5.29. <i>Coefficientes para la conductividad térmica del líquido de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	214
5.30. <i>Coefficientes para la conductividad térmica del vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	215
5.31. <i>Coefficientes para la tensión superficial de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	217
5.32. <i>Volúmenes de difusión atómica de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina</i>	218
6.1. <i>Mezclas de biocombustibles empleadas para la simulación de un chorro diesel.</i>	236
6.2. <i>Geometría de la tobera empleada para el desarrollo de la simulación. .</i>	241
6.3. <i>Condiciones de la maqueta de visualización a volumen constante. . .</i>	246
6.4. <i>Ángulos y semi ángulos del chorro para los chorros de biocombustible.</i>	251
6.5. <i>Factores de tiempo para la inyección de biocombustible.</i>	260
6.6. <i>Presión de inyección para los biocombustibles y el diesel</i>	261
6.7. <i>Condiciones de operación para la simulación de un chorro de biocombustible</i>	262

NOMENCLATURA

Números adimensionales

\mathcal{T}	Número de Taylor	[–]
\mathcal{Z}	Número de Ohnesorge	[–]
Re	Número de Reynolds	[–]
We	Número de Weber	[–]
Co	Número de Courant	[–]
Pe	Número de Peclet	[–]
Pr	Número de Prandtl	[–]
Sc	Número de Schmidt	[–]

Acrónimos

CFD	Dinámica de Fluidos Computacional	[–]
KH	Kelvin-Helmholtz	[–]
PM	Peso molecular	[<i>gr/mol</i>]
RT	Rayleigh-Taylor	[–]
SMD	Sauter Mean Diameter	[<i>m</i>]
$V.C$	Volumen de control	[–]

<i>PIMPLE</i>	Híbrido PISO-SIMPLE	[—]
<i>PISO</i>	Pressure Implicit with Splitting of Operators	[—]
<i>SIMPLE</i>	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations	[—]

Símbolos Griegos

α_t	Difusividad térmica	$[m^2/s]$
Δ	Cambio en el valor de una variable	[—]
δ_{ij}	Valor de Kronocker	[—]
ϵ	Razón de disipación	$[m^2/s^3]$
Λ	Longitud de onda	$[m]$
ν	Coefficiente de Poisson	[—]
μ	Viscosidad	$[Pa.s]$
μ_{eff}	Viscosidad dinámica efectiva	$[m^2/s]$
μ'	Momento dipolo	$[debye]$
μ°	Viscosidad del vapor	$[Pa.s]$
ν_{eff}	Viscosidad cinemática efectiva	$[m^2/s]$
Ω	Crecimiento de onda	$[m]$
ω	Factor acéntrico	[—]
Φ	Esfuerzo viscoso en la ecuación de la energía	$[m^2/s]$
π	Número de pi	[—]
ρ	Densidad	$[kg/m^3]$

ρ'_i	Densidad fluctuante en la componente i	$[kg/m^3]$
σ	Tensión superficial	$[N/m]$
τ	Esfuerzo normal viscoso	$[kg/m.s^2]$
τ_{KH}	Tiempo característico de break-up	$[s]$
τ_p	Tiempo de relajación de la partícula	$[s]$
θ	Polinomio de temperatura reducida	$[-]$
$\Theta/2$	Medio ángulo del cono	$[grad]$
v	Parámetro de solubilidad	$[(J/m^3)^{1/2}]$
ε	Coefficiente de perdida	$[-]$
Γ	Coefficiente de difusión	$[m^2/s]$
$\bar{\rho}_i$	Densidad promedio en la componente i	$[kg/m^3]$
Operadores		
∇	Operador Gradiente	$[-]$
∇^2	Operador Laplaciano	$[-]$
Símbolos Romanos		
\dot{m}	Flujo másico	$[kg/s]$
$\frac{D}{Dt}$	Derivada material	$[-]$
E	Calor latente de evaporación	$[J/kg]$
V	Volumen	$[cm^3/kg]$
D	Razón de modulo de Young y Poisson	$[Pa]$
E	Modulo de Young o elasticidad	$[Pa]$

Π	Escala de velocidad característica	$[m/s]$
\mathfrak{D}	Difusividad de vapor	$[cm^2/s]$
f	Factor de fricción	$[-]$
V	Velocidad de difusión de especies	$[m^2/s]$
∂t	Derivada parcial con respecto al tiempo	$[-]$
φ	Desplazamiento máximo	$[m]$
A	Área de la tobera	$[m^2]$
B	Segundo coeficiente virial	$[m^3/kg]$
C_D	Coeficiente de arrastre	$[-]$
ch	Parámetro de cohesión	$[-]$
C_p	Capacidad calorífica	$[J/kg.K]$
D	Diámetro característica	$[m]$
g	Aceleración debida a la gravedad	$[m/s^2]$
h	Espesor	$[mm]$
hl	Entalpía de vaporización	$[J/kg]$
k	Conductividad térmica	$[W/m.K]$
l	Longitud característica	$[m]$
N	Número de dobles enlaces presentes en la molécula	$[-]$
P	Número de Parachor	$[-]$
P	Presión	$[Pa]$
P_{vap}	Presión de vapor	$[Pa]$

q	Flujo de calor	$[W/m^2]$
R	Constante universal de los gases	$[Pa.m^3/K.mol]$
r	Radio de la gota	$[m]$
S	Término fuente debido a la interacción del chorro	$[-]$
T	Temperatura	$[K]$
t	Coordenada temporal	$[-]$
Tr	Temperatura reducida	$[-]$
u	Vector de velocidad dirección x	$[-]$
u'_i	Velocidad fluctuante en la componente i	$[m/s]$
v	Vector de velocidad dirección y	$[-]$
w	Vector de velocidad dirección z	$[-]$
x	Coordenada espacial	$[-]$
Y	Fracción de especies	$[-]$
Z_{RA}	Factor de densidad para cada ácido graso	$[-]$
m	masa inyectada de combustible	$[kg]$
\varkappa	Factor de tiempo de inyección	$[-]$
\bar{u}_i	Velocidad promedio en la componente i	$[m/s]$

Subíndices

a	Gas ambiental	$[-]$
AB	Difusión del componente A al B	$[-]$
b	Ebullición	$[-]$

<i>br</i>	Ebullición reducida	[—]
<i>c</i>	Puntos críticos	[—]
<i>cm</i>	Propiedad crítica de la mezcla	[—]
<i>con</i>	Continuidad	[—]
<i>f</i>	Fluido de estudio	[—]
<i>FA</i>	Difusión del combustible al ambiente	[—]
<i>g</i>	Fase gaseosa	[—]
<i>he</i>	Ecuación de energía	[<i>J/kg</i>]
<i>hole</i>	Orificio de tobera	[—]
<i>ideal</i>	Tiempo ideal	[<i>s</i>]
<i>inj</i>	Inyección	[—]
<i>k</i>	Especie k	[—]
<i>l</i>	Fase líquida	[—]
<i>max</i>	Diámetro Máximo	[<i>m</i>]
<i>min</i>	Diámetro Mínimo	[<i>m</i>]
<i>mol</i>	Molar	[—]
<i>mom</i>	Cantidad de movimiento	[—]
<i>new</i>	Radio nuevo de gota	[<i>m</i>]
<i>p</i>	Partícula	[—]
<i>real</i>	Tiempo real	[<i>s</i>]
<i>ref</i>	Referencia	[—]
<i>t</i>	Turbulencia	[—]

RESUMEN

Debido a su alta eficiencia los motores diesel, han sido usados ampliamente para aplicaciones en la generación de energía, ya que el motor diesel se compone de una unidad generadora autónoma que no exige calderas ni depende del suministro de gas del servicio público, además del uso de combustibles alternos como el biodiesel como una mejora al consumo de combustible y generación de emisiones, sin embargo es necesario profundizar en su desempeño dentro la cámara de combustión.

La presente tesis se enfoca en el análisis del biodiesel derivado del aceite usado de cocina como una alternativa viable y económica al consumo de combustible. A fin de demostrar su potencial es necesario caracterizar su composición y el efecto de sus propiedades de transporte y termo-físicas en el proceso de formación de mezcla en una cámara de combustión empleando un biodiesel puro, una mezcla con 20 % de biodiesel y 80 % diesel, una mezcla con 50 % biodiesel y 50 % diesel y finalmente una comparativa con diesel puro.

Existe una amplia variedad de investigaciones relacionadas con el tema de la inyección de combustible, de biodiesel de diversas fuentes y de diesel, además el uso de simulación numérica permite profundizar en el conocimiento donde la contraparte experimental está limitada, sin embargo a pesar de la existencia de una basta información relacionada con la penetración del chorro y el proceso de mezcla de un biodiesel existe ambigüedad en la dependencia de las propiedades de transporte y en cómo implementarlas en códigos CFD.

El objetivo de esta tesis es profundizar en la composición de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina, para esto es necesario determinar los ácidos grasos más

relevantes que componen el biodiesel empleando la técnica de cromatografía de gases, así como generar las propiedades de transporte y termo-físicas empleadas para la simulación de un chorro diesel mediante correlaciones empíricas de grupos funcionales para cada componente obtenido por la cromatografía, a su vez empleando la información recabada de las correlaciones empíricas se empleara en un análisis numérico de la penetración del chorro de un biocombustible y compararlo con la penetración del chorro de un diesel haciendo uso de un software libre.

Los resultados obtenidos para la composición demostraron la amplia gama de componentes dentro de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina, debido al tratamiento térmico que sufre el aceite de cocina. De esta composición es posible agrupar los isómeros de ácidos grasos en un único componente, puesto que las correlaciones empíricas no toman en cuenta la posición de los enlaces sino la cantidad y el tipo de doble enlace.

Los dobles enlaces y la cabeza de ester son una característica distintiva de los ácidos grasos, los cuales funcionan como fuentes energéticas generando un considerable aumento en las propiedades de transporte que afectan directamente el proceso de inyección, formación de mezcla y generación de emisiones, posteriormente empleando un análisis numérico es posible pronosticar un aumento en la penetración para cada biocombustible.

Se exhibe un incremento en la penetración del chorro para un milisegundo de tiempo de inyección, tiempo característico de un motor diesel, de 5.13 % para una mezcla con 20 % de biodiesel, 7.96 % para una mezcla con 50 % de biodiesel y un 8.20 % para un biodiesel puro. El aumento en la penetración del chorro impacta directamente en la eficiencia del motor, la generación de emisiones y el consumo de combustible, sin embargo para tiempos cortos de inyección este aumento es relativamente pequeño, por lo tanto si es posible emplear biodiesel puro siempre y cuando se disminuyan los tiempos de inyección.

ABSTRACT

Due to its high efficiency, diesel engines have been used widely for applications related with the power generation because the diesel engine consists of an autonomous generating unit that does not demand boiler or depends on gas supply of public service, besides the use of alternative fuels as biodiesel, as an improvement in the fuel consumption and emissions generation. However it's necessary get deepen knowledge about its performance inside the combustion chamber.

The present thesis is focus on the analysis of waste cooking oil biodiesel as a viable and economic to the fuel consumption alternative and to emissions generation. In order to demonstrate its potential, is necessary characterize its composition and the effect of the transport and thermo-physical properties in the mixture process formation in a combustion chamber using pure biodiesel, a blend with 20 % of biodiesel and 80 % of diesel, a blend with 50 % biodiesel and 50 % diesel and finally a comparative with pure diesel, in order to analyse the variations of the macroscopic parameters.

There is a wide variety of researches related to the fuel injection topic of biodiesel from several sources and also diesel, besides the use of numerical simulation that allows to deeper in the knowledge where the experimental counterpart are limited, however despite the existence of a wide information related with the spray penetration and the mixture process of a biodiesel there is ambiguity in the dependency of the transport properties and how implement in CFD codes.

The object of this thesis is to get deeper in the compositions of the waste cooking oil biodiesel; for this it is necessary determine the most relevant fatty acids that compo-

se the biodiesel using the gas chromatography technique, and generate the transport and thermo-physical properties used for the simulation of a biodiesel spray through empirical correlations of functional groups for each component obtained in the chromatography. The results achieved from the empirical correlations shall be used in a spray penetration numerical analysis of a biofuel and will be compared with the spray penetration achieved from a diesel using an open source CFD code. The proposed methodology is well known by the diesel community, however the methodology has been improved, especially a data base has been generated for an accurate prediction of the transport properties, without requiring any correlation, only necessary to know the biodiesel composition. This is one of the main contributions of the present study. The results obtained from the composition demonstrate a wide variety of components that compose a waste cooking oil biodiesel, due mostly to the heat treatment and the hydrolysis by the water present in the food that cooking oil suffers. From this composition it is possible to group the isomers of the fatty acids into one unique component, since the empirical correlations do not take into account the bond position only the quantity and the type of double bond.

The double bonds and the ester head are distinguishing features of the fatty acids, which act like energy sources giving a considerable increase in the transport properties that affect directly in the injection process, the mixture formation and emissions generation. Finally by using a numerical analysis it is possible to predict an increase in the penetration for each biofuel.

It is displayed an increase in the spray penetration for an injection time of one millisecond, a characteristic diesel engine time, of 5.13 % for a mixture with 20 % of biodiesel, 7.96 % for a mixture with 50 % of biodiesel and 8.20 % for pure biodiesel in comparison with pure diesel. The increment in the spray penetration, impacts directly in the engine efficiency, emissions generation and fuel consumption, however for early injection times this increment is relatively small, therefore it is possible to employ pure biodiesel as long as injection times were decreased. However the increase on the injection pressure ensures a better atomization by the reduction of the droplet diameter.

CAPÍTULO 1

MOTIVACIÓN

1.1. Biodiesel en el Mundo	1
1.2. Biodiesel en México	2
1.3. Estímulos socio-económicos	3
Bibliografía	5

1.1 BIODIESEL EN EL MUNDO

Las fuentes renovables también conocidos como fuentes alternas de energía, los cuales usan fuentes autóctonas que tienen el potencial de proveer energía con una generación nula o mínima de emisiones contaminantes o de gases invernadero. Esto convierte a las tecnologías renovables en productos económicos para la generación de energía mediante el uso de recursos naturales provocados por el efecto directo o indirecto de la tierra y el sol (solar, eólica, corrientes marinas, y biomasa), núcleo terrestre (geotérmica), entre otras.

Estas tecnologías suministran el 19.1% de la demanda de energía global. En la Figura: 1.1 se observa el consumo global de energía de la cual solo un porcentaje de la energía es de origen renovable, siendo solo el 19.1% del total los energéticos

renovables. De ese porcentaje se distribuyen en biomasa tradicional siendo el 9.1 % mientras que las energías renovables modernas consumidas en el mundo son el 10.1 % de las cuales solo el 0.8 % corresponde al uso de biocombustibles [1].

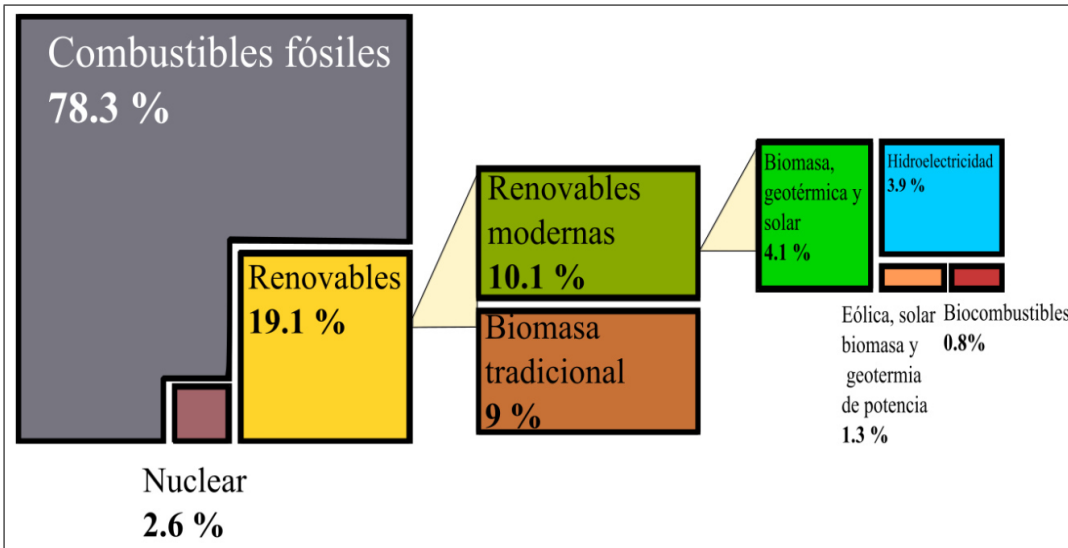


Figura 1.1: Consumo global estimado de energías renovables

Estos escenarios dependerán de las regulaciones medioambientales, las cuales son una característica del desarrollo sustentable de un país. La producción de biocombustibles es una solución alternativa a la producción de emisiones contaminantes y se espera que el consumo de biomasa para el 2020 sea aproximado a 1,791 millones de toneladas equivalentes de petróleo [2].

1.2 BIODIESEL EN MÉXICO

En México la producción del biodiesel a escala industrial es factible a mediano plazo como uso directo tanto para la generación de electricidad como sustituto de combustible para automoción en mezcla. Sin embargo existen muchas variantes para poder hacerlo factible, ya que análisis económicos muestran que los precios de producción del biodiesel son mayores que el costo comercializado de diesel.

Los costos de producción del biodiesel tienen un rango aproximado de entre \$5.3 para plantas industriales de producción exclusiva de biodiesel y \$12.4 para una planta de extracción de aceite y producción de biodiesel, siendo los insumos agrícolas un 59 % al 90 % del costo total de producción del biocombustible.

Como se comentó el principal gasto se encuentra en el sector agrícola para lo cual se debe de establecer un amplio criterio que involucre aspectos sociales, estímulos económicos y una amplia investigación [3].

1.3 ESTÍMULOS SOCIO-ECONÓMICOS

- Apoyar cultivos para adquirir porcentajes mínimos de materia prima que den valor agregado a la agricultura rural y contribuyan a la biodiversidad.
- Incentivos tributarios ofrecidos a las empresas que adquieran semillas oleaginosas producidas por agentes agrícolas de la región.
- Incentivar la formación y el desarrollo del mercado así como la investigación para la formación de recurso humano capacitado para la correcta aplicación de la tecnología y optimización.
- Organismos que creen programas para la producción de biodiesel que tengan tasas de interés preferentes para la producción.

Se estima que para llegar a mezclas B5 sería necesario instalar 10 plantas industriales con capacidad de 100,000 ton/año o 140 plantas pequeñas con capacidad de 5,000 ton/año. Esto representa inversiones estimadas de \$3,100 millones de pesos; con esta inversión se asegura el mercado nacional e internacional.

Estos son los inconvenientes económicos del biodiesel derivado del aceite virgen, es por eso que la forma correcta de introducción del biodiesel, viable y económica, es con el uso de materias primas de bajo costo tal es el caso de grasa y **aceites de cocina usados**, los cuales no solo promueven el reciclaje, sino que permiten disminuir la demanda biológica y química de oxígeno en las aguas residuales siendo además el precio por litro más competitivo según exponen Macera et al. [4] aproximado a \$7.9 con una inversión inicial de \$2,900 millones de pesos para cubrir la demanda.

El panorama en México no es desalentador puesto que las energías renovables están en marcha. Se estima que para el 2026 se tendrá un incremento de 20,544 MW de los cuales el mayor porcentaje será de energías eólicas e hidráulicas con un 59% y un 28% respectivamente, la biomasa (biodiesel, bioetanol, biogas, etc) tendrá un simbólico 4% aun así existen actualmente en el país 745 centrales generadores de electricidad a partir de biomasa [5].

1.3 BIBLIOGRAFÍA

- [1] J. Twidell, T. Weir, *et al.*, *Renewable energy resources*. Routledge, 2015.
- [2] D. Ayhan, “Biodiesel a realistic fuel alternative for diesel engines,” *ISBN-13: 9781846289941*, 2008.
- [3] R. A. Rodrigues and J. H. Accarini, *Programa Brasileiro de Biodiesel*. PETROBRAS, 2013.
- [4] O. Maserá, N. Rodríguez-Martínez, I. Lazcano-Martínez, L. Horta-Nogueira, I. Macedo, S. Trindade, D. Thrän, O. Probst, M. Weber, and F. Müller-Langer, “Potenciales y viabilidad del uso de bioetanol y biodiesel para el transporte en México,” *Sener/BID/GTZ Proyecto ME-T1007-ATN/DO-9375-ME y PN*, pp. 042148–7, 2007.
- [5] W. Lozano-Cardona and G. Quiroga, “Energías renovables,” *SE, Secretaria de economía*, 2013.

CAPÍTULO 2

EL BIODIESEL Y EL PROCESO DE INYECCIÓN

2.1. Introducción	8
2.2. Características macroscópicas de un biodiesel y un diesel	8
2.3. Composición química	15
2.3.1. Propiedades termo-físicas y de transporte	19
2.4. Fundamentos del proceso de mezcla en motores diesel .	22
2.5. Modelado del chorro	30
2.5.1. Propiedades termo-físicas y de transporte	33
2.5.2. Ecuaciones de gobierno	40
2.5.3. Modelado del chorro y la formación de la mezcla.	83
Bibliografía	102

2.1 INTRODUCCIÓN

El presente capítulo se divide en cuatro bloques entre los cuales se abordaran los temas más relevantes relacionados con el proceso de inyección de un biocombustible derivado del aceite usado de cocina. Una ligera introducción a la influencia que tiene sobre el proceso de mezcla y desempeño en el motor el biodiesel a causa de su naturaleza, una introducción a la composición característica de un biodiesel y la forma más convencional de producción, la propiedades de transporte y termo-físicas que rigen la formación de mezcla y las ecuaciones para su determinación, finalmente las ecuaciones de gobierno del fenómeno para el modelado de un chorro diesel mediante dinámica de fluidos computacional usando el código CFD OpenFOAM.

2.2 CARACTERÍSTICAS MACROSCÓPICAS DE UN BIODIESEL Y UN DIESEL

Como se menciona en el capítulo anterior el biodiesel puede ser ampliamente usado como combustible en motores diesel, tomando en cuenta todas sus limitantes, pero para poder llevar a cabo este cometido es necesario el estudio pertinente de su desempeño en el proceso de mezcla.

Amplios son los estudios donde se compara el diesel fósil con el biodiesel con el fin de determinar sus características para el proceso de mezcla, tales como la penetración y el ángulo las cuales juegan un importante papel en el desempeño del motor y la formación de emisiones. En la Figura: 2.1 se compara un estudio de un chorro diesel mediante simulación (a) y mediante experimentación (b).

Tanto en la simulación como en la experimentación existe una estrecha relación entre el desempeño, la penetración y la generación de emisiones con las propiedades del combustible, las cuales son resultado de la variada composición de metil esterres de

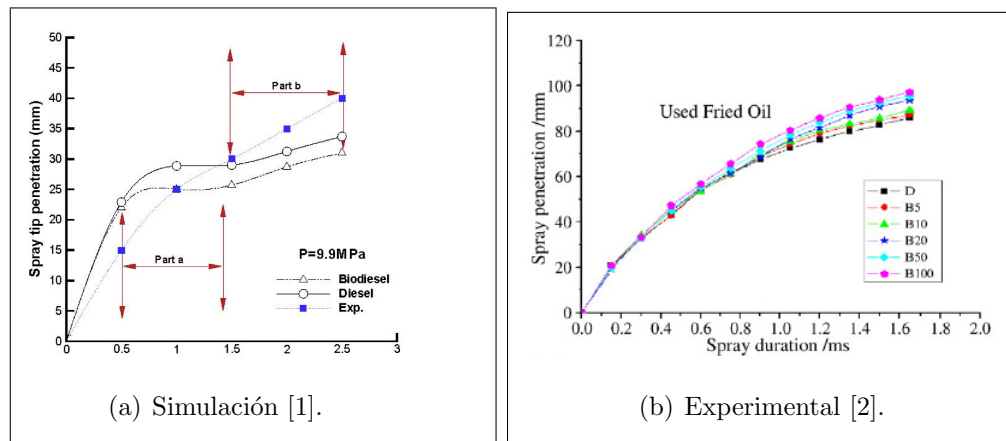


Figura 2.1: (a) Determinación de la penetración mediante el uso de simulación y (b) determinación de la penetración mediante experimentación entre un biodiesel y un diesel

ácidos grasos que conforman el combustible, esta variación en la estructura molecular del ácido graso incrementa las propiedades de transporte y termo-físicas.

Mohan et al. [3] caracterizan biodiesel derivado del aceite usado de cocina, con el cual experimentan para determinar la penetración donde se denota el característico aumento de propiedades debido a su composición, donde se concluye que el aumento de la penetración es debido al aumento de viscosidad haciendo hincapié como el aumento en la contrapresión afecta el desarrollo de la penetración, por otro lado, comenta que la presión de inyección no juega un papel en el desarrollo de la penetración en lo cual cae en discrepancia con He et al. [4], los cuales comentan que debido al aumento en las propiedades de transporte se tiene que incrementar el tiempo en la inyección y por consiguiente la presión de inyección del biodiesel tiende a ser mayor a la del diesel si se maneja la misma duración en la inyección o la misma masa en el sistema, debido a esto la penetración aumenta con el incremento de la duración de la inyección. Sin embargo a pesar del aumento de la inyección la penetración es muy similar en los primeros 1.5 ms de desarrollo a su vez He et al. concluyen que la alta densidad, viscosidad y tensión superficial le provoca mayor cantidad de movimiento y tamaño a las gotas lo que contribuye a la alta penetración.

Kegl et al. [5] realizaron pruebas con mezclas de biodiesel y diesel reportando aumentos en las presiones de inyección y duración de la inyección debido al incremento

del porcentaje de biodiesel en la mezcla a consecuencia de la alta viscosidad.

Yamane et al.[6] reportan la diferencia crítica entre las propiedades del biodiesel y el diesel fósil y la dependencia de la viscosidad, para la simulación del chorro diesel líquido a bajas temperaturas; en este estudio se cambia la presión de inyección y el flujo másico para compensar el aumento del módulo de bulk y la viscosidad.

Debido a este aumento en la presión de inyección los picos de inyección aumentan para un biodiesel.

Lin et al. [7] reportan que la variación en las propiedades requiere el aumento de la presión de un inyección entre un 5 y un 10% con esto se asegura que se introducirá al sistema la misma cantidad de masa de biocombustible bajo el mismo tiempo de inyección.

La variación de las propiedades de transporte están ligas a la fuente de procedencia del biocombustible, las cuales tendrán que ser determinadas exclusivas para un biodiesel en particular con una composición específica que depende del porcentaje de cada ácido graso en el biodiesel.

Efectos de las propiedades del biodiesel: Emisiones y Desempeño

En la subsección anterior se habló de la influencia de las propiedades de transporte en el desempeño del proceso de mezcla, las cuales no solo afectan la penetración sino además el desempeño del motor e impactan en la generación de emisiones.

- **Emisiones:**

En la Tabla: 2.1 se muestra como con el uso de biodiesel se pueden reducir las siguientes emisiones:

Cabe destacar que mediante el uso del biodiesel se reducen las emisiones de hidrocarburos sin quemar, las emisiones de monóxido de carbono y sulfatos, sin embargo existe un incremento significativo en las emisiones de óxidos de nitrógeno aproximado al 8% [9].

Mismo comportamiento con el material particulado y generación de hollín [10].

Regulado		
Tipo de emisión	B100	B20
Hidrocarburos sin quemar	-67 %	-20 %
Monóxido de Carbono (CO)	-48 %	-12 %
Material particulado	-47 %	-12 %
Óxidos de Nitrógeno (NO_x)	+10 %	+2 %
No regulado		
Sulfatos	-100 %	-20 %

Tabla 2.1: *Emisiones promedio de biodiesel en comparativa con un diesel fósil [8]*

Cabe mencionar que este comportamiento no es exclusivo del biodiesel derivado del aceite usado de cocina, en general las fuentes de procedencias no rigen enteramente el desempeño del combustible más bien lo que gobierna su comportamiento y desempeño es la composición y las propiedades de transporte y termo-físicas.

Un ejemplo de esto es el aumento en los óxidos de nitrógeno que esta influenciado por el incremento en el número de cetano de los biocombustibles lo cual incrementa la temperatura de la cámara ayudando al proceso de combustión pero generando variedad de NO_x [11].

Las propiedades aumentan la presión de inyección, además la baja compresibilidad del biodiesel y su alta viscosidad incrementan en las emisiones de NO_x . Otra alternativa para mitigar el efecto de las propiedades es el aumento en el tiempo de inyección con el objeto de poder suministrar la misma masa de combustible [12].

- **Desempeño:**

Existe una amplia variedad de efectos negativos relacionados con el uso de biodiesel en el motor, sin embargo el desempeño del motor es uno de los más primordiales.

En primera instancia se presenta una disminución en la potencia del motor y la eficiencia térmica esto debido al bajo poder calorífico del biodiesel, el cual indica que el combustible tarda más en ser calentado, por lo tanto, la razón de temperatura usada para calentar las gotas de biodiesel debe de ser mayor en comparación con las gotas de diesel fósil a la misma tasa de transferencia de calor, además las propiedades de transporte más elevadas son una razón más para la reducción en la eficiencia. La alta viscosidad, tensión superficial y presión de vapor son propiedades que afectan directamente el proceso de inyección y la formación de la mezcla con el aire [13]. En la Figura: 2.2 se muestra un comparativo de la disminución de potencia del motor por parte de biodiesel y de la capacidad calorífica.

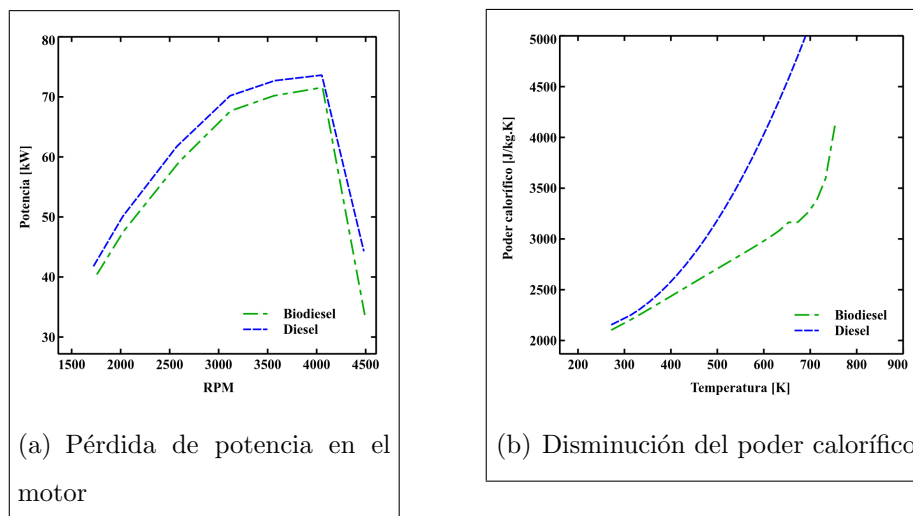


Figura 2.2: (a) Pérdida en la potencia del motor y (b) disminución del poder calorífico entre un biodiesel y un diesel [14]

Estas variaciones de pérdida de potencia son dependientes de la fracción de biodiesel en la mezcla: entre más biodiesel se tenga en la mezcla menor será la potencia entregada y mayor será el consumo de combustible para compensar la pérdida de potencia como se muestra en la Figura: 2.3. Adicionalmente a este aumento en el consumo también se presenta un incremento en la eficiencia

térmica al frenado conforme se aumenta el contenido de biodiesel en las mezclas esto debido a la alta lubricidad y viscosidad del biocombustible [15].

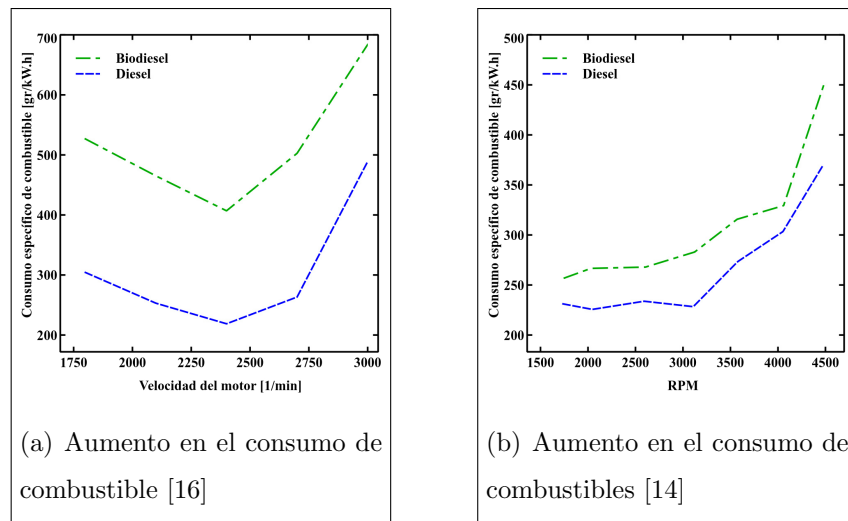


Figura 2.3: Aumento en el consumo de combustible

Debido al aumento en la temperatura por las cadenas oxigenadas y el bajo poder calorífico que demanda un aumento en la temperatura del cilindro, se puede tener una combustión más completa y eficiente y disminuir los hidrocarburos no quemados haciendo que grandes fracciones de carbón en el combustible se quemen produciendo humos menos opacos, se puede presentar una disminución aproximada del 23% en comparación con el diesel fósil, este mismo efecto puede ser notado en una disminución en la temperatura de los gases de escape aproximada al 6.5% la cual es debida a las propiedades y composición molecular del biodiesel, ya que al contar con un número de cetano más elevado ocurre un retraso en la ignición por lo tanto se alcanzan temperaturas superiores dentro de la cámara de combustión, las cuales pasan al sumidero de energía del sistema de enfriamiento provocando en los gases de escape una disminución de temperatura. En la Figura: 2.4 se muestra el aumento de combustible y la disminución en la temperatura de los gases de escape. Varios autores reportan el mismo comportamiento: [16, 17, 14] aun así existe discrepancia en este te-

ma del cual se requiere mayor investigación puesto que las condiciones de uso varían provocando cambios en las condiciones para la combustión [15].

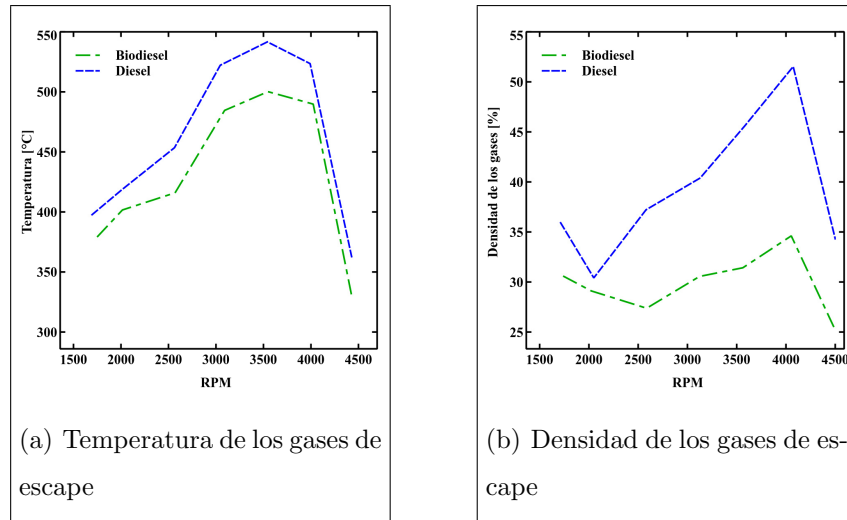


Figura 2.4: (a) Variación de la temperatura y (b) densidad de los gases de escape entre un biodiesel y un diesel [14]

2.3 COMPOSICIÓN QUÍMICA

Como se menciona en la sección anterior, las propiedades efectivamente afectan el desempeño del motor, debido a esto es la importancia de entender el por qué de estas propiedades, para eso es necesario comprender la composición del biodiesel y su forma de obtención.

El biodiesel está definido como una mezcla de mono-alquil ésteres de largas cadenas de ácidos grasos los cuales por su origen natural tanto animal como vegetal contienen mezclas de triglicéridos que contienen varios tipos de estos ácidos grasos saturados e insaturados, los cuales son más abundantes en los aceites vegetales que en las grasas animales. Los ácidos grasos más comunes de los triglicéridos son ácidos carboxílicos lineales y largos entre 12 y 20 carbonos. En la Figura: 2.5 se muestra un ejemplo de ácidos grasos los cuales son completamente diferentes a un hidrocarburo lineal que compone un diesel. Por ejemplo el ácido esteárico tiene un punto de fusión de 70°C teniendo este una configuración de 18 carbonos sin ningún doble enlace a diferencia del ácido linoleico el cual tiene un punto de fusión de -5°C teniendo una configuración lineal de 18 carbonos con la diferencia de dos dobles enlaces en el carbono 6 – 7 y 9 – 10.

La presencia de dobles enlaces *cis* (ácido graso insaturado) hace que el punto de fusión disminuya, esta disminución del punto de fusión de los ácidos grasos insaturados es debida a un doblamiento de la cadena al nivel del doble enlace [18].

Este es solo un ejemplo de cómo la composición y la estructura de las moléculas de los ácidos grasos afectan a las propiedades del aceite.

La composición de ácidos grasos es muy variada para ambos casos, dependiendo de la fuente, la limpieza del aceite, el proceso de transesterificación y purificación. Los aceites usados de cocina tienen propiedades diferentes a los aceites vírgenes, hecho debido a las altas temperaturas a las que están expuestas en un proceso normal de cocimiento y el agua presente en las comidas acelera el proceso de hidrólisis del tri-

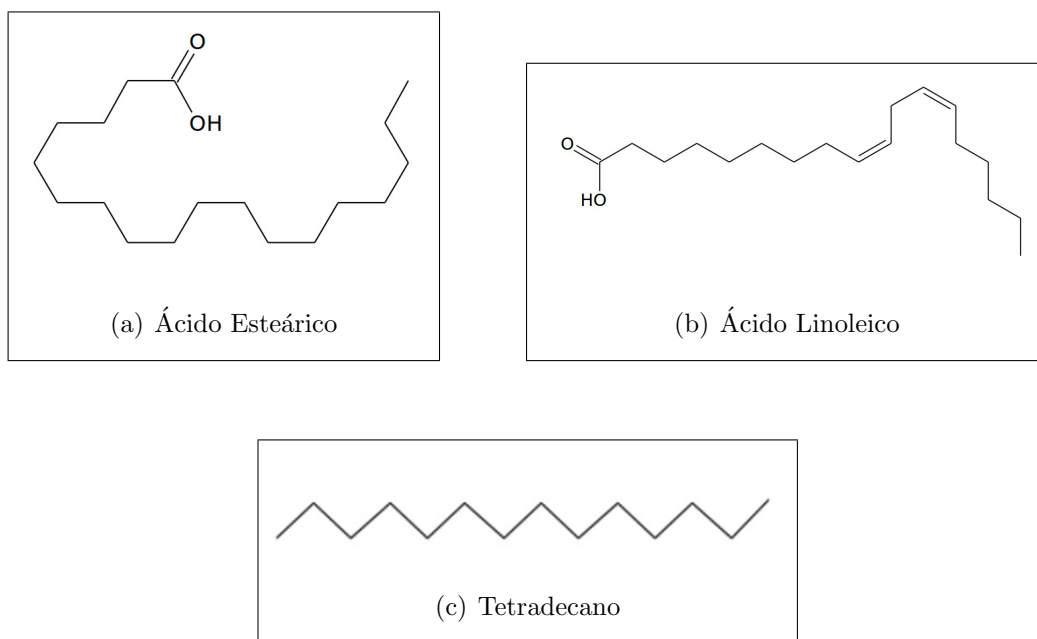


Figura 2.5: (a) Ácido saturado ,(b) Ácido insaturado y (c) Hidrocarburo lineal

glicérido incrementando el contenido de ácidos grasos libres contenidos en el aceite. Además se tienen problemas con la estabilidad de las mezclas, aumento de la viscosidad y densidad.

El método más común de producción de biodiesel es mediante la transesterificación, la cual consta de un triglicérido reaccionado con un alcohol y un catalizador, usualmente se usa hidróxido de sodio, esta reacción es reversible y usando un exceso de alcohol se tiende a favorecer el equilibrio del lado de los productos para incrementar la eficiencia de la reacción [19].

Son mucho los alcoholes usados en la reacción siendo el más común el metanol, por su bajo costo, sus ventajas químicas tales como su polaridad y su corta cadena de carbonos (CH_4O) el cual adiciona un metil (CH_3) generando así un metil ester de ácido graso [20].

En la Figura: 2.6 se muestra el mecanismo de reacción típico de una transesterificación donde se puede observar la sustitución nucleofílica en el grupo acilo por el mecanismo de adición-eliminación. El ión metóxido (CH_3O^-), proveniente del metanol y del catalizador de hidróxido de potasio, es suficientemente nucleofílico, es

decir rico en electrones, para atacar al grupo carbonilo ($C = O$) del éster finalmente el ion etóxido actúa como grupo saliente.

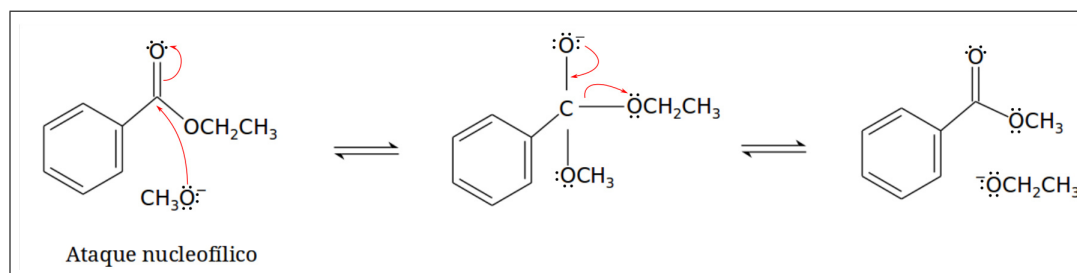


Figura 2.6: Mecanismo de reacción para la transesterificación asistida por un catalizador básico

La Figura: 2.7 se muestra el mecanismo de reacción más común por el cual la mayoría de los procesos de transesterificación ocurren a nivel industrial con rendimiento y pureza muy elevados entre un 70 % y 99 %, usando una razón molar de 6 : 1 de metanol/aceite y 1 % de hidroxido de potasio por espacio de una hora a una temperatura de reacción de $60^{\circ}C$ [21].

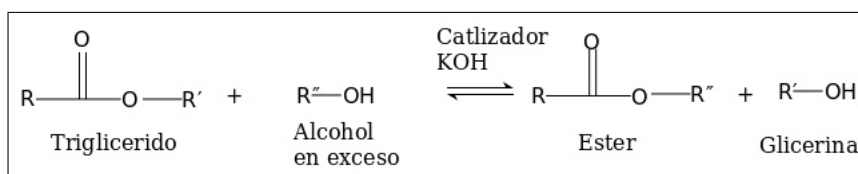


Figura 2.7: Proceso general de transesterificación

Como se comentó con anterioridad el biodiesel derivado del aceite usado de cocina tiene una composición y propiedades diferentes, esto debido a la variedad de procesos térmicos a los cuales son expuestos y por las diversas fuentes de aceite virgen de los cuales provienen. La Tabla: 2.2 muestra la composición más común de ácidos grasos presentes en el biodiesel.

Composición de ácidos grasos [% en peso]	
Mirístico (C14:0)	0.9
Palmítico (C16:0)	20.4
Palmitoléico (C16:1)	4.6
Esteárico (C18:0)	4.8
Oléico (C18:1)	52.9
Linoléico (C18:2)	13.5
Linolénico (C18:3)	0.8
Araquídico (C20:0)	0.12
Eicosénico (C20:1)	0.84
Behénico (C22:0)	0.03
Erúcico (C22:1)	0.07
Tetracosánico (C24:0)	0.04

Tabla 2.2: *Composición de ácidos grasos de esteres de un aceite usado de cocina* [22]

Los porcentajes en peso van a depender del proceso de transesterificación y de la fuente del aceite, sin embargo diversos autores reportan un comportamiento similar en composición lo cual es un buen indicador de la fuente del aceite [23].

Esta es una de las principales diferencias entre un aceite usado de cocina y uno proveniente de aceites vírgenes donde los porcentajes en peso varían principalmente por el motivo de la ruptura de cadenas y por el mayor uso de aceites insaturados los cuales son más fáciles de digerir y procesar para el cuerpo, ya que ayudan a la prevención de enfermedades cardiovasculares. En la Tabla:2.3 se muestra la composición característica del biodiesel derivado de diferentes fuentes.

Composición del Biodiesel. Varias fuentes [% peso]			
Ácido Graso	Aceite de cocina [24]	Aceite de Palma [25]	Aceite de soya [26]
Laurítico (12:0)	0	0.35	0
Mirístico (14:0)	0.42	1.08	0
Palmítico (16:0)	8.64	43.79	11
Palmitoléico (16:1)	0.91	0.15	0
Esteárico (18:0)	5.92	4.42	6
Oléico (18:1)	51.12	39.90	30.8
Linoléico (18:2)	11.68	9.59	53
Linolénico (18:3)	2.98	0.17	10.5
Araquídico (20:0)	0.59	0.38	0
Eicosenóico (20:1)	1.02	0	0
Behénico (22:1)	0.31	0	0

Tabla 2.3: *Composición de ácidos grasos para varias fuentes de aceite*

2.3.1 PROPIEDADES TERMO-FÍSICAS Y DE TRANSPORTE

Con el conocimiento de la composición de un biodiesel es posible determinar sus propiedades en base a su estructura molecular.

Para una correcta predicción del comportamiento de un biodiesel en el proceso de mezcla, existen cuatro parámetros claves, las características del flujo de aire en el cilindro, el chorro de combustible, el ángulo del chorro y finalmente las propiedades del combustible.

De los parámetros de especial importancia se encuentran el chorro de combustible y el ángulo del chorro los cuales afectan la ignición, combustión y la generación de contaminantes.

Tanto el chorro de combustible y el ángulo del chorro están en función de las propiedades termo-físicas y de transporte del combustible. Sin embargo, son pocos los estudios donde se ha desarrollado el impacto de las propiedades del biocombustible

en el proceso de mezcla [27, 28, 29].

El chorro de combustible esta típicamente influenciado por doce propiedades termo-físicas y de transporte, además de sus propiedades críticas, de estas doce propiedades, la viscosidad líquida, la densidad, la tensión superficial, la presión de vapor y la difusividad de vapor son las más relevantes en el proceso de la formación del chorro, la combustión y emisiones.

Estas propiedades dependen de los grupos moleculares presentes en el combustible, los que se mencionaron en la sección anterior.

Como se señalo un biodiesel consta de una mezcla de diversos ácidos grasos que varían acorde a la materia prima, debido a esto desarrollar modelos apropiados para la determinación del biodiesel es complicado por estas variaciones de composición. Normalmente se hace uso de un sustituto para poder facilitar los cálculos usándose el componente de mayor porcentaje en la mezcla lo que no es recomendable por el nivel de inexactitud que se puede presentar a la hora de desarrollar los modelos, debido a estos motivos se usa la composición completa del biodiesel y se determinan sus propiedades en base a los grupos funcionales en la molécula del hidrocarburo, una práctica que puede arrojar resultados muy satisfactorios.

En la Tabla: 2.4 se presenta una amplia variedad de autores los cuales presentan estudios relacionados con la generación de las propiedades de transporte y termo-físicas de manera experimental y con modelos empíricos en base a los grupos funcionales.

Muchos de estos métodos usan correlaciones empíricas que se basan en la estructura molecular del ácido graso para reproducir su propiedad de transporte y tener una estimación de ésta para su posterior uso. Se profundizará en estas propiedades en capítulos posteriores.

Propiedad termo-física o de transporte	Autores relacionados
Propiedades críticas	Mauricio Sales Cruz[30]
Densidad	Mustafa E. Tat[31], Lusi F. Ramirez Verduzco[32]
Presión de vapor	W. Yuan[33], James S. Chickos[34]
Entalpía de vaporización	Chein-Hsiun Tu[35]
Capacidad calorífica líquida	Mark J. van Bommel[36], Noor Azian Morad[37]
Capacidad calorífica del gas ideal	Dong Qian[38]
Segundo coeficiente virial	Gustavo A. Iglesias-Silva[39]
Viscosidad líquida	Roberta Ceriani[40], Hossein Nouredini[41]
Viscosidad del vapor	TIng-Horng Chung[42]
Conductividad térmica líquida	Richard A. Perkins[43]
Conductividad térmica del vapor	TIng-Horng Chung[42]
Tensión superficial	Cecil A.W. Allen[44]
Difusividad del vapor	America Petroleum Institute[45]

Tabla 2.4: *Métodos de estimación y datos experimentales para las propiedades termo-físicas y de transporte*

2.4 FUNDAMENTOS DEL PROCESO DE MEZCLA EN MOTORES DIESEL

En las secciones anteriores se enfatizó en el importante papel que juegan las propiedades de transporte en el proceso de mezcla y en el desempeño del motor, a su vez como la composición química del biodiesel influye en las propiedades físico-químicas, el proceso para la producción de biodiesel y la forma de obtención de las propiedades de transporte y termo-físicas. A continuación se explicará cómo estas propiedades afectan la física involucrada en el desarrollo de un chorro diesel.

Existen diferentes mecanismos de ruptura del chorro para la formación de la nube de atomización. En la Figura: 2.8 se muestra la formación del chorro la cual es usualmente caracterizada por la distancia entre la tobera y el punto de formación de la primera gota.

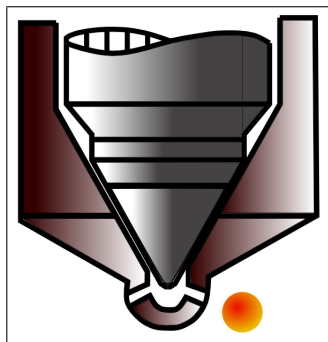


Figura 2.8: Proceso de formación de ruptura

Para poder dar una magnitud cuantitativa del proceso de desintegración, el cual puede ser descrito a través de los siguientes números adimensionales:

- El número de Weber líquido

$$We_l = \frac{u^2 \cdot D \cdot \rho_l}{\sigma} \quad (2.1)$$

- El número de Reynolds

$$Re = \frac{u \cdot D \cdot \rho_l}{\mu} \quad (2.2)$$

- El número de Weber de la fase gaseosa

$$We_g = \frac{u^2 \cdot d \cdot \rho_g}{\sigma} \quad (2.3)$$

donde u es la velocidad relativa, D es el diámetro de la tobera, ρ_l y ρ_g son la densidad del combustible y del gas circundante, respectivamente σ es la tensión superficial del combustible y μ es la viscosidad dinámica términos que incluyen todas las propiedades de transporte relevantes para la formación de la nube de atomización.

La ruptura de las gotas en un chorro diesel es causada por fuerzas aerodinámicas inducidas por la velocidad relativa entre el líquido y el gas circundante, estas fuerzas aerodinámicas generan un incremento inestable de ondas entre la interfaz gas/líquido lo que conlleva a la desintegración y la formación de gotas más chicas. Este comportamiento está expresado en el número de Weber de la fase gaseosa, el cual representa la razón de presión dinámica $P_{din}[N/m] = u_{rel}^2 \cdot D \cdot \rho_g$ y las fuerzas de tensión superficial.

En un chorro diesel la mayor parte el proceso de desintegración ocurre cerca de la tobera donde los números de Weber son altos, mientras que al ir viajando

dentro de la cámara los números de Weber disminuyen, esto debido a los diámetros reducidos de las gotas, a la alta tensión superficial la cual es función del diámetro, a la masa, a la evaporación del mismo combustible y a la reducción de la velocidad relativa debido a las fuerzas de arrastre.

En la Figura: 2.9 se muestra un chorro de combustible desarrollado completamente justo después de abandonar la tobera, siendo este el momento en el que empieza la ruptura del chorro.

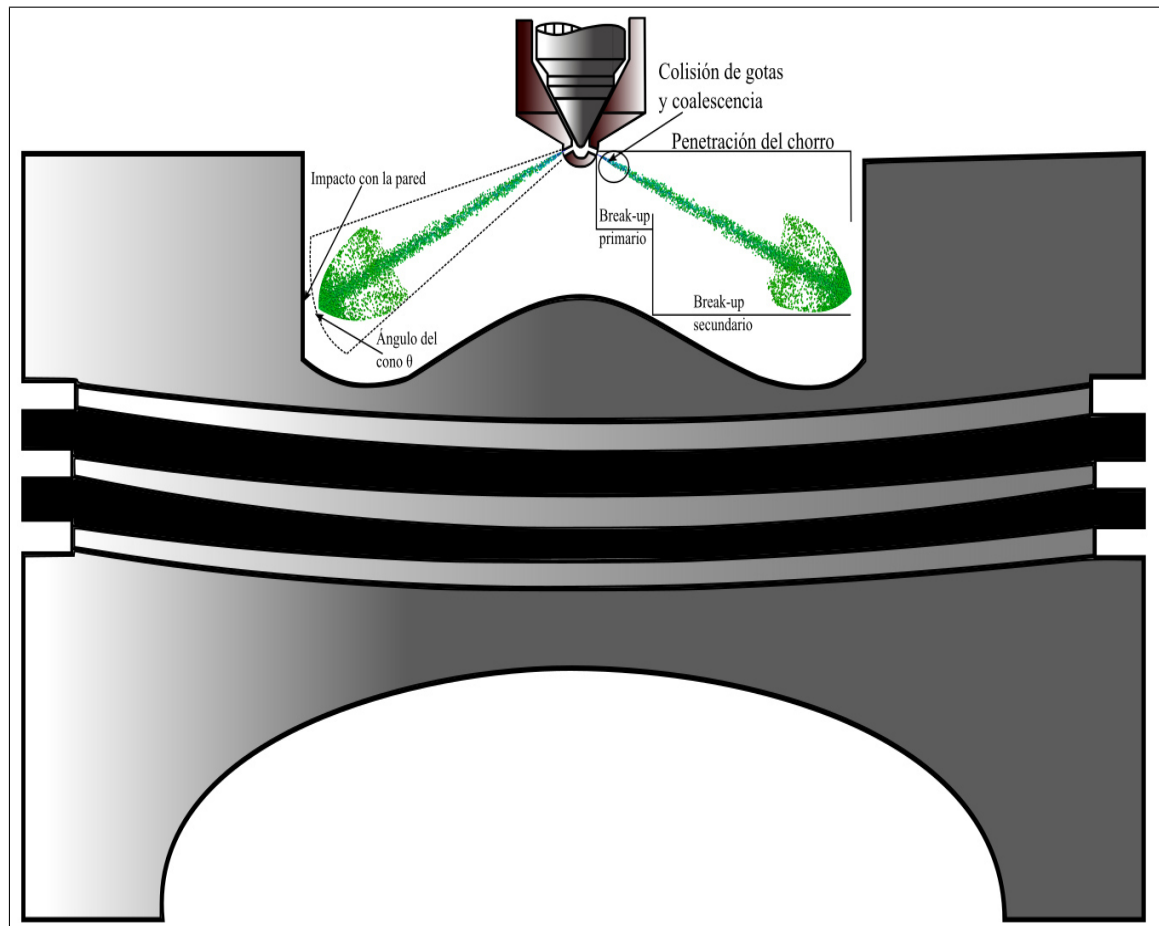


Figura 2.9: Ruptura del cono completo de un chorro diesel

El proceso por el cual se forma la ruptura ocurre en tres etapas:

- Ruptura primaria.

En esta primera etapa se forman largos ligamentos de gotas que forma un chorro denso cerca de la tobera como se muestra en la Figura: 2.10. En esta primera fase en la zona más densa del chorro existe la probabilidad de colisión, la cual cambia el diámetro de las gotas y la velocidad.

Estas gotas pueden romperse en gotas de menor tamaño, pero además pueden combinarse para formar gotas de mayor tamaño, a esto se le llama coalescencia de gotas.

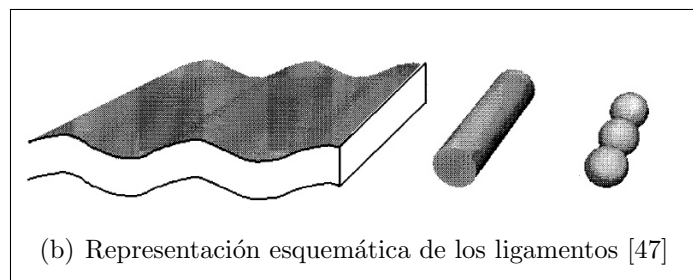
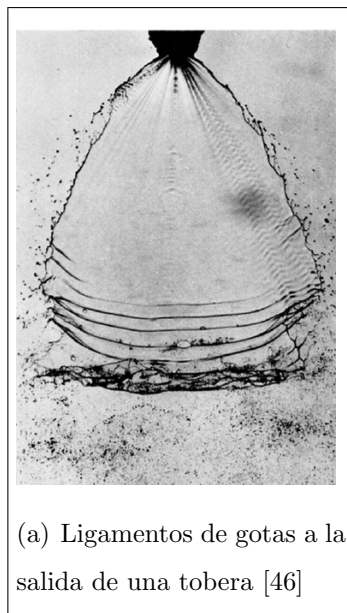


Figura 2.10: Representación de la formación de ligamentos y su desintegración

- Ruptura secundaria.

Es el proceso subsecuente por el cual pasan las gotas ya existentes para convertirse en gotas de menor tamaño debido a las fuerza aerodinámicas causadas por la velocidad relativa entre las gotas y el gas de la cámara. Estas fuerzas aerodinámicas desaceleran las gotas.

En la segunda zona el chorro está más diluido debido a la desintegración y a la evaporación, la cual es un factor impuesto por las condiciones en la cámara de combustión, tales como la temperatura y densidad del gas circundante.

- Punta del chorro.

Las gotas en esta zona experimentan la mayor fuerza de arrastre y son mucho más desaceleradas que las gotas que les siguen, esta incidencia de la punta del chorro se muestra en la Figura: 2.11 donde las gotas de la punta son continuamente remplazadas por gotas nuevas, es por esta razón el incremento de la penetración.

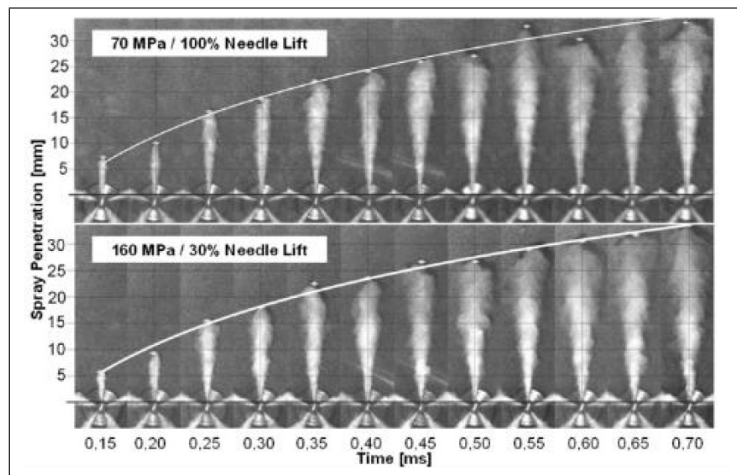


Figura 2.11: Desarrollo de un chorro diesel y aumento en la penetración [48], $P_{inj}=70$ MPa, $P_{back}=5$ MPa, $T_{N2}=710$ K

Esta penetración es mejor conocida como la distancia entre la tobera y el cilindro del pistón, dicha penetración es dependiente de un desarrollo temporal que ocurre en dos fases:

1. Primera etapa:

Empieza al inicio de la inyección con la apertura de la aguja del inyector ($t = 0$) y termina cuando el líquido empieza a desintegrarse del orificio de la tobera ($t = t_{break}$).

2. Segunda etapa:

La punta del chorro consiste en gotas y la velocidad de la punta es menor que la velocidad de la primera etapa. La punta continua penetrando en el gas debido a las gotas nuevas con alta energía cinética que siguen a las más lentas en la punta, que ya han intercambiado cantidad de movimiento con el gas y son reemplazadas. En la Figura: 2.11 se puede observar el aumento de la penetración de un chorro en función del tiempo.

Se puede concluir que entre más grande la penetración del chorro menor la energía de las nuevas gotas en la punta y más lenta la velocidad de éstas.

Se puede observar en la Figura: 2.12 como la penetración del chorro disminuye conforme penetra en la cámara de combustión esto debido a la baja velocidad de las gotas de la punta. Este comportamiento se respeta tanto para un biodiesel como para un diesel. Sin embargo **debido al aumento en las propiedades de transporte del biodiesel, este penetra más dentro de la cámara de combustión ya que demanda mayor presión dinámica por parte del gas circundante romper la tensión superficial del biodiesel, adicionalmente a esto la viscosidad hace que la presión de inyección sea mayor para poder ingresar la misma masa que para un diesel convencional.**

Otra medida característica para definir el éxito de una ruptura de un chorro, es el diámetro de una gota modelo, mejor conocido como *Sauter mean diameter* (SMD), en el cual su razón de volumen-superficie-área es igual a la suma del volumen de todas las gotas (V) en el chorro y a la suma del área (A) de la superficie de todas las gotas.

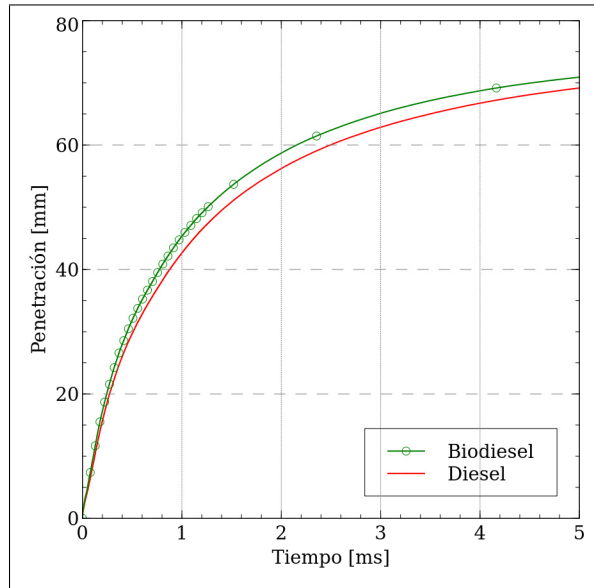


Figura 2.12: Evolución temporal de la penetración correspondiente a un chorro de biocombustible y combustible fósil

$$\left(\frac{V}{A}\right)_m = \frac{(\pi/6) \cdot SMD^3}{\pi SMD^2} = \frac{SMD}{6} \quad (2.4)$$

La ecuación 2.4 expone que entre menor sea el SMD, mayor será la superficie por unidad de volumen. Sin embargo un aumento en la superficie, mejora la efectividad de la evaporación y el proceso de formación de mezcla.

Adicionalmente el valor de SMD indica como son las condiciones de la cámara puesto que si el diámetro aumenta, quiere decir que hubo un aumento en la colisión y coalescencia de las gotas esto debido al aumento de la densidad del gas.

Un incremento en la presión de inyección resulta en un mejor proceso de atomización y por lo tanto en un decremento en el SMD; notablemente el aumento de la contrapresión afecta también en la penetración favoreciendo el proceso de mezclado. Roisman et al. [49] comentan que el gas debe de ser tomado como compresible, mientras que el combustible inyectado debe de ser tomado como incompresible, estos dos criterios se aplican a chorros inyectados a altas velocidades, los cuales desarrollan

ondas de impacto en el gas circundante el cual justo después de ser inyectado se propaga en el gas que no ha sido perturbado. En la Figura: 2.13 se muestra como la onda de impacto divide el gas en la cámara en una zona sin perturbar, la que considerada la zona superior al impacto, con una presión y densidad característica y la zona compresible, en la zona posterior del impacto, con una presión y densidad correspondiente.

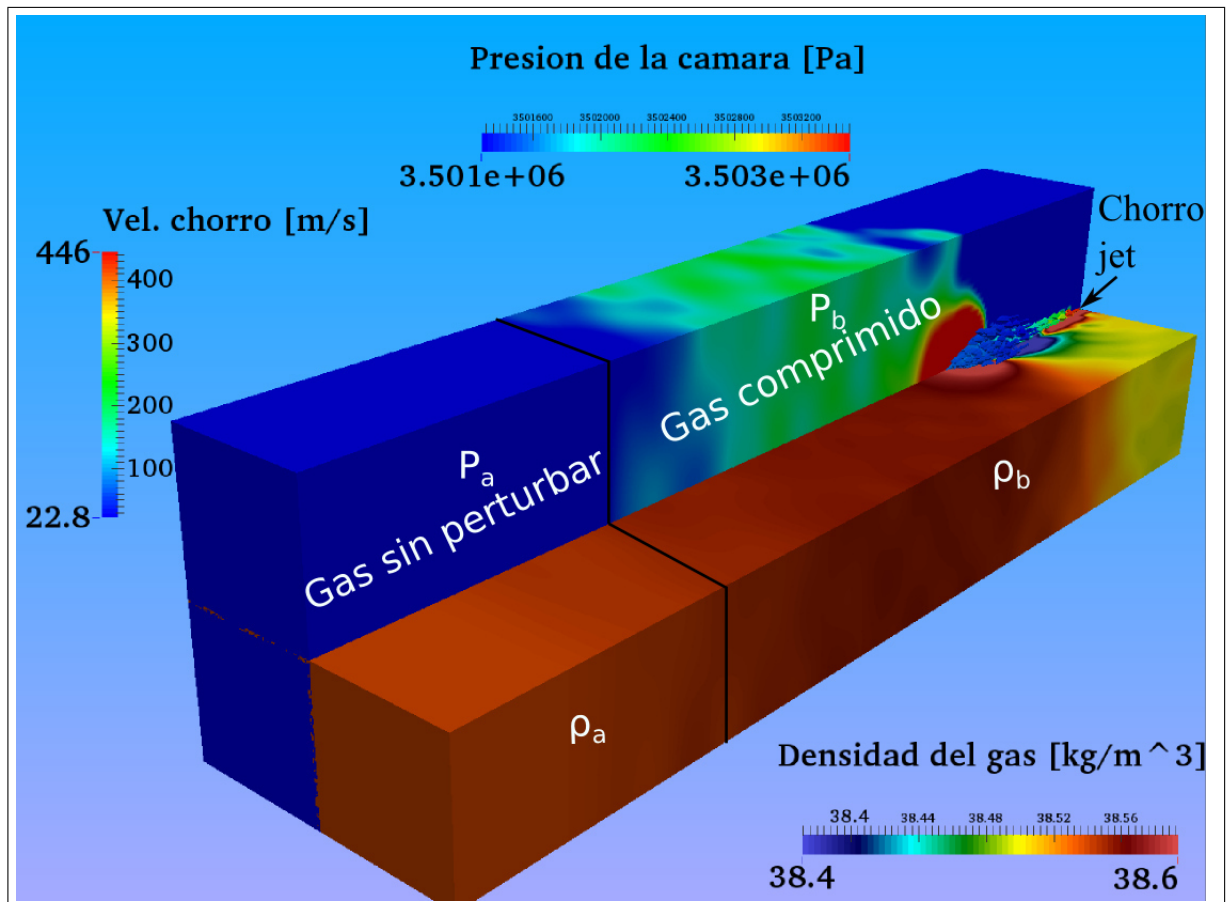


Figura 2.13: Esquema de la propagación de un chorro en la cámara de combustión

Es necesario comprender la física involucrada en el proceso de mezcla para tener un pleno conocimiento de cómo evaluar la propagación de chorro mediante herramientas de simulación, con esto se asegura la integración del fenómeno con las ecuaciones que lo gobiernan.

2.5 MODELADO DEL CHORRO

Con el objeto de poder validar la generación de las propiedades en una simulación es necesario introducir al lector en la forma particular de resolución de un chorro diesel, lo cual abarca la metodología de la aproximación Euleriana-Lagrangiana, donde el gas es descrito mediante las ecuaciones para fluidos compresibles RANS o promedio de Favre, mientras que el movimiento de las gotas son modeladas mediante una aproximación de rastreo.

Un chorro diesel es un caso particular de un flujo multifásico disperso originado por la inestabilidad de un líquido a alta presión emergiendo en una atmósfera gaseosa estable. El chorro está compuesto por una fase gaseosa *continua* y una fase de gotas líquidas *dispersas*. Se modelan grupos de gotas con las mismas propiedades conocidas como parcelas o parcelas, las cuales siguen los siguientes marcos de referencia.

Modelar dichos chorros puede llevar a dos caminos:

1. Primer camino: Concentrado en modelar los efectos del gas en las gotas
 - El modelo -primer camino- es usado para modelar turbulencia que no es, directamente influenciada por las gotas, está presente en las ecuaciones en el modelo de turbulencia y son idénticas a aquellas usadas para un flujo gaseoso puro
2. Two way : Modelando ambos efectos en consideración
 - El modelo -two way- es usado para promediar las propiedades de un flujo.

En este caso las gotas son tratadas como puntos-partículas con propiedades características, el problema es trazar su posición en el dominio, ya que la posición en el espacio de una partícula de interés en función del tiempo, es información muy valiosa y necesaria puesto como subproducto de dicha información se puede obtener

velocidad, aceleración, cambio de radio de las gotas, entre otras; la información del flujo está en función de la partícula y el tiempo, debido a esto es llamada descripción *Lagrangiana* componente clave para localizar la travesía de una partícula acorde a la segunda ley de Newton, por lo tanto:

- Posición $x = x(\text{partícula}, \text{tiempo})$
- velocidad $u = dx(\text{partícula}, \text{tiempo})/dt$
- aceleración $a = d^2x(\text{partícula}, \text{tiempo})/dt^2$

La aproximación Lagrangiana es usada para la descripción de fases dispersas como chorros que consisten en gotas de líquido pero no para fluidos continuos. En esta fase la densidad del fluido de interés es cero en el volumen entre los dos fluidos, y para el cual la posición exacta y el tamaño del elemento debe ser conocido de modo que se pueda describir la distribución espacial y temporal, por lo tanto la derivada temporal en la ecuación 2.5 de cualquier cantidad de flujo en función de la partícula y el tiempo describe una propiedad de un elemento del líquido puesto que todas las cantidades de flujos son únicamente función de la partícula y el tiempo.

$$\frac{dF(\text{partícula}, \text{tiempo})}{dt} = \frac{DF}{dt} \quad (2.5)$$

Cabe recordad que todas las cantidades de flujo son únicamente función de la partícula y el tiempo a diferencia de la aproximación Euleriana, la cual describe las cantidades de flujo F en función del punto $x=(x_1, x_2, x_3)$ en espacio y tiempo donde dF es:

$$dF(t, x_1, x_2, x_3) = \frac{\partial F}{\partial t} dt + \frac{\partial F}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial F}{\partial x_3} dx_3 \quad (2.6)$$

Si se deriva en función dF entre dt tenemos:

$$\frac{dF(t, x_1, x_2, x_3)}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} \frac{dt}{dt} + \frac{\partial F}{\partial x_1} \frac{dx_1}{dt} + \frac{\partial F}{\partial x_2} \frac{dx_2}{dt} + \frac{\partial F}{\partial x_3} \frac{dx_3}{dt} \quad (2.7)$$

Siendo $dx_i/dt = u_i$, por lo tanto la derivada material se puede leer de la siguiente manera:

$$\frac{DF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x_1} u_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} u_2 + \frac{\partial F}{\partial x_3} u_3 \quad (2.8)$$

donde $u = (u_1, u_2, u_3)$ siendo el vector de la velocidad. La aproximación Lagrangiana y Euleriana es aplicada a ciertos problemas especiales que pueden tener varios resultados, por ejemplo la aceleración de un elemento de líquido pasando por un punto en el espacio, **Descripción Lagrangiana**, debe ser idéntica a la aceleración resultante predicha para ese punto en particular en la **Descripción Euleriana** como se muestra en la Figura 2.14.

A continuación se dan más detalles acerca de la ecuación 2.8. La primera derivada parcial en el lado derecho de la ecuación anterior ($\frac{\partial F}{\partial t}$) es la derivada local, la cual describe el cambio temporal de la cantidad de flujo F en un punto fijo en el espacio siendo ésta igual a cero si el flujo es estático, sin embargo la velocidad siempre será mayor aguas abajo (punto B) que aguas arriba (punto A) y un elemento pasando aguas arriba (punto A) experimentará un cambio de aceleración adicional que no está incluido en la derivada local. La aceleración adicional está expresada por los tres términos remanentes a la derecha de la ecuación anterior, juntos forman la derivada convectiva. Es aquí la utilidad de la descripción Euleriana la cual permite distinguir entre una parte local y una convectiva de la derivada material, mientras que la descripción Lagrangiana no.

Dependiendo de la formulación usada las fases Euleriana y Lagrangiana pueden interactuar entre sí de muchas maneras mediante el intercambio de cantidad de movimiento y energía a través del flujo de cantidad de movimiento y el flujo de energía

como términos fuentes [50].

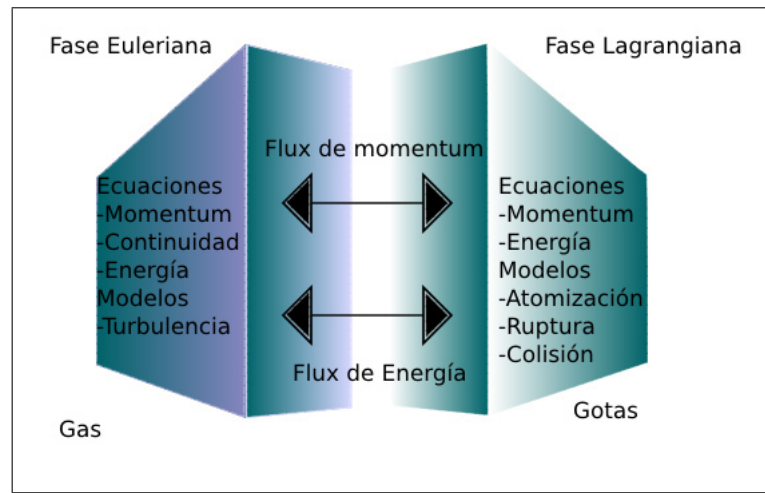


Figura 2.14: Formulación de la formación de un chorro Euleriano-Lagrangiano

A continuación se presentan las ecuaciones que gobiernan este fenómeno empezando por la generación de propiedades, las ecuaciones básicas de gobierno y su interpretación y finalmente las ecuaciones que dan un panorama sobre la formación de la mezcla.

Estas ecuaciones son ampliamente usadas para la simulación de un chorro, en este caso en particular en el código CFD OpenFOAM.

2.5.1 PROPIEDADES TERMO-FÍSICAS Y DE TRANSPORTE

Como se mencionó anteriormente, uno de los puntos claves para poder entender el comportamiento de un biocombustible en un motor es la estructura del chorro y de la fase vapor, las cuales son gobernadas primordialmente por las propiedades termo-físicas y de transporte del combustible. El entendimiento de estas propiedades es crucial para poder diferenciar y modelar un combustible fósil y un biocombustible. Como se mencionó en la sub-sección de propiedades, son trece las propiedades de interés que se estudian en este trabajo: las propiedades críticas, densidad, presión

de vapor, entalpía de vaporización, capacidad calorífica líquida, capacidad calorífica del gas ideal, segundo coeficiente virial, viscosidad líquida, viscosidad gaseosa, conductividad térmica líquida, conductividad térmica gaseosa, tensión superficial y difusividad de vapor, de las cuales las más relevantes para el proceso de mezcla son: la densidad, la viscosidad, la presión de vapor y la tensión superficial.

El código CFD OpenFOAM, cuenta con una librería para el cálculo de cada una de las propiedades mencionadas de las cuales únicamente ocupa coeficientes para los modelos establecidos, lo cual es una herramienta muy útil para el cálculo de propiedades de componentes complejos o mezclas con varios componentes, puesto que si se conocen estos coeficientes se puede reducir el tiempo de estimación de las propiedades, ya que generar un modelo matemático que se ajuste a una amplia gama de componentes es tarea ardua y compleja.

El código CFD OpenFOAM hace el calculo de las propiedades del líquido mediante los siguientes grupos de ecuaciones proporcionadas por el sistema nacional de información de referencia estándar y por el instituto Americano de ingenieros químicos por su siglas en ingles NSRDS-AICHE (National Standard Reference Data Series-American Institute of Chemical Engineers), aun así estas relaciones pueden encontrarse en la literatura. A continuación se presentan los modelos empleados por el código CFD OpenFOAM para el cálculo de las propiedades, donde las letras cursivas representan el código mientras que el código en su versión algebraica se encuentra escrito de manera ordinaria:

- Densidad Líquida

Función NSRDS No.5:

$$\rho = a / \text{pow}(b, 1 + \text{pow}(1 - T/c, d))$$

$$\rho = \frac{A}{B^{1+(1-\frac{T}{c})^D}} \quad (2.9)$$

donde A , B y D son los coeficientes del modelo. El coeficiente C es la temperatura crítica del componente o de la mezcla para esta ecuación en particular. Esta ecuación puede ser encontrada en Spencer et al. [51] una fuente más reciente puede ser encontrada en [52]

- Presión de vapor

Función NSRDS No.1:

$$pv = \exp(a + b/T + c \cdot \log(T) + d \cdot \text{pow}(T, e))$$

$$P_{vap} = e^{(A + \frac{B}{T} + C \cdot \log T + D \cdot T^E)} \quad (2.10)$$

Ecuación evaluada por Vetere et al. [53] una fuente más reciente puede ser encontrada en [52].

- Calor de vaporización

Función NSRDS No.6

$$hl = a \cdot \text{pow}(1 - Tr, ((e \cdot Tr + d) \cdot Tr + c) \cdot Tr + b)$$

$$hl = A \cdot (1 - Tr)^{(E \cdot Tr^3 + D \cdot Tr^2 + C \cdot Tr + B)} \quad (2.11)$$

donde:

$$Tr = \frac{T}{T_c} \quad (2.12)$$

Esta ecuación puede ser encontrada en [52]

- Capacidad calorífica líquida y Entalpía

Función NSRDS No.0

$$C_p = (((f \cdot T + e) \cdot T + d) \cdot T + c) \cdot T + b) \cdot T + a$$

$$C_{p_l} = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + E \cdot T^4 + F \cdot T^5 \quad (2.13)$$

Esta ecuación puede ser encontrada en [52]

- Capacidad calorífica del gas ideal

Función NSRDS No.7

$$C_{p_g} = a + b \cdot \text{sqr}((c/T)/\sinh(c/T)) + d \cdot \text{sqr}((e/T)/\cosh(e/T))$$

$$C_{p_g} = A + B \cdot \left(\frac{C}{\sinh \frac{C}{T}}\right)^2 + D \cdot \left(\frac{E}{\cosh \frac{E}{T}}\right)^2 \quad (2.14)$$

Ecuación evaluada por Jaeschke et al. [54] una fuente más reciente puede ser encontrada en [52].

- Segundo Coeficiente virial

Función NSRDS No.4

$$B = a + b/T + c/\text{pow}(T, 3) + d/\text{pow}(T, 8) + e/\text{pow}(T, 9)$$

$$B = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^3} + \frac{D}{T^8} + \frac{E}{T^9} \quad (2.15)$$

Una relación similar usada para la determinación de la densidad en [52].

- Viscosidad dinámica

Función NSRDS No.1

$$\mu = \exp(a + b/T + c \cdot \log(T) + d \cdot \text{pow}(T, e))$$

$$\mu = e^{(A + \frac{B}{T} + C \cdot \log T + D \cdot T^E)} \quad (2.16)$$

La viscosidad como una correlación en función de la temperatura fue propuesta por Teja et al. [55] como ecuación de referencia para el cálculo de viscosidad de mezclas siendo esta análoga en su forma extendida a la ecuación para la presión de vapor de Riedel 2.10 evaluada por Vetere et al. [53] además dicha ecuación puede ser encontrada en [52].

- Viscosidad dinámica de vapor

Función NSRDS No.2

$$\mu_g = a \cdot \text{pow}(T, b) / (1.0 + c/T + d/\text{sqr}(T))$$

$$\mu_g = \frac{A \cdot T^B}{1 + C/T + D/T^2} \quad (2.17)$$

Esta ecuación es usada para gases a baja densidad, usualmente pueden ser correlacionada con la ecuación 2.17 para la cual a bajos rangos de temperatura, los parámetros C y D pueden ser descartados siendo el logaritmo natural de la viscosidad razonablemente lineal con el el logaritmo natural de la temperatura [52].

- Conductividad térmica líquida

Función termo-física NSRDS No.0

$$K = (((f \cdot T + e) \cdot T + d) \cdot T + c) \cdot T + b) \cdot T + a$$

$$k = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + E \cdot T^4 + F \cdot T^5 \quad (2.18)$$

La conductividad térmica en función de la temperatura es un polinomio de segundo orden exactamente igual a la correlación para la capacidad calorífica, las cuales predicen resultados con un 0.2% en un amplio intervalo de temperaturas [56].

- Conductividad térmica de vapor

Función NSRDS No.2

$$Kg = a \cdot \text{pow}(T, b) / (1.0 + c/T + d/\text{sqr}(T))$$

$$k_g = \frac{A \cdot T^B}{1 + C/T + D/T^2} \quad (2.19)$$

Tanto la viscosidad de la fase gaseosa como la conductividad térmica de la fase gaseosa pueden ser correlacionadas con la misma ecuación, debido a que ambas están en función del momento dipolo de las moléculas del biodiesel siendo la conductividad térmica de la fase gaseosa dependiente de la viscosidad de dicha fase [42].

- Tensión superficial

Función NSRDS No.6

$$\text{sigma} = a \cdot \text{pow}(1 - Tr, ((e \cdot Tr + d) \cdot Tr + c) \cdot Tr + b)$$

$$\sigma = A \cdot (1 - Tr)^{(E \cdot Tr^3 + D \cdot Tr^2 + C \cdot Tr + B)} \quad (2.20)$$

donde:

$$Tr = \frac{T}{T_c} \quad (2.21)$$

La correlación de Stefan establece la dependencia de la entalpía de vaporización con la tensión superficial, debido a esto es posible utilizar la misma función termodinámica que la entalpía de vaporización para el cálculo de la tensión superficial [57].

- Difusividad de vapor

Función termo-física del American Petroleum Institute (API)

$$D = 3.6059e - 3 * (pow(1.8 * T, 1.75)) * alpha / (p * beta)$$

$$\mathfrak{D} = 3.6059 \times 10^{-3} \cdot (1.8 \cdot T^{1.75}) \cdot \frac{\alpha}{p \cdot \beta} \quad (2.22)$$

donde:

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{PM_{soluto}} + \frac{1}{PM_{solvente}}} \quad (2.23)$$

$$\beta = (\Sigma(V1^{1/3}) + \Sigma(V2^{1/3}))^2 \quad (2.24)$$

$\Sigma(V_i)$ representa la suma de los volúmenes de difusión atómica del componente j .

La correlación en función de la temperatura usada por OpenFOAM para el cálculo de la difusividad de vapor es tomada de [45].

Una práctica muy común es la substitución de los volúmenes de difusión atómica por la de un substituto en el caso del código CFD OpenFOAM usan lo volúmenes del n-heptano, con el fin de facilitar el cálculo, práctica que no será realizada para el desarrollo de esta propiedad en esta tesis, en su defecto se generaran los volúmenes de difusión atómica específicos para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

2.5.2 ECUACIONES DE GOBIERNO

Una vez determinadas las propiedades del fluido se pueden entender las ecuaciones que gobiernan la fase continua y la fase dispersa. Para el caso de un chorro diesel la fase gaseosa consta de varios componentes (nitrógeno, oxígeno, combustible, vapor, entre otras). Debido a esto existe la necesidad de agregar términos adicionales a las ecuaciones de conservación donde se involucren los cambios en la concentración de especies debido a la difusión másica y a las reacciones químicas.

Fase continua (Gaseosa).

La fase continua es denominada para todas las fases gaseosas presentes en el dominio del flujo. El conjunto de ecuaciones de gobierno están conformadas por la ecuación de continuidad, de especie, de cantidad de movimiento y de energía, mientras que la fase dispersa contribuiría como fuente de sumidero para cada ecuación de la fase gaseosa. Las ecuaciones de conservación deben modificarse por la interacción del chorro, puesto que el gas ya no consiste únicamente en una sola especie sino en diferentes especies como el combustible, emisiones entre otras. Las ecuaciones de gobierno de la fase gaseosa fueron deducidas a partir de los principios usados por Poinson et al. [58] y por Piccini et al. [59] en dado caso de haber usado una fuente adicional se específica en donde fue usada.

La ecuación de continuidad

El primer paso en la derivación de la ecuación de conservación de masa es escribir un balance de masa para un elemento fluido como se muestra en la Figura: 2.15:

Razón de incremento de masa en el elemento fluido	=	Tasa neta de flujo de masa en el elemento fluido
---	---	--

Figura 2.15: Balance de masas

La razón de incremento de masa en el elemento fluido está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \delta x \delta y \delta z) \quad (2.25)$$

Seguido es necesario tomar en consideración la razón de flujo de masa a través de la cara del elemento, el cual está dado por el producto de la densidad, el área y los componentes de la velocidad normales a la cara del elemento. En la Figura: 2.16 se puede observar el elemento fluido de estudio.

El flujo que está directo dentro del elemento produce un incremento de masa en el elemento, por lo tanto adquiere un signo positivo, mientras que aquel que se sale del elemento adquiere un signo negativo.

En la Figura: 2.16 se muestra la razón de incremento de masa dentro del elemento es igualada a la razón neta de flujo de masa dentro del elemento a través de las caras. Todos los términos del balance resultante de masa son arreglados al lado izquierdo y divididos por el elemento de volumen $\delta x \delta y \delta z$ esto lleva a que el balance de masa del elemento fluido quede de la siguiente manera:

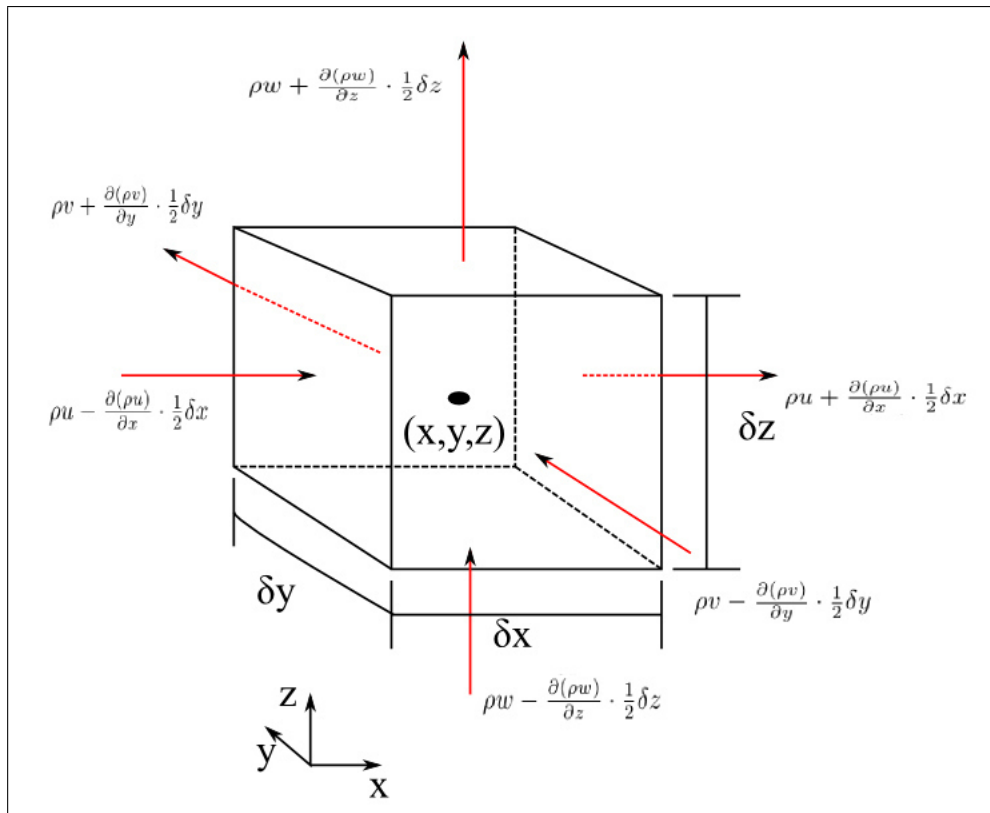


Figura 2.16: Flujo de masa de entrada y salida en un elemento fluido

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho u) = 0 \quad (2.26)$$

La ecuación 2.26 es la ecuación de conservación de masa en estado transitorio para las tres dimensiones siendo el primer término del lado izquierdo la razón de cambio de densidad con respecto al tiempo (masa por unidad de volumen), mientras que el segundo término describe el flujo neto de salida de masa del elemento a través de las fronteras mejor conocido como término convectivo.

Sin embargo en un elemento multi-físico donde se adiciona o pierde masa la ecuación de continuidad no puede estar igualada a cero, por lo tanto es necesario agregar la contribución de este aumento o disminución de masa como un término fuente [61].

En la Figura: 2.17 se muestra el código CFD OpenFOAM la ecuación de continuidad para un chorro de dos fases el cual se modifica de la siguiente manera:

```

32 {
33   fvScalarMatrix rhoEqn
34   (
35     fvm::ddt(rho)
36     + fvc::div(phi)
37     ==
38     parcels.Srho(rho)
39     + fvOptions(rho)
40   );
41

```

Figura 2.17: Código empleado en la resolución de la continuidad para la densidad

El siguiente código expuesto en la Figura: 2.17 es la representación de la ecuación de continuidad empleada por el código CFD OpenFOAM; visto de forma algebraica quedaría representado por la ecuación: 2.27

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot U) = S_{con} \quad (2.27)$$

Donde:

- ϕ = flujo de velocidad.
- $\frac{d}{dt}(\rho)$ = La razón del cambio en el incremento de la densidad en el volumen de control
- $\text{div}(\phi)$ = La razón del flujo de masa pasando por la superficie de control
- $\text{parcels.Srho}(\rho)$ = El término fuente debido a la evaporación del chorro líquido

La ecuación de conservación de especies

Si se tiene una flujo con más de una especie de interés, en esta caso el combustible se evapora mientras avanza por el dominio, se está hablando de una ecuación de transporte de especies para un componente en esta mezcla binaria.

La ecuación de conservación de especies se expresa de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho(u_i + V_k) Y_k] = S Y_k \text{ para } k = 1, N \quad (2.28)$$

donde V_k es la velocidad de difusión del i -componente de la especie k y $S Y_k$ la velocidad de reacción de las especies. Por definición se tiene:

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_k = 0 \quad (2.29)$$

Las velocidades de difusión son obtenidos bajo la aproximación de una mezcla diluida en la cual se considera que la concentración de una especie es mucho más grande que la otra, como es el caso de un chorro penetrando en una cámara con N_2 con una masa superior. Para esto es necesario recurrir a la ley de Fick para difusión de múltiples especies:

$$V_k Y_k = -\mathfrak{D}_t \Delta X_k \quad (2.30)$$

La ecuación 2.30 es la primera ley de Fick de la difusión expresada para la densidad de flujo molar de difusión. Esta relación establece que la especie \mathbf{k} se mueve con relación a la mezcla en la dirección decreciente de la fracción molar de \mathbf{k} , análogo a la forma en la que fluye el calor por conducción en dirección de la temperatura decreciente teniendo ésta las mismas unidades que la viscosidad cinemática y la difusión térmica [60].

Sin embargo la conservación de masa es una tarea complicada cuando se trata de flujos reactivos por la cantidad de N especies presentes en la ecuación 2.28, siendo obvio que $\sum_{k=1}^N Y_k = 1$, ecuación que también forma parte de las N ecuaciones con sus N incógnitas (Y_k). Si se agregan todas las posibles especies de una combustión a la ecuación 2.28 y si se emplea la identidad 2.29 la ecuación de conservación de masa se ordena de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i}) + S Y_k = 0 \quad (2.31)$$

La ecuación 2.31 muestra que hay únicamente N ecuaciones independientes para cada N ecuaciones de especies. En este caso el término de velocidad de difusión de la ecuación 2.31 tiene que cambiar para no conservar el balance global de masa y que no tienda a cero, mediante el cambio de velocidad de difusión de especie por $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \sum_{k=1}^N \mathfrak{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i})$.

Sin embargo resolver especies es complicado, por lo tanto para la resolución de la ecuación de conservación es necesario resolver la de continuidad para una sola ecuación de especie $N - 1$, mientras que las últimas fracciones másicas de las especies se obtienen del siguiente modelo:

$$Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} Y_k \quad (2.32)$$

La ecuación 2.32 absorbe todas las inconsistencias posibles introducidas por la ley de Fick en la ecuación 2.30. Esta simplificación solo puede ser usada para flujos altamente diluidos como sería el caso de una mínima fracción de combustible diluido en una fracción de Y_{N_2} suficientemente grande, siendo este el caso de estudio. Por lo tanto, la ecuación de conservación de especies queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \mathfrak{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}) + S Y_k \quad (2.33)$$

Tanto el término convectivo ($\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k)$) como el difusivo ($\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \mathfrak{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i})$) de la ecuación 2.33 están evaluados mediante un promedio de densidades de los cuales el término difusivo trata los flujos turbulentos, el cual es análogo a la viscosidad turbulenta. Por lo tanto, la ecuación de conservación de especies empleada por el código CFD OpenFOAM queda descrita como muestra la Figura: 2.18

```

26         fvm::ddt(rho, Yi)
27         + mvConvection->fvmDiv(phi, Yi)
28         - fvm::laplacian(turbulence->muEff(), Yi)
29         ==
30         parcels.SYi(i, Yi)
31         + combustion->R(Yi)
32         + fvOptions(rho, Yi)

```

Figura 2.18: Código empleado en la resolución de la ecuación de conservación de especies

El código empleado para la resolución de la ecuación de conservación muestra un término difusivo turbulento análogo al término difusivo turbulento empleado por la ecuación de cantidad de movimiento.

La ecuación de cantidad de movimiento

La **segunda ley Newton** establece que la razón de cambio de cantidad de movimiento de una partícula de fluido es igual a la suma de las fuerzas aplicadas sobre la partícula. En la Figura: 2.19 se muestra el balance de fuerzas de la segunda ley de Newton.

Razón de incremento de cantidad de movimiento de una partícula de fluido	=	Suma de las fuerzas aplicadas sobre la partícula de fluido
--	---	--

Figura 2.19: Balance de fuerzas

Donde la razón de incremento de cantidad de movimiento por unidad de volumen de una partícula de fluido en las tres direcciones está dada por:

$$\rho \frac{Du}{Dt} \quad \rho \frac{Dv}{Dt} \quad \rho \frac{Dw}{Dt} \quad (2.34)$$

En una partícula de fluido es posible distinguir dos tipo de fuerzas que ejercen sobre la partícula:

- Fuerzas superficiales
 - Fuerzas de presión
 - Fuerzas viscosas
 - Fuerzas gravitacionales

- Fuerzas de cuerpo
 - Fueras centrífugas
 - Fuerzas de Coriolis (movimiento de un cuerpo respecto a un sistema de referencia en rotación)
 - Fuerzas electromagnéticas

Las fuerzas superficiales son contribuciones a la ecuación de cantidad de movimiento, mientras que las fuerzas de cuerpo se usan como términos fuente.

El esfuerzo de un elemento de fluido se define en función de la presión y de las nueve componentes del esfuerzo viscoso. La magnitud de una fuerza resultante de un esfuerzo viscoso es el producto del esfuerzo y el área. La fuerza total por unidad de volumen en el fluido debido al esfuerzo viscoso sobre el elemento de fluido de la Figura:2.20 dividido por el volumen $\delta x \delta y \delta z$.

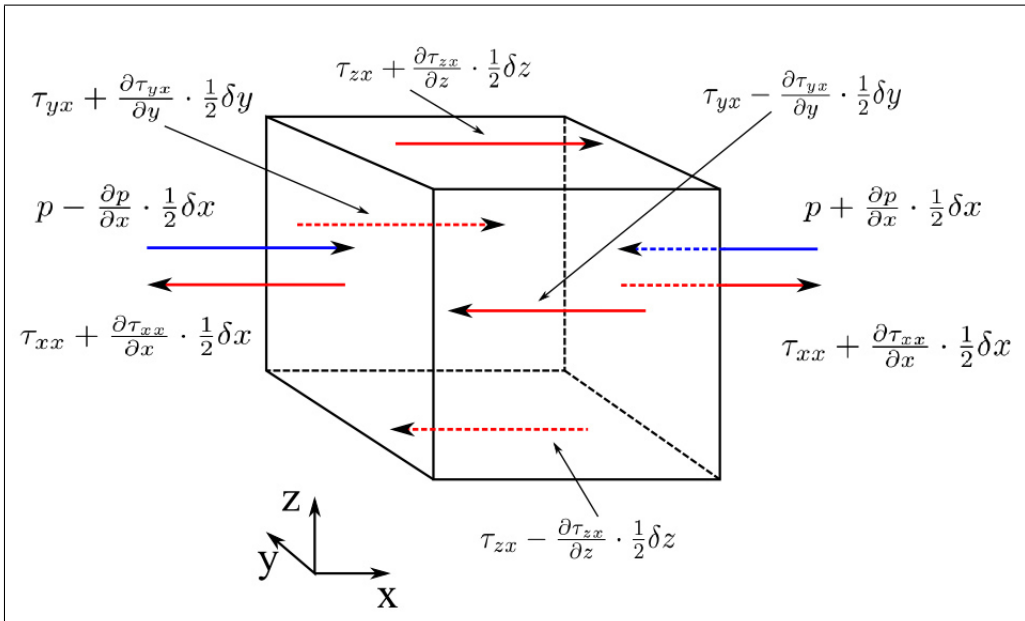


Figura 2.20: Componentes de esfuerzo en la dirección x

Además si se define el término fuente S_{Mx} se tiene la ecuación para la cantidad de movimiento en la componente x . Configurando la razón de cambio de la cantidad de movimiento en x para una partícula de fluido se tiene:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-P + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (2.35)$$

donde el signo asociado con la presión es opuesto al asociado con el esfuerzo

normal viscoso, puesto que la convención de signos habitualmente genera un tensor de esfuerzos positivos al esfuerzo normal a la presión.

La ecuación 2.35 contiene demasiadas incógnitas relacionadas con el esfuerzo viscoso, por lo tanto una forma usual de tratar las ecuaciones de conservación para el flujo de fluido es el de introducir modelos para el esfuerzo viscoso.

En muchos fluidos el esfuerzo viscoso puede ser expresado como una función de la razón de la deformación local o la velocidad de deformación.

Si un flujo es Newtoniano el esfuerzo viscoso es proporcional a la razón de deformación. Por lo tanto empleando la ley de la viscosidad de Newton para flujos compresibles tenemos:

$$\tau_{ii} = 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \lambda \operatorname{div} u, \quad (2.36a)$$

$$\tau_{ij} = \tau_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.36b)$$

por lo tanto, es posible tratar la ecuación 2.35 en término de la velocidad de deformación con la ecuación 2.36 lo que da como resultado las llamadas ecuaciones de Navier-Stokes.

A continuación se presenta la ecuación bidimensional para el flujo de un fluido:

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} = & -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u_x}{\partial x} + \lambda \operatorname{div} u \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] + S_{Mx} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Sin embargo esta forma es poco empleada por lo tanto la ecuación de Navier-Stokes puede ser escrita en su forma más usual empleada para el método de volumen

finito:

$$\begin{aligned}\rho \frac{Du}{Dt} &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \text{div}(\mu \text{grad } u) + S_{Mx} \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu(\nabla^2 u) + S_{Mx}\end{aligned}\tag{2.38}$$

De la misma manera la ecuación de cantidad de movimiento tiene su variante en código de CFD OpenFOAM en el cual se incluyen los términos de flotación, esfuerzo viscoso y el término fuente debido a la interacción del chorro. En la Figura: 2.21 se muestra el código empleado para resolución de la ecuación de la cantidad de movimiento.:

```

1  fvVectorMatrix UEqn
2  (
3      fvm::ddt(rho, U)
4      + fvm::div(phi, U)
5      + turbulence->divDevRhoReff(U)
6      ==
7      rho.dimensionedInternalField()*g
8      + parcels.SU(U)
9      + fvOptions(rho, U)
10 );

```

Figura 2.21: Código empleado en la resolución de la conservación de la cantidad de movimiento

Donde:

- $\text{ddt}(\rho, U)$ = Razón de incremento de cantidad de movimiento por unidad de volumen en el volumen de control
- $\text{div}(\phi, U)$ = La razón del flujo de masa pasando por la superficie de control
- $\text{turbulence-divDevRhoReff}(U)$ = Estrés viscoso que está en un tensor instantáneo de esfuerzo

- `rho.dimensionedInternalField()*g` = Fuerza específica del cuerpo o término de flotación
- `parcel.SU(U)` = La razón de ganancia/pérdida de cantidad de movimiento por unidad de volumen, debido al chorro.

Esta terminología usada por el código CFD OpenFOAM tiende a presentar confusión, por está razón se tiene que empezar con la ecuación general del balance de cantidad de movimiento a partir de la cual se explicaran los términos empleados por el código CFD OpenFOAM.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} P + \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} + \rho g + S_{mom} \quad (2.39)$$

Todos los términos no tienen mayor complicación más que el relacionado con el estrés viscoso turbulento `turbulence=divDevRhoReff(U)` el cual regresa dos funciones diferentes:

- `-fvm::laplacian(nuEff(),U)`

Esta expresión se puede representar de la siguiente manera:

$$-\frac{\partial}{\partial x_j}(\nu_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}) \quad (2.40)$$

- `-fvc::div(nuEff()*dev(fvc::grad(U)().T()))`

Esta expresión es la divergencia de la viscosidad efectiva de un tensor transpuesto representada de la siguiente manera:

$$-\frac{\partial}{\partial x_j}[\nu_{eff}(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij})] \quad (2.41)$$

Lo cual se simplifica usando el tensor unidad:

$$- \frac{\partial}{\partial x_j} (\nu_{eff} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) \quad (2.42)$$

Ya sumando ambos términos se tiene:

$$- \frac{\partial}{\partial x_j} [\nu_{eff} (\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})] = \nabla \cdot \tau \quad (2.43)$$

Este término no es más que el tensor de esfuerzos viscosos y turbulentos expresado para tomar todas las variables.

Cuando el fluido circula en la dirección x perpendicular a la dirección y , de forma que u_x es una función exclusiva de y se obtiene la ecuación 2.43.

Por ultimo si se substituye la ecuación 2.43 en la ecuación 2.39 se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu_{eff} (\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})] = \frac{\partial}{\partial x_i} P + \rho g + S_{mom} \quad (2.44)$$

La ecuación: 2.44 es empleada para el cálculo de la cantidad de movimiento usada por OpenFOAM, la cual puede ser encontrada en una forma más explícita en [62].

La ecuación de energía

La ecuación de la energía se deriva a partir de la primera ley de la termodinámica, la cual establece que la razón de cambio de energía de una partícula de fluido es igual a la razón de calor añadido a la partícula de fluido además la razón de trabajo realizado por la partícula. En la Figura: 2.22 se muestra el balance de energía empleado para la resolución de la ecuación de la energía:

Razón de incremento de energía de una partícula de fluido	=	Razón neta de calor añadido a la partícula de fluido	+	Razón neta de trabajo realizado por la partícula de fluido
---	---	--	---	--

Figura 2.22: Balance de energía

La razón neta de calor transferida a la partícula de fluido debido al flujo de calor en la dirección x se representa en la Figura: 2.23 a través de las caras de elemento:

En la Figura: 2.23 la razón total de calor añadido a la partícula de fluido por unidad de volumen debido al flujo que cruza las fronteras y dividido por una unidad de volumen $\delta x \delta y \delta z$ está definido por:

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} = -div \mathbf{q} \quad (2.45)$$

La ecuación 2.45 puede ser relacionada mediante la ley de Fourier para la conducción de flujo de calor al gradiente local de temperatura, por lo tanto empleando la ley de Fourier $q = -k \frac{\partial T}{\partial x}$ se tiene:

$$\mathbf{q} = -k grad T \quad (2.46)$$

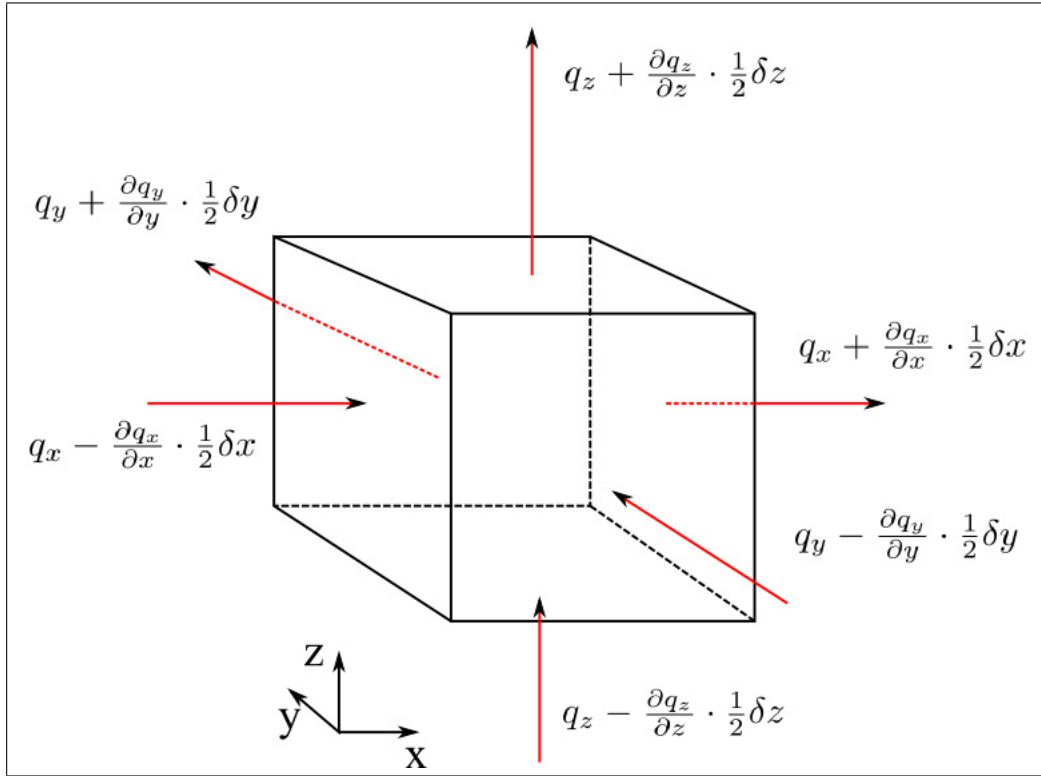


Figura 2.23: Balance de energía en un volumen de control

La conservación de la energía de una partícula de fluido está definida por la ecuación de la razón de cambio en la energía de la partícula de fluido ($\rho \frac{DE}{Dt}$) igualado a la suma del trabajo neto realizado en la partícula de fluido, la razón neta de calor añadido al fluido y la razón de incremento de energía debido a las fuentes. Por lo tanto para un fluido incompresible con una capacidad calorífica específica la ecuación de la energía queda de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \rho C_p \frac{DT}{Dt} &= \text{div}(k \text{ grad } T) + \tau_{xx} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u_x}{\partial z} \\
 &+ \tau_{xy} \frac{\partial u_y}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial u_y}{\partial z} \\
 &+ \tau_{xz} \frac{\partial u_z}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial u_z}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial u_z}{\partial z} + S_i
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Además si se emplea el modelo Newtoniano para el esfuerzo viscoso en la ecuación de la energía 2.47 se tiene la forma de Navier-Stokes para la ecuación de la energía:

$$\begin{aligned}\rho C_p \frac{DT}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(k \text{grad } T) + \Phi + S_i \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x} + k(\nabla^2 T) + \Phi + S_i\end{aligned}\tag{2.48}$$

Se debe de prestarse mucha atención en el código usado para la conservación de energía mostrado en la Figura: 2.24, puesto que existen un aproximado de nueve diferentes formas para el balance según exponen Poinso et al. [58], por esta razón se dará una explicación de los términos usados en el código el cual contiene la conservación de energía total, la fuente debido al chorro y un termino adicional de calor debido a la combustión y radiación los cuales se exponen en la Figura: 2.24.

Donde:

- $\text{ddt}(\text{rho}, \text{he}) + \text{ddt}(\text{rho}, \text{K})$ = velocidad de ganancia de energía por unidad de volumen.
- $\text{Div}(\text{phi}, \text{he}) + \text{div}(\text{phi}, \text{K})$ = velocidad de entrada de energía por unidad de volumen debido a la convección.
- $\text{absolute}(\text{phi}/\text{fvc}::\text{interpolate}(\text{rho}), \text{U}), \text{p}$ = velocidad de trabajo comunicado al fluido por unidad de volumen debido a las fuerzas de presión.
- $\text{laplacian}(\text{turbulence-alphaeff}(), \text{he})$ = velocidad de entrada de energía turbulenta por unidad de volumen debido a la conducción.

Al igual que el caso de la ecuación de cantidad de movimiento se debe empezar con el balance general para la conservación de la energía total para un elemento diferencial:

```

1 {
2   volScalarField& he = thermo.he();
3
4   fvScalarMatrix EEqn
5   (
6     fvm::ddt(rho, he) + mvConvection->fvmDiv(phi, he)
7     + fvc::ddt(rho, K) + fvc::div(phi, K)
8     + (
9       he.name() == "e"
10      ? fvc::div
11        (
12          fvc::absolute(phi/fvc::interpolate(rho), U),
13          p,
14          "div(phi,v,p)"
15        )
16      : -dPdt
17    )
18    - fvm::laplacian(turbulence->alphaEff(), he)
19    ==
20    parcels.Sh(he)
21    + radiation->Sh(thermo)
22    + combustion->Sh()
23    + fvOptions(rho, he)
24  );|

```

Figura 2.24: Código empleado en la resolución de la conservación de la energía como la suma de la energía sensible y cinética

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_t) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h_t) = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} u_i) + Q + S_{he} \quad (2.49)$$

La ecuación 2.49 es el balance para la entalpía total, la cual incluye el flujo de calor y la difusión de especies con las diferentes entalpías para cada componente $q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_k$, la fuente de calor Q debido a una chispa, flujo de radiación, entre otras. Finalmente incluye el término fuente debido a la transferencia de calor por parte del chorro.

Si la energía total se define como la acumulación de energía cinética e interna en el interior del volumen de control ($h_t = he + K$) siendo $K = u_i u_i / 2$ y el trabajo total como la sumatoria del trabajo realizado por cada especie ($\omega_T = \sum_{k=1}^N \Delta h_k^\circ w_k$) y si se substituyen estas expresiones en la ecuación 2.49 además factorizando y teniendo en cuenta la poca relevancia de los esfuerzos viscosos en la transferencia de calor se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(h_e + K)] + \frac{\partial}{\partial x_i}[\rho u_i(h_e + K)] - \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha h_e)\right] = S_{he} + \omega_T + Q \quad (2.50)$$

Siendo la ecuación 2.50 la interpretación diferencial del código usado por OpenFOAM.

Turbulencia para chorros reactivos

Cada vez que se intenta engañar a la madre naturaleza promediando sus detalles, ella se venga dejando un problema más grande, más incógnitas que ecuaciones.

Solamente entendiendo como se comporta la turbulencia se puede esperar estimar un paquete apropiado de ecuaciones constitutivas y entender las limitantes de éstas.

Esto es otra consecuencia del hecho de que la turbulencia es una propiedad del flujo y no del fluido.

A altos números de Reynolds la velocidad y otras propiedades varían de forma caótica, a este régimen se le conoce como turbulento, en el cual es posible observar estructuras de flujo rotatorias llamadas eddies turbulentos, los cuales son capaces de atraer partículas de fluido que inicialmente se encontraban separadas y como consecuencia mejorar el transporte de calor, masa y cantidad de movimiento.

La transición de un flujo laminar a uno turbulento inicia en el punto donde se encuentra una inestabilidad, el cual puede ser identificado como el punto donde el número de *Reynolds* es igual al número de *Reynolds crítico*, el cual dependerá del grado de amplitud de las perturbaciones inestables. El flujo de un chorro diesel es un ejemplo de turbulencia, puesto que después que el chorro emerge de la tobera el flujo laminar saliente genera vórtices, seguido de una deformación de este flujo laminar generando un único vórtice, el cual aguas arriba del flujo, se descompone en perturbaciones tri-dimensionales haciendo que los vórtices se vuelvan altamente distorsionados e indistintos. En la Figura: 2.25 se muestra el proceso de transición de un chorro diesel.

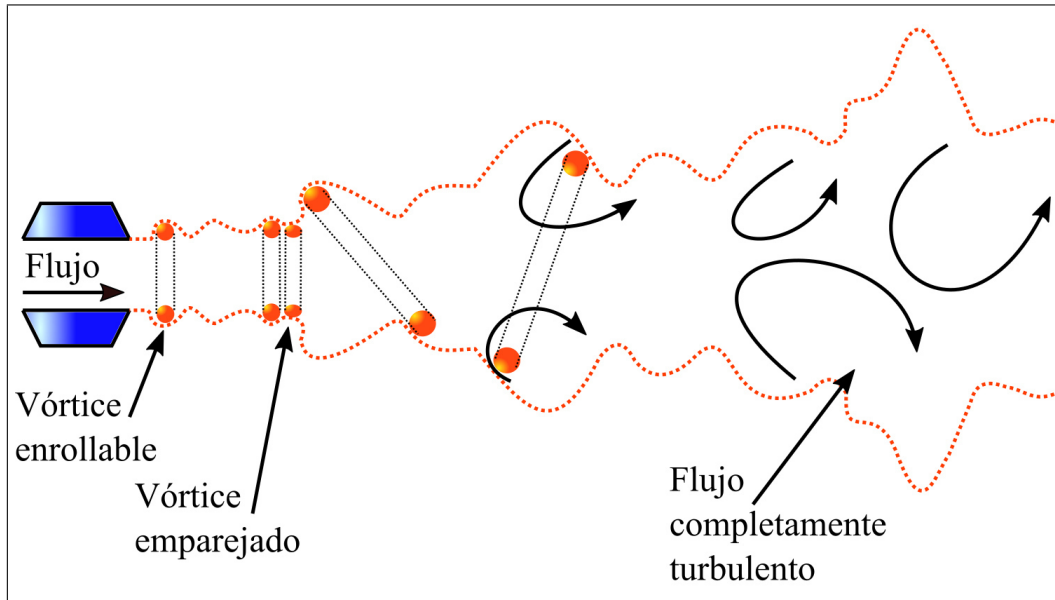


Figura 2.25: Transición de un flujo tipo jet o chorro diesel

Esta turbulencia manifiesta fluctuaciones aleatorias en las mediciones de velocidad como otras propiedades, tales como la temperatura, la densidad, la presión, entre otras.

El chorro diesel se caracteriza por tener una región tipo jet a alta velocidad rodeada completamente por un fluido estacionario en el cual el flujo dentro de la región jet es altamente turbulenta, sin embargo en la región alejada del jet se encuentra sin perturbar y no se ve afectada por la turbulencia. Este comportamiento indica que el medio ambiente local controla el flujo turbulento.

Las fluctuaciones en la velocidad del chorro no son iguales, lo que implica una estructura anisotrópica (propiedades cambiantes en las tres coordenadas) turbulenta, sin embargo al igualar la distancia de la dirección a contra flujo y la mitad del espesor a contra flujo las propiedades se vuelven isotrópicas (se mantiene constantes en las tres direcciones).

En resumen la turbulencia es generada por un corte en el flujo promedio. Si el corte es grande en magnitud las fluctuaciones de la velocidad y su distribución será grande

y anisotrópica con un alto nivel de fluctuaciones en el flujo promedio, sin embargo sin un corte la turbulencia decae y se vuelve isotrópica en el proceso, un efecto más de que la turbulencia es un efecto del flujo más que del fluido.

Si se considera el volumen de control de la Figura: 2.26 bidimensional con un flujo cortante paralelo al eje x con un gradiente medio de velocidad en el dirección y .

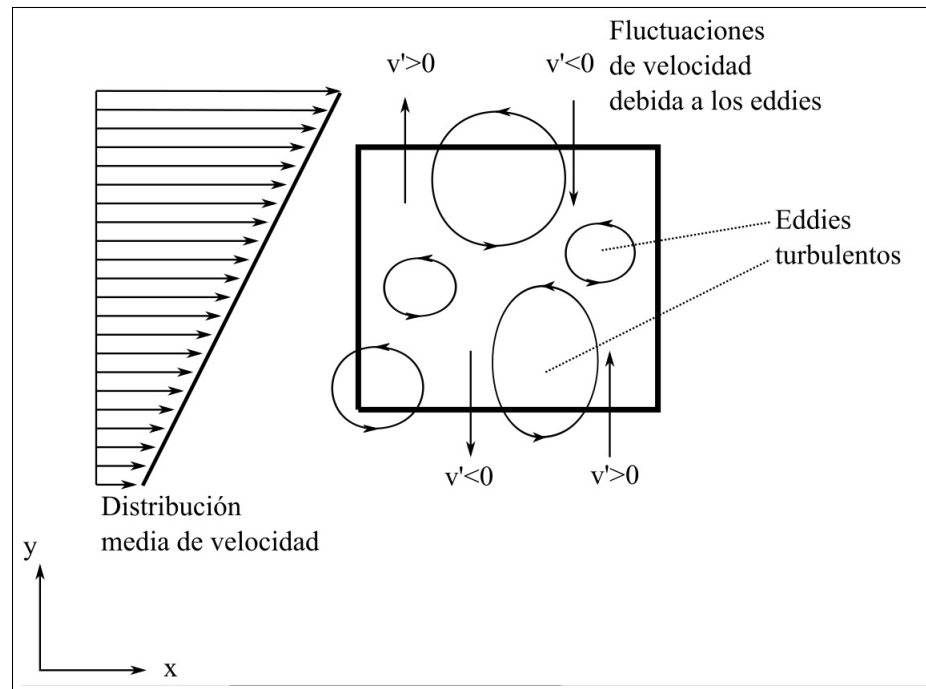


Figura 2.26: Volumen de control bidimensional con flujo cortante turbulento

Estos movimientos del fluido de recirculación están sujetos a la ecuación de continuidad, por lo tanto no pueden agregar masa al volumen de control, sin embargo estos eddies pueden transferir cantidad de movimiento y energía dentro y fuera del volumen de control. Estos eddies son capaces de transferir cantidad de movimiento, puesto que tiene gradientes de velocidad en la dirección y , lo que resulta en un transporte de cantidad de movimiento debida al transporte convectivo por los eddies, lo que causa que las capas de fluido con mayor velocidad se desaceleren y que las capas más lentas se aceleren.

En consecuencia a estos movimientos adicionales las capas de fluido experimentarían

un esfuerzo cortante turbulento adicional conocido como esfuerzos de Reynolds.

A continuación se describen las ecuaciones del modelo empleado para la resolución de la turbulencia generada por el chorro diesel entrando a una atmósfera estacionaria. Las ecuaciones del modelo de turbulencia en este trabajo están referenciadas a partir de los análisis hechos por Nordin et al. [63], Baumgarten et al. [64], George et al. [65] y Malalsekra et al. [66] en caso de usar otra referencia se especificara en el texto. La tarea de un modelo de turbulencia es proveer una relación para un eddy viscoso turbulento de un campo de flujo a modo de cerrar las ecuaciones promedio de Navier-Stokes (RANS). En las ecuaciones RANS, todas las inestabilidades del campo de flujo son promediadas, tratadas como parte de la turbulencia e incluidas en los esfuerzos turbulentos y flujos.

A continuación se describen las ecuaciones promedio de Navier-Stokes (RANS) junto con el modelo de turbulencia empleado para la resolución de éstas, con esta descripción se le da cierre a la interpretación de las ecuaciones de continuidad 2.27, la ecuación de conservación de especies 2.33, la ecuación de cantidad de movimiento 2.44 y la ecuación de energía 2.50.

Las ecuaciones de Navier-Stokes pueden ser resueltas de manera directa sin promediar o sin usar modelos de turbulencia, siempre y cuando el espacio de mallado sea lo suficientemente fino como para resolver pequeños eddies en el campo de flujo. A este método se le conoce como simulación numérica directa o DNS por sus siglas en ingles *Direct Numerical Simulation*, sin embargo es poco fiable y por lo tanto no es recomendada para problemas de ingeniería puesto que se emplea para bajos números de Reynolds y dominios muy pequeños.

Otra estrategia empleada es al simulación de grandes eddies o LES, por su siglas en ingles *Large Eddy Simulation*, la cual distingue entre pequeños y grandes eddies, sin embargo se le da mayor importancia a los eddies de mayor tamaño, puesto que son los de mayor energía haciendo que este método no se aplique al presente estudio.

El modelo más común en aplicaciones de ingeniería es el conocido como el de las ecuaciones promedio de Navier-Stokes o RANS, por sus siglas en ingles *Reynolds-averaged Navier-Stokes* combinado con un modelo de turbulencia apropiado. Este modelo

emplea los valores instantáneos de las cantidades del flujo turbulento, las cuales las divide en un componente promedio y uno fluctuante, mejor conocido como descomposición de Reynolds:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad \rho = \bar{\rho} + \rho'_i, \quad T_i = \bar{T}_i + T'_i \quad (2.51)$$

donde la barra superior denota el promedio del tiempo dado por

$$\bar{u}_i = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u_i(x, t) dt \quad (2.52)$$

y el superíndice (') denota la fluctuación superimpuesta como se muestra en la Figura: 2.27.

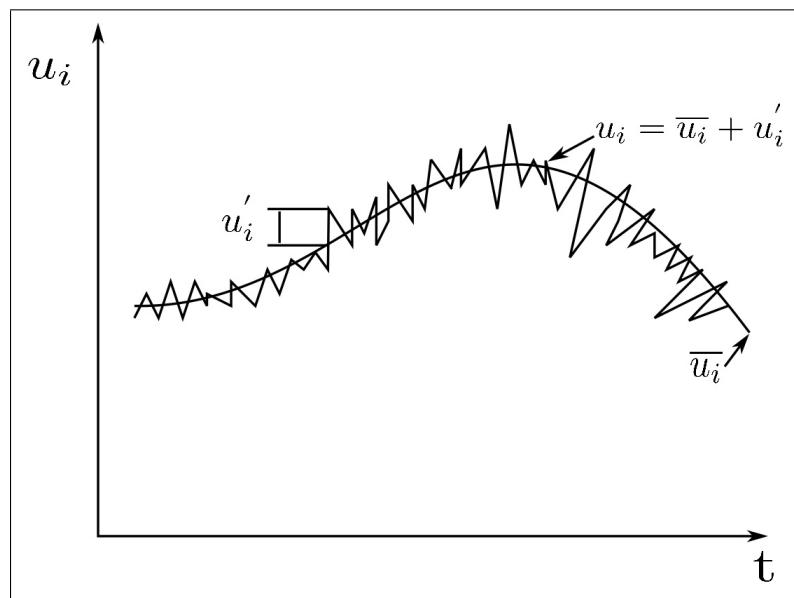


Figura 2.27: Flujo turbulento inestable

En la ecuación 2.52 el intervalo de tiempo Δt debe de ser muy grande en comparación al periodo de fluctuación relevante, pero lo suficientemente pequeño como para trazar la dependencia del tiempo de un flujo inestable.

Empleando la descomposición de Reynolds 2.51 en las ecuaciones de conservación permite que el flujo turbulento sea descrito por las ecuaciones de conservación en términos de cantidades de tiempo promedio. El efecto de la turbulencia en las ecuaciones de gobierno se muestra en la adición de términos en las ecuaciones de cantidad de movimiento y energía mediante los esfuerzos de Reynolds y mediante el flujo de calor turbulento, los cuales tendrán que ser descritos por un modelo de turbulencia a modo de cerrar el sistema de ecuaciones. La ecuación 2.53a muestra la ecuación de cantidad de movimiento para un flujo laminar mientras que la ecuación 2.53b muestra la adición de los esfuerzos de Reynolds en la cantidad de movimiento para un flujo turbulento.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu(\nabla^2 u) + S_{Mx}, \quad (2.53a)$$

$$\rho \frac{D\bar{u}}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu(\nabla^2 \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u' u') + S_{Mx} \quad (2.53b)$$

Sin embargo este análisis es posible para flujos turbulentos incompresibles en los cuales las ecuaciones RANS tienen la misma forma que las ecuaciones de conservación, con la adición de los esfuerzos de Reynolds, por lo tanto para un flujo turbulento compresible las ecuaciones de conservación se obtienen mediante el procedimiento del tiempo promedio de la masa-peso [64].

Se emplea el promedio de Favre el cual da como resultado ecuaciones de conservación similares a las originales, las cuales contienen pocos términos adicionales debidos al efecto de al turbulencia.

El promedio de Favre es usado a menudo en los flujos compresibles y se emplea cuando se tiene una localización o que habrá alta generación de calor en flujos com-

bustibles lo que causa que la densidad varíe como una función de la posición en los flujos reactivos suelen ser quemados para la producción de energía, tal es el caso de un chorro diesel. La presencia de la fluctuación en la densidad da lugar a términos adicionales cuando se usa el promedio de Reynolds, por ejemplo empleando la ecuación instantánea de la continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.54)$$

Substituyendo u y ρ por los promedios de Reynolds se tiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho u_i})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{\rho' u'_i})}{\partial x_i} = 0 \quad (2.55)$$

En comparación con las ecuaciones promedio de Reynolds con densidad para un flujo constante:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \overline{u_i}) = 0 \quad (2.56)$$

El término adicional $\frac{\partial(\overline{\rho' u'_i})}{\partial x_i}$ en la ecuación 2.55 surge de la correlación entre las fluctuaciones de la velocidad y la densidad en un flujo reactivo y tienen que ser modeladas.

A modo de reducir el número de términos separados requeridos para el modelado de flujos reactivos con densidad variable, se emplea la estrategia mencionada del promedio de Favre. Esta técnica es empleada principalmente para flujos hipersónicos, sin embargo el promedio de Favre también puede ser empleado en flujos con una transferencia de calor significativa o con combustión. Wilcox et al. [67] exponen que el nivel de $\rho'/\bar{\rho}$ para una capa límite a Mach 5 es comparable al nivel encontrado en una capa de mezclado a Mach 1. Las fluctuaciones de la densidad no son pequeñas en comparación con la densidad promedio. Por lo tanto para el modelado de un flujo con combustión, el promedio de Favre es preferible, puesto que $\rho'/\bar{\rho} \gg 1$ claramente para flujos con combustión las fluctuaciones en la densidad no son pequeñas relativamente en comparación con la densidad promedio del flujo y a las fluctuaciones originadas debido a los efectos combinados y de la expansión térmica, debida a la liberación de calor. Por lo tanto, es correcto emplear el promedio peso-masa de Favre para evitar la ocurrencia de la correlación de la densidad en los términos de las ecuaciones de gobierno.

Las ecuaciones promedio de Favre se obtiene dividiendo el producto de la densidad y la velocidad promedio por la densidad promedio:

$$\tilde{u} = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} \quad (2.57)$$

La velocidad instantánea u se escribe de la siguiente manera:

$$u = \tilde{u} + u'' = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} + u'' \quad (2.58)$$

A diferencia de la descomposición de Reynolds dada por la ecuación 2.51, don-

de u' que representa una fluctuación de velocidad turbulenta, la cantidad u'' también incluye los efectos de la fluctuación de la densidad, además de contener el valor promedio de las cantidades instantáneas del flujo denotadas por \tilde{u} .

El término convectivo en la ecuación de continuidad requiere el promedio de Favre del producto de la densidad con la velocidad (ρu_i). Multiplicando la ecuación 2.58 por la densidad se obtiene:

$$\rho u = \rho(\tilde{u} + u'') = \rho\bar{u} + \rho u'' \quad (2.59)$$

Y promediando en el tiempo la ecuación 2.59 queda de la siguiente manera:

$$\frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} = \frac{\overline{\rho \tilde{u}}}{\bar{\rho}} + \frac{\overline{\rho u''}}{\bar{\rho}} = \frac{\bar{\rho} \tilde{u}}{\bar{\rho}} + \frac{\overline{\rho u''}}{\bar{\rho}} = \tilde{u} + \frac{\overline{\rho u''}}{\bar{\rho}} \quad (2.60)$$

¿Cuál es la ventaja del uso del promedio de Favre en vez del promedio de Reynolds?, por ejemplo en el promedio de Reynolds el término convectivo $\rho u_i u_j$ en la ecuación de momento con variación en la densidad da lo siguiente:

$$\begin{aligned} \overline{\rho u_i u_j} &= \overline{(\rho + \rho')(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{u}_j + u'_j)} \\ &= \overline{\rho u_i u_j} + \overline{\rho' u'_i u'_j} + \overline{\bar{u}_i \rho' u'_j} + \overline{\bar{u}_j \rho' u'_i} + \overline{\rho' u'_i u'_j} \end{aligned} \quad (2.61)$$

Mientras que empleando el promedio de Favre el mismo término queda de la siguiente manera empleando la ecuación 2.59:

$$\begin{aligned}\overline{\rho u_i u_j} &= \overline{\rho(\tilde{u}_i + u_i'')(\tilde{u}_j + u_j'')} \\ &= \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \overline{\rho u_i'' u_j''}\end{aligned}\quad (2.62)$$

El uso del promedio de Favre claramente reduce el número de productos de cantidades fluctuantes. Por lo tanto empleando las siguientes reglas de promediado es posible derivar expresiones para las ecuaciones de conservación.

$$\overline{f + g} = \overline{f} + \overline{g}, \quad \overline{\rho' \tilde{f}} = 0, \quad \overline{\frac{\partial f}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial s}\quad (2.63)$$

Por lo tanto empleando el promedio de las cantidades fluctuantes del flujo para la velocidad $u_i = \tilde{u}_i + u_i''$ a excepción de la densidad las cuales únicamente están promediadas en el tiempo y empleando la ecuación 2.58 y por definición $\overline{\rho u''} = 0$ la ecuación de continuidad queda de la siguiente manera :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} &= \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho(\tilde{u}_i + u_i'')})}{\partial x_i} \\ &= \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{u}_i})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{\rho u_i''})}{\partial x_i} \\ &= \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho \tilde{u}_i})}{\partial x_i}\end{aligned}\quad (2.64)$$

La ecuación 2.64 es la forma original de la ecuación de continuidad. Las ecuaciones de Navier-Stokes también son tratadas siguiendo el mismo procedimiento. Nuevamente la forma general resultante de las ecuaciones es idéntica a la

forma general, exceptuando por la adición de los términos de esfuerzos turbulentos en la ecuación de movimiento 2.65 y energía 2.66:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j) = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{q}_i + \overline{\rho u_j'' \tilde{h}}) + \bar{S}_h \quad (2.66)$$

Los componentes el tensor de esfuerzos en la ecuación 2.65 se obtienen mediante el uso de la descomposición promedio de Favre y los términos de la ecuación 2.36, sin embargo los términos de las fluctuaciones promedio no desaparecen:

$$\tau_{ij} = \left[\mu \left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i} \right] + \left[\mu \left(\frac{\partial\bar{u}_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{u}_j''}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial\bar{u}_i''}{\partial x_i} \right] \quad (2.67)$$

Y el flujo de calor en la ecuación 2.66:

$$\bar{q}_i = -k \left(\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_i} + \frac{\partial\bar{T}''}{\partial x_i} \right) \quad (2.68)$$

Debido a la presencia de los esfuerzos de Reynolds y del flujo de calor turbulento las ecuaciones de conservación no están cerradas, puesto que contienen más variables que ecuaciones, por lo tanto estas ecuaciones de conservación deben de ser cerradas mediante un modelo de turbulencia. El modelo tradicional de turbulencia

sugiere que el efecto de la turbulencia en la ecuación de la cantidad de movimiento puede ser representada como un incremento en la viscosidad, por lo tanto el esfuerzo de Reynolds puede ser expresado en una analogía al tensor del esfuerzo viscoso τ_{ij} , conduciendo al modelo de viscosidad eddy propuesto por Boussinesq en 1877,

$$\overline{\tau_{ij,t}} = -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad (2.69)$$

donde μ_t es la viscosidad turbulenta del eddy, la cual es una propiedad del fluido sino del flujo, δ_{ij} valor de Kronecker, la cual es una función variable de múltiples funciones aplicadas a ciertos intervalos del dominio de la función principal ($\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ y $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$) y k es la energía cinética turbulenta la cual está definida por:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u'_1 u'_1} + \overline{u'_2 u'_2} + \overline{u'_3 u'_3}) \quad (2.70)$$

Finalmente el flujo de calor turbulento el cual es modelado de la misma manera:

$$\overline{q_{i,t}} = -\alpha_t \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_i} \quad (2.71)$$

donde $\alpha_t = \frac{k_t}{\rho C_p}$ la cual es la difusividad térmica turbulenta y k_t está referido a la conductividad turbulenta de eddy, las cuales al igual que en la ecuación 2.69 son

propiedades del flujo no del fluido.

El promedio de Favre conlleva a que las ecuaciones de gobierno tengan la misma forma que las ecuaciones de turbulencia para flujos con densidad constante.

Finalmente dependiendo de las ecuaciones diferenciales parciales será necesario la introducción de un modelo de turbulencia clásica en modelo algebraico y modelo de una y dos ecuaciones, como en este caso en particular se resuelven dos ecuaciones es necesario incluir un modelo de dos ecuaciones, para esto se empleara el modelo $k - \epsilon$, el cual es adecuado para zonas confinadas y de escalas de longitud pequeñas. Con la anterior exposición se describe como el código CFD OpenFOAM trata los términos difusivos para la ecuación de cantidad de movimiento y para la energía.

A continuación se describe el modelo de turbulencia empleado para cerrar los sistemas de ecuaciones.

El modelo $k - \epsilon$

La viscosidad turbulenta tiene las mismas dimensiones que las moléculas, es decir el producto de una velocidad y una longitud:

$$\mu_t = C_\mu \rho l \Pi \quad (2.72)$$

donde C_μ es una constante del modelo, l es una longitud característica y Π es una escala de velocidad característica la cual esta definida por la ecuación 2.70. Sin embargo la decisión para la elección de la longitud característica depende del hecho de que en el flujo donde ocurre la producción de energía cinética turbulenta. Dicha longitud es igual a su razón de disipación ϵ , por lo tanto la escala de longitud l y la energía cinética turbulenta pueden ser relacionadas por:

$$\epsilon \approx \frac{k^{3/2}}{l} \quad (2.73)$$

En flujos turbulentos, la energía cinética turbulenta únicamente es disipada por pequeños eddies, mientras que únicamente los eddies más grandes son capaces de convertir la energía cinética del flujo principal en producción de energía cinética turbulenta. La energía cinética turbulenta es transferida de eddies de gran escala a eddies de menor escala, hasta que finalmente es disipada en pequeños eddies, una característica asociada con la longitud característica l , los cuales perderán su forma al mezclarse con el ambiente circundante.

La derivación de las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta y para la disipación son complicadas y varían dependiendo del caso de estudio. Por lo tanto, únicamente se expondrá la forma canónica de la ecuación en base a la estructura de cualquier otra ecuación de transporte:

$$\text{Convección}(k) = \text{Difusión}(k) \pm \text{Fuente}(k) \quad (2.74)$$

La ecuación de energía cinética turbulenta es derivada a partir del trabajo expuesto por Kays et al. [68]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{u_j' u_i'} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\rho \overline{u_j' \frac{u_i' u_i'}{2}} - \overline{u_j' p'} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\overline{u_i' u_i'}}{2} \right) \right] \\ &+ \left(-\rho \overline{u_j' u_i'} \right) \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \rho \epsilon + \overline{u_i' X_i'} \end{aligned} \quad (2.75)$$

donde ϵ es un tensor de segundo orden llamado disipación turbulenta el cual esta definido como:

$$\epsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} \quad (2.76)$$

En la ecuación 2.75 los dos primeros términos son en realidad transferencia de energía representando difusión de k por la turbulencia misma y por el trabajo realizado por el flujo turbulento, mientras que el tercer término representa una propia difusión viscosa de k finalmente los últimos términos representan una fuente o sumidero de k , este sumidero está definido por el término $\rho\epsilon$, término que representa la disipación de k , siendo definitivamente positiva pero con signo negativo, mostrando ser una fuente de energía térmica en el proceso de transferencia de energía.

Finalmente combinando la ecuación 2.75 con la ecuación de continuidad y reordenando se tiene:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \bar{u}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} \approx \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{C_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.77)$$

De la misma manera es posible derivar una relación para la disipación empleando el balance de energía cinética y multiplicando por la razón de disipación $\nu \partial u'_j / \partial x_j$ y promediando en el tiempo, dando como resultado una expresión análoga

pero siendo ésta la razón de disipación:

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho \bar{u}_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \approx \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{C_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + C_1 \frac{\epsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.78)$$

donde C_k , C_ϵ , C_1 y C_2 son constantes del modelo que se especificaran más adelante.

A continuación se describen las ecuaciones empleadas por el código CFD Open-FOAM para la resolución del modelo de turbulencia $k - \epsilon$.

La ecuación de la energía cinética turbulenta

A pesar de que existen numerosos métodos de turbulencia disponibles, el modelo $k - \epsilon$ es el más usado en la literatura y tal vez el más usado en aplicaciones industriales además de tomar en cuenta el flujo promedio y el efecto de la turbulencia en las propiedades del flujo.

Como se menciona anteriormente la zona alejada del flujo tipo jet no se ve afectada por la turbulencia, sin embargo la modificación turbulenta debido a un chorro diesel es un proceso complejo y poco estudiado donde el chorro actúa únicamente como fuente de sumidero en la ecuación de k y como reducción de energía. Es de suma importancia entender las contribuciones del chorro a la turbulencia, ya que relativamente pequeñas cantidades de partículas dispersas pueden causar un cambio significativo en la estructura de la fase continua. Existen varias razones de este comportamiento:

- La incapacidad de las partículas para seguir el flujo, debido a la inercia.
- La resistencia de las partículas a la deformación continua que experimenta el fluido circundante.

- La diferencia de la velocidad inicial entre las diferentes fases.

Conforme aumenta la fase dispersa dentro del dominio existe una reducción en la turbulencia, esto debido a que la fase dispersa se mueve mucho más rápido que la fase continua además la razón del tamaño de partícula en comparación con la longitud turbulenta característica es menor; una explicación más detallada es propuesta por Kralj et al. [69].

El modelo $k - \epsilon$ está basado en el hecho de que en el flujo el producto de la energía cinética turbulenta (k) es igual a su razón de disipación (ϵ) y su escala de longitud l . La energía cinética turbulenta puede ser relacionada de la siguiente manera:

$$\epsilon \approx \frac{k^{3/2}}{l}.$$

Como se menciono anteriormente en flujos turbulentos la energía cinética solo es disipada en pequeños eddies mientras que únicamente los eddies más grandes son capaces de convertir la energía cinética del flujo principal en producción de energía cinética turbulenta la cual es transferida de eddies de mayor magnitud a unos de menor hasta que finalmente se disipan en pequeños eddies.

$$-\rho \langle u_i u_j \rangle = \mu_T \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{2}{3} \langle u_i u_i \rangle \quad (2.79)$$

La Viscosidad turbulenta propuesta por Boussinesq como su efecto en la ecuación de cantidad de movimiento que puede ser representada como un incremento en la viscosidad [65, 58, 64].

En la Figura: 2.28 se muestra el código empleado por el código CFD OpenFOAM para al resolución de la energía cinética turbulenta:

Sin embargo para poder comprender esta interpretación, al igual que la deducción de la cantidad de movimiento, se tiene que deducir a partir de la ecuación clásica para los esfuerzos de Reynolds dada por la ecuación: 2.80.

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} \langle u_i u_i \rangle + U_j \frac{\partial}{\partial x_j} \langle u_i u_i \rangle \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ -\frac{2}{\rho} \langle p u_i \rangle \delta_{ij} - \langle q^2 u_j \rangle + 4\nu \langle s_{ij} u_i \rangle \right\} \\ - 2 \langle u_i u_j \rangle \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - 4\nu \langle s_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \rangle \end{aligned} \quad (2.80)$$

```

2
3 volScalarField G(GName(), nut_*2*magSqr(symm(fvc::grad(U_))));
4
5 // Turbulent kinetic energy equation
6 tmp<fvScalarMatrix> kEqn
7 (
8     fvm::ddt(k_)
9     + fvm::div(phi_, k_)
10    - fvm::laplacian(DkEff(), k_)
11    ==
12    G
13    - fvm::Sp(epsilon_/k_, k_)
14 );
15
16 kEqn().relax();
17 solve(kEqn);
18 bound(k_, kMin_);
19
20
21 // Re-calculate viscosity
22 nut_ = Cmu_*sqr(k_)/epsilon_;
23 nut_.correctBoundaryConditions();
24 }

```

Figura 2.28: Código empleado en la resolución de ecuación de la energía cinética turbulenta

Si se usa la condición de incompresibilidad $\partial u_j / \partial x_j = 0$ para eliminar el término del tensor de presión, además empleando la ecuación 2.70, siendo que el tensor de producción de turbulencia puede ser descompuesto en una parte simétrica, tensor de esfuerzo, y una anti-simétrica, tensor rotacional se tiene:

$$G = \nu_T \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.81)$$

Dividiendo la ecuación 2.80 entre 2 e insertando la ecuación 2.81 y la ecuación 2.70 se puede reescribir de la siguiente forma con la consideración de que no hay fluctuaciones por la presión y no hay fluctuaciones por la turbulencia. Dando como resultado la interpretación de la ecuación de la energía turbulenta en el código CFD de OpenFOAM mostrado en la Figura: 2.28:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \right] = \nu_T \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \epsilon \quad (2.82)$$

Donde:

- $\text{ddt}(k)$ = Es la razón de cambio de energía cinética por unidad de masa debida a la dependencia no estacionaria del promedio del tiempo.
- $\text{div}(\text{phi}, k)$ = Razón de cambio de energía por unidad de masa debido a la convección por el flujo promedio a través del campo no homogéneo.
- $\text{laplacian DkEff}()$, k = Transporte de energía cinética en un campo no homogéneo debido a la turbulencia y al esfuerzo viscoso.
- G = Razón de producción de energía cinética turbulenta por el flujo promedio.
- $\text{Sp epsilon}/k$, k = Razón de disipación de energía cinética por unidad de masa debido al esfuerzo viscoso.
- ν_{eff} = viscosidad dependiente del fluido restando la viscosidad turbulenta dependiente del movimiento $\nu_t = C_{mu} \frac{k^2}{\epsilon}$.

La diferencia entre la ecuación 2.82 y el código CFD OpenFOAM mostrado en la Figura: 2.28, es el término de la ν_T que no esta dividida por el término σ_k , ya que éste es igual a la unidad, puesto que las ecuaciones del modelo $k - \epsilon$ son iguales.

La ecuación de disipación

La ecuación de la energía cinética turbulenta arroja un término nuevo, la disipación de energía cinética turbulenta por unidad de masa.

$$\epsilon \equiv 2\nu \langle s_{ij} s_{ij} \rangle = \nu \left\{ \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\rangle \right\} \quad (2.83)$$

El termino de disipación ϵ siempre tendrá a ser mayor o igual a cero, puesto que es la suma del cuadrado de cantidades promediadas, adicionalmente a esto en la ecuación 2.82 le precede un signo negativo lo que deja claro que solo puede actuar para *reducir* la energía cinética del flujo. Por lo tanto solo puede causar un cambio negativo en la razón de cambio de energía cinética; he aquí el nombre de disipación.

De manera física, la energía se disipa debido al trabajo hecho por las fluctuaciones de los esfuerzos viscosos como respuesta a la resistencia que tiene el material fluido a la deformación por las fluctuaciones en las velocidades de deformación.

Se puede escribir de la misma manera que la ecuación: 2.82 de la energía cinética, debido a que ambas ecuaciones son las mismas. En la Figura: 2.29 se muestra el código empleado para la resolución de la ecuación de disipación.

```

243 // Dissipation equation
244 tmp<fvScalarMatrix> epsEqn
245 (
246     fvm::ddt(epsilon_)
247     + fvm::div(phi_, epsilon_)
248     - fvm::laplacian(DepsilonEff(), epsilon_)
249     ==
250     C1_*G*epsilon_/k_
251     - fvm::Sp(C2_*epsilon_/k_, epsilon_)
252 );
253
254 epsEqn().relax();
255
256 epsEqn().boundaryManipulate(epsilon_.boundaryField());
257
258 solve(epsEqn);
259 bound(epsilon_, epsilonMin_);
260

```

Figura 2.29: Código empleado en la resolución de ecuación de disipación de energía cinética turbulenta (ϵ)

Utilizando la misma estructura para la determinación de la ecuación 2.82 se tiene:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \right] = C_1 \frac{\epsilon}{k} \nu_T \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - C_2 \frac{\epsilon}{2k} \quad (2.84)$$

Siendo este el modelo para el cálculo de la disipación de la energía cinética turbulenta como se muestra en la ecuación 2.84.

Las constantes usadas por ambos modelos no son universales y tienen que ajustarse a un problema específico para lo que se necesario experimentación del caso en particular.

$$C_{mu} = 0.09; \sigma_k = 1; \sigma_\epsilon = 1.3; C_1 = 1.44; C_2 = 1.92 \quad (2.85)$$

Sin embargo las constantes usadas han sido determinadas para una amplia gama de experimentos por Jones et al. [70] y referenciadas ampliamente en [71, 72].

Fase Dispersa (Líquida)

La tarea en simular un chorro consiste en determinar para cada gota el tiempo, posición $x^{\rightarrow} = (x, y, z)$, los valores para el radio r , su velocidad u y su temperatura T en un chorro con millones de gotas.

Para esto se define la función $f(x^{\rightarrow}, u^{\rightarrow}, r, T, t) dudrdT$ la cual representa el número probable de gotas por unidad de volumen al tiempo t , en la posición x^{\rightarrow} , con velocidades en el rango du alrededor de u , mientras el radio está en un intervalo dr alrededor de r y la temperatura en un intervalo dT alrededor de T .

La función f es una función en un espacio de nueve dimensiones, donde la evolución de f con respecto al tiempo puede ser descrita en su forma diferencial por una ecuación de transporte conocida como la *ecuación del chorro*:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x(fu) + \nabla_u(fa) + \frac{\partial}{\partial T}(f \frac{\partial T}{\partial t}) + \frac{\partial}{\partial r}(f \frac{\partial r}{\partial t}) = f_{fuente} \quad (2.86)$$

donde:

- dr/dt es la razón de cambio en el tamaño de la gota debido a la vaporización.
- dT/dt es la razón de cambio en la temperatura de la gota debido al calentamiento.

- $a = du/dt$ la aceleración de la gota líquida o arrastre de la gota.

Debido a esta cantidad de variables hace que sea extremadamente compleja su resolución es por esa razón que se tienen que manejar las variables aleatorias (parcelas) con una distribución particular de probabilidad en función del tiempo. A este método se le conoce como parcela-estocástica o por su nombre en ingles más común *Stochastic-Parcel*.

Un chorro consiste en miles de gotas, donde el comportamiento de todo un conjunto o número discreto de todas estas gotas es calculado en detalle y se asume que el comportamiento y propiedades del resto de las gotas puede ser aproximado por estas gotas discretas. Es por esto que cada gota representativa obtiene un número de futuras gotas con características idénticas, las cuales a su vez se comportan igual que la gota representativa.

La cantidad de parcelas es un valor que puede ser modificado en el código CFD OpenFOAM, que entre más se tengan mejor la aproximación.

Las ecuaciones del chorro son usadas para obtener los términos fuente de interacción en las ecuaciones de la fase continua gaseosa las cuales son representadas con los términos S_{con} , S_{mom} y S_{he} en las ecuaciones 2.27, 2.44 y 2.50.

Estos términos de contribución debido al chorro se obtienen mediante la suma de razones de cambio de masa, cantidad de movimiento y energía de todas las gotas en cada posición x a cada tiempo t .

$$S_{con} = \int f\rho 4\pi r^2 \frac{\partial r}{\partial t} dudrdTdy \quad (2.87)$$

$$S_{mom} = - \int f\rho \left[\frac{4}{3}\pi^3 \left(\frac{\partial u}{\partial t} - g \right) + 4\pi r^2 \frac{\partial r}{\partial t} u \right] dudrdTdy \quad (2.88)$$

$$S_{he} = - \int f\rho \left\{ 4\pi r^2 \left[I_1 \frac{1}{2} (u - \nu)^2 \right] + \frac{4}{3}\pi^3 \left[C_1 \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial u}{\partial t} - g \right) (u - \nu - \nu') \right] \right\} dudrdTdy \quad (2.89)$$

donde g es la gravedad, ν es la velocidad de la gase gaseosa, I_1 representa la energía interna, C_1 es el calor específico y ν' es la velocidad del gas debida a la fluctuación turbulenta la cual es asumida que sigue una distribución con la varianza de $\frac{2}{3}k^{17}$ dicho valor es usado en la aproximación de Monte Carlo para la dispersión de la gota debida a la turbulencia, método que se basa en la aproximación de una solución sin conocer las posibles soluciones mediante el uso de un número discreto de puntos, cuyas posiciones se encuentran dentro de un área conocida. El comportamiento de estos puntos discretos es usado para estimar el comportamiento de todos los puntos. La Figura: 2.30 muestra una función $F(x)$, que sus valores en y para cada posición en x son conocidos y se requiere determinar el área bajo la curva.

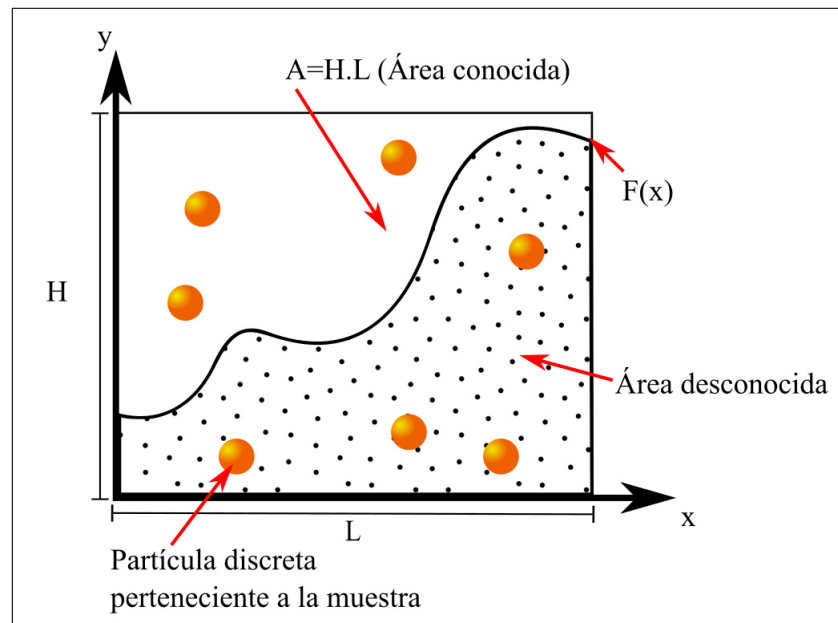


Figura 2.30: Idea básica del método de Monte Carlo

Las ecuaciones de movimiento de la gota son integradas dentro de un campo de velocidad $\nu + \nu'$ hasta que la gota entra a un nuevo *eddy* viscoso. El tiempo de interacción gota-*eddy* está determinado por el tiempo de vida del *eddy* o por el tiempo que le toma a la gota pasar a través del *eddy* [73].

La ecuación de movimiento de partícula

Una partícula P es definida por su posición desde su centro x_p , su diámetro D_p , su velocidad U_p y su densidad ρ_p . Donde su masa esta definida por $m_p = \frac{1}{6}\rho_p\pi D_p^3$. En el marco Lagrangiano el vector de posición de cada partícula es calculado mediante: $\frac{dx_p}{dt} = U_p$ esta relación simple junto con la segunda ley de Newton para una partícula discreta gobiernan el movimiento de las gotas.

La deducción de las ecuaciones de partícula puede ser corroborada según el trabajo de Nordin et al. [63] y Vallier et al. [74] cualquier otra referencia será especificada en el texto.

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = \Sigma F \quad (2.90)$$

En un flujo diluido, la fuerza dominante que actúa sobre la partícula es la fuerza de arrastre F_D de la fase gaseosa y las fuerzas gravitacionales. Las fuerzas debido a la rotación de la gota, masa añadida, entre otras son despreciadas puesto que para sistemas donde la razón de la densidad de la fase dispersa y continua es del orden 10^2 .

$$\Sigma F = F_D + m_p g \quad (2.91)$$

Esta fuerza de arrastre puede ser expresada como:

$$F_D = m_p \frac{U_p - U}{\tau_p} \quad (2.92)$$

donde τ_p es el tiempo de relajación de la partícula el cual define el tiempo que le toma a la partícula responder a los cambios en la velocidad del fluido local dado por la siguiente ecuación:

$$\tau_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_p D_p}{\rho_f C_D |U - U_p|} \quad (2.93)$$

Si se substituyen la relación para la masa de la partícula, la ecuación 2.93 en la ecuación 2.92 y despreciando la fuerza gravitacional se tiene que para un chorro diesel la fuerza de arrastre está definida por:

$$F_D = -\frac{1}{8} \pi m_p D_p^2 \rho_f C_D |U_p - U| (U_p - U) \quad (2.94)$$

donde C_D es el coeficiente de arrastre para una esfera a diversos números de Reynolds, ρ_f es la densidad del fluido, D_p es el diámetro de la partícula y la diferencia $U_p - U$ representa la variación entre las velocidades relativas de la partícula y el gas ambiental.

- Régimen de Stokes $Re_p \leq 0.1$

$$C_D = \frac{24}{Re_p}$$

- Régimen transitorio $0.1 \leq Re_p \leq 1000$

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{1}{6} Re_p^{2/3}\right)$$

- Régimen Newtoniano $Re_p \geq 1000$

$$C_D = 0.44$$

- Reynolds

$$Re = \frac{\rho_f D_p |U - U_p|}{\mu_f}$$

Estas expresiones del coeficiente de arrastre son usadas con la suposición de que los efectos de la razón de vaporización, deformación y una alta fracción líquida son despreciables o tienen mínimo impacto [63].

Puesto que la velocidad del fluido U , es calculada en el marco Euleriano, es necesario para el calculo de la fuerza de arrastre en el marco Lagrangiano, ésta tiene que ser interpolada desde la posición de la partícula hasta los puntos vecinos en la malla U_{ap} . Finalmente la velocidad de la partícula es calculada usando las ecuaciones 2.90, 2.91 y 2.92. En la Figura: 2.31 se muestra el código empleado para la resolución de la velocidad de partícula.

```

89     scalar Dc = (24.0*nuc/d_)*ReFunc*(3.0/4.0)*(rhoc/(d_*rhop));
90
91     U_ = (U_ + dt*(Dc*Uc + (1.0 - rhoc/rhop)*td.g()))/(1.0 + dt*Dc);
--

```

Figura 2.31: Código empleado en la resolución de la velocidad de la partícula

El código de CFD OpenFOAM presentado en la Figura: 2.31 representa la siguiente ecuación para el calculo de la velocidad actualizada para el primer paso de tiempo Lagrangiano Δt :

$$U_p^{t+\Delta t} = \frac{U_p^t + U_{ap} \frac{\Delta t}{\tau_p} + g \Delta t}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_p}} \quad (2.95)$$

El código de CFD OpenFOAM de la Figura: 2.31 introduce un factor escalar que no se define con anterioridad, pero en realidad este factor no es más que el inverso del tiempo de relajación con la substitución del coeficiente de arrastre mostrado en la ecuación 2.93:

$$Dc = \frac{1}{\tau_p} = \frac{24\nu}{d} \frac{3}{4} \frac{\rho_f}{Dp\rho_p} \quad (2.96)$$

Ya con esta velocidad se puede determinar la posición de la partícula y posterior la penetración de la misma, como se muestra en la Figura: 2.32.

```

68         dt *= trackToFace(position() + dt*U_, td);
69
70         tEnd -= dt;

```

Figura 2.32: Código empleado en la resolución de la posición de la partícula

El código mostrado en la Figura: 2.32 ser interpretada en su forma algebraica de la siguiente manera:

$$x_p^{t+\Delta t} = x_p^t + U_p^t \Delta t \quad (2.97)$$

Estas son las relaciones usadas para determinar la penetración del chorro en el dominio.

2.5.3 MODELADO DEL CHORRO Y LA FORMACIÓN DE LA MEZCLA.

Se necesita resumir la subsección anterior para comprender la importancia del modelado del chorro de modo que se sepa como se calcula la penetración.

Como se menciono se tienen que considerar dos fases, la continua (gaseosa) y la dispersa (líquida) si se quiere calcular la penetración de un chorro que entra en una atmósfera gaseosa de una cámara de combustión de un motor.

La fase gaseosa es descrita con las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en conjunto con el modelo de turbulencia $k - \epsilon$, esta fase gaseosa se encuentra en el marco Euleriano para el cual a cada tiempo t se describe el comportamiento de los parámetros más relevantes del flujo como los componentes de velocidad, presión, densidad, temperatura en función de la posición (x, y, z) para todo el campo tridimensional del flujo, la formulación Euleriana es para la fase continua (fase que puede tomar cualquier valor de un rango), en esta fase se emplea un volumen de control fijo, y

los cambios en el fluido son almacenados conforme pasan a través del volumen de control y la fase dispersa (fase que solo puede tomar valores particulares y no valores entre ellos) es calculada usando la descripción Lagrangiana, dicha descripción toma en consideración los cambios en las propiedades de un elemento fluido son almacenados y observados moviéndose con el elemento fluido.

Las gotas son tratadas como puntos mäsicos individuales, cuya velocidad es reducida por las fuerzas de arrastre debidas a la velocidad relativa entre el gas y la gota con una masa decreciente debido a la evaporación.

El comportamiento de ambas fases se acopla debido a que la cantidad de movimiento de la gota se reduce mientras que la velocidad del gas incrementa, hay un intercambio de energía y masa, ya que la masa evaporada de la gota pasa a la fase gaseosa.

El método de calculo toma los efectos de la fase gaseosa en el líquido disperso usando la información actual, como la temperatura y la velocidad del gas de cada celda en la malla de una gota cruzando al tiempo t como una condición de frontera.

Aquí se encuentra la necesidad de submodelos de ruptura del chorro que describan el intercambio de cantidad de movimiento, energía y masa de todas las gotas dentro de una celda al tiempo t .

Proceso de ruptura del chorro (Break-up process)

Existen dos mecanismos principales para simular la ruptura del chorro:

- Ruptura primaria (Primary Break-up)

La ruptura primaria provee de las condiciones iniciales para el calculo de la subsecuente formación de la mezcla en el cilindro puesto que la descripción Lagrangiana requiere la existencia de gotas, las cuales comienzan a penetrar en la cámara de combustión. Este modelo determina las condiciones de inicio de las gotas como el radio, velocidad y ángulo.

- Ruptura secundaria (Secondary Break-up)

La ruptura secundaria es la desintegración de las gotas existentes en gotas de menor tamaño debido a las fuerza aerodinámicas que son inducidas por al velocidad relativa entre la gota y el gas circundante. Estas fuerzas resultan en un crecimiento inestable de ondas en la superficie de la gota o en la gota misma que finalmente lleva a su desintegración.

Break-up primario

A partir de este sección se le nombrara al proceso de ruptura como *Break-up* nombre más comúnmente empleado usado en la literatura.

Uno de los métodos más sencillos, por lo tanto más usado para la simulación del Break-up primario es, el método de gotas o blobs usado para definir las condiciones iniciales de las primeras gotas a la salida del orificio de la tobera. Esto método esta basado en la suposición de que la atomización y el break-up en la zona más densa del chorro a la salida de la tobera son procesos indistinguibles, esto es de suma ventaja puesto que una simulación detallada puede ser reemplazada por la inyección de grandes gotas esféricas con tamaños uniformes que posteriormente son sometidas a un break-up secundario ocasionado por las fuerza aerodinámicas.

En la Figura: 2.33 se muestran los diámetros de estos blobs, los cuales son iguales al orificio de la tobera. Dicho número de blobs inyectados esta determinado por el flujo másico.

Este método exige que se alimente un flujo másico el cual normalmente es desconocido o se requiere experimentación, debido a esto el código CFD OpenFOAM permite alimentar una masa por inyección y no un flujo másico como tal, debido a esto la ecuación de Bernoulli para un flujo sin fricción puede ser empleada para determinar la velocidad de inyección superior. En la Figura: 2.34 se muestra el código empleado para la determinación de la velocidad de inyección.

El código determina la velocidad de tres maneras diferentes en el presente caso se

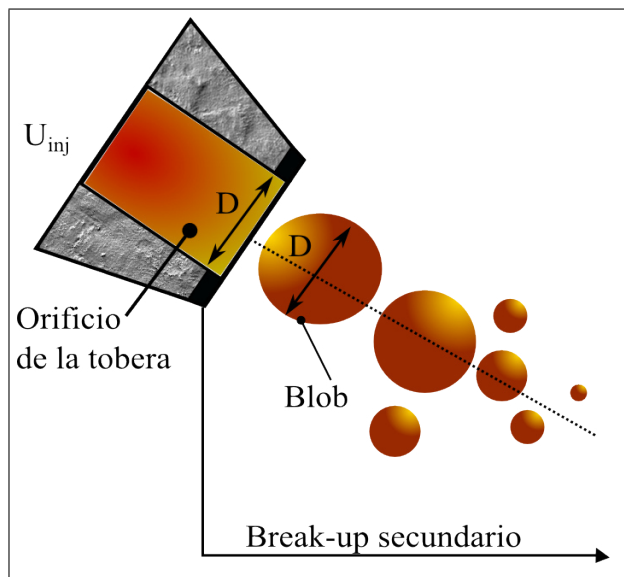


Figura 2.33: Método de blob para break-up primario

```

2 void Foam::ConeNozzleInjection<CloudType>::setFlowType()
3 {
4     word flowType = this->coeffDict().lookup("flowType");
5     if (flowType == "constantVelocity")
6     {
7         this->coeffDict().lookup("UMag") >> UMag_;
8         flowType_ = ftConstantVelocity;
9     }
10    else if (flowType == "pressureDrivenVelocity")
11    {
12        Pinj_.reset(this->coeffDict());
13        flowType_ = ftPressureDrivenVelocity;
14    }
15    else if (flowType == "flowRateAndDischarge")
16    {
17        Cd_.reset(this->coeffDict());
18        flowType_ = ftFlowRateAndDischarge;
19    }
20
21    UMag_(0.0),
22    Cd_(owner.db().time(), "Cd"),
23    Pinj_(owner.db().time(), "Pinj")
24
25    scalar pAmbient = this->owner().pAmbient();
26    scalar rho = parcel.rho();
27    scalar UMag = ::sqrt(2.0*(Pinj_.value(t) - pAmbient)/rho);
28    parcel.U() = UMag*dirVec;

```

Figura 2.34: Código empleado para la determinación de la velocidad de inyección

usará el método `pressureDrivenVelocity` con el fin de poder suministrar la presión de inyección `Pinj(owner.db().time())`, "Pinj" la cual tiene que ser incrementada al momento de trabajar con biodiesel [4, 5, 6, 7].

La determinación de la velocidad de inyección se realiza mediante la siguiente ecuación:

$$U_{inj} = \sqrt{\frac{2\Delta P_{inj}}{\rho_l}} \quad (2.98)$$

donde ΔP_{inj} es la diferencia entre la presión de inyección y la presión de la cámara de combustión y ρ_l la densidad del combustible; todo esto para el caso particular de una tobera mono-orificio.

Break-up secundario

Una vez que las parcelas líquidas son inyectadas están empiezan a deformarse y romperse, este comportamiento esta expresado por el número adimensional Weber de la fase gaseosa $We_g = \frac{\rho_g u_{rel}^2 d}{\sigma}$ el cual representa la razón de las fuerzas aerodinámicas y la tensión superficial de la gota. Entre más pequeño es el diámetro de la gota, más grande será la fuerza de la tensión superficial, por lo tanto mayor deberá de ser su velocidad crítica relativa necesaria para generar la ruptura.

Existen una amplia variedad de modelos para simular la ruptura del chorro de los cuales se seleccionan dependiendo del número de Weber de la fase gaseosa, estos modelos también pueden ser encontrados en la librería del código CFD OpenFOAM:

- TAB Taylor Analogy Brak-up

Método basado en la analogía entre las fuerzas oscilantes de un sistema tipo masa-resorte-amortiguador con una gota que penetra dentro de una atmósfera gaseosa con una velocidad relativa u_{rel} el cual se muestra en la Figura: 2.35.

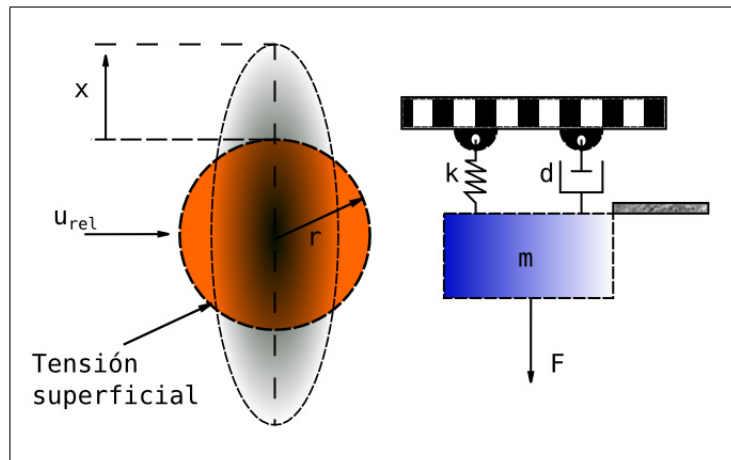


Figura 2.35: Modelo de la analogía de Taylor para el Break-up (TAB)

La fuerza F inicia la oscilación de la masa que corresponde a las fuerza aerodinámicas que deforman la gota. La fuerza $F_{resorte} = k \cdot x$ es análoga a la tensión superficial, la fuerza encargada de mantener la gota esférica y restaurar la fuerza inicial. La fuerza de amortiguación $F_{amort}=d \cdot \dot{x}$ corresponde a las fuerza de fricción dentro de la gota representadas por la viscosidad del líquido. En este modelo es necesaria la condición de break-up vibracional esta condición ocurre cuando el $12 < We_g < 16$.

- ETAB Enhanced Taylor Analogy Break-up.

Este modelo usa la deformación de gotas empleadas por el modelo TAB, en este modelo la desintegración del líquido es simulada como una cascada de gotas en desintegración, además con la consideración de que la producción de gotas empieza con una serie de desintegraciones hasta que se alcance una condición estable en la producción de gotas. En este modelo es necesaria la condición de break-up caótico la cual ocurre cuando el $45 < We_g < 100$ [75].

- KH Kelvin-Helmholtz Break-up.

Modelo basado en el análisis de primer orden de las inestabilidades de Kelvin-

Helmholtz (transición hacia un flujo turbulento en fluidos de diferentes densidades moviéndose a varias velocidades) aumentando en la superficie del líquido con un diámetro r_0 que se adentra en gas incompresible estacionario. El resultado es una ecuación de dispersión general que relaciona la razón de crecimiento de estas perturbaciones en la superficie con la amplitud de onda.

Este modelo predice una distribución de tamaño de partícula que consiste en un número pequeño de grandes gotas mayor tamaño que se desintegran en gotas de menor tamaño, cuyos radios disminuyen mediante aumenta el número de gotas de menor diámetro. En este modelo es necesaria la condición de break-up de descubrimiento (stripping) la cual ocurre cuando el $100 < We_g < 1000$ uno de los mecanismos más comunes en inyección a altas presiones.

- RT Rayleigh-Taylor Break-up.

Basado en la inestabilidad de la interfaz entre dos fluidos de diferentes densidad en el caso de una aceleración o desaceleración normal a la interfaz, como es el caso de un líquido viajando directamente en un gas. En este caso la gota se desacelera debido a las fuerzas de arrastre generando ondas inestables que aumentan.

Estos modelos han sido empleados y validados en varios códigos tales como KIVA (código basado en Fortran para la simulación CFD) y OpenFOAM. Sin embargo a pesar de lo preciso de estos modelos usualmente no describen todos los regímenes de break-up, puesto que aplican para un régimen en particular, es por esta razón el uso de modelos combinados, los cuales consisten en al menos dos modelos diferentes de break-up lo cual garantiza una mejor precisión de resultados. Uno de los modelos más comunes es el Kelvin-Helmholtz (KH) el cual se usa para inyección a alta presión, sin embargo una de sus desventajas es mostrar tamaños de partícula poco realistas.

Debido a esta debilidad del modelo es necesario combinarlo con otro que permita simular la desintegración de las gotas en gotas de mayor diámetro que las predichas

por el modelo Kelvin-Helmholtz (KH), por esta razón usualmente se combina con el modelo Rayleigh-Taylor (RT) [76, 77, 63, 64].

Modelos híbridos

Estos dos modelos usualmente están combinados con el objetivo de aumentar la precisión en las predicción, ya que en un motor ocurren todos los regímenes de break-up que existen, por lo tanto es común agregar un método para el calculo del break-up primario el cual complementa el método KH-RT para el break-up secundario. Es método es uno de los más comunes para el calculo de la penetración.

A continuación se presentara un análisis del código empleado para el calculo con una descripción detallada de las ecuaciones usadas.

1. OpenFOAM Kelvin-Helmholtz.

En este método se asume que ambas fases son incompresibles además que debido a la turbulencia generada dentro de la tobera crea en la superficie del chorro un espectro sinusoidal de ondas superficiales con un desplazamiento $\eta = \eta_0 \cdot e^{\Omega t}$ causando fluctuaciones en el líquido y el gas. Estas ondas crecen debido por las fuerza aerodinámicas, debidas a la velocidad relativa entre el gas y el líquido. La ecuación de dispersión relaciona la razón de crecimiento de amplitud por unidad de tiempo de una perturbación con su longitud de onda [64]. La solución de esta ecuación asume que la onda con una razón de crecimiento mayor será desprendida del chorro para formar nuevas gotas. En la Figura: 2.36 se muestra el esquema de formación de inestabilidad para el esquema KH.

Esta teoría se aplica al modelado del break-up de las gotas liquidas con un radio r en el que el crecimiento de ondas en la superficie con una razón de aumento Ω y una longitud de onda Λ .

La razón de cambio del radio de la gota, r_d , se asume que decrece en tamaño durante el proceso de break-up y puede ser descrito por:

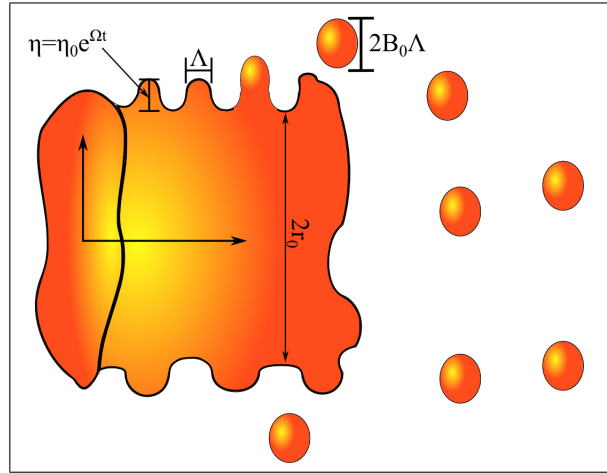


Figura 2.36: Figura esquemática de la formación de gotas por el proceso de inestabilidad KH

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r_d - r_{new}}{\tau_{KH}} \quad (2.99)$$

Esto resulta en un encogimiento de radios donde la razón de reducción a un cierto tiempo t depende de la diferencia entre el valor actual del radio de la gota r_d y al tamaño de las nuevas gotas, r_{new} de acuerdo con la ecuación 2.100, la cual es proporcional a la longitud de onda Λ y así como a el tiempo característico de break-up τ_{KH} el cual se muestra en la ecuación 2.101.

$$r_{new} = B_0 \Lambda \quad (2.100)$$

donde B_0 es una constante de valor fijo igual a 0.61 [78].

$$\tau_{KH} = 3.726 \cdot B_1 \frac{r_d}{\Lambda \Omega} \quad (2.101)$$

donde B_1 es una constante del modelo que se puede ajustar a valores de $B_1 = 1.73$ y $B_1 = 40$ [79]. **Un valor elevado de B_1 lleva a una reducción del break-up y a un incremento en la penetración, mientras que con un valor menor resulta en un incremento en la desintegración del**

chorro, un mejor proceso de mezcla y una reducción de penetración [64]. En la Figura: 2.37 se muestra el código empleado para la resolución del diámetro de la gota.

```

1
2  if (weGas > weberLimit_)
3  {
4      scalar fraction = dt/tauKH;
5
6      // reduce the diameter according to the rate-equation
7      d = (fraction*dc + d)/(1.0 + fraction);
8
9      // stable KH diameter
10     scalar dc = 2.0*b0_*lambdaKH;
11
12    // characteristic Kelvin-Helmholtz breakup time
13     scalar tauKH = 3.726*b1_*r/(omegaKH*lambdaKH);
14

```

Figura 2.37: Código empleado para la resolución del diámetro y el tiempo de break-up KH

Estas relaciones introducen los términos de crecimiento de onda en la superficie Ω y longitud de onda Λ . Ambos parámetros son calculados por el código expuesto en la Figura: 2.38.

```

2  // Note: Reitz is using radius instead of diameter for Re-number
3  scalar reLiquid = rho*Urmag*r/mu;
4  scalar ohnesorge = sqrt(weLiquid)/(reLiquid + VSMALL);
5  scalar taylor = ohnesorge*sqrt(weGas);
6  scalar weGas = 0.5*rhoc*sqr(Urmag)*d/sigma;
7  scalar weLiquid = 0.5*rho*sqr(Urmag)*d/sigma;
8
9  // frequency of the fastest growing KH-wave
10  scalar omegaKH =
11     (0.34 + 0.38*pow(weGas, 1.5))
12     /((1.0 + ohnesorge)*(1.0 + 1.4*pow(taylor, 0.6)))
13     *sqrt(sigma/(rho*pow3(r)));
14
15  // corresponding KH wave-length.
16  scalar lambdaKH =
17     9.02
18     *r
19     *(1.0 + 0.45*sqrt(ohnesorge))
20     *(1.0 + 0.4*pow(taylor, 0.7))
21     /pow(1.0 + 0.865*pow(weGas, 1.67), 0.6);
22

```

Figura 2.38: Código empleado para la resolución del crecimiento de onda en la superficie Ω y longitud de onda Λ para las inestabilidades KH

El código puede ser interpretado para crecimiento de onda en la superficie Ω como se muestra en la ecuación 2.102.

$$\Omega_{KH} = \frac{0.34 + 0.38We_g^{1.5}}{(1 + \mathcal{Z})(1 + 1.4\mathcal{T}^{0.6})} \cdot \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l r^3}} \quad (2.102)$$

Y para su correspondiente longitud de onda Λ de la ecuación 2.103.

$$\Lambda_{KH} = 9.02r_0 \frac{(1 + 0.45\sqrt{\mathcal{Z}})(1 + 1.4\mathcal{T}^{0.7})}{(1 + 0.865We_g^{1.67})^{0.6}} \quad (2.103)$$

Con sus respectivos números adimensionales, que se definen de la siguiente manera:

- Ohnesorge. Número adimensional que relaciona las fuerza viscosas con la fuerza inercial y las fuerzas de tensión.

$$\mathcal{Z} = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\sigma \rho_l D_p}} \quad (2.104)$$

- Taylor. Número adimensional que relaciona las fuerza centrifugas con las viscosas.

$$\mathcal{T} = \mathcal{Z} \sqrt{We_g} = \frac{\mu_l u_{rel}^2}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (2.105)$$

- Weber fase líquida y gaseosa. Número que relaciona el proceso de desintegración mediante las fuerzas aerodinámicas contra la tensión superficial.

$$We = \frac{\rho_{g,l} r_0^2 u_{rel}^2}{\sigma} \quad (2.106)$$

- Reynolds. Las fuerza inerciales a las fuerzas viscosas.

$$Re = \frac{\rho_l r_0 u_{rel}}{\mu_l} \quad (2.107)$$

donde r_0 es el radio de la gota antes del break-up, u_{rel} la velocidad relativa entre la gota y el gas circundante.

2. OpenFOAM Rayleigh-Taylor.

Este método trata la inestabilidad de la interfaz entre dos fluidos de diferentes densidades para el caso de una aceleración o desaceleración normal a la interfaz. La desaceleración de la gota debido a las fuerzas de arrastre también puede ser tratada como una aceleración en dirección al flujo de aire (dirección hacia atrás). Estas ondas inestables pueden crecer en la parte trasera de la gota haciendo que ésta se desintegre por la inercia de las gotas líquidas y los ligamentos que dejan la tobera con una alta velocidad como se muestra en la Figura: 2.39.

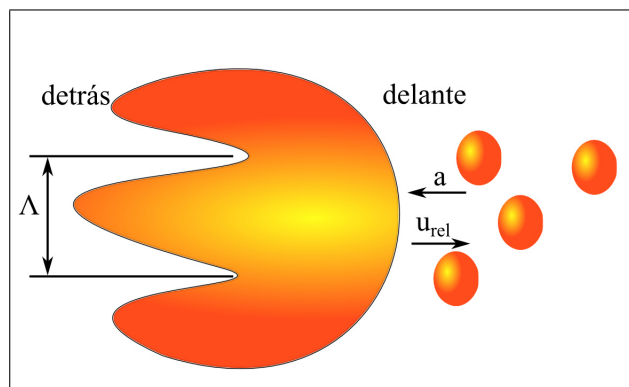


Figura 2.39: Figura esquemática de la formación de gotas por el proceso de inestabilidad RT

donde a representa la aceleración de la interfaz relacionada con la velocidad relativa. Al igual que el modelo KH se introducen los términos de crecimiento de onda en la superficie Ω y longitud de onda Λ . Ambos parámetros son calculados en el código que se muestra en la Figura: 2.40.

```

2
3 vector acceleration = Urel/tMom;
4 vector trajectory = U/mag(U);
5 scalar gt = (g + acceleration) & trajectory;
6
7 // the frequency of the fastest growing RT wavelength.
8 scalar helpVariable = mag(gt*(rho - rhoc));
9 scalar omegaRT = sqrt
10 (
11     2.0*pow(helpVariable, 1.5)
12     /(3.0*sqrt(3.0*sigma)*(rhoc + rho))
13 );
14
15 // RT wave number
16 scalar KRT = sqrt(helpVariable/(3.0*sigma + VSMALL));
17
18 // wavelength of the fastest growing RT frequency
19 scalar lambdaRT = constant::mathematical::twoPi*cRT_/(KRT + VSMALL);
20

```

Figura 2.40: Código empleado para la resolución crecimiento de onda en la superficie Ω y longitud de onda Λ para las inestabilidades RT

El código puede ser interpretado para crecimiento de onda en la superficie Ω mediante la ecuación 2.108.

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2[a(\rho_l - \rho_g)]^{1.5}}{3\sqrt{3\sigma}(\rho_l + \rho_g)}} \quad (2.108)$$

donde a en el código esta interpretado como gt , una relación de la gravedad más la aceleración de la velocidad relativa entre el tiempo de la cantidad de movimiento.

Y para su correspondiente longitud de onda Λ se presenta la ecuación 2.109.

$$\Lambda_{RT} = \frac{2\pi C_{RT}}{\sqrt{\frac{a(\rho_l - \rho_g)}{3\sigma}}} \quad (2.109)$$

donde C_{RT} es la constante ajustable del modelo similar a B_1 en el modelo KH. Mediante el incremento de este valor el break-up se reduce, siempre y cuando la longitud de onda sea mayor al diámetro de la gota, y el tamaño de las nuevas gotas se incrementan.

En la Figura: 2.41 se muestra la combinación del método híbrido KH-RT donde las fuerza aerodinámicas desestabilizan a las gotas para dar la forma de ligamentos, estos ligamentos se desaceleran para romperse en largos fragmentos bien representados por la inestabilidad RT, mientras que la inestabilidad KH con longitud de ondas más cortas se originan en las orillas de estos ligamentos creando ondas que se rompen en gotas de micras de diámetro.

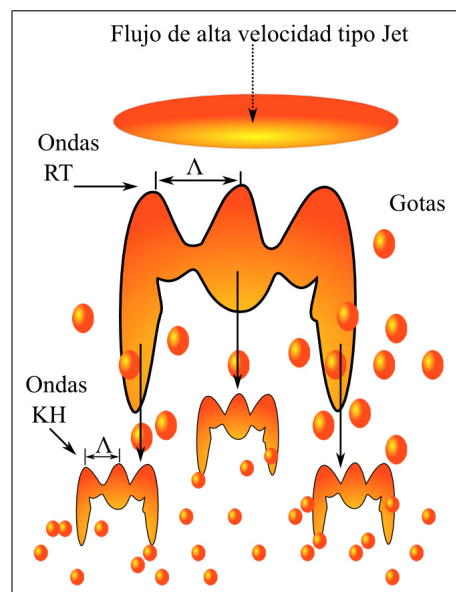


Figura 2.41: Diagrama esquemático de un mecanismo de break-up en régimen castrófico

Si además de este método se utiliza el método blob para la predicción de las gotas iniciales estos dos modelos pueden describir muy bien el comportamiento ya que el primer método puede describir el comportamiento a la salida de la tobera mientras

que el segundo se encarga del resto de la zona del chorro, sin embargo la reducción del tamaño de las gotas predichas por el modelo RT es muy rápida si se aplica a las gotas que esta dejando apenas la tobera, ya que este modelo aplica a cierta distancia de la tobera, únicamente el modelo KH aplica en un régimen de descubrimiento que ocurre cerca de la tobera. por lo tanto el cálculo debe ser invertido como se muestra en la Figura: 2.42.

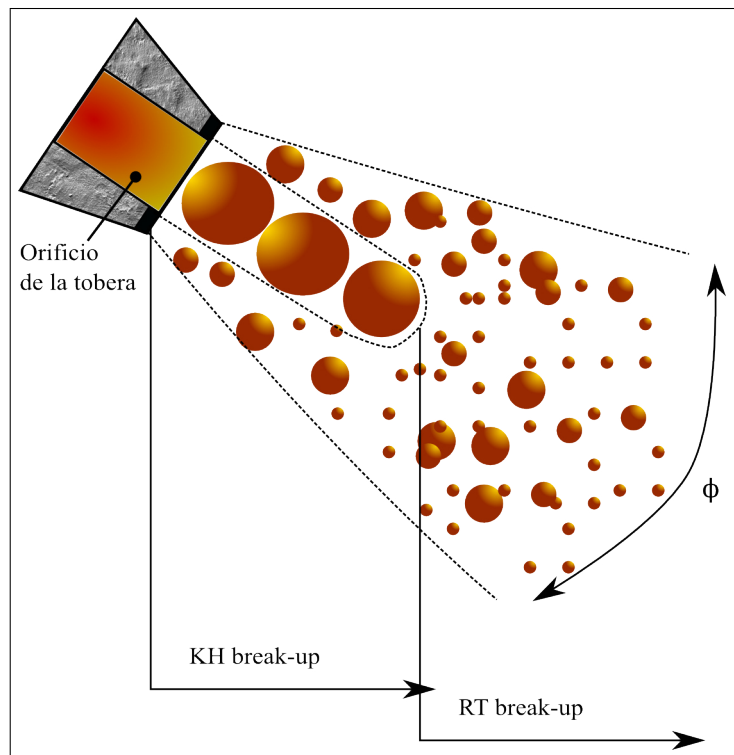


Figura 2.42: Método combinado Blob-KHRT

El modelo KH-RT es uno de los más populares y más usados, ya que genera muy buenos resultados en comparación de datos experimentales [78, 63, 59, 64].

Colisión y coalescencia

La colisión de gotas es un efecto muy importante en la región donde hay un chorro muy denso cerca de la tobera de inyección, donde el número de gotas por volumen es grande y la probabilidad de colisión es alta. Esta colisión es ocasionada por dife-

rencias entre las velocidades de inyección, diferencias entre las desaceleraciones y la velocidad en la trayectoria de las gotas debido a las fuerzas de arrastre, por el break-up, turbulencia, entre otros. El resultado de la colisión dependerá en la energía de impacto y de la razón de los diámetros de las gotas y a las condiciones ambientales tales como la viscosidad del gas o la razón de densidades entre el gas y el combustible. Esta colisión puede resultar en una combinación de las masas mejor conocida como coalescencia, haciendo que la velocidad en la trayectoria de las gotas cambie al igual que el tamaño y el número de gotas. Nuevamente el proceso de transferencia de masa, cantidad de movimiento y energía cambiarán durante la formación de la mezcla.

La colisión se puede dividir en cinco regímenes diferentes que se relacionan con el número de Weber y un parámetro de impacto [80, 64].

En este caso en particular se usará el régimen de coalescencia, el cual se refiere a la colisión de dos gotas que se combinan y forman una sola gota como se muestra en la Figura: 2.43. Por un lado, esto puede ocurrir a bajos números de Weber donde la energía de impacto es pequeña y hay suficiente tiempo para desplazar la capa de gas que se encuentra entre ambas gotas. Por el otro lado, la coalescencia también puede ocurrir a altos números de Weber, donde la velocidad normal es muy elevada que elimina esta capa de aire. La colisión depende de la competición entre la energía de la superficie que intenta mantener la gota junta, y la energía cinética, que se esfuerza en separar las gotas nuevamente.

El código OpenFOAM implementa el modelo de colisión por trayectoria basado en el análisis propuesto por Nordin et al. [63, 81] el cual comenta que la colisión entre dos parcelas puede ocurrir si sus trayectorias logran interceptarse y si el punto de intersección es alcanzado al mismo tiempo que el paso de integración.

En la Figura: 2.44 se muestra el modelo de colisión implementado en el código CFD OpenFOAM el cual toma en cuenta la dirección, así como comprueba si puede ocurrir colisión en el paso de tiempo actual.

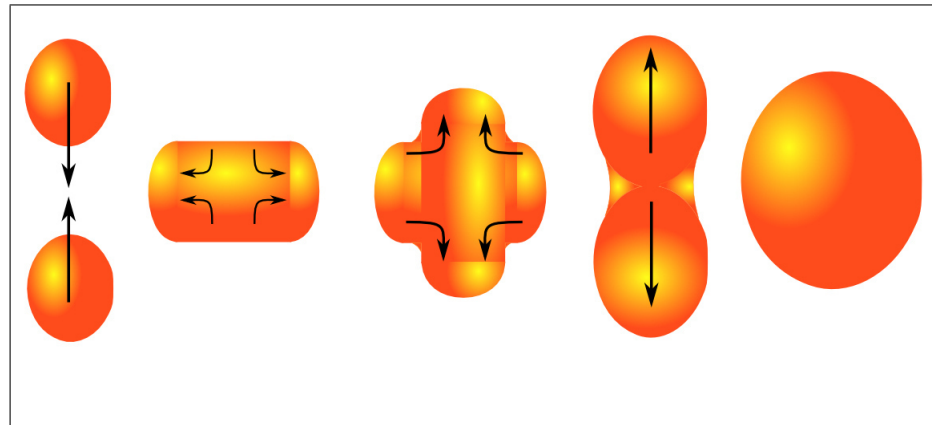


Figura 2.43: Mecanismo de colisión con coalescencia

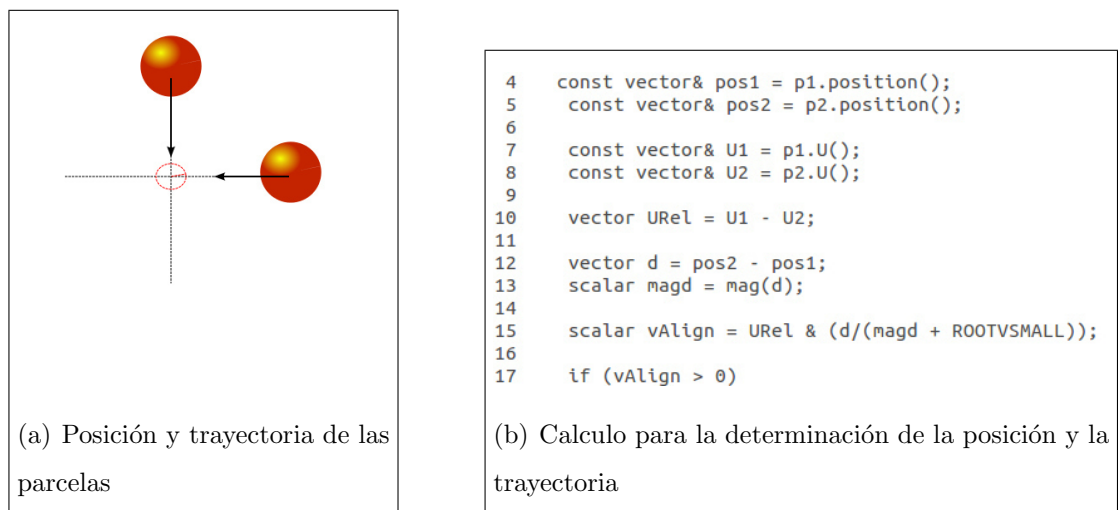


Figura 2.44: Cálculo para el modelo de colisión de trayectoria

donde $d = pos2 - pos1$ es el vector de distancia entre las parcelas, $magd = mag(d)$ la distancia entre las parcelas, $scalar vAlign = URel \& (d / (magd + ROOTVSMALL))$; el producto punto de la velocidad relativa y la normal y $if (vAlign > 0)$ la colisión únicamente si las parcelas viajan una hacia a la otra. Además de tomar en cuenta la posición y la dirección de las parcelas el modelo permite calcular la colisión a menos que la distancia entre las parcelas sea menor que la distancia máxima definida por la velocidad relativa entre las parcelas por el paso del tiempo.

$$U_{1-2}\Delta t > |x_2 - x_1| - \frac{D_{max} + D_{min}}{2} \quad (2.110)$$

donde $U_{1-2} = (U_1 - U_2) \frac{x_2 - x_1}{|x_2 - x_1|}$.

Si se cumplen estos dos requisitos las parcelas tiene oportunidad de una colisión. La desigualdad en la ecuación 2.110 puede ser expresada en términos matemáticos de la siguiente manera: si $\alpha \in [0, \Delta t]$ y $\beta \in [0, \Delta t]$. En términos de código es interpretado como se muestra en la Figura: 2.45:

```

2 |      scalar magU1 = mag(U1) + ROOTVSMALL;
3 |      scalar magU2 = mag(U2) + ROOTVSMALL;
4 |      vector n1 = U1/magU1;
5 |      vector n2 = U2/magU2;
6 |
7 |      scalar n1n2 = n1 & n2;
8 |      scalar n1d = n1 & d;
9 |      scalar n2d = n2 & d;
10 |
11 |     scalar det = 1.0 - sqr(n1n2);
12 |
13 |     scalar alpha = GREAT;
14 |     scalar beta = GREAT;
15 |
16 |     if (mag(det) > 1.0e-4)
17 |     {
18 |         beta = -(n2d - n1n2*n1d)/det;
19 |         alpha = n1d + n1n2*beta;
20 |     }
21 |
22 |     alpha /= magU1*dt;
23 |     beta /= magU2*dt;
24 |

```

Figura 2.45: Variables para dar de alta α y β

donde $scalarmagU1 = mag(U1)$ la magnitud de velocidad de la parcela uno y dos, $vectorn1 = U1/magU1$ la velocidad normalizada de la parcela uno y dos, $scalarn1n2 = n1&n2$ el producto punto de las velocidades normalizadas, $scalarn1d = n1&d$ el producto punto de la velocidad normaliza y el vector de distancia con estas condiciones se generan α y β como constantes con magnitud para poder ser usadas en un sistema de ecuaciones.

$$\begin{aligned} p_{1c} &= pos_1 + \alpha U_1 dt, \\ p_{2c} &= pos_2 + \beta U_2 dt, \end{aligned} \quad (2.111)$$

En la Figura: 2.46 se muestra el sistema que calcula la posible colisión en un paso de tiempo.

```

2
3   if ((alpha > 0) && (alpha < 1.0) && (beta > 0) && (beta < 1.0))
4   {
5       vector p1c = pos1 + alpha*U1*dt;
6       vector p2c = pos2 + beta*U2*dt;
7

```

Figura 2.46: Posible colisión para un paso de tiempo

Finalmente el código calcula la probabilidad de colisión mediante el siguiente código que se muestra en la Figura: 2.47.

```

|scalar closestDist = mag(p1c - p2c);
|
|scalar collProb =
|    pow(0.5*sumD/max(0.5*sumD, closestDist), cSpace_)
|    *exp(-cTime_*mag(alpha - beta));
|
|scalar xx = this->owner().rndGen().template sample01<scalar>();
|
|// collision occurs
|if (xx > collProb)
|{
|    if (d1 > d2)
|    {
|        coalescence = this->collideSorted(dt, p1, p2, m1, m2);
|    }
|    else
|    {
|        coalescence = this->collideSorted(dt, p2, p1, m2, m1);
|    }
|}

```

Figura 2.47: Cálculo de la probabilidad de colisión

La Figura: 2.47 puede ser interpretada mediante la siguiente ecuación 2.112:

$$P = \left(\frac{\frac{1}{2}(sumD)}{\max(\frac{1}{2}(sumD), closestDist)} \right)^{cspace} e^{-ctime|\alpha-\beta|} \quad (2.112)$$

donde $sumD$ corresponde a la suma de los diámetro de la gota uno y dos, $closestDist_{1-2} = |p_{2c}(\beta) - p_{1c}(\alpha)|$ la mínima distancia entre las dos trayectorias, $cspace$ el decaimiento de probabilidad espacial en las afueras del cilindro mediante un barrido hecho por las gotas y $ctime$ el decaimiento de probabilidad temporal.

$cspace$ permite trayectorias cercanas o con una oportunidad de colisión. Tanto α y β contienen información de cuando ocurre la colisión por lo tanto, el término $e^{-ctime|\alpha-\beta|}$ toma en consideración que las parcelas deban de estar en el mismo lugar al mismo tiempo.

Todos estos modelos estas implementados en el código CFD OpenFOAM y en una amplia variedad de códigos. Con este último modelo se termina la interpretación de las ecuaciones de gobierno del fenómeno.

2.5 BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. A. A.-K. Majhool, A. A. S. ALJeebori, *et al.*, “Study of modelling spray penetration of biodisel fuel under transient engine conditions,” *Academic Research International*, vol. 3, no. 3, pp. 70–79, 2012.
- [2] Y. Gao, J. Deng, C. Li, F. Dang, Z. Liao, Z. Wu, and L. Li, “Experimental study of the spray characteristics of biodiesel based on inedible oil,” *Biotechnology Advances*, vol. 27, no. 5, pp. 616–624, 2009.
- [3] B. Mohan, W. Yang, K. L. Tay, and W. Yu, “Experimental study of spray characteristics of biodiesel derived from waste cooking oil,” *Energy Conversion and Management*, vol. 88, pp. 622–632, 2014.
- [4] C. He, Y. Ge, J. Tan, and X. Han, “Spray properties of alternative fuels: A comparative analysis of biodiesel and diesel,” *International Journal of energy research*, vol. 32, no. 14, pp. 1329–1338, 2008.
- [5] B. Kegl and A. Hribernik, “Experimental analysis of injection characteristics using biodiesel fuel,” *Energy & fuels*, vol. 20, no. 5, pp. 2239–2248, 2006.
- [6] K. Yamane, A. Ueta, and Y. Shimamoto, “Influence of physical and chemical properties of biodiesel fuels on injection, combustin and exhaust emission characteristics in a direct injection compression ignition engine,” *International Journal of Engine Research*, vol. 2, no. 4, pp. 249–261, 2001.
- [7] Y.-S. Lin and H.-P. Lin, “Spray characteristics of emulsified castor biodiesel on engine emissions and deposit formation,” *Renewable Energy*, vol. 36, no. 12, pp. 3507–3516, 2011.
- [8] A. advanced Biofuel, “Biodiesel emissions,” Febrero 2007.
- [9] K. Nantha Gopal, A. Pal, S. Sharma, C. Samanchi, K. Sathyanarayanan, and T. Elango, “Investigation of emissions and combustion characteristics of a ci

- engine fueled with waste cooking oil methyl ester and diesel blends,” *Alexandria Engineering Journal*, vol. 53, no. 2, pp. 281–287, 2014.
- [10] M. Lapuerta, J. Rodríguez-Fernández, and J. R. Agudelo, “Diesel particulate emissions from used cooking oil biodiesel,” *Bioresource Technology*, vol. 99, no. 4, pp. 731–740, 2008.
- [11] W. Yuan, A. Hansen, M. Tat, J. Van Gerpen, Z. Tan, *et al.*, “Spray, ignition, and combustion modeling of biodiesel fuels for investigating nox emissions,” *Transactions of the ASAE*, vol. 48, no. 3, pp. 933–939, 2005.
- [12] M. Lapuerta, O. Armas, and J. Rodriguez-Fernandez, “Effect of biodiesel fuels on diesel engine emissions,” *Progress in energy and combustion science*, vol. 34, no. 2, pp. 198–223, 2008.
- [13] M. N. Nabi, M. M. Rahman, and M. S. Akhter, “Biodiesel from cotton seed oil and its effect on engine performance and exhaust emissions,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 29, no. 11, pp. 2265–2270, 2009.
- [14] Z. Utlu and M. S. Koçak, “The effect of biodiesel fuel obtained from waste frying oil on direct injection diesel engine performance and exhaust emissions,” *Renewable Energy*, vol. 33, no. 8, pp. 1936–1941, 2008.
- [15] E. Buyukkaya, “Effects of biodiesel on a di diesel engine performance, emission and combustion characteristics,” *Fuel*, vol. 89, no. 10, pp. 3099–3105, 2010.
- [16] H. Hazar, “Effects of biodiesel on a low heat loss diesel engine,” *renewable Energy*, vol. 34, no. 6, pp. 1533–1537, 2009.
- [17] M. Çetinkaya, Y. Ulusoy, Y. Tekin, and F. Karaosmanoğlu, “Engine and winter road test performances of used cooking oil originated biodiesel,” *Energy Conversion and Management*, vol. 46, no. 7, pp. 1279–1291, 2005.
- [18] L. G. Wade, *Química Orgánica*, vol. 1. Ribera del Loira 28, Madrid: Pearson Education, 5 ed., 2004.

- [19] J. M. Encinar, J. F. Gonzalez, and A. Rodríguez-Reinares, “Biodiesel from used frying oil. variables affecting the yields and characteristics of the biodiesel,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 44, no. 15, pp. 5491–5499, 2005.
- [20] A. Talebian-Kiakalaieh, N. A. S. Amin, and H. Mazaheri, “A review on novel processes of biodiesel production from waste cooking oil,” *Applied Energy*, vol. 104, pp. 683–710, 2013.
- [21] P. Felizardo, M. J. Neiva Correia, I. Raposo, J. F. Mendes, R. Berkemeier, and J. M. Bordado, “Production of biodiesel from waste frying oils,” *Waste management*, vol. 26, no. 5, pp. 487–494, 2006.
- [22] D. Leung and Y. Guo, “Transesterification of neat and used frying oil: optimization for biodiesel production,” *Fuel Processing Technology*, vol. 87, no. 10, pp. 883–890, 2006.
- [23] A. N. Phan and T. M. Phan, “Biodiesel production from waste cooking oils,” *Fuel*, vol. 87, no. 17, pp. 3490–3496, 2008.
- [24] T. Issariyakul, M. G. Kulkarni, A. K. Dalai, and N. N. Bakhshi, “Production of biodiesel from waste fryer grease using mixed methanol/ethanol system,” *Fuel Processing Technology*, vol. 88, no. 5, pp. 429–436, 2007.
- [25] D. Darnoko and M. Cheryan, “Kinetics of palm oil transesterification in a batch reactor,” *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, vol. 77, no. 12, pp. 1263–1267, 2000.
- [26] D. Bajpai and V. Tyagi, “Biodiesel: source, production, composition, properties and its benefits,” *Journal of Oleo Science*, vol. 55, no. 10, pp. 487–502, 2006.
- [27] W. Yuan, A. Hansen, Q. Zhang, *et al.*, “Predicting the physical properties of biodiesel for combustion modeling,” *Transactions of the ASAE*, vol. 46, no. 6, pp. 1487–1493, 2003.

- [28] Y. Ra, R. D. Reitz, J. McFarlane, and C. S. Daw, “Effects of fuel physical properties on diesel engine combustion using diesel and bio-diesel fuels,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2008.
- [29] H. M. Ismail, H. K. Ng, X. Cheng, S. Gan, T. Lucchini, and G. D’Errico, “Development of thermophysical and transport properties for the cfd simulations of in-cylinder biodiesel spray combustion,” *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 8, pp. 4857–4870, 2012.
- [30] M. Sales-Cruz, G. Aca-Aca, O. Sánchez-Daza, and T. López-Arenas, “Predicting critical properties, density and viscosity of fatty acids, triacylglycerols and methyl esters by group contribution methods,” in *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering–(ESCAPE20)*, 2010.
- [31] M. E. Tat and J. H. Van Gerpen, “The specific gravity of biodiesel and its blends with diesel fuel,” *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, vol. 77, no. 2, pp. 115–119, 2000.
- [32] L. F. Ramírez Verduzco, “Density and viscosity of biodiesel as a function of temperature: empirical models,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 19, pp. 652–665, 2013.
- [33] W. Yuan, A. Hansen, and Q. Zhang, “Vapor pressure and normal boiling point predictions for pure methyl esters and biodiesel fuels,” *Fuel*, vol. 84, no. 7, pp. 943–950, 2005.
- [34] J. S. Chickos, H. Zhao, and G. Nichols, “The vaporization enthalpies and vapor pressures of fatty acid methyl esters c18, c21 to c23, and c25 to c29 by correlation-gas chromatography,” *Thermochimica acta*, vol. 424, no. 1-2, pp. 111–121, 2004.
- [35] C.-H. Tu and C.-P. Liu, “Group-contribution estimation of the enthalpy of vaporization of organic compounds,” *Fluid Phase Equilibria*, vol. 121, no. 1, pp. 45–65, 1996.

- [36] M. J. van Bommel, H. A. Oonk, and J. C. van Miltenburg, "Heat capacity measurements of 13 methyl esters of n-carboxylic acids from methyl octanoate to methyl eicosanoate between 5 k and 350 k," *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 49, no. 4, pp. 1036–1042, 2004.
- [37] N. A. Morad, A. M. Kamal, F. Panau, and T. Yew, "Liquid specific heat capacity estimation for fatty acids, triacylglycerols, and vegetable oils based on their fatty acid composition," *JOURNAL-AMERICAN OIL CHEMISTS SOCIETY*, vol. 77, no. 9, pp. 1001–1006, 2000.
- [38] D. Qian, Y. Xinjian, X. Zhihong, *et al.*, "Study and improvement of rihani-doraiswamy estimation method for cp with computer program," *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 4, pp. 73–82, 1989.
- [39] G. A. Iglesias-Silva and K. R. Hall, "An equation for prediction and/or correlation of second virial coefficients," *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 40, no. 8, pp. 1968–1974, 2001.
- [40] R. Ceriani, C. B. Goncalves, and J. A. Coutinho, "Prediction of viscosities of fatty compounds and biodiesel by group contribution," *Energy & Fuels*, vol. 25, no. 8, pp. 3712–3717, 2011.
- [41] H. Nouredini, B. Teoh, and L. D. Clements, "Viscosities of vegetable oils and fatty acids," *Journal of the American Oil Chemists Society*, vol. 69, no. 12, pp. 1189–1191, 1992.
- [42] T. H. Chung, L. L. Lee, and K. E. Starling, "Applications of kinetic gas theories and multiparameter correlation for prediction of dilute gas viscosity and thermal conductivity," *Industrial & engineering chemistry fundamentals*, vol. 23, no. 1, pp. 8–13, 1984.
- [43] R. A. Perkins and M. L. Huber, "Measurement and correlation of the thermal conductivities of biodiesel constituent fluids: methyl oleate and methyl linoleate," *Energy & Fuels*, vol. 25, no. 5, pp. 2383–2388, 2011.

- [44] C. A. Allen, K. C. Watts, and R. G. Ackman, “Predicting the surface tension of biodiesel fuels from their fatty acid composition,” *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, vol. 76, no. 3, pp. 317–323, 1999.
- [45] “Technical data book petroleum refining,” tech. rep., America Petroleum Institute, 1997.
- [46] C. Clark and N. Dombrowski, “Aerodynamic instability and disintegration of inviscid liquid sheets,” *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 329, no. 1579, pp. 467–478, 1972.
- [47] P. Senecal, D. P. Schmidt, I. Nouar, C. J. Rutland, R. D. Reitz, and M. Corradini, “Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 25, no. 6, pp. 1073–1097, 1999.
- [48] J. Stegemann, J. Seebode, J. Baltes, C. Baumgarten, and G. Merker, “Influence of throttle effects at the needle seat on the spray characteristics of a multihole injection nozzle,” *Zaragoza*, vol. 9, p. 11, 2002.
- [49] I. Roisman, L. Araneo, and C. Tropea, “Effect of ambient pressure on penetration of a diesel spray,” *International journal of multiphase flow*, vol. 33, no. 8, pp. 904–920, 2007.
- [50] R. Gjesing, J. Hattel, and U. Fritsching, “Coupled atomization and spray modelling in the spray forming process using openfoam,” *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. 3, no. 4, pp. 471–486, 2009.
- [51] C. F. Spencer and R. P. Danner, “Improved equation for prediction of saturated liquid density,” *Journal of Chemical and Engineering Data*, vol. 17, no. 2, pp. 236–241, 1972.
- [52] J. O. Maloney, *Perry’s Chemical Engineers Handbook*, vol. 1. 8 ed., 2008.
- [53] A. Vetere, “The riedel equation,” *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 30, no. 11, pp. 2487–2492, 1991.

- [54] M. Jaeschke and P. Schley, “Ideal-gas thermodynamic properties for natural-gas applications,” *International journal of thermophysics*, vol. 16, no. 6, pp. 1381–1392, 1995.
- [55] A. Teja and P. Rice, “Generalized corresponding states method for the viscosities of liquid mixtures,” *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, vol. 20, no. 1, pp. 77–81, 1981.
- [56] H.-T. Chen and J.-Y. Lin, “Simultaneous estimations of temperature-dependent thermal conductivity and heat capacity,” *International journal of heat and mass transfer*, vol. 41, no. 14, pp. 2237–2244, 1998.
- [57] A. A. Strechan, G. J. Kabo, and Y. U. Paulechka, “The correlations of the enthalpy of vaporization and the surface tension of molecular liquids,” *Fluid phase equilibria*, vol. 250, no. 1, pp. 125–130, 2006.
- [58] T. Poinso, D. Veynante, *et al.*, “Theoretical and numerical combustion,” 2005.
- [59] R. B. Piccinini, *Eulerian-Lagrangian simulation of a turbulent evaporating spray*. PhD thesis, Master’s thesis, ITA, 2011.
- [60] R. Bird, W. Stewart, and E. Lightfoot, *Fenómenos de Transporte, Segunda edición Reverté*, vol. 1. SA, Barcelona, España: REVERTÉ, 2006.
- [61] A. A. Amsden, P. Orourke, and T. Butler, “Kiva-2: A computer program for chemically reactive flows with sprays,” *NASA STI/recon technical report N*, vol. 89, p. 27975, 1989.
- [62] E. Furbo, “Evaluation of rans turbulence models for flow problems with significant impact of boundary layers,” 2010.
- [63] P. Nordin, *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*. Chalmers University of Technology, 2001.
- [64] C. Baumgarten, *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer, 2006.

- [65] W. K. George, “Lectures in turbulence for the 21st century,” *Chalmers University of Technology*, 2009.
- [66] W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education UK, 2007.
- [67] D. C. Wilcox *et al.*, *Turbulence modeling for CFD*, vol. 2. DCW industries La Canada, CA, 1998.
- [68] W. M. Kays, M. E. Crawford, and B. Weigand, *Convective heat and mass transfer*. Tata McGraw-Hill Education, 2012.
- [69] C. Kralj, *Numerical simulation of Diesel spray processes*. PhD thesis, University of London, 1996.
- [70] W. Jones and B. Launder, “The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence,” *International journal of heat and mass transfer*, vol. 15, no. 2, pp. 301–314, 1972.
- [71] S. B. Pope, *Turbulent flows*. Cambridge university press, 2000.
- [72] I. B. Celik, “Introductory turbulence modeling,” *Western Virginia University*, 1999.
- [73] B. Challen and R. Baranescu, “Diesel engine reference book,” 1999.
- [74] A. Vallier, “Tutorial icolagrangianfoam,” *LUND TEKNISKA HO GSKOLA*, 2010.
- [75] O. Kaario, M. Larmi, and F. Tanner, “Non-evaporating liquid spray simulations with the etab and wave droplet breakup models,” *Zaragoza*, vol. 9, p. 11, 2002.
- [76] M. Kayhani, A. Z. Aghaie, and M. M. Razavi, “Investigation of different numerical models in spray behavior simulation in order to predict the spray tip penetration,”

- [77] M. Yousefifard, P. Ghadimi, and H. Nowruzi, “Three-dimensional les modeling of induced gas motion under the influence of injection pressure and ambient density in an ultrahigh-pressure diesel injector,” *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, pp. 1–9, 2014.
- [78] M. Yousefifard, P. Ghadimi, and M. Mirsalim, “Numerical simulation of biodiesel spray under ultra-high injection pressure using openfoam,” *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, pp. 1–10, 2014.
- [79] M. Turner, S. Sazhin, J. Healey, C. Crua, and S. Martynov, “A breakup model for transient diesel fuel sprays,” *Fuel*, vol. 97, pp. 288–305, 2012.
- [80] J. Qian and C. Law, “Regimes of coalescence and separation in droplet collision,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 331, pp. 59–80, 1997.
- [81] J. Rusten and A. Koesters, “Droplet collisions in dieselspray and implementations of collisions in solidparticle,” tech. rep., Chalmers University of Technology, 2010.

CAPÍTULO 3

PLANTEAMIENTO DE LA TESIS

3.1. Introducción	113
3.2. Síntesis del marco teórico	114
3.3. Objetivos.	117
3.3.1. Objetivo general.	117
3.3.2. Objetivos específicos.	117
3.4. Metodología de la tesis	118
Bibliografía	122

3.1 INTRODUCCIÓN

El presente capítulo se centrará en dar una descripción del contenido y planteamiento de la investigación realizada. A continuación se exponen los apartados presentes en este capítulo: En el primer apartado, se dará una breve síntesis del marco teórico descrito en el capítulo 2, en el que se expondrán los puntos estudiados sobre la inyección del chorro de biodiesel además de las carencias y ambigüedades que justifican este estudio. En el segundo, se expondrá el objetivo general y los objetivos específicos que se pretenden alcanzar para cubrir las carencias debido a la

incertidumbre en la literatura relacionada con la simulación de un chorro de biocombustible. En el tercero, se describirá la metodología que se empleará para alcanzar los objetivos planteados finalmente, se describirán las aportaciones esperadas en este trabajo.

3.2 SÍNTESIS DEL MARCO TEÓRICO

El biodiesel derivado del aceite usado de cocina es una de las promesas para el desarrollo energético eficiente, económico y en cierta manera sustentable. Sin embargo, existe la necesidad de analizar las ventajas y desventajas de su uso.

Estas ventajas y desventajas están ligadas con las propiedades de transporte del biodiesel, las cuales afectan a la penetración del chorro y el proceso de mezcla, un claro ejemplo de la influencia de las propiedades en el proceso de mezcla es en el aumento en la presión de inyección para poder suministrar la misma masa dentro de la cámara de combustión que si se usara diesel [1, 2].

Uno de los beneficios de estas propiedades es su efectividad en la reducción de emisiones de hidrocarburos no quemados, la disminución en la formación de CO_2 y la disminución de la densidad de humos de escape, debido a la combustión carente de hollín y material particulado, sin embargo estas ventajas no se encuentran libres de desventajas, tal es el caso en la formación de emisiones de NO_x , debido a las altas temperaturas que alcanza la combustión del biodiesel mayormente influenciada por las cadenas oxigenadas de metil esterres que conforman el biodiesel además su baja capacidad calorífica disminuye la potencia del motor lo que se traduce en un incremento en el consumo del combustible [3].

Dichos efectos son influenciados por las propiedades de transporte, las cuales a su vez son influenciadas por la composición química del biodiesel. El biodiesel en sí es una mezcla de una amplia variedad de metil esterres de ácidos grasos, por sus siglas en ingles *FAME* los cuales están presentes en mayor o menor porcentaje en el bio-

diesel dependiendo de su origen. En el caso particular del biodiesel del aceite usado de cocina éste suele tener una composición más variada de ácidos grasos saturados e insaturados, los cuales al momento del calentamiento rompen sus cadenas por la presencia del doble enlace y se hidroliza rápidamente con el agua presente en los alimentos promoviendo la formación de ácidos grasos saturados, los cuales afectan directamente el proceso de transesterificación y las propiedades de transporte del combustible [4].

Determinar estas propiedades de transporte y termo-físicas de un biodiesel es una tarea compleja, ya que no se puede estandarizar el biodiesel dado que, como se menciono anteriormente, dependiendo de la fuente para la producción de biodiesel será su composición de ácido grasos los cuales afectarán el movimiento del fluido por su estructura molecular, sin embargo, esta estructura permite determinar sus propiedades en base a correlaciones empíricas de grupos funcionales presentes en la molécula del ácido graso, permitiendo que esta desventaja se convierta en una estrategia útil y ampliamente usada e investigada, sin embargo la implementación de estas propiedades en códigos CFD esta poco explorada.

El chorro de biodiesel está influenciado por doce propiedades de transporte y termo-físicas: la densidad, presión de vapor, entalpía de vaporización, capacidad calorífica del líquido y el gas, segundo coeficiente virial, la viscosidad líquida y del gas, conductividad térmica del líquido y del gas, la tensión superficial y la difusividad de vapor, siendo la viscosidad del líquido, la densidad, presión de vapor y tensión superficial; las propiedades que mayor influencia tienen en la formación del chorro y el proceso de mezcla, comportamiento representado por los números adimensionales que caracterizan este fenómeno y que a su vez incluyen las propiedades que más influyen en la formación del chorro. [5].

La formación del chorro influenciado por estas propiedades se puede llevara a cabo en dos principales etapas: la ruptura primaria, donde grandes gotas equivalente al diámetro de los orificios de la tobera chocan entre ellas uniéndose y mezclándose y la ruptura secundaria, donde estas gotas de gran tamaño forman ligamentos que se rompen por la inestabilidad de la interfase gas líquido generando gotas más pe-

queñas, las cuales posteriormente se evaporan y se mezclan con el gas ambiental. Esta ruptura del chorro permite que éste avance dentro de la cámara de combustión; a esta distancia se le conoce como penetración, la cual es un parámetro característico de mezcla que se define como la distancia entre la sección de salida del orificio de la tobera y el frente del chorro, la cual aumenta debido a que las gotas inicialmente intercambian cantidad de movimiento con el gas haciendo que las gotas posteriores transfieran menos cantidad de movimiento, lo cual aumenta su traslado en la cámara de combustión. Para un biodiesel aplica el mismo principio con la diferencia de que el aumento en sus propiedades de transporte aumenta la dificultad de las fuerzas aerodinámicas del gas para favorecer la desintegración de la gota haciendo que éste penetre más dentro de la cámara de combustión [6].

Con el objetivo de poder visualizar este comportamiento es posible emplear dos vías: de manera experimental o mediante el uso de herramientas de modelado, esta última se empleará en el presente trabajo, dichas herramientas de modelado tratan al chorro como un flujo multifásico disperso originado por la inestabilidad de un líquido a alta presión emergiendo en una atmósfera gaseosa. Dicho fenómeno puede ser evaluado mediante una descripción Euleriana-Lagrangiana donde la fase gaseosa se modela en el marco Euleriano, el cual está descrito por las ecuaciones de Navier-Stokes empleando un promedio de Favre, junto con un modelo convencional de turbulencia mientras que la fase dispersa se modela en un marco Lagrangiano, el cual trata a las gotas como puntos mágicos individuales.

Aquí se acoplan ambas fases, ya que la cantidad de movimiento de la gota se reduce mientras que la velocidad del gas incrementa. Esto junto con un modelo híbrido de Break-up KH-RT, se mide el cambio de radio de una gota tomando en cuenta su velocidad y su radio dentro de la cámara de combustión así como la colisión y coalescencia de las gotas, las cuales afectan su masa y su distancia [7].

Estos cálculos ocupan que las propiedades de transporte sean introducidas al código, sin embargo el uso de modelos simples permite aplicar estas propiedades sin modificaciones excesivas en el código, pero pocos son los autores que reportan la forma de implementación [8].

3.3 OBJETIVOS.

Con base en a la síntesis del marco teórico, se han identificado áreas de oportunidad relacionadas con la simulación del chorro de una mezcla de biodiesel y diesel, adicionalmente también se han identificado ambigüedades en la implementación de las propiedades de transporte y termo-físicas. Por consiguiente, tomando en cuenta las áreas de oportunidad y ambigüedades identificadas se han planteado los siguientes objetivos.

3.3.1 OBJETIVO GENERAL.

Profundizar en el comportamiento de un chorro de biocombustible y su influencia en el proceso de formación de mezcla dentro de la cámara de combustión al variar el porcentaje de biodiesel en la mezcla de biodiesel-diesel.

Con el propósito de alcanzar el objetivo general previamente descrito, se han planteado los siguientes objetivos específicos.

3.3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.

- Estudiar la composición de un biodiesel, derivado del aceite usado de cocina.

- Determinar las propiedades de transporte y termo-físicas del biodiesel derivado del aceite usado de cocina; dicha actividad es posible llevarla a cabo mediante experimentación; sin embargo, de momento en las instalaciones del Laboratorio de Investigación e Innovación en Tecnología Energética (LIITE) no se cuenta

con equipo adecuado para la determinación de las propiedades en función de la temperatura. Por lo tanto, se recurre al uso de modelos empíricos que emplean la estructura molecular de la composición previamente mencionada con la finalidad de reproducir las propiedades y estudiar su influencia en el proceso de mezcla.

- Obtener los coeficientes para los diversos modelos usados por el código CFD OpenFOAM para cada ácido graso y para la mezcla de biodiesel.

- Realizar diversas simulaciones de un biodiesel en mezcla con un diesel fósil para estudiar la influencia del biodiesel en la penetración del chorro, el cual es un parámetro que caracteriza el proceso de mezcla.

Seguidamente se describirá la metodología que se seguirá en el presente trabajo, para alcanzar cada uno de los objetivos planteados.

3.4 METODOLOGÍA DE LA TESIS

La metodología general que se seguirá para alcanzar cada uno de los objetivos que se han planteado, consiste de cinco etapas: (1) Selección de los combustibles, (2) Determinación de la composición química del biodiesel, (3) Determinación de las propiedades de transporte y termo-físicas del biodiesel, (4) Planteamiento de las mezclas biodiesel-diesel y (5) Simulación CFD del chorro mediante el código CFD OpenFOAM. En la Figura: 3.1 se describen cada una de las estas etapas. A continuación se proporcionan más detalles de las etapas que conforman la metodología.

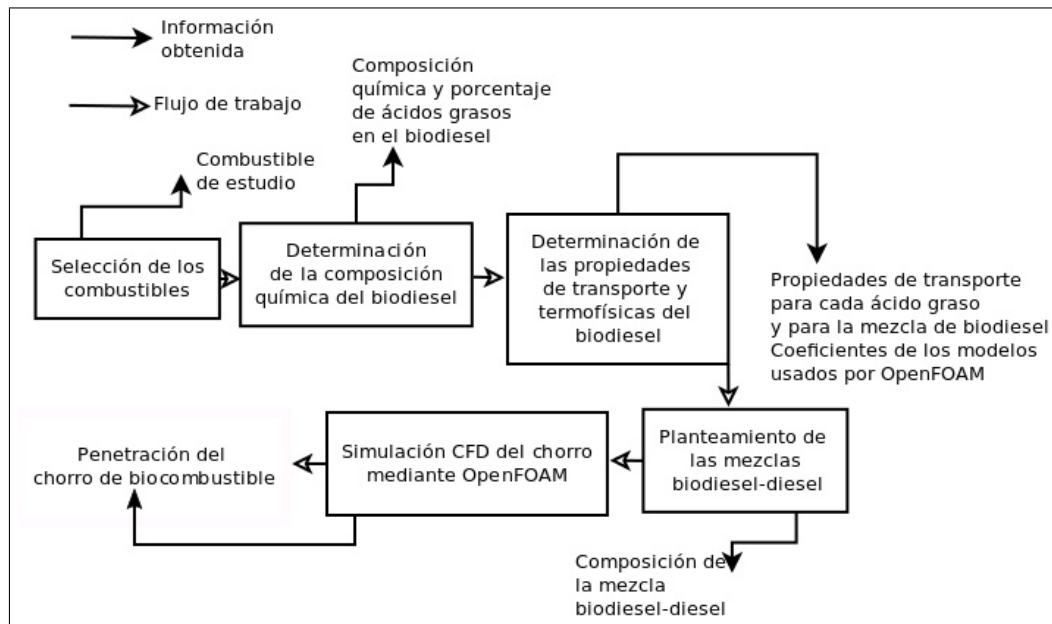


Figura 3.1: Metodología general

Selección de combustibles

Existe una amplia variedad de biocombustibles, y uno de los más prometedores es el biodiesel, especialmente el derivado del aceite usado de cocina por sus virtudes económicas y sustentables. Por esta razón el biocombustible objeto de estudio será el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Determinación de la composición química del biodiesel

Para estudiar la influencia de la mezcla biodiesel-diesel en el proceso de mezcla, es necesario comprender el papel que juegan las propiedades de transporte del biodiesel, para ello se requiere analizar la composición del biodiesel.

Para llevar a cabo el análisis de la composición del biodiesel se empleará un cromatógrafo de gases de la marca Bruker, modelo 450-GC, el cual está compuesto, entre otros componentes por una columna de 30 metros de longitud y 0.32 milíme-

tros de diámetro interno.

Determinación de las propiedades del biodiesel

Dependiendo de la composición del biodiesel se tendrá una determinada eficiencia del proceso de mezcla, para conocer más detalles de este proceso es necesario determinar las propiedades de transporte del biocombustible. Esta determinación de las propiedades se realizará empleando correlaciones empíricas que tomen en cuenta la composición del biodiesel, y así de esta manera es posible determinar las propiedades.

Los modelos que emplea el código CFD OpenFOAM para las propiedades de transporte son universales y ampliamente utilizados, mismos que pueden usarse para otra aplicación independiente del modelado de un chorro diesel, empleando únicamente los coeficientes obtenidos para cada ácido graso.

Planteamiento de las mezclas biodiesel-diesel

Las propiedades de transporte del biodiesel afectan a los siguientes aspectos: a la eficiencia del proceso de mezcla, al proceso de combustión y a la potencia del motor, entre otros. Estas son las principales razones por lo que comúnmente el biodiesel se emplea como una mezcla binaria con diesel. Con el fin de profundizar en el efecto de esta mezcla sobre la eficiencia del proceso de mezcla, se plantea caracterizar a través de modelado la penetración de un chorro de biodiesel y otro de diesel, parámetro que sirve para caracterizar al proceso de mezcla, para ello en primer lugar se realizará esta caracterización para un diesel puro (B0) y un biodiesel puro (B100), los resultados obtenidos de estas caracterizaciones servirán como marco de referencia para analizar las siguientes mezclas binarias: 20 % biodiesel- 80 % diesel (B20) y 50 % biodiesel- 50 % diesel (B50).

Simulación del chorro

En este capítulo se recoge toda la información que se ha generado en los apartados anteriores, logrando así simular un chorro de biocombustible. Concretamente para llevarlo a cabo se utilizará el código libre de CFD OpenFOAM, el cual permite modificar y agregar información para simulara cualquier liquido existente a través de la creación de librerías específicas donde se introducen los coeficientes obtenidos para las propiedades de transporte y termo-físicas.

Adicionalmente, el código CFD OpenFOAM permite controlar y modificar por un lado, las condiciones termodinámicas del gas en el interior de la cámara de combustión, es decir, temperatura, presión y densidad y, por el otro lado, los parámetros de inyección, geometría del inyector, presión de inyección, tiempo de energización del inyector, el diámetro de la sección de salida del orificio de la tobera, el coeficiente de descarga y el ángulo de apertura del chorro.

La simulación se realiza empleando el método de volúmenes finitos, el cual permite modificar la geometría y la calidad de malla.

Una vez realizadas las simulaciones se lleva a cabo un post-procesado de los datos obtenidos de las simulaciones a través de comandos `bash` para la extracción de la información relacionada con la penetración del chorro, la cual se almacena en un fichero de trabajo o archivo `log`.

3.4 BIBLIOGRAFÍA

- [1] C. He, Y. Ge, J. Tan, and X. Han, “Spray properties of alternative fuels: A comparative analysis of biodiesel and diesel,” *International Journal of energy research*, vol. 32, no. 14, pp. 1329–1338, 2008.
- [2] B. Mohan, W. Yang, K. L. Tay, and W. Yu, “Experimental study of spray characteristics of biodiesel derived from waste cooking oil,” *Energy Conversion and Management*, vol. 88, pp. 622–632, 2014.
- [3] Z. Utlu and M. S. Koçak, “The effect of biodiesel fuel obtained from waste frying oil on direct injection diesel engine performance and exhaust emissions,” *Renewable Energy*, vol. 33, no. 8, pp. 1936–1941, 2008.
- [4] A. Talebian-Kiakalaieh, N. A. S. Amin, and H. Mazaheri, “A review on novel processes of biodiesel production from waste cooking oil,” *Applied Energy*, vol. 104, pp. 683–710, 2013.
- [5] H. M. Ismail, H. K. Ng, X. Cheng, S. Gan, T. Lucchini, and G. D’Errico, “Development of thermophysical and transport properties for the cfd simulations of in-cylinder biodiesel spray combustion,” *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 8, pp. 4857–4870, 2012.
- [6] C. Baumgarten, *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer, 2006.
- [7] P. Nordin, *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*. Chalmers University of Technology, 2001.
- [8] M. Yousefifard, P. Ghadimi, and M. Mirsalim, “Numerical simulation of biodiesel spray under ultra-high injection pressure using openfoam,” *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, pp. 1–10, 2014.

CAPÍTULO 4

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL BIODIESEL

4.1. Selección del combustible	123
4.2. Determinación de la composición química	124
4.2.1. Cromatografía de gases	125
4.3. Perfil de ácidos grasos y composición	133
4.4. Conclusiones	137
Bibliografía	138

4.1 SELECCIÓN DEL COMBUSTIBLE

Como se comentó en el capítulo 1, el biodiesel derivado del aceite usado de cocina es uno de los bioenergéticos más prometedores por su rentabilidad económica y su sustentabilidad ambiental. Sin embargo el biodiesel puede ser usado en conjunto con otros bioenergéticos como bioetanol una práctica empleada para optimizar el uso del combustible, mejorar las propiedades de transporte relacionadas con la formación del chorro y disminuir el tamaño de las gotas para eficientizar el proceso

de mezcla [1].

A pesar de los efectos positivos provocados por la adición de otro bioenergético el biodiesel por si solo es viable económicamente si es mezclado con diesel fósil con el fin de disminuir los efectos negativos provocados por el aumento en el valor absoluto de las propiedades de transporte y termo-físicas.

Uno de los factores que determinan el potencial del biodiesel de aceite usado de cocina es su procedencia, la cual convierte un desecho en una materia prima útil para la producción, sin embargo a diferencia de un aceite virgen los aceites de cocina por su procedencia y por el tratamiento térmico al que son expuestos pueden tener más componentes que uno virgen. Cabe recordar que los aceites de los cuales procede el biodiesel son mezclas de triglicéridos que pueden contener varios tipos de ácidos grasos saturados e insaturados, adicionalmente a esto el calentamiento al que es expuesto beneficia el rompimiento de los dobles enlaces en los ácidos grasos poliinsaturados (indica la presencia de más un doble enlace) generando ácidos grasos saturados con una amplia gama de número de carbonos, los cuales pueden variar desde ácido butírico con 4 carbonos hasta ácido behénico con 22 carbonos [2].

Es por esta razón que la selección del combustible permite predecir su composición y con esto el comportamiento del fluido y la posterior formación de la nube atomizada en mezcla con el gas circundante.

A continuación se presenta la metodología que se empleará para la determinación de la composición química del biodiesel derivado del aceite usado de cocina mediante cromatografía de gases.

4.2 DETERMINACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA

Como se comentó anteriormente la composición del biodiesel es un factor determinante no solo para saber su procedencia sino además sirve para predecir su comportamiento durante el proceso de la inyección y la formación de la mezcla. Esta

determinación de los componentes del biodiesel se puede llevar a cabo mediante la técnica de cromatografía de gases.

Mohan et al. [3] exponen la composición del biodiesel analizada y obtenida mediante un cromatógrafo de gases y masas bajo condiciones similares a las usadas para esta experimentación. La cromatografía de gases puede ser usada para determinar propiedades de transporte como el caso de las entalpías de vaporización [4].

La descripción de la técnica, el equipo y la metodología empleada puede ser consultada en el trabajo realizado por Harris et al. [5].

4.2.1 CROMATOGRAFÍA DE GASES

La técnica de la cromatografía de gases consiste en hacer pasar un analito (gas o líquido volátil), el cual es arrastrado por una fase gaseosa conocida como gas portador. Es habitual que la muestra de estudio sea un líquido volátil conocida como fase estacionaria, la cual se inyecta a través de un septo en un inyector caliente, en cuyo interior se evapora. Este vapor es arrastrado por un gas portador (fase móvil) usualmente He , N_2 o H_2 en el cual los analitos son separados por diferencia en puntos de ebullición, los cuales llegan a un detector que arroja una respuesta que es medida.

En la Figura: 4.1 se muestra el cromatógrafo de gases Bruker 450-GC, que será utilizado en el presente trabajo. Este está compuesto por tres componentes principales: (1) el sistema de inyección, (2) la columna y (3) el detector. Seguidamente se darán más detalles de cada uno de estos componentes.

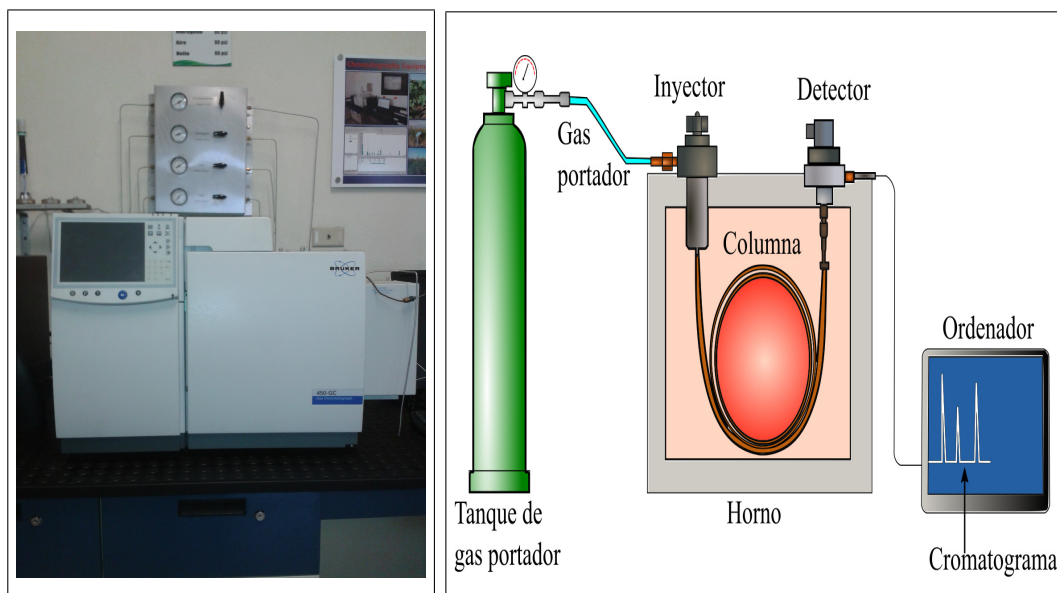


Figura 4.1: Cromatógrafo de gases Bruker 450-GC

Descripción del equipo

1. Sistema de inyección

El sistema de inyección está compuesto de un diafragma de silicona conocido como septa en el cual se inyecta la muestra a un volumen de entre $0.1 - 2 \mu\text{l}$ a modo de *sandwich* (ver Figura: 4.2), el cual no es más que la inserción de la muestra entre dos capas de aire con el fin de evitar que los componentes más volátiles se evaporen y no logren ser detectados y además poder limpiar la jeringa de trazas de muestra.

Como método de inyección se utilizó el método conocido como sin división o splitless, el cual es la mejor manera para niveles traza de solutos de alto punto de ebullición, como son los ácidos grasos de largas cadenas de carbonos en disolventes de bajo punto de ebullición como es el caso del tolueno, solvente usado en este experimento por su bajo punto de ebullición, en comparación con

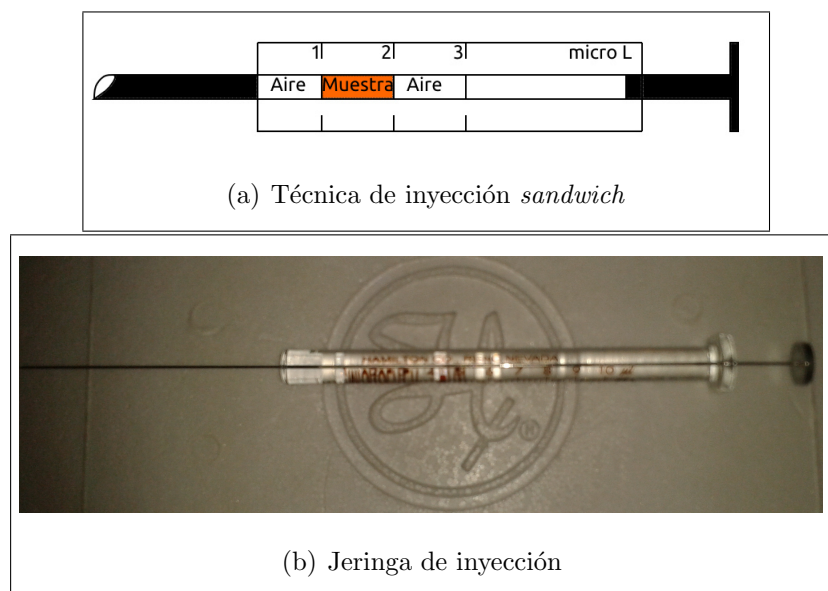


Figura 4.2: (a) Técnica de inyección y (b) Jeringa de inyección usada

los ácidos grasos aproximado a 106°C mientras que el ácido butírico ($\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$) de cuatro carbonos tiene un punto de ebullición aproximado a 163°C .

En la Figura: 4.3 se muestra la septa, a través de la cual se realiza la inyección durante un tiempo de 1-2 segundos con esto se asegura que la muestra tenga tiempo de entrar a la columna.

2. Columna tubular abierta

La mayoría de los análisis de cromatografía utilizan columnas tubulares abiertas, las cuales están fabricadas de sílice fundida SiO_2 y recubiertas de algún material resistente a altas temperaturas como poliamida. En la Figura: 4.4 se muestra la columna empleada para este análisis, una columna Bruker BR-S WAX con una longitud de 30 metros por 0.32 milímetros de diámetro interno.

Estas columnas en el interior están recubiertas de una película líquida usualmente un líquido de las mismas características químicas que la muestra ha

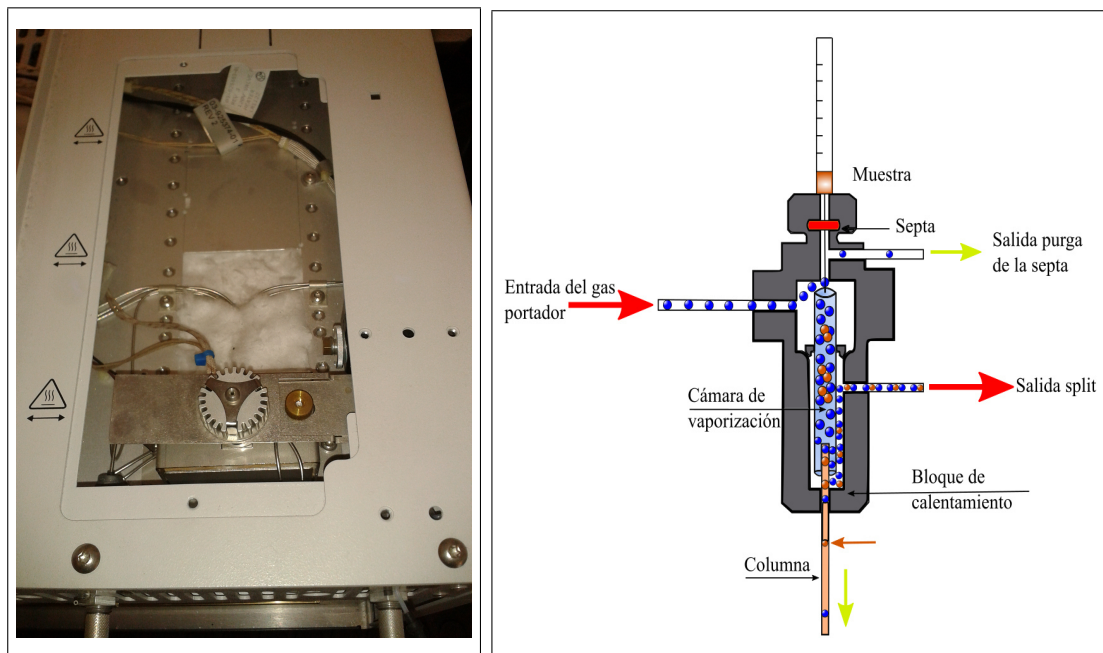


Figura 4.3: Septa de inyección de muestra de biodiesel



Figura 4.4: Columna tubular abierta Bruker BR-S WAX

analizar, de modo que se puede disolver la muestra de interés, para el caso de los ácidos grasos los cuales se les puede considerar no polares puesto que a pesar de tener una región polar hidrófila (que interactúa con el agua), que es la zona del carboxílico, la región no polar hidrófoba (que repele el agua), que es la zona hidrocarbonada, domina a toda la molécula, por lo tanto se le puede considerar como un componente no polar, en ese caso el recubrimiento interno de la columna debe de ser un componente de polaridad intermedia o débil en este caso se recubre de éter. En la Figura: 4.5 se muestra el mapa de potencial electrostático, donde la región roja muestra una zona rica en electrones alrededor de la carga negativa parcial (zona carboxílica) y una región azul pobre en electrones alrededor de las cargas positivas parciales.

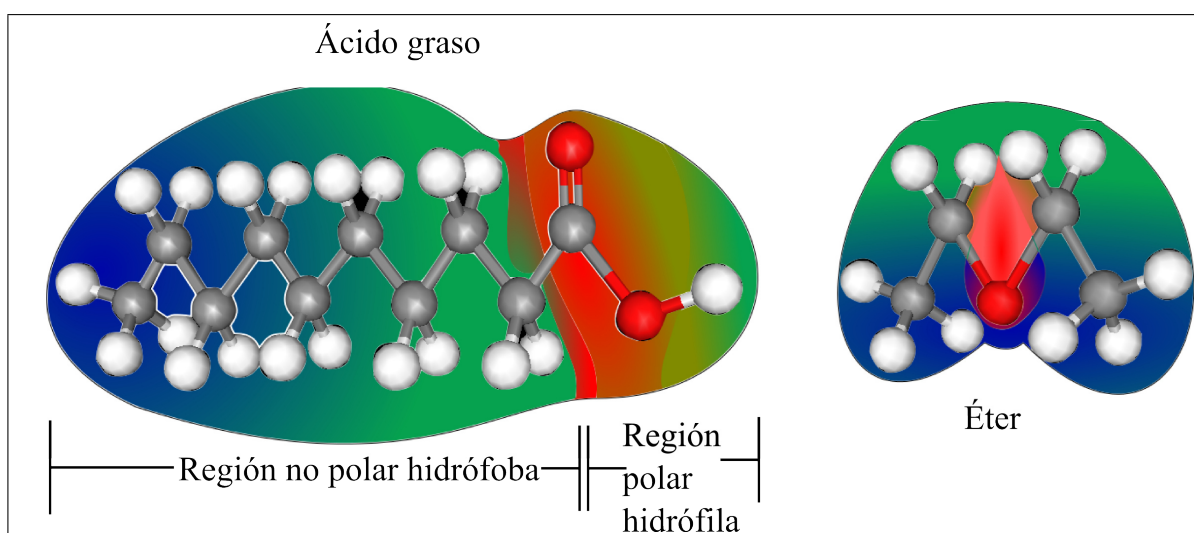


Figura 4.5: Mapa de potencial electrostático de un ácido graso y un éter

La muestra recorre la columna donde presenta tiempos relativos de retención a medida que varía la polaridad de la fase estacionaria, la fuerza que determina esta retención son los enlaces por puente de hidrógeno. Una fase estacionaria muy polar retendrá componentes muy polares. En la Figura: 4.6 se muestra el camino que recorre la muestra y como va siendo detectada según el tiempo relativo que presenta.

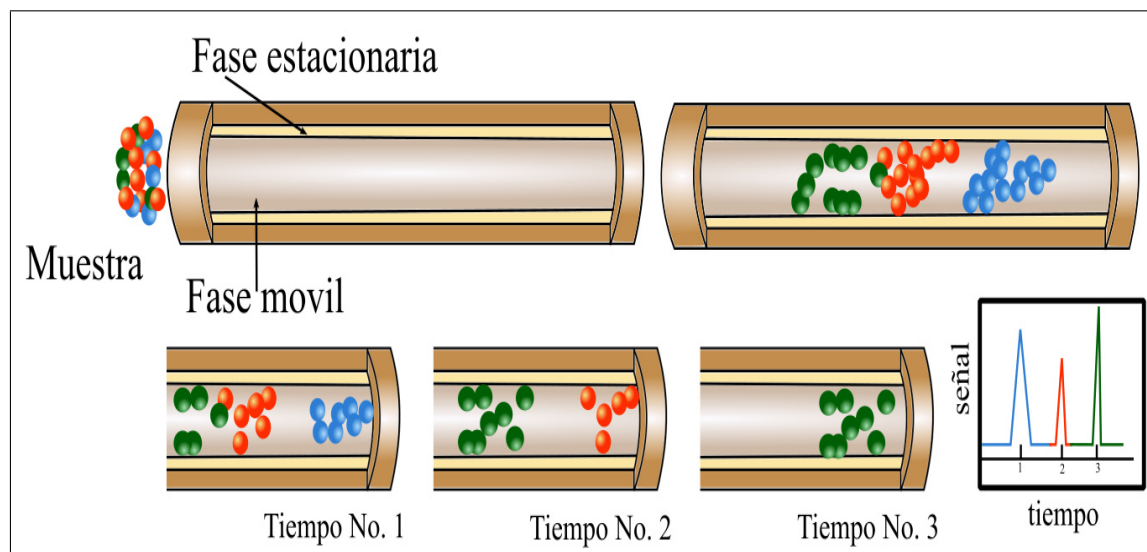


Figura 4.6: Esquema de tiempo de retención para una muestra dentro de la columna

3. Detector flama ionizada o FID por su siglas en ingles *Flame Ionization Detector*

Uno de los métodos más fiables es comparar tiempos de retención añadiendo una muestra conocida, en este caso heptadecanoato, a la muestra del biodiesel. Este compuesto ya se tiene registro en las librerías del cromatógrafo, por lo tanto se puede identificar comparando su espectro con los guardados en el ordenador. Para determinar su porcentaje se escogen condiciones de respuesta lineal, que permiten correlacionar el área del pico con la cantidad del componente en la muestra.

El detector usado en esta experimentación es de flama ionizada en el cual la muestra proveniente de la columna se quema con una mezcla de H_2 y aire donde los átomos de carbono producen radicales CH , los cuales en contacto con oxígeno producen iones CHO^+ , esta producción de iones es proporcional al número de átomos de carbono que penetran en la flama. En la ecuación 4.1 se muestra la reacción de oxidación que genera los iones CHO^+ .



Los cationes que se producen en la llama conducen corriente eléctrica desde la punta del quemador, que actúa como ánodo, a un colector catódico. Esta corriente eléctrica es la señal que da al detector, el cual se ilustra en la Figura: 4.7, y que se lee en el ordenador.

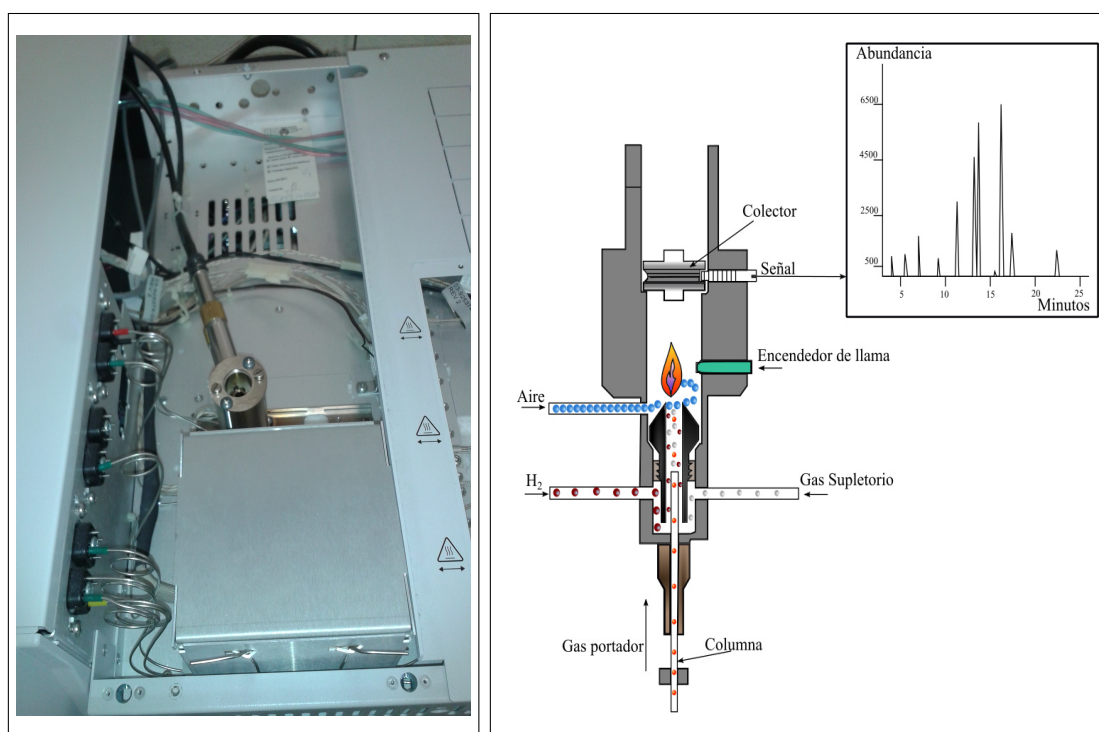


Figura 4.7: Detector de flama ionizada FID

Éstos son los elementos que componen el cromatógrafo de gases empleado para la realización de este trabajo, seguidamente se describirá la metodología experimental para determinar la composición del biodiesel derivado aceite usado de cocina.

Ensayos experimentales

Con el objeto de evaluar lípidos y triglicéridos es necesario utilizar 50 miligramos de la muestra disuelta en 1 mililitro de solución conocida en esta caso heptadecanoato [6].

En la Figura: 4.8 se muestran las dos pruebas realizadas con la misma masa de 50 miligramos, con el fin de eliminar el error causado por la medición del peso .



Figura 4.8: (a) 50 miligramos de biodiesel y (b) Doble vial

Para eliminar el error producido en el cromatógrafo se realizarán 7 diferentes mediciones para cada vial, las cuales serán promediadas para la obtención del perfil de ácidos grasos presentes en el biodiesel.

Cada ácido graso tiene diferente tiempo de retención según su número de carbonos, por lo tanto es necesario evaluar un perfil conocido o estandarizado a modo cualitativo para determinar cuales son los ácidos grasos presentes. Para llevar a cabo esta actividad se hizo uso del estándar *SUPELCO F.A.M.E mix, C₄-C₂₄*. En la Tabla: 4.1 se muestran los tiempos de retención obtenidos:

Compuesto	Tiempo de retención [min]
C4	7.83
C6:0	9.57
C8:0	10.21
C10:0	11.35
C11:0	12.48
C12:0	13.42
C13:0	13.54
C14:0	14.58
C14:1	14.96
C15:0	15.56
C15:1	15.93
C16:0	16.56
C16:1	16.8
C17:0	17.53
C17:1	17.82
C18:0	18.62
C18:1n9t	18.88
C18:1n9c	19.39
C18:2n6t	19.74
C18:2n6c	20.14

4.3 PERFIL DE ÁCIDOS GRASOS Y COMPOSICIÓN

Una vez determinado el cromatograma del estándar SUPELCO se prosiguió a determinar la composición del biodiesel derivado del aceite usado de cocina así como su perfil y cromatograma. En la Tabla: 4.2, se muestran los resultados asociados a la composición del biodiesel de estudio. Las siglas *TR* descritas en esta tabla repre-

Compuesto	Tiempo de retención [min]
C20:0	20.91
C18:3n6	21.15
C20:1	21.75
C18:3n3	22.11
C21:0	22.42
C20:2	22.59
C22:0	23.27
C20:3n6	23.36
C22:1n9	23.64
C20:3n3	24.27
C23:0	24.61

Tabla 4.1: *Tiempos de retención obtenidos para el estándar SUPELCO*

sentan el tiempo de retención.

El perfil de ácidos grasos obtenido tiene la misma tendencia que el perfil de ácidos grasos reportado por Issariyakul et al. [2] y por Lapuerta et al. [7] con la diferencia que caracteriza al biodiesel derivado del aceite usado de cocina del biodiesel de aceite virgen, la procedencia y el tratamiento térmico, factores que favorecen la formación de ácidos grasos saturados. En la Figura: 4.9 se muestra el cromatograma del biodiesel objeto de estudio, concretamente en este se pueden observar el manera gráfica los tiempos de retención.

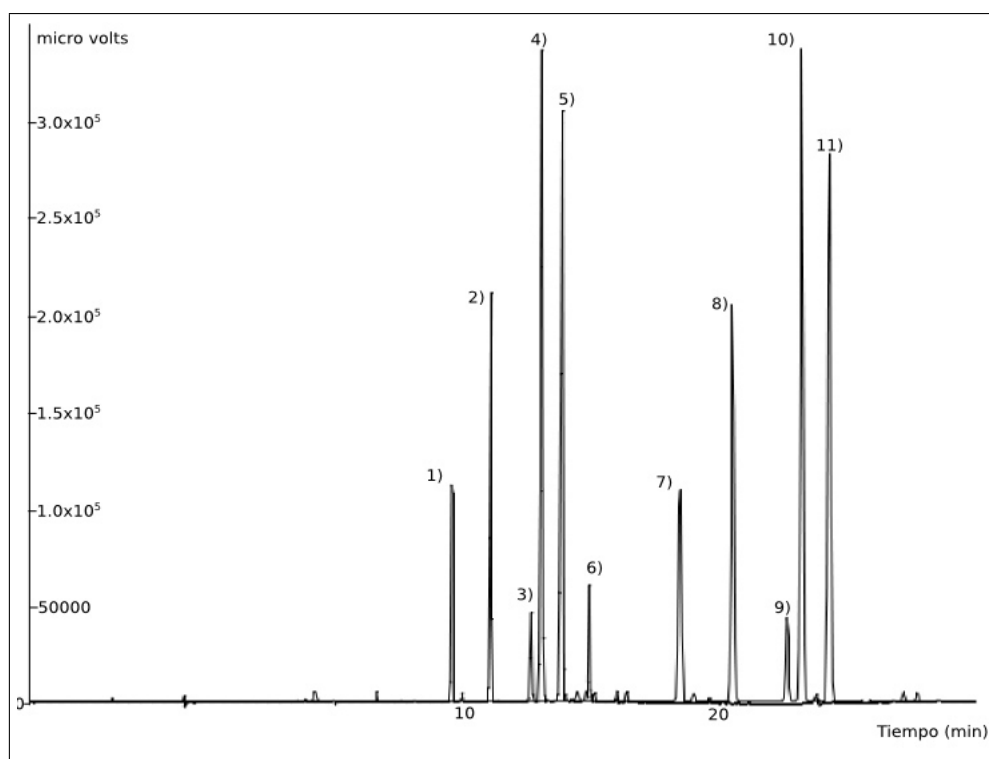


Figura 4.9: Cromatograma del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Número	Compuesto	TR estándar	TR Biodiesel	Perfil Biodiesel [% masa]
1	C6:0	9.57	9.54	1.097
2	C14:0	14.58	14.53	0.2841
3	C16:0	16.56	16.50	14.1294
4	C16:1	16.8	16.75	0.3742
5	C18:0	18.62	18.55	4.1950
6	C18:1n9t	18.88	18.82	37.3361
7	C18:1n9c	19.39	19.36	35.9904
8	C18:2n6c	20.14	20.08	5.3369
9	C20:0	20.91	20.79	0.4462
10	C18:3n6	21.15	21.06	0.6063
11	C22:0	23.27	23.23	0.2034

Tabla 4.2: *Tiempos de retención y perfil de ácidos grasos del biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

4.4 CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos son un claro ejemplo de lo importante que es determinar el perfil de ácidos grasos antes de realizar cualquier ejercicio matemático relacionado con la simulación y con la obtención de las propiedades de transporte y termo-físicas.

En la Figura: 4.10 se muestra al ácido oléico el cual está presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina como un isómero, en el cual el doble enlace se ubica en una posición diferente y se le conoce como ácido eláidico.

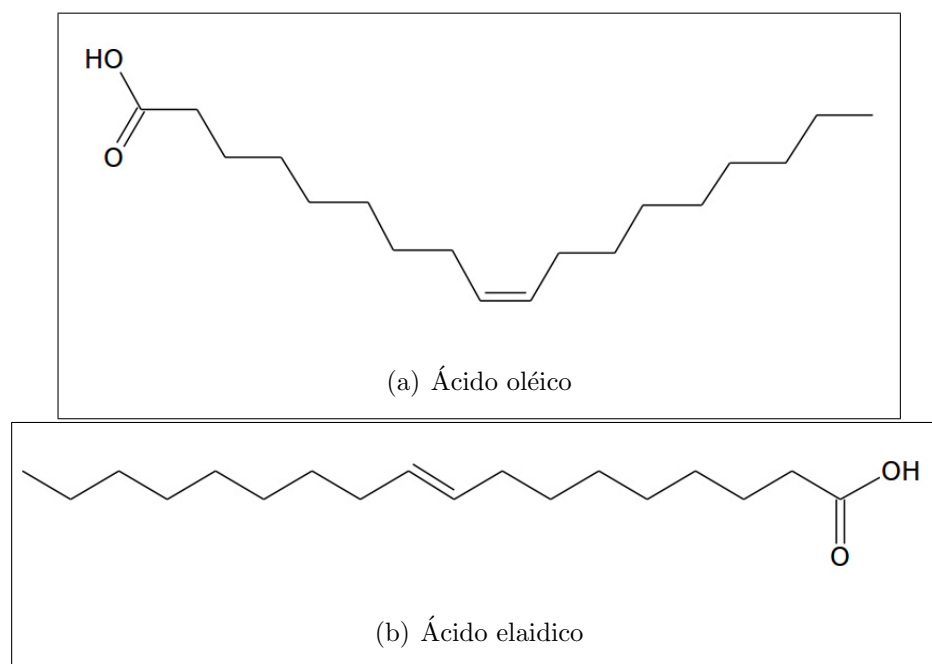


Figura 4.10: (a) Ácido oléico y (b) Trans del ácido oléico, ácido eláidico

Esta variación del ácido graso aumenta el número de ácido grasos en el biodiesel, sin embargo el cálculo de las propiedades de transporte y termo-físicas dependen de los grupos funcionales no de la posición de los dobles enlaces, por lo tanto se puede manejar un porcentaje único para el ácido oléico, como se muestra en la Tabla: 4.3 donde se suman los porcentajes tanto del ácido oléico como del ácido eláidico.

Por lo tanto esta será la composición que se empleara para el cálculo de las doce propiedades de transporte empleadas en la simulación del chorro.

No. de componente	Componente	[% masa]
1	Á. Caprónico/C6:0	1.0979
2	Á. Mirístico/C14:0	0.2841
3	Á. Palmítico/C16:0	14.1294
4	Á. Palmitoléico/C16:1	0.3742
5	Á. Esteárico/C18:0	4.1950
6	Á. Oléico/C18:1n9c	73.3266
7	Á. Linoléico/C18:2n6c	5.3369
8	Á. Linolénico/C18:3n6	0.6063
9	Á. Araquídico/C20:0	0.4462
10	Á. Behénico/C22:0	0.2034

Tabla 4.3: *Composición y porcentaje del biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

4.4 BIBLIOGRAFÍA

- [1] S. H. Park, H. K. Suh, and C. S. Lee, “Effect of bioethanol- biodiesel blending ratio on fuel spray behavior and atomization characteristics,” *Energy & Fuels*, vol. 23, no. 8, pp. 4092–4098, 2009.
- [2] T. Issariyakul, M. G. Kulkarni, A. K. Dalai, and N. N. Bakhshi, “Production of biodiesel from waste fryer grease using mixed methanol/ethanol system,” *Fuel Processing Technology*, vol. 88, no. 5, pp. 429–436, 2007.
- [3] B. Mohan, W. Yang, K. L. Tay, and W. Yu, “Experimental study of spray characteristics of biodiesel derived from waste cooking oil,” *Energy Conversion and Management*, vol. 88, pp. 622–632, 2014.
- [4] J. S. Chickos, H. Zhao, and G. Nichols, “The vaporization enthalpies and vapor pressures of fatty acid methyl esters c18, c21 to c23, and c25 to c29 by correlation-gas chromatography,” *Thermochimica acta*, vol. 424, no. 1-2, pp. 111–121, 2004.
- [5] D. C. Harris, *Análisis Químico Cuantitativo*, vol. 1. 08029 Barcelona-España: Reverte, 3 ed., 2007.
- [6] W. W. Christie, “Gas chromatography and lipids,” 1989.
- [7] M. Lapuerta, O. Armas, and J. Rodriguez-Fernandez, “Effect of biodiesel fuels on diesel engine emissions,” *Progress in energy and combustion science*, vol. 34, no. 2, pp. 198–223, 2008.

CAPÍTULO 5

PROPIEDADES DE TRANSPORTE Y TERMO-FÍSICAS

5.1. Propiedades de transporte y termo-físicas	142
5.1.1. Propiedades usadas en el código CFD OpenFOAM	144
5.2. Correlaciones de grupos funcionales	145
5.2.1. Propiedades críticas	145
5.2.2. Factor acéntrico	146
5.2.3. Propiedades de mezcla	147
5.2.4. Densidad	149
5.2.5. Presión de vapor	150
5.2.6. Entalpía de vaporización	153
5.2.7. Capacidad calorífica del líquido	154
5.2.8. Capacidad calorífica del gas	154
5.2.9. Segundo coeficiente virial	156
5.2.10. Viscosidad líquida	162
5.2.11. Viscosidad de vapor	162
5.2.12. Conductividad térmica líquida	164

5.2.13. Conductividad térmica de vapor	165
5.2.14. Tensión superficial	166
5.2.15. Difusividad de vapor	168
5.3. Análisis de las propiedades de los ácidos grasos y del biodiesel	172
5.3.1. Correlaciones empíricas de grupos funcionales para los áci- dos grasos	172
5.3.2. Regresiones no lineales	189
5.3.3. Propiedades de transporte del biodiesel derivado del aceite usado de cocina	204
5.3.4. Generación de la librería del biodiesel para el código CFD OpenFOAM	219
5.4. Conclusiones	225
Bibliografía	227

5.1 PROPIEDADES DE TRANSPORTE Y TERMO-FÍSICAS

En el capítulo anterior se hizo uso de la cromatografía de gases para analizar el biodiesel derivado del aceite usado de cocina así de esta manera poder determinar cuales ácidos grasos y en que cantidad se encuentran presentes en el biodiesel.

La composición del biodiesel permite determinar los componentes que se encuentran en mayor proporción en el biodiesel a partir de los cuales se pueden determinar las propiedades de transporte y termo-físicas.

Como se comento en la sección 2.3.1 la estructura del chorro de combustible y de la fase vapor está influenciado principalmente por 12 propiedades de transporte y termo-físicas de las cuales las más significativas para la formación del chorro son la densidad, la viscosidad, tensión superficial y presión de vapor, puesto que son todas las propiedades relacionas con las fuerzas de deformación de una gota que viaja

dentro de una cámara de combustión, la cual a su vez ejerce una presión dinámica a la gota provocando la desintegración de la gota favoreciendo la evaporación y la mezcla con el aire en el interior de la cámara de combustión.

Una práctica muy común es utilizar el componente de mayor porcentaje en la mezcla de ácidos grasos que componen el biodiesel, generando propiedades de transporte genéricas lo cual resultaría en un grado de inexactitud. En la Figura: 5.1 se muestra el grado de insaturación de cada ácido graso el cual afecta las propiedades del fluido, puesto que cada molécula se acomoda en el flujo dependiendo de su grado de insaturación.

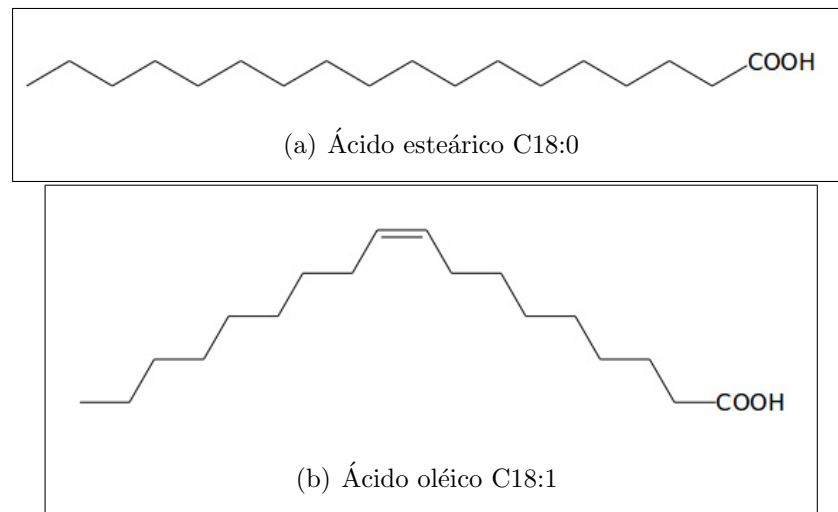


Figura 5.1: (a) Ácido saturado y (b) Ácido insaturado

Esta característica propia de los ácidos grasos que conforman un biodiesel hace que las propiedades dependan de cada ácido por esta razón tratar el biodiesel como un componente puro puede llevar a tener errores en la determinación de la penetración y de las propiedades macroscópicas del chorro de biodiesel. Estas propiedades deben ser determinadas antes de realizar simulación puesto que de ellas dependen la formación del chorro, la evaporación, la mezcla con el gas en la cámara, la ignición, combustión y formación de especies.

5.1.1 PROPIEDADES USADAS EN EL CÓDIGO CFD OPENFOAM

La determinación de las propiedades es una actividad indispensable para el correcto análisis del chorro, sin embargo, actualmente en el Laboratorio de Investigación en Innovación Energética (LIITE) no se cuenta con el equipo adecuado para la correcta determinación de las propiedades de transporte y termo-físicas en función de la temperatura. Por lo tanto para determinar las propiedades del biodiesel se recurre al uso de correlaciones empíricas de grupos funcionales, las cuales emplean la estructura molecular de cada ácido graso presente en el perfil de ácidos previamente obtenido.

A continuación se presentan las propiedades que influyen el desarrollo del chorro, las correlaciones empleadas para el computo de las propiedades y el análisis para cada uno tanto para los ácidos grasos como para el biodiesel y finalmente los coeficientes obtenidos por medio de las regresiones no lineales.

El código CFD OpenFOAM permite el cálculo de las 12 propiedades relevantes en todo el proceso de inyección de combustible: densidad, presión de vapor, entalpía de vaporización, capacidad calorífica líquida y del gas, segundo coeficiente virial, viscosidad líquida y del gas, conductividad térmica líquida y del gas, tensión superficial y difusividad de vapor. Como se comentó en la sección 2.5.1 el código CFD OpenFOAM cuenta con la versatilidad del cálculo de propiedades en función de la temperatura. El código CFD OpenFOAM cuenta con librerías de propiedades para componentes puros, sin embargo el uso de componentes puros para la simulación de un líquido de variada composición llevaría a la inexactitud en los resultados; en dado caso de poder emplear un componente puro como sustituto de biodiesel el código de CFD OpenFOAM no cuenta con una librería de ácidos grasos, por lo que usar un ácido graso como sustituto de biodiesel no sería posible [1].

Estos son los principales motivos por los cuales es necesario desarrollar las propiedades antes de poder simular un chorro de biocombustible. Sin embargo estos modelos usados por el código CFD OpenFOAM requieren el uso de coeficientes para los modelos empleados; información que es limitada para ácidos grasos, por lo que, para

un biodiesel de una composición específica tendrían que ser determinados.

5.2 CORRELACIONES DE GRUPOS FUNCIONALES

Estas propiedades dependen de los grupos moleculares presentes en cada molécula característica que conforma el biodiesel, esta estrategia permite el cálculo de las propiedades en función de estos grupos moleculares. Esta herramienta es mejor conocida como correlaciones de grupos funcionales las cuales puede ser empleadas para muchas aplicaciones independientes al estudio del chorro de biodiesel [2, 3].

A partir de los resultados obtenidos en la sección 4.3 se emplean las siguientes correlaciones de grupos funcionales para determinar las propiedades de transporte para cada ácido graso presente en el biodiesel, posteriormente se emplearan las reglas de mezclado de Kay para determinar las propiedades del biodiesel la cual es una correlación sencilla y presenta un porcentaje de error, respecto a valores experimentales, menor al 2%; una regla ampliamente usada y validada [3, 4].

A continuación se presentan los métodos empleados para la determinación de las propiedades críticas, de transporte y termo-físicas. Los métodos de correlaciones empíricas pueden ser consultados en [3, 5] en dado caso de emplear otra referencia se especificará en el texto.

5.2.1 PROPIEDADES CRÍTICAS

Las correlaciones relacionadas con las propiedades de transporte dependen de las propiedades críticas de cada ácido graso, por lo tanto es necesario determinarlas antes que cualquier propiedad de transporte.

El primer método empleado de grupos funcionales, es el método de Ambrose et al.

[6] el cual presenta resultados más acertados en comparación con otros métodos. El método de Ambrose permite el cálculo de la temperatura crítica que se determina mediante la ecuación 5.1, la presión crítica determinada por la ecuación 5.2 finalmente el volumen crítico determinado por la ecuación 5.3

$$T_c = T_b[1 + (1.242 + \sum \Delta T)^{-1}] \quad (5.1)$$

donde T_b representa la temperatura de ebullición y ΔT la contribución de grupo funcional presente en la molécula para la temperatura crítica presentada en la Tabla: 5.1. Las temperaturas de ebullición son proporcionadas a partir de la información del instituto nacional de referencia y tecnología, por sus siglas en inglés *NIST* (National Institute of Standards and Technology) [7].

$$P_c = PM(0.339 + \sum \Delta P)^{-2} \quad (5.2)$$

donde PM representa el peso molecular de cada ácido y ΔP la contribución del grupo funcional presente en la molécula que se muestran en la Tabla: 5.1.

$$V_c = 40 + \Delta V \quad (5.3)$$

donde ΔV es la contribución del grupo funcional presente en la molécula para el volumen crítico expuesto en la Tabla: 5.1.

5.2.2 FACTOR ACÉNTRICO

Para determinar las propiedades críticas de la mezcla es necesario determinar el factor acéntrico de cada componente para posteriormente determinar la propieda-

Contribución	ΔT	ΔP	ΔV
Carbonos de alquilo	0.138	0.226	55.1
COOH	0.578	0.45	80
HC=CH	-0.50	-0.065	-20

Tabla 5.1: *Contribución de grupos funcionales para la temperatura, presión y volumen crítico usados en el método de Ambrose [3]*

des de la mezcla. Es posible determinar el factor acéntrico empleando la ecuación 5.4

$$\omega = \frac{\alpha}{\beta} \quad (5.4)$$

donde:

$$\alpha = -\ln(P_{ci}) - 5.92714 + 6.09648\Theta^{-1} + 1.28862\ln(\Theta) - 0.169347\Theta^6 \quad (5.5)$$

y

$$\beta = 15.2518 - 15.6875\Theta^{-1} - 13.4721\ln(\Theta) + 0.43577\Theta^6 \quad (5.6)$$

donde Θ representa la temperatura de ebullición reducida $\Theta = \frac{T_{bi}}{T_{ci}}$

5.2.3 PROPIEDADES DE MEZCLA

Ya determinadas las propiedades individuales de cada componente es necesario determinar las propiedades de la mezcla utilizando las reglas de mezclado de Kay, la cual es una regla de mezclado simple en la cual las diferencias entre otras reglas de mezclado de mayor complejidad no superen el 2% [3]. Empleando las reglas de mezclado es posible determinar el factor acéntrico de la mezcla usando la ecuación

5.7, la temperatura crítica de la mezcla usando la ecuación 5.8, el volumen crítico de la mezcla usando la ecuación 5.9 y finalmente haciendo uso de la ecuación 5.10 para determinar la fracción molar en lugar de la fracción másica si es el caso.

$$\omega_m = \sum y_i \omega_i \quad (5.7)$$

$$T_{cm} = \sum y_i T_{ci} \quad (5.8)$$

$$V_{cm} = \sum \sum y_j y_i V_{cji} \quad (5.9)$$

$$y_i = \frac{\frac{x_i}{PM_i}}{\sum \frac{x_j}{PM_j}} \quad (5.10)$$

donde ω_m representa el factor acéntrico de la mezcla, T_{cm} es la temperatura crítica de la mezcla, V_{cm} es el volumen crítico de la mezcla, y_i es la fracción molar y x_i es la fracción masa anteriormente determinada mediante la cromatografía de gases expuesta en la Tabla: 4.3, finalmente los subíndices i representan la propiedad individual de cada componente.

Sin embargo la presión crítica de la mezcla, P_{cm} , presenta inexactitud usando la regla de mezclado de Kay, puesto que la presión crítica de un sistema va de un máximo a un mínimo en función de la composición. Para determinar la presión crítica de la mezcla se hace uso de la regla de mezclado de Lee-Kesler empleando la ecuación 5.11.

$$P_{cm} = \frac{(0.2905 - 0.085\omega_m)RT_{cm}}{V_{cm}} \quad (5.11)$$

donde ω_m , T_{cm} y V_{cm} son las propiedades de la mezcla calculadas mediante las ecua-

ciones 5.7, 5.8, 5.9 respectivamente y R representa la constante universal de los gases.

5.2.4 DENSIDAD

Para determinar la densidad existen varios métodos uno de los más empleados es el método de Rackett et al. [3] el cual emplea la ecuación 5.12:

$$\rho = \frac{\rho_{ref}}{Z_{RA}^{\theta}} \quad (5.12)$$

donde:

$$Z_{RA}^{\theta} = 0.29056 - 0.08775\omega_m \quad (5.13)$$

donde θ esta dada por la ecuación 5.14

$$\theta = \left(1 - \frac{T}{T_{cm}}\right)^{2/7} - \left(1 - \frac{T_{ref}}{T_{cm}}\right)^{2/7} \quad (5.14)$$

donde Z_{RA}^{θ} representa un factor único para cada componente, independiente del factor de compresibilidad, el cual fue determinado para cada componente en el trabajo expuesto por Sales-Cruz et al. [8] o mediante la ecuación 5.13, ρ_{ref} que muestra una densidad a una temperatura de referencia, la cual es función de la composición de ácidos grasos específica por esta razón debe de ser determinada de manera experimental como se muestra en el trabajo realizado por Tat et al. [9]. Sin embargo esta relación necesita el uso de una densidad de referencia la cual en dado caso de no contar con un valor estimado de densidad de referencia es necesario estimarla. Para poder determinar la densidad de referencia empleada en la ecuación

5.12 se hace uso de la correlación 5.15, ecuación propuesta por Ramírez-Verduzco [10]:

$$\rho = 1.069 + \frac{3.575}{PM} + 0.0113N - 7.41 \times 10^{-4}T \quad (5.15)$$

donde PM es la masa molar de cada ácido graso, N el número de dobles enlaces presentes en la molécula y T la temperatura. Esta relación presenta resultados muy favorables antes de la temperatura de ebullición además de ser una relación sencilla que contiene toda la información pertinente de un ácido graso según comenta Phankosol et al. [11].

Sin embargo después del punto de ebullición de los ácidos grasos, la ecuación 5.15 predice valores de densidad con un error aproximado al 5 %, por lo tanto, se utiliza la relación de Ramírez-Verduzco 5.15 para determinar la densidad de referencia empleada en la ecuación 5.12. Con este acoplamiento de ecuaciones se construye la propiedad en función de la temperatura con un mínimo de error.

5.2.5 PRESIÓN DE VAPOR

La presión de vapor es una de las propiedades básicas de los fluidos y con un alto nivel de contribución en el proceso de mezcla, puesto que representa la coexistencia entre la fase líquida y el vapor en función de la temperatura.

La ecuación 5.16 es la ecuación de los estados correspondientes propuesta por Riedel y citada por Vetere et al. [12], la cual es una ecuación empleada para el cálculo de presión de vapor siendo esta una forma sencilla y acertada en comparación con otros métodos de cálculo o estimación [13, 14].

$$\ln(Pvap) = A + \frac{B}{T_r} + C \ln(T_r) + DT_r^6 \quad (5.16)$$

donde P_{vap} es la presión de vapor reducida A, B, C y D son las constantes de la forma empírica las cuales están ligadas al factor α_c dependiente de la temperatura de ebullición de cada ácido graso y T_r^6 es la temperatura reducida a la sexta potencia la cual permite la descripción del punto de inflexión en la curva de presión de vapor en la región de más alta presión. Las constantes A, B, C y D se pueden calcular mediante las ecuaciones 5.17 a la 5.21:

$$A = -35Q \quad (5.17)$$

$$B = -36Q \quad (5.18)$$

$$C = 42Q + \alpha_c \quad (5.19)$$

$$D = -Q \quad (5.20)$$

$$Q = K(3.185 + \alpha_c) \quad (5.21)$$

El término α_c es una derivación de una relación universal válida para todos los compuestos, la relación de Clausius-Clapeyron escrita en su forma reducida como:

$$\alpha(T_r) = \frac{d \ln(P_{vap})}{d \ln(T_r)} = \frac{\Delta H_{vap}}{RT \Delta Z} \quad (5.22)$$

El análisis hecho por Riedel se lleva a cabo en la zona de presión de vapor cerca al

punto crítico de donde se obtienen las condiciones de frontera para la resolución de la ecuación 5.22:

$$\left. \frac{d\alpha}{dT_r} \right|_{T_r=1} \quad (5.23)$$

Del cual se impone el parámetro de Riedel α_c mismo que depende de un sistema de ecuaciones basados en la presión reducida de cada componente, sin embargo Vetere et al. [12] propone una modificación a la ecuación de Riedel con el fin de ajustar el modelo a todo tipo de compuestos:

$$\alpha_c = \frac{3.758K\psi + \ln\left(\frac{P_c}{1.01325}\right)}{K\psi - \ln(T_{br})} \quad (5.24)$$

donde:

$$\psi = -35\frac{36}{T_{br}} + 42\ln(T_{br}) + T_{br}^6 \quad (5.25)$$

donde P_c es la presión crítica en bar, T_{br} es la temperatura de ebullición reducida y K es el valor de contribución para los componentes orgánicos, cuyo valor es igual a 0.0838.

La presión de vapor de la mezcla depende de los componentes individuales presentes en el biodiesel, la cual puede ser calculada usando la Ley de Raoult mediante [15], esta ley permite estimar la presión de vapor de una mezcla mediante la ecuación 5.26:

$$P_{vap_{mix}} = \sum P_{vap_i} x_i \quad (5.26)$$

donde $P_{vap_{mix}}$ y P_{vap_i} es la presión de vapor del biodiesel y de cada componente individual, respectivamente y x_i es la fracción molar de cada ácido graso dada por la ecuación 5.10.

5.2.6 ENTALPÍA DE VAPORIZACIÓN

La entalpía de vaporización puede ser determinada a partir de la relación de Clausius-Clapeyron dada por la ecuación 5.22, donde ΔH_v es la entalpía de vaporización, R es la constante universal, T es la temperatura y ΔZ es el término asociado al cambio molar de volumen entre la fase gaseosa y líquida, sin embargo el uso de esta relación requiere el uso de información específicamente del cambio de volumen de la fase gaseosa y líquida, información que no es común encontrar puesto que es una mezcla de ácidos grasos. Con el objeto de poder determinar la entalpía de vaporización se han propuesto una serie de modelos teóricos y empíricos [16, 17], los cuales se basan en parámetros moleculares. Sin embargo estos modelos no toman en cuenta la posición de los dobles enlaces como es el caso de los isómeros complejos. Por esta razón se recomienda utilizar métodos que relacionan la entalpía de vaporización y la temperatura con la curva de equilibrio vapor saturado-líquido como el método propuesto por Fish et al. [18]:

$$\Delta H_v = \Delta H_{vb} \frac{T_r}{T_{br}} S^* \quad (5.27)$$

donde:

$$S^* = \frac{X + X^q}{1 + X^p} \quad (5.28)$$

donde X esta dada por la ecuación 5.29

$$X = \frac{T_{br}}{T_r} \frac{1 - T_r}{1 - T_{br}} \quad (5.29)$$

donde T_{br} es la temperatura reducida de ebullición, T_r es la temperatura reducida y q y p en la ecuación 5.28 son los parámetros relacionados con la contribución del compuesto orgánico, cuyos valores son 0.35298 y 0.13856, respectivamente.

5.2.7 CAPACIDAD CALORÍFICA DEL LÍQUIDO

Existen varios métodos para la determinación de la capacidad calorífica del líquido, unos de los más usados es el propuesto por Rowlinson-Bondi, el cual se describe en la ecuación 5.30 para los estados correspondientes, éste es aplicable a valores bajos de temperatura con un margen de error menor al 5 % [3, 19].

$$\frac{C_{pl} - C_p^\circ}{R} = 1.45 + 0.45(1 - T_r)^{-1} + 0.25\omega[17.11 + 25.2(1 - T_r)^{1/3}T_r^{-1} + 1.742(1 - T_r)^{-1}] \quad (5.30)$$

donde C_{pl} y C_p° son la capacidad calorífica del líquido y el gas, respectivamente, R es la constante universal de los gases, T_r es la temperatura reducida de cada ácido graso y ω es el factor acéntrico.

Sin embargo esta relación requiere el uso de la capacidad calorífica del gas para esto se utilizará el método de Joback, éste se describirá a continuación.

5.2.8 CAPACIDAD CALORÍFICA DEL GAS

El método de Joback es uno de los más usados puesto que maneja contribución de grupos y coeficientes polinomiales para relacionar la capacidad calorífica con la

temperatura de la siguiente forma:

$$C_p^o = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (5.31)$$

Este polinomio de la capacidad calorífica del gas ideal es usado para un elevado número de compuestos orgánicos, como aromáticos, alifáticos, anillos y sistemas conjugados, alquilo, entre otros. Para estos compuestos la desviación estándar es del orden del 3% en un rango de temperaturas hasta los 300K, mientras que en el rango entre 400 y 1500K es menor al 2% esto tiene coherencia relacionada con el comportamiento del gas el cual tiende a expandirse y a aumentar su capacidad calorífica siendo este método más acertado en rangos de temperatura más elevados [20].

El uso de métodos de contribución de grupos funcionales permite el cálculo de la capacidad calorífica para esto se utiliza la ecuación 5.31 con la modificación propuesta por Joback et al. [3].

$$C_p^o = \left(\sum_i n_i \Delta_a - 37.93 \right) + \left(\sum_i n_i \Delta_b + 0.210 \right) T \\ + \left(\sum_i n_i \Delta_c - 3.91 \times 10^{-4} \right) T^2 + \left(\sum_i n_i \Delta_d - 2.06 \times 10^{-7} \right) T^3 \quad (5.32)$$

donde n_j es el número de grupos del i -ésimo término, Δ son las contribuciones para el i -ésimo grupo atómico o molecular cuyos valores se describen en la Tabla: 5.2 y T es el rango de temperaturas de operación en Kelvin.

Este acoplamiento de métodos permite una correcta estimación de la capacidad calorífica del biodiesel y de todos sus componentes.

	Δ_a	Δ_b	Δ_c	Δ_d
CH_3	$1.95x10^1$	$-8.08x10^{-3}$	$1.53x10^{-4}$	$-9.67x10^{-8}$
CH_2	$-9.09x10^{-1}$	$9.50x10^{-2}$	$-5.44x10^{-5}$	$1.19x10^{-8}$
$HC = CH$	-8	$1.05x10^{-1}$	$-9.63x10^{-5}$	$3.56x10^{-8}$
$COOH$	$2.41x10^1$	$4.27x10^{-2}$	$8.04x10^{-4}$	$-6.87x10^{-8}$

Tabla 5.2: *Contribución de grupos funcionales para la determinación de la capacidad calorífica del gas a través del método de Joback [3]*

5.2.9 SEGUNDO COEFICIENTE VIRIAL

La ecuación de estado es una forma algebraica que relaciona la presión, la temperatura y el volumen molar en una ecuación polinomial:

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{RTB}{V^2} + \frac{RTC}{V^3} + \dots \quad (5.33)$$

donde B y C son el segundo y el tercer coeficiente virial en función de la temperatura para un fluido puro, estos parámetros caracterizan las fuerzas potenciales intermoleculares.

Es más común truncar la ecuación virial al segundo coeficiente, debido a que la expansión virial no es rigurosamente dependiente a altas presiones, las relaciones de fuerzas moleculares de alto orden son intratables y finalmente esta forma es más acertada para fluidos densos.

Para la evaluación de B es necesario contar con información experimental, sin embargo existen numerosos métodos que relacionan el segundo coeficiente virial con la temperatura y con las interacciones moleculares de cada compuesto puro. Un método es el propuesto por Tsonopoulos et al. [3], el cual converge a todas las formas posibles de la ecuación de estado utilizando la ecuación 5.34:

$$\frac{B(T)}{V^*} = \sum a_i f^{(i)}\left(\frac{T}{T^*}\right) \quad (5.34)$$

donde V^* es el volumen característico en su forma de $\frac{P_c}{RT_c}$ siendo la suma de todas las funciones universales como una función de la temperatura reducida $f^{(i)}(\frac{T}{T^*})$ y un parámetro a_i como las fuerzas de interacciones intramoleculares expresado de la siguiente forma:

$$\frac{BP_c}{RT_c} = f^{(0)} + \omega f^{(1)} + a f^{(2)} + b f^{(3)} \quad (5.35)$$

donde las funciones universales están definidas por las ecuaciones 5.36 a la 5.39:

$$f^{(0)} = 0.083 - \frac{0.422}{T_r^{1.6}} \quad (5.36)$$

$$f^{(1)} = 0.139 - \frac{0.172}{T_r^{4.2}} \quad (5.37)$$

$$f^{(2)} = \frac{1}{T_r^6} \quad (5.38)$$

$$f^{(3)} = \frac{-1}{T_r^8} \quad (5.39)$$

donde la ecuación 5.36 es la fuerza para sustancias simples con a_0 siendo la unidad, la ecuación 5.37 corrige la forma no esférica y la globularidad de las sustancias normales con a_i comúnmente siendo el factor acéntrico (ω), la ecuación 5.38

toma en consideración la polaridad con $a_2 = a$ siendo una función del momento dipolo (μ') expresado mediante la ecuación 5.40 y la ecuación 5.39 la cual toma en consideración la asociación con $a_3 = b$ un parámetro empírico.

Estos parámetros empíricos están en función del momento dipolo reducido para acetonas, aldehídos, nitrilos del alquilo, ésteres y ácidos carboxílicos:

$$a = -2.14x10^{-4}\mu'_r - 4.308x10^{-21}\mu_r'^8 \quad (5.40)$$

$$b = 0 \quad (5.41)$$

donde μ'_r es el momento dipolo reducido expresado de la siguiente manera:

$$\mu'_r = \frac{10^5 \mu'^2 P_c}{T_c^2} \quad (5.42)$$

donde μ' es el momento dipolo en debyes, P_c es la presión crítica de cada ácido graso en bares y T_c es la temperatura crítica de cada ácido graso en Kelvin.

El momento dipolo es un parámetro que ayuda a entender la interacción entre átomos en la misma o diferente molécula. Es un modelo de la atracción neta de la molécula, la cual es una magnitud de carga eléctrica y de polaridad de un enlace, el cual define de que forma serán atraídos los electrones de un átomo.

El momento dipolo incrementa con el aumento de la electronegatividad (ver Figura: 5.2) de la misma manera el momento dipolo de una molécula incrementa con la reactividad química de la molécula según expone Obi et al. [21].

Los átomos de carbono presentes en el ácido graso tienen más electrones alrededor suyo, estos electrones se mueven de un átomo con poca afinidad por los electrones (baja electronegatividad), como el carbón, a uno con alta afinidad por los electrones,

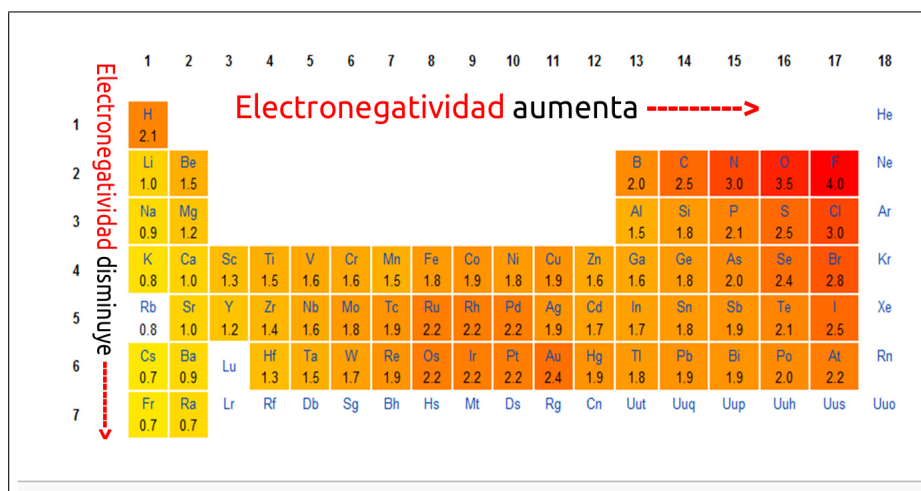


Figura 5.2: Electronegatividad de los elementos químicos

como el oxígeno, cuando ocurre este movimiento de electrones se libera energía.

Por lo tanto, cuando un elevado número de electrones alrededor de un átomo de carbón de un ácido graso son transferidos a un oxígeno (un proceso como la combustión) se libera más energía en este proceso.

La característica poliinsaturada de algunos ácidos grasos no difiere en la electronegatividad, puesto que las moléculas solo contiene enlaces carbón-hidrógeno y la cabeza del carboxilo.

En la Figura: 5.3 se muestra como el momento dipolo de los ácidos grasos depende de su electronegatividad la cual disminuye al aumentar la cadena de hidrocarburos [22].

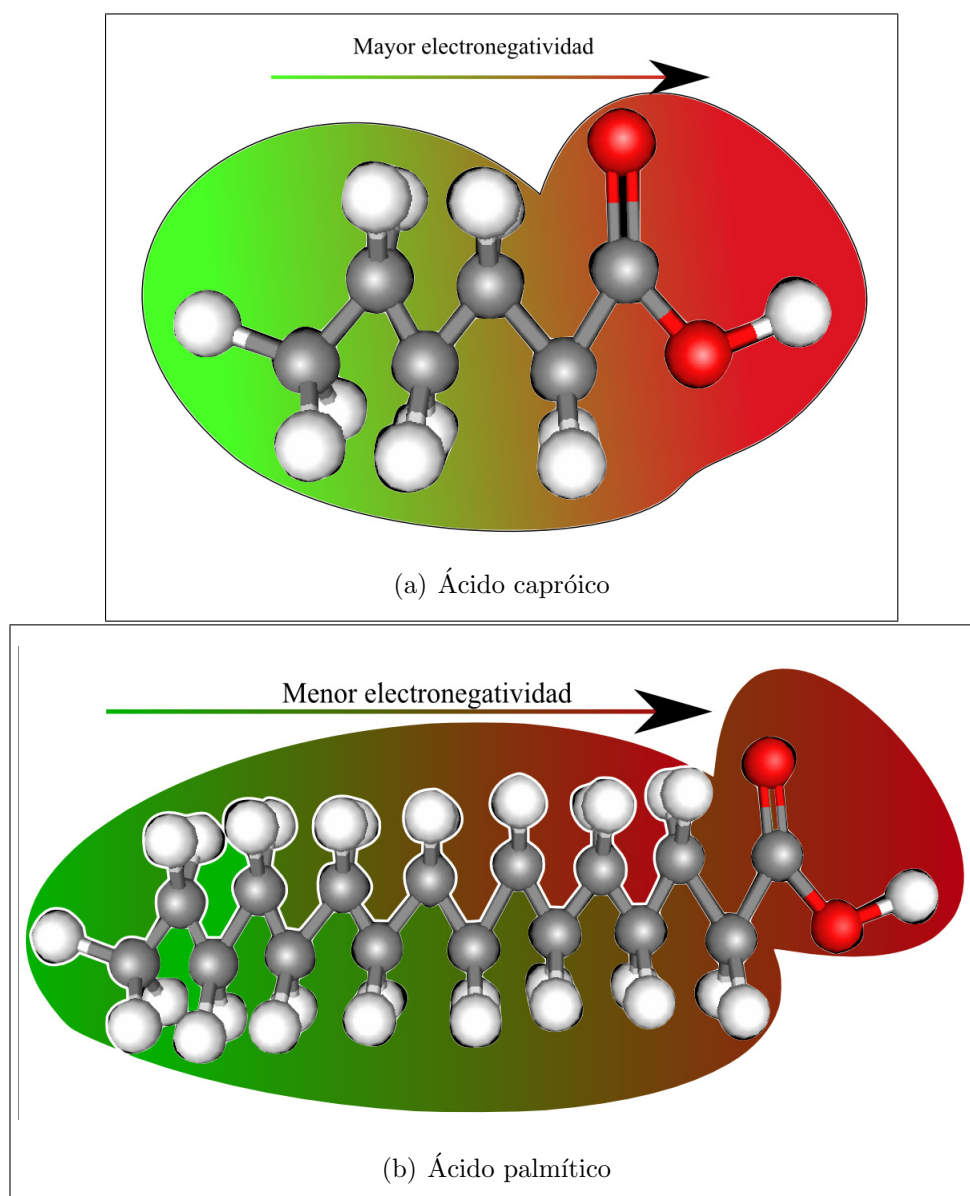


Figura 5.3: (a) Comparativa de electronegatividad para el ácido caprónico/C6:0 y (b) ácido palmítico/C16:0

En la Figura: 5.4 se muestra el comportamiento del momento dipolo en función del número de carbonos presentes en la molécula. Concretamente en esta figura se puede observar como el momento dipolo disminuye con el incremento de la cadena de carbonos.

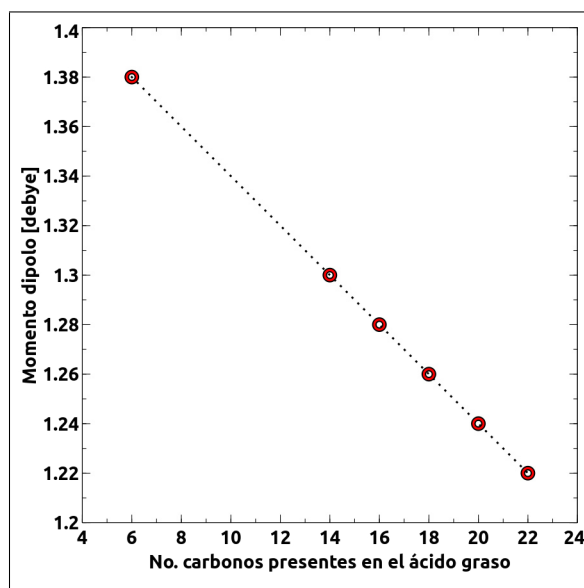


Figura 5.4: Momento dipolo para los ácidos grasos

En la Tabla: 5.3 se muestra el momento dipolo para cada ácido graso en función del número de carbonos presentes en la cadena del ácido graso.

No. de Carbonos	Momento dipolo [debye]
6	1.38
14	1.3
16	1.28
18	1.26
20	1.24
22	1.22

Tabla 5.3: *Momento dipolo para los ácidos grasos en función del número de carbonos presentes en la molécula*

Con este análisis del momento dipolo de los ácidos grasos se puede determinar el segundo coeficiente virial para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

5.2.10 VISCOSIDAD LÍQUIDA

El biodiesel, típicamente, es inyectado a temperaturas relativamente frías entre 27 y 40°C y debido a la alta viscosidad del biodiesel se pueden presentar diferencias significativas en el proceso de inyección.

Como se comentó en la sección 2.2 se tiene que aumentar la presión de inyección para asegurar la misma masa en la cámara de combustión, esto debido a la alta viscosidad.

Existen una amplia variedad de métodos relacionados con la estimación de la viscosidad para ácido graso [23, 24], sin embargo presentan complejidad en su forma de resolución, además de tener cierto grado de inexactitud por estos motivos se emplea la relación propuesta por Ramírez-Verduzco dada por la ecuación 5.43:

$$\ln(\mu) = -18.354 + 2.362\ln(PM) - 0.127N + \frac{2009}{T} \quad (5.43)$$

donde μ es la viscosidad de cada ácido graso, M es el peso molecular de cada ácido graso, N es el número de dobles enlaces presentes en la molécula y T es el rango de temperaturas de operación. Esta relación tiene en cuenta con toda la información relevante de los ácidos grasos [10].

5.2.11 VISCOSIDAD DE VAPOR

Los métodos para la estimación de la viscosidad del gas, requieren del momento dipolo, previamente descrito y obtenido en la sección 5.2.9, y de las condiciones críticas de cada compuesto uno de estos métodos es el propuesto por Reichenberg et al. [5, 25], el cual es aplicable para vapores orgánicos no polares como es el caso del

biodiesel. Este método presenta un error entre 0.5 – 1.5 % para estos compuestos no polares:

$$\mu^{\circ} = \frac{AT_r^2}{[1 + 0.36T_r(T_r - 1)]^{1/6}} \left[\frac{1 + 270(\mu'_r)^4}{T_r + 270(\mu'_r)^4} \right] \quad (5.44)$$

donde A es el parámetro determinado por la contribución de grupos, T_r es la temperatura reducida y μ'_r es el momento dipolo reducido modificado determinado a través de la siguiente ecuación:

$$\mu'_r = 52.46 \frac{\mu'^2 P_c}{T_c} \quad (5.45)$$

donde μ' es el momento dipolo descrito anteriormente en la Tabla: 5.3, P_c es la presión crítica y T_c es la temperatura crítica.

El parámetro A relacionado con la contribución de grupos para compuestos orgánicos esta determinado por la siguiente relación:

$$A = 10^7 \frac{PM^{1/2}T_c}{\sum n_i C_i} \quad (5.46)$$

donde PM es la masa molar, n_i es la cantidad de grupo funcional presente en la molécula y C_i es la contribución de grupos para la viscosidad de vapor, cuyos valores se describen en la Tabla: 5.4.

Grupo funcional	C_i
CH_3	9.04
CH_2	6.47
$COOH$	18.65
$-HC = CH-$	5.53

Tabla 5.4: *Contribución de grupos funcionales para el modelo de Reichenberg [5]*

5.2.12 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA LÍQUIDA

La conductividad térmica es la medida de la velocidad en la que el calor se conduce a través de un material y esta definida como la constante de proporción en la ley de Fourier para la conducción de calor, la cual relaciona el gradiente de temperatura con el flux de calor por unidad de área, en este caso el material de conducción son las gotas del biodiesel. En el biodiesel líquido la transferencia de energía ocurre más eficientemente por conducción a través de los pozos intramoleculares entre moléculas que a través de la colisión de estas mismas. Por esta razón la conductividad térmica disminuye con el aumento de la temperatura. La conductividad del líquido se determina utilizando el método de Missenard para compuestos orgánicos [3]:

$$k_l = \frac{k_l|_{273K}[3 + 20(1 - T_r)^{2/3}]}{3 + 20[1 - (273/T_c)]^{2/3}} \quad (5.47)$$

donde T_r es la temperatura reducida, T_c es la temperatura crítica de cada ácido graso y $k_l|_{273 K}$ es la conductividad térmica líquida a 273 K dada por la siguiente relación:

$$k_l|_{273K} = \frac{9.0 \times 10^{-3} \left(\frac{T_b \rho'}{PM}\right)^{1/2} C_p'}{N^{1/4}} \quad (5.48)$$

donde T_b es la temperatura normal de ebullición, ρ' es la densidad del líquido a 273 K, PM es el peso molecular, C_p' es la capacidad calorífica del líquido a 273 K y N es el número de átomos en la molécula.

5.2.13 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA DE VAPOR

La conductividad de los gases es primordialmente por colisión molecular, y la conductividad incrementa con el aumento de temperatura, puesto que incrementa la velocidad molecular. Para determinar esta propiedad se empleará el método propuesto por Chung et al. [26] para vapores orgánicos:

$$\frac{kPM}{\mu C_v} = 3.75 \Psi \left(\frac{R}{C_v}\right) \quad (5.49)$$

donde PM es el peso molecular, μ es la viscosidad del gas determinada por la ecuación 5.44, C_v es la capacidad calorífica a volumen constante, R es la constante universal de los gases y Ψ es la contribución de grupo y los grados internos de libertad determinada por la siguiente relación:

$$\Psi = 1 + \alpha \left(\frac{0.215 + 0.28288\alpha - 1.061\beta + 0.26665\gamma}{0.6366 + \beta\gamma + 1.061\alpha\beta} \right) \quad (5.50)$$

donde α es la capacidad calorífica interna reducida a volumen constante determinada por la ecuación 5.51, β es la razón de viscosidad con el producto de la densidad y la propia difusividad interna a la condición de gas diluido determinada por la ecuación 5.52 y γ es la contribución debida a la ubicación interna determinada por la ecuación

5.53.

$$\alpha = \left(\frac{C_v}{R}\right) - \frac{3}{2} \quad (5.51)$$

donde C_v es la capacidad calorífica a volumen constante y R es la constante universal de los gases.

$$\beta = \frac{\mu}{\rho D} = 0.7862 - 0.7109\omega + 1.3168\omega^2 \quad (5.52)$$

donde ω es el factor acéntrico de cada ácido graso.

$$\gamma = 2.0 + 10.5T_r^2 \quad (5.53)$$

donde T_r representa la temperatura reducida.

5.2.14 TENSION SUPERFICIAL

La tensión superficial, juega un papel muy importante en el proceso de atomización, puesto que es la propiedad encargada de mantener la gota esférica y contrarresta las fuerza aerodinámicas, ejercidas por la cámara de combustión, encargadas de desintegrar la gota, atomizar y mezclar el combustible con el aire de la cámara. Esta propiedad esta definida como una capa en la interfaz vapor-líquido, es una tensión y se contraerá para minimizar el área superficial.

La tensión superficial es debida a las grandes fuerzas de atracción que experimentan las moléculas en la interfaz a partir de las moléculas en la fase líquida, está tensión es mucho más grande que la de la fase gaseosa de baja densidad. Estas fuerzas son

debidas a las fuerzas intramoleculares en la superficie de la gota del biocombustible y se forma una gota para disminuir el área superficial.

Una de las formas para determinar la tensión superficial es relacionarla con la densidad del líquido y un termino independiente de la temperatura pero dependiente de los grupos funcionales 5.54:

$$\sigma = \left(\frac{[\sum n_i \Delta P_i] \rho_i}{PM} \right)^4 \quad (5.54)$$

donde n_i es la cantidad de grupo funcional presente en la molécula, ΔP_i es la contribución de grupos conocido como *Parachor*, cuyos valores se describen en la Tabla: 5.5, ρ es la densidad del líquido a diferentes temperaturas y PM es la masa molar de cada compuesto. La relación 5.54 fue propuesta por Allen et al. [27].

Grupo funcional	ΔP_i
CH_3	55.25
CH_2	40.11
$COOH$	74.57
$-HC = CH-$	34.57

Tabla 5.5: *Contribución de grupos funcionales para el modelo de Allen [5]*

No se puede manejar la tensión superficial de la mezcla como una relación lineal utilizando la regla de mezclado de Kay para el mezclado puesto que la composición de la superficie del líquido no es necesariamente la misma que la del resto de las propiedades, puesto que los componentes con menor tensión superficial producirían menos de el 100 % de efecto en la mezcla prediciendo valores superiores de tensión superficial. Los componentes con menor tensión superficial tendrán una influencia menor en la mezcla que los de mayor. Debido a esto se realiza una función-peso, la cual corresponde a la ecuación 5.55, ésta no es más que una relación lineal derivada

de la tensión superficial, para esto se toma un factor de peso total para la máxima tensión superficial con un valor de 1 y un valore de 0.93 para la mínima tensión superficial.

Esta relación se gráfica contra los valores mínimos y máximos obtenidos de tensión superficial para cada ácido graso, con el fin de obtener la pendiente de una recta y la intersección con el eje de las ordenadas.

$$\sigma_{mezcla} = \sum w_i \sigma_i y_i \quad (5.55)$$

donde w_i es el factor de peso, σ_i es la tensión superficial individual de cada ácido graso, y_i es la fracción de cada ácido graso. El factor de peso esta dado por $w_i = m\sigma_i + c$, relación que implica que el factor de peso de cada componente no es constante, pero será una función de su posición relativa en la mezcla, con respecto a la magnitud de su tensión superficial.

5.2.15 DIFUSIVIDAD DE VAPOR

Al igual que la viscosidad y la conductividad térmica, la difusividad de vapor es una constante proporcional entre un gradiente y su rapidez de difusión. Así como la viscosidad está presente la cantidad de movimiento, la conductividad térmica en la transferencia de energía, la difusividad está presente en el movimiento de una substancia dentro de otra por un gradiente de concentración. La difusión es más compleja que el flujo viscoso o la conducción de calor, debido a la complejidad que es operar con mezclas. Las unidades de la difusividad \mathfrak{D} son m^2/s , mismas unidades que las constantes de proporcionalidad de la cantidad de movimiento y energía. El transporte de cantidad de movimiento es a causa de un gradiente de cantidad de movimiento como se muestra en la ecuación 5.56, el transporte de energía es causa

de un gradiente de cantidad de energía como se muestra en la ecuación 5.57 y el transporte de materia a causa de un gradiente de concentración como se muestra en la ecuación 5.58 [28].

$$\tau_{xy} = -\nu \frac{d}{dy}(\rho v_x) \quad (5.56)$$

$$q_x = -\alpha \frac{d}{dy}(\rho C_p T) \quad (5.57)$$

$$J_{Ax} = -\mathfrak{D}_{AB} \frac{d}{dy}(\rho A) \quad (5.58)$$

La difusividad \mathfrak{D}_{AB} de un sistema binario, descrita a través de la ecuación 5.59, es una función de la temperatura, la presión y la composición, mientras que la viscosidad y la conductividad térmica son una función de la presión y la temperatura únicamente, por esta razón la difusividad de un sistema en particular dependerá de la composición de dicho sistema. El código CFD OpenFOAM utiliza la relación para el cálculo de la difusividad, con el cambio de unidades para el sistema internacional, propuesta en el manual del Instituto Americano del Petróleo [29],

$$\mathfrak{D}_{AB} = \frac{0.0204T^{1.75} \left\{ \frac{1}{PM_f} + \frac{1}{PM_a} \right\}^{0.5}}{P[(\sum_1 v_1)^{1/3} + (\sum_2 v_2)^{1/3}]^2} \quad (5.59)$$

donde PM_f es la masa molar del combustible, PM_a es la masa molar de la atmósfera, P es la presión del sistema en este caso corresponde a la contrapresión

de la cámara y $\sum_i v_i$ es la suma de los volúmenes de difusión atómica de cada componente, cuyos valores se describen en la Tabla: 5.6.

Grupo funcional	Difusión atómica
<i>C</i>	16.5
<i>H</i>	1.98
<i>O</i>	5.48
<i>N₂</i>	17.9

Tabla 5.6: *Volumenes de difusión atómica [29]*

Esta contribución permite estimar la difusividad de cada compuesto, sin embargo el biodiesel no es un compuesto puro, por lo tanto no es posible determinar una contribución de grupos para una amplia gama de compuestos. Con el objetivo de poder determinar la difusividad de vapor se recurre a la modificación de Wilke & Lee de la teoría cinética de Chapman & Enskog, dada por la ecuación 5.60 la cual toma en consideración las fuerzas intermoleculares presentes en el vapor [3],

$$\mathfrak{D}_{FA} = \frac{[3.03 - \frac{0.93}{M_{FA}^{1/2}}](10^{-3})T^{3/2}}{P \cdot PM_{FA}^{1/2} \sigma_{FA}^2 \Omega_D} \quad (5.60)$$

donde T es el rango de temperaturas, P es la presión del sistema, $PM_{FA}^{1/2}$ son los pesos moleculares de los compuestos en el sistema definida por la ecuación 5.61, σ_{FA} la longitud de onda característica definida por la ecuación 5.62, la cual depende de las fuerza intermoleculares y Ω_D es la integral de colisión por difusión, este parámetro esta en función de la temperatura definido por la ecuación 5.63 el cual

depende del campo de potencial intermolecular o parámetro energético de Lennard-Jones.

$$PM_{FA} = 2\left[\frac{1}{PM_F} + \frac{1}{PM_A}\right]^{-1} \quad (5.61)$$

donde PM_F y PM_A son los pesos moleculares del combustible y de la atmósfera, respectivamente.

$$\sigma_{FA} = \frac{\sigma_F + \sigma_A}{2} \quad (5.62)$$

donde σ_F y σ_A son los parámetros de Lennard-Jones para la longitud característica molecular definidos para cada compuesto como $\sigma = 1.18V_l^{1/3}$ donde V_l es el volumen molar líquido.

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{e^{DT^*}} + \frac{E}{e^{FT^*}} + \frac{G}{e^{HT^*}} \quad (5.63)$$

donde A , B , C , D , E , F , G y H son coeficientes para el modelo y T^* la temperatura adimensional en función del parámetro de Lennard-Jones de energía potencial definido por $\frac{\epsilon}{k} = 1.15T_b$.

En el caso de los gases atmosféricos ya sea N_2 , aire, entre otros pueden ser considerados como sustancias poliatómicas sencillas y se encuentran reportados en [28].

Sin embargo la relación para la difusividad empleado por el código CFD OpenFOAM ocupa un parámetro de contribución, el cual no existe para un biodiesel, por lo tanto al determinar la difusividad mediante otro método es posible determinar la difusión atómica para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Como se ha mencionado anteriormente el objeto de las correlaciones empíricas no es programarlas en el código, puesto que dependen de la química molecular de cada ácido graso, tarea que sería poco practica y muy específica para un biodiesel en particular, por lo tanto, se realizaran regresiones no lineales a modo de ajustar los

resultados obtenidos por las correlaciones empíricas a los modelos empleados por el código CFD OpenFOAM descritos en la sección 2.5.1.

A continuación se presenta un compendio de los métodos empleados para la determinación de las propiedades así como los resultados obtenidos de las propiedades de transporte y termo-físicas para los ácidos grasos y para el biodiesel.

5.3 ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE LOS ÁCIDOS GRASOS Y DEL BIODIESEL

La presente sección está compuesta de dos subsecciones, en la primera se expondrán los resultados para cada una de las propiedades descritas en la Tabla: 5.7 de los 10 ácidos grasos mostrados en la Tabla: 4.3, y en la segunda se describirán los coeficientes obtenidos a partir de las regresiones no lineales para los 10 ácidos grasos.

Además en ambas secciones se expondrán las propiedades para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

5.3.1 CORRELACIONES EMPÍRICAS DE GRUPOS FUNCIONALES PARA LOS ÁCIDOS GRASOS

Anteriormente se describieron las correlaciones empleadas para el computo de las propiedades de transporte y termo-físicas las cuales emplean la química molecular de cada ácido graso; a continuación se expondrán los resultados obtenidos por las correlaciones.

	Propiedad de transporte o termo-física	Método de estimación
1	Propiedades críticas	Método de Ambrose [6]
2	Mezclas de ácidos grasos	Ley de Kay y Raoult [3, 15]
3	Densidad	Rackett-Ramirez Verduzco [6, 10]
4	Presión de vapor	Método de Vetere [12]
5	Entalpía de vaporización	Método de Fish [18]
6	Capacidad calorífica líquida	Método de Rowlinson-Bondi [3, 19]
7	Capacidad calorífica del vapor	Método de Joback [3]
8	Segundo coeficiente virial	Método de Tsonopolus [3]
9	Viscosidad líquida	Método de Ramírez Verduzco [10]
10	Viscosidad del vapor	Método de Reichenberg [5, 25]
11	Conductividad térmica del líquido	Método de Missenard [3]
12	Conductividad térmica del vapor	Método de Chung [26]
13	Tensión superficial	Método de Allen [27]
14	Difusividad de vapor	Método de Wilke-Lee [3]

Tabla 5.7: *Métodos propuestos para la estimación de las propiedades de transporte y termo-físicas de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

Propiedades críticas de los ácidos grasos y del biodiesel

Aplicando las correlaciones descritas en la sección 5.2.1 se obtienen los resultados mostrados en la Tabla: 5.8:

Ácidos grasos					
Propiedades	[C6:0]	[C14:0]	[C16:0]	[C16:1]	[C18:0]
$T_c[K]$	667.25	668.54	768.26	770.30	775.21
$P_c[bar]$	31.54	16.44	14.68	15.03	13.26
$V_c[\frac{cm^3}{mol}]$	395.50	836.30	946.50	926.50	1056.70
$T_b[K]$	477.15	523.65	611.15	611.15	625.15
ω	0.6412	0.9693	1.0446	1.0342	1.1167

Propiedades	[C18:1]	[C18:2]	[C18:3]	[C20:0]	[C22:0]
$T_c[K]$	773.30	796.34	798.30	736.48	783.10
$P_c[bar]$	13.53	13.84	14.15	12.10	11.12
$V_c[\frac{cm^3}{mol}]$	1036.70	1016.70	996.70	1166.70	1277.10
$T_b[K]$	622.15	639.15	639.15	601.15	646.15
ω	1.1055	1.0968	1.0866	1.1856	1.2512

Tabla 5.8: *Propiedades críticas de los ácidos grasos caprico, mirístico, palmítico, palmitoléico, esteárico, oléico, linoléico, linolénico, araquídico y behénico*

En la Tabla: 5.8 se demuestra la primera diferencia y lo imperativo del conocer la composición del biodiesel, puesto que el número de carbonos y dobles enlaces presentes en la molécula afectara la a las propiedades. Usando las reglas de mezclado descritas en la sección 5.2.3 se pueden determinar las propiedades para el biodiesel, sin embargo el código CFD OpenFOAM requiere no únicamente las propiedades críticas sino además el factor de compresibilidad crítico Z_c , la temperatura y la presión en el punto triple, el momento dipolo y el parámetro de solubilidad del biodiesel. Por lo tanto, es necesario determinar esos factores antes de completar la información crítica del biodiesel.

- Factor de compresibilidad

El factor de compresibilidad para la mezcla es determinado mediante la siguiente relación:

$$Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c} = 0.291 - 0.080\omega_m \quad (5.64)$$

donde Z_c es el factor de compresibilidad crítico, P_c es la presión crítica del biodiesel, V_c es el volumen crítico del biodiesel, T_c es la temperatura crítica y ω_m es el factor acéntrico de la mezcla [3].

- **Parámetro de Solubilidad**

También conocida como la energía de cohesión, la cual mide las fuerza intermoleculares responsables de la unión o la cohesión de un material y puede ser definida como la raíz cuadrada de la densidad de energía de cohesión. La relación entre el parámetro de solubilidad y la densidad de energía de cohesión esta dada por la siguiente relación:

$$v = ch^{1/2} = \left(\frac{\mathbf{E}}{\mathbf{V}_{\text{mol}}}\right)^{1/2} = \left(\frac{\Delta H_v - RT}{\mathbf{V}_{\text{mol}}}\right)^{1/2} \quad (5.65)$$

donde ch es el parámetro de cohesión, \mathbf{E} es el calor latente de evaporación, \mathbf{V}_{mol} es el volumen molar, ΔH_v es la entalpía de vaporización, R es la constante de los gases y T es la temperatura de referencia. Batista et al. [30] emplean esta relación para sistemas no polares como es el caso del biodiesel.

En la Tabla: 5.9 se muestran propiedades críticas del biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Propiedades críticas del biodiesel	
$M[kg/kmol]$	276.91
$T_c[K]$	772.43
$P_c[Pa]$	1.25×10^6
$V_c[\frac{m^3}{kmol}]$	1.016
Z_c	0.2036
$T_{triple}[K]$	253.15
$P_{triple}[Pa]$	8.20×10^{-5}
$T_b[K]$	619.774
$\mu[debye]$	1.264
ω_m	1.0917
$v[(\frac{J}{m^3})^{1/2}]$	3.92×10^4

Tabla 5.9: *Propiedades críticas del biodiesel empleadas en el código CFD OpenFOAM*

Densidad

Empleando las relaciones propuestas en la sección 5.2.4 se obtienen los resultados representados en la Figura: 5.5, concretamente en esta figura se puede observar un aumento de la densidad con el aumento en la cadena de hidrocarburos, así como el aumento en la cantidad de dobles enlaces varia gradualmente el valor absoluto de la densidad. Los resultados obtenidos mediante el acoplamiento de la relación de Rackett-Ramírez Verduzco siguen la misma tendencia que los valores experimentales reportados en [11, 31, 32] con un porcentaje de error menor al 0.5 %.

Presión de vapor

Empleando las relaciones propuestas en la sección 5.2.5 se obtienen los resultados representados en la Figura: 5.6, específicamente en la figura se puede observar una variación en la presión de vapor de los diversos ácidos grasos. Los ácidos grasos son componentes orgánicos de baja volatilidad, por lo tanto al aumentar la cadena de hidrocarburos disminuye la presión de vapor [33, 14] además las moléculas con cadenas

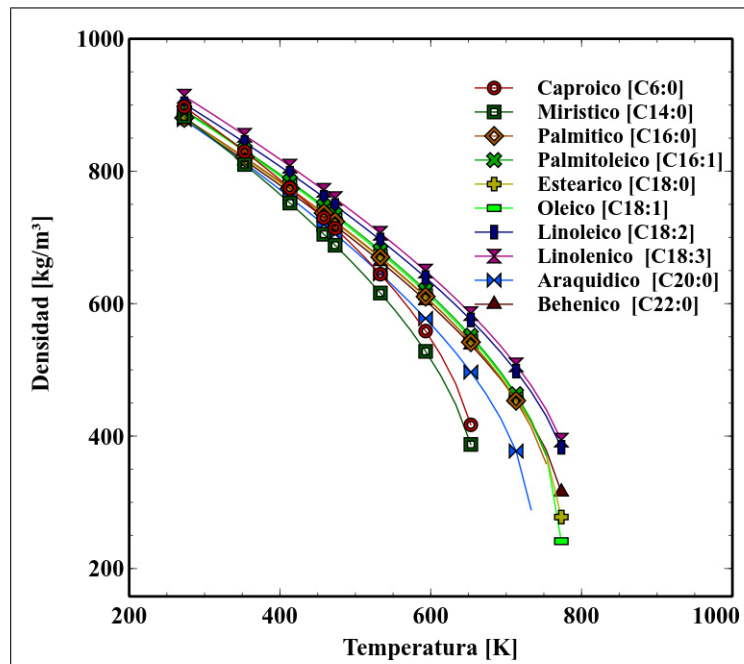


Figura 5.5: Densidad de los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

más corta requieren menor energía para su evaporación elevando su presión de vapor.

Entalpía de vaporización

Como se comentó en la sección 5.2.6, la relación propuesta por Fish et al. [18] es un método ampliamente empleado y genera resultados satisfactorios para la entalpía de vaporización de los ácidos grasos. En la Figura: 5.7 se muestra la tendencia que siguen los ácidos grasos al disminuir la entalpía de vaporización molar en función del número de carbonos [34], sin embargo el código CFD OpenFOAM, ocupa la entalpía de vaporización específica, por lo tanto es necesario tratar la entalpía de vaporización de la Figura: 5.7 en función de la masa, obteniendo los resultados representados en la Figura: 5.8, donde se puede observar como la entalpía de vaporización específica disminuye con el aumento de la temperatura además de una disminución del valor absoluto con una disminución en la cadena de hidrocarburos.

Cabe destacar el comportamiento del ácido caproico el cual tiene una entalpía de

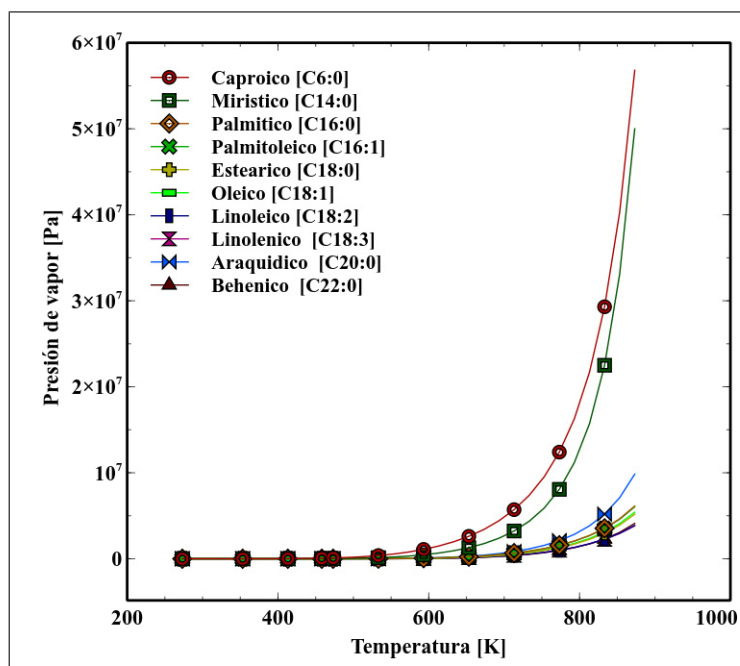


Figura 5.6: Presiones de vapor de los ácidos grasos presentes en el biodiésel derivado del aceite usado de cocina

vaporización más alta a temperaturas bajas, está influenciado por su masa molar y por el aumento en el momento dipolo que mantiene la molécula unida a bajos niveles de energía, sin embargo en los rangos de temperatura de trabajo habitual de un motor tiene un decaimiento muy pronunciado a comparación con el resto de los ácidos grasos de cadenas más largas.

Capacidad calorífica del líquido

La variación en la cadena de hidrocarburos genera una variación en la capacidad calorífica. El método propuesto en la sección 5.2.7 es una buena aproximación para la determinación de la capacidad calorífica y reproduce acertadamente la tendencia al incremento en la capacidad calorífica con el aumento en la temperatura según expone Cedeño et al. [35], este aumento se ve propiciado por colisiones moleculares que favorecen el calentamiento y la entrega de energía. En la Figura: 5.9 se puede observar como la capacidad calorífica aumenta al incrementar la temperatura, sin

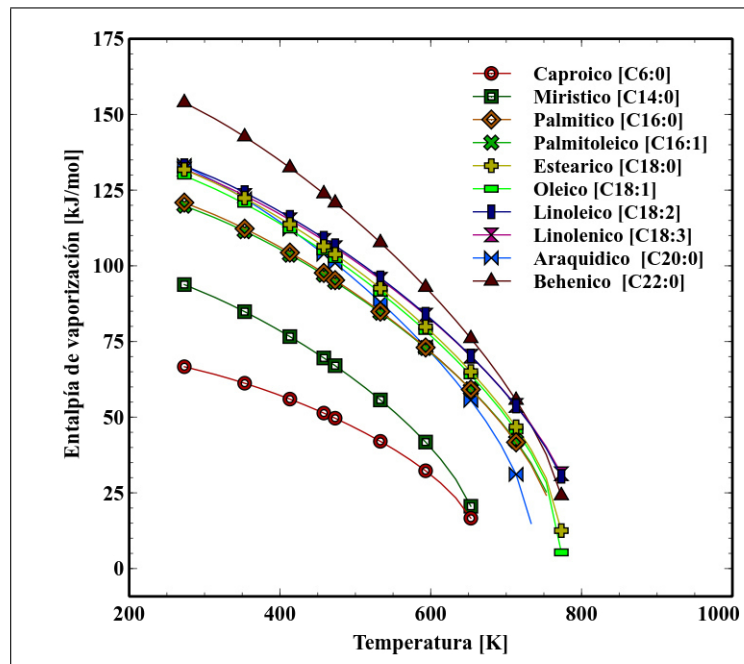


Figura 5.7: Entalpía de vaporización molar para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

embargo dependiendo de la cadena de hidrocarburos y la cantidad de dobles enlaces se favorece la ruptura de la molécula en la ubicación de los dobles enlaces evitando una correcta liberación de energía y la entrega de electrones al oxígeno.

Capacidad calorífica del gas

La capacidad calorífica de los ácidos grasos aumenta con forme incrementa la cadena de hidrocarburos, la cual a su vez aumenta al incrementar la temperatura, comportamiento muy similar a un hidrocarburo convencional, sin embargo en la Figura: 5.10 se muestra como la cantidad de dobles enlaces se desempeñan como un factor para el aumento de la capacidad calorífica de un gas, puesto que actúan como almacenes de energía una vez rotos los enlaces, factor que hace que los ácidos grasos poliinsaturados sean los más óptimos para la liberación de energía por la alta cantidad de electrones presentes [36].

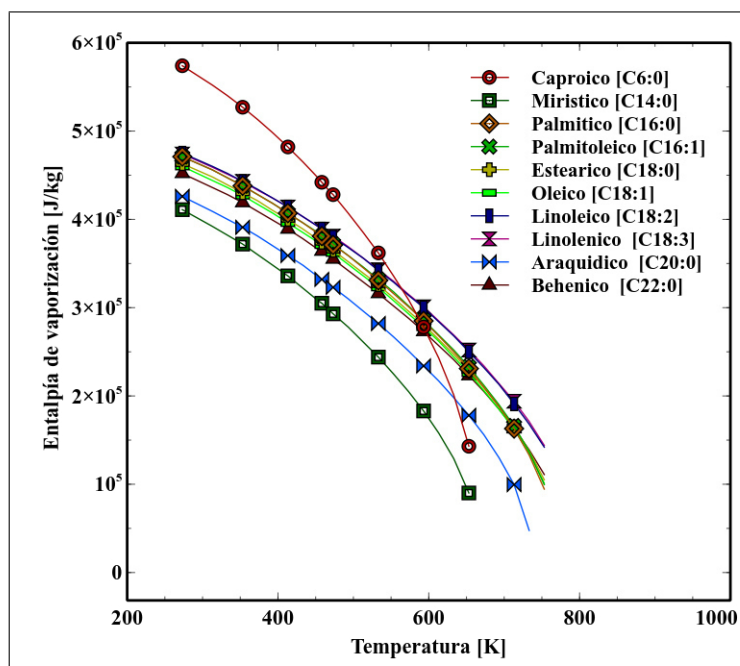


Figura 5.8: Entalpía de vaporización específica para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Segundo coeficiente virial

Como se comentó en la sección 5.2.9 el segundo coeficiente virial es un parámetro que caracteriza las fuerzas intermoleculares relacionadas con la expansión del gas y su liberación de energía al reaccionar con oxígeno. Un compuesto con mayor electronegatividad tendrá mayor afinidad a atraer electrones, por lo tanto un incremento en la electronegatividad disminuye la capacidad de electrones libres que puedan reaccionar con el oxígeno presente en la cámara de combustión, por lo tanto se presenta un incremento en el coeficiente virial, como puede ser observado en la Figura: 5.11, sin embargo también se puede observar un aumento del coeficiente virial en compuestos con electronegatividad nula como los hidrocarburos, puesto que a medida que la temperatura aumenta, y con ello la energía cinética de las moléculas, presentándose aumentos en las colisiones entre las moléculas, por lo tanto al aumentar la temperatura aumentan las fuerzas repulsivas haciendo que el coeficiente virial se haga menos negativo y permite la liberación de electrones presentes en los enlaces.

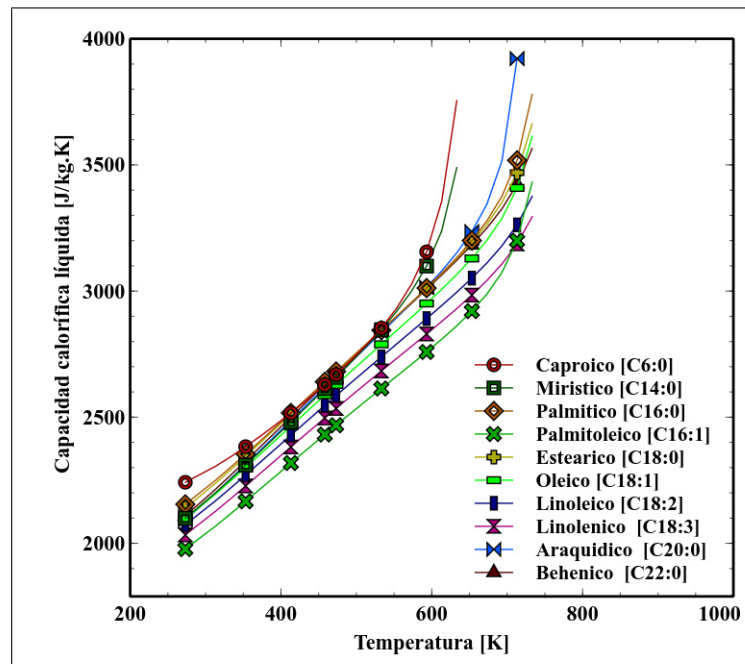


Figura 5.9: Capacidad calorífica del líquido para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Viscosidad líquida

El efecto del peso molecular y de la cantidad de dobles enlaces en la viscosidad se puede observar en la Figura: 5.12 donde al incrementar el peso molecular se tiene un incremento en la viscosidad, un ejemplo de este comportamiento es el ácido behénico junto con el ácido caproico el cual tiene un decremento del 90 % en viscosidad, sin embargo este efecto se ve mitigado conforme al aumento en la temperatura. Esta tendencia, que siguen los ácidos grasos, fue reportada por Allen et al. [23] y por Ramirez Verduzco[10] con una desviación del 7 % con respecto a información experimental.

Viscosidad de vapor

La viscosidad de vapor exhibe un comportamiento similar al segundo coeficiente virial, puesto que ésta depende de las fuerzas intermoleculares que expanden el vapor la cual aumenta con la temperatura, debida al aumento de la energía cinética y la

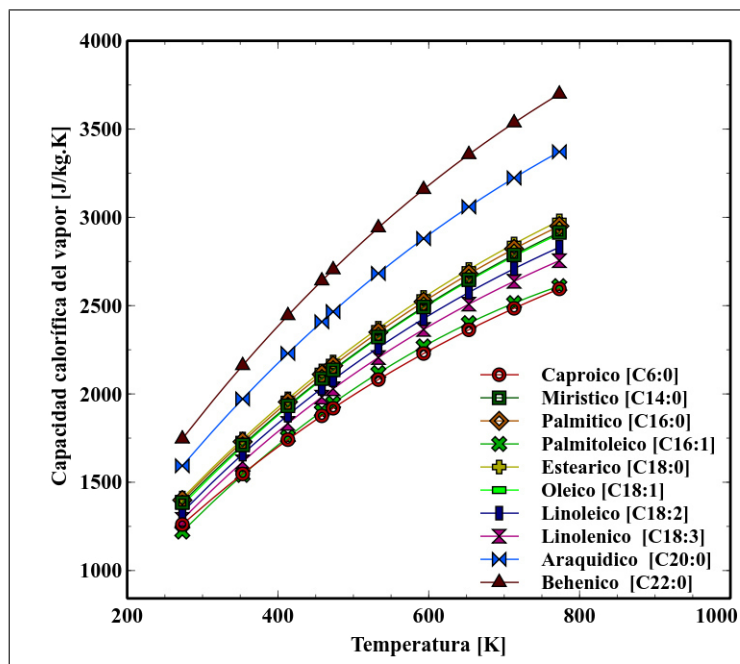


Figura 5.10: Capacidad calorífica del gas para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

colisión entre las moléculas presentes en el gas. En la Figura: 5.13 se puede observar la variación de la viscosidad con respecto a la cadena hidrocarbonada la cual a su vez es función del momento dipolar de cada molécula. La viscosidad del vapor disminuye conforme aumenta la cadena de hidrocarburo debido a la poca facilidad para conseguir colisión molecular en cadenas más grandes y pesadas.

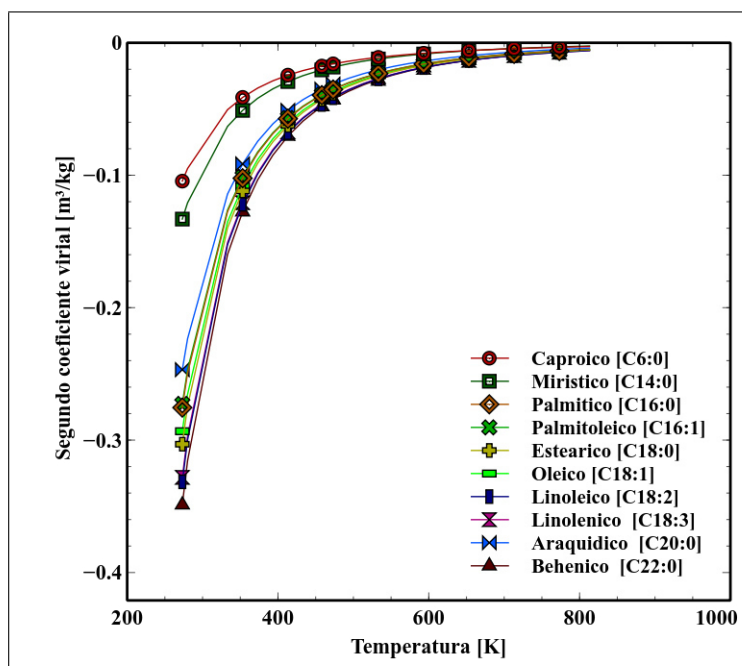


Figura 5.11: Segundo coeficiente virial para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Conductividad térmica líquida

Como se comentó anteriormente la transferencia de energía líquidos ocurre más eficientemente por conducción a través de los pozos intermoleculares entre moléculas que a través de la colisión de estas. Esta conducción es más eficiente a través de estos potenciales intermoleculares. Como resultado de esto la conductividad térmica de un líquido disminuye conforme aumenta la temperatura, de la misma manera que la densidad disminuye con el aumento en la temperatura.

La conductividad disminuye al aumentar el número de carbonos, debido al aumento en la cadena hidrocarbonada, la cual demanda más energía, en cada molécula. Sin embargo entre moléculas del mismo número de carbonos los dobles enlaces funcionan como sumidero de energía por los enlaces compartidos, disminuyendo el coeficiente de transferencia de calor, este comportamiento fue reportado para el ácido oléico y el linoléico por Perkins et al. [37], sin embargo existe poca literatura relacionada con el resto de los ácidos grasos. En la Figura: 5.14 se puede observar la disminución de la conductividad térmica con el aumento en la temperatura y la variación con la

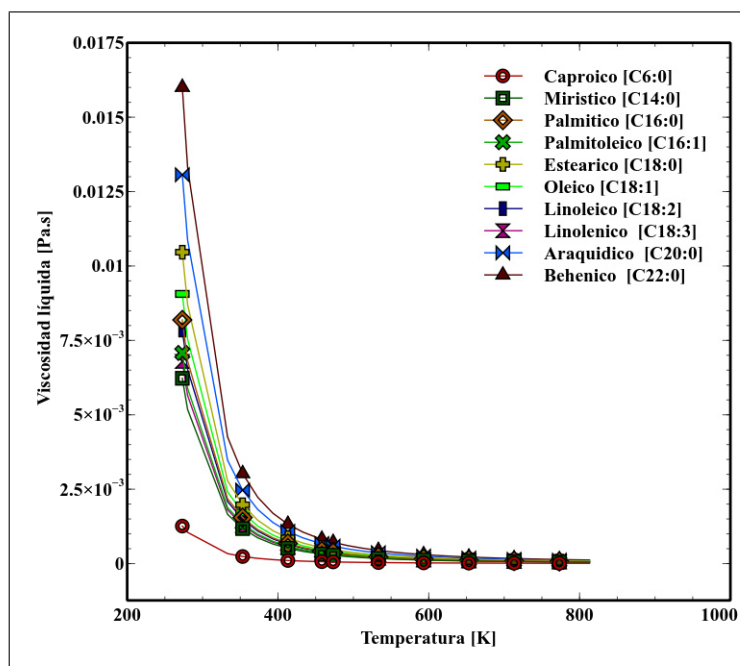


Figura 5.12: Viscosidad líquida para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

cantidad de dobles en enlaces presentes en la molécula.

Conductividad térmica del vapor

Como se comentó anteriormente la conductividad térmica es la medida de la razón de conducción de calor a través de un material. El mecanismo de conducción en gases de baja densidad, es primordialmente vía colisiones moleculares, y el valor absoluto de k , para los gases, incrementa con la temperatura, puesto que incrementa la velocidad de colisión molecular. Los elementos con electronegatividad más alta atraen con más fuerza electrones de enlace. Los ácidos grasos se consideran no polares por las largas cadenas que no permiten la atracción de electrones como lo hacen los compuestos polares, sin embargo entre los ácidos grasos el comportamiento puede variar por esta característica, puesto que el momento dipolar varía con la cadena de carbonos esta variación en la electronegatividad permite que se compartan con mayor facilidad los electrones permitiendo que haya mayor energía cinética incrementando la conducti-

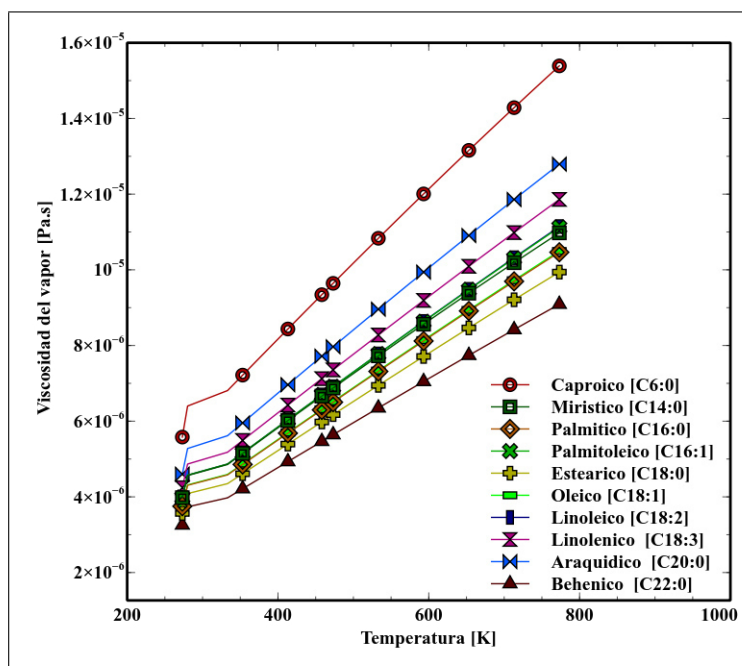


Figura 5.13: Viscosidad de vapor para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

vidad térmica de la fase vapor. Los mapas de potencial electrostáticos de la Figura: 5.15 muestran los momentos dipolares de enlace para el formaldehído y del ácido capríco, en color rojo los extremos negativos y en color azul los extremos positivos de los dipolos.

Este comportamiento asociado con la carga eléctrica de la molécula que gobierna el comportamiento de las propiedades de la fase vapor, motivo por el cual los ácidos grasos presentan conductividades térmicas diferentes. En la Figura: 5.16 se muestra la conductividad térmica de la fase vapor en función de la temperatura y la variación con el tamaño de la cadena hidrocarbonada.

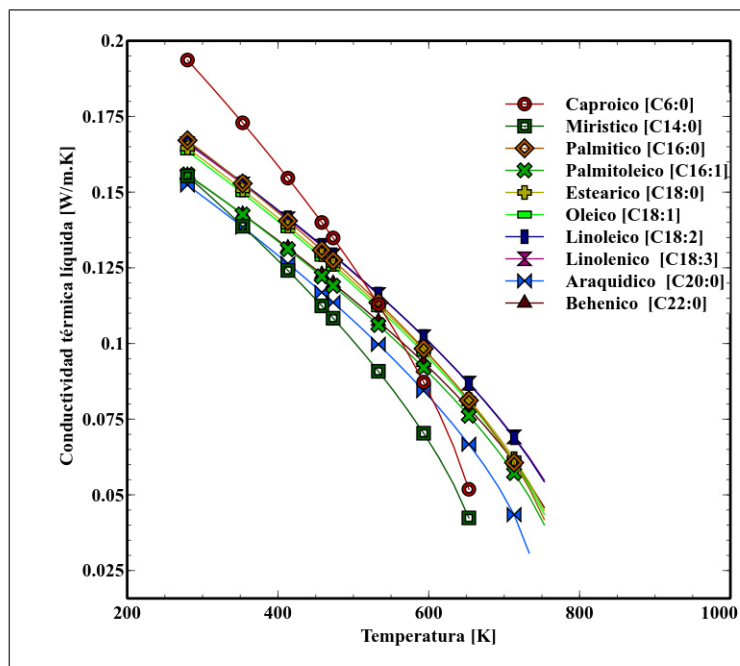


Figura 5.14: Conductividad térmica líquida para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

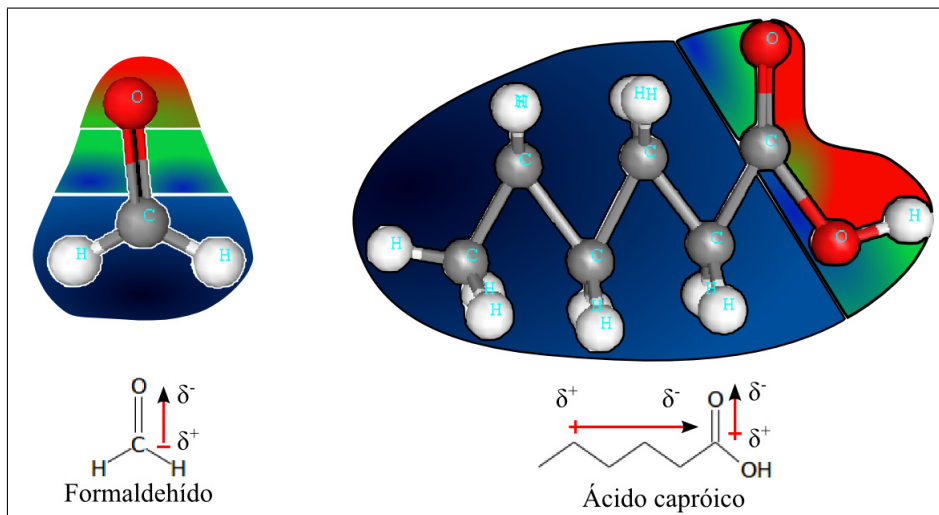


Figura 5.15: Potencial electrostático

Tensión superficial

La tensión superficial es una de las propiedades más relevantes en el proceso de atomización, la cual dependerá de la cadena de hidrocarburos y del grado de insatu-

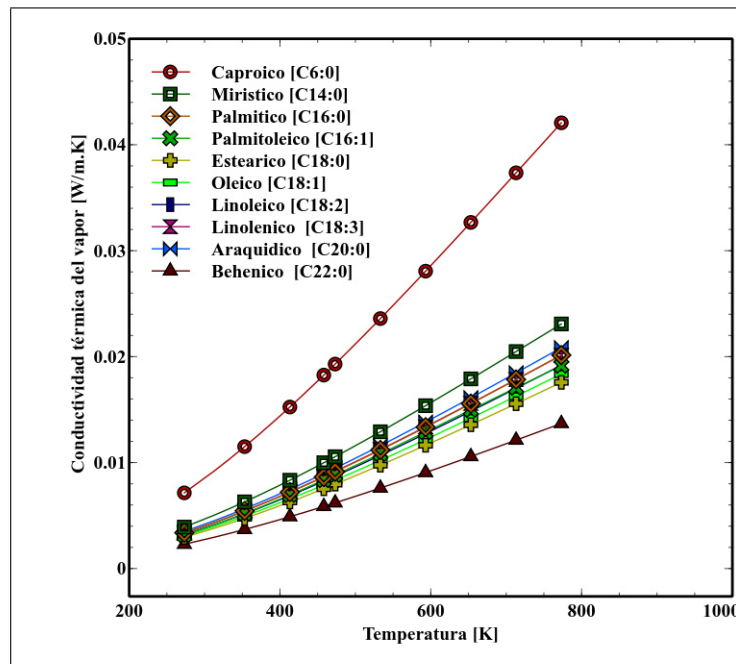


Figura 5.16: Conductividad térmica del vapor para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

ración de cada ácido graso. Esta propiedad se debe a las atracciones intermoleculares entre cada molécula de ácido graso donde las cargas eléctricas de cada ácido genera pequeñas atracciones magnéticas entre cada ácido, lo que permite que las fuerzas de atracción molecular de las moléculas en el centro de la gota estén balanceadas permitiendo que fluyan libremente dentro de la gota a diferencia de las moléculas en la superficie de la gota, las cuales sus fuerzas laterales se encuentran balanceadas, sin embargo las fuerzas inferiores jalan a la gota creando una *película* lo que se conoce como tensión superficial (ver Figura: 5.17), sin embargo conforme aumenta la temperatura y empieza la excitación molecular la fuerza de atracción de las moléculas decrece disminuyendo la tensión superficial.

Entre los ácidos grasos saturados la tensión superficial aumenta conforme aumenta la cadena de hidrocarburos [27, 38], sin embargo entre los ácidos grasos insaturados entre mayor número de dobles enlaces presentes en la molécula mayor tensión superficial [39] en comparación con su contra parte saturada este comportamiento se puede observar la Figura: 5.18, esta característica está ligada al hecho de que

los electrones presentes en los dobles enlaces mejoran las fuerzas intermoleculares aumentando el valor absoluto de la tensión superficial.

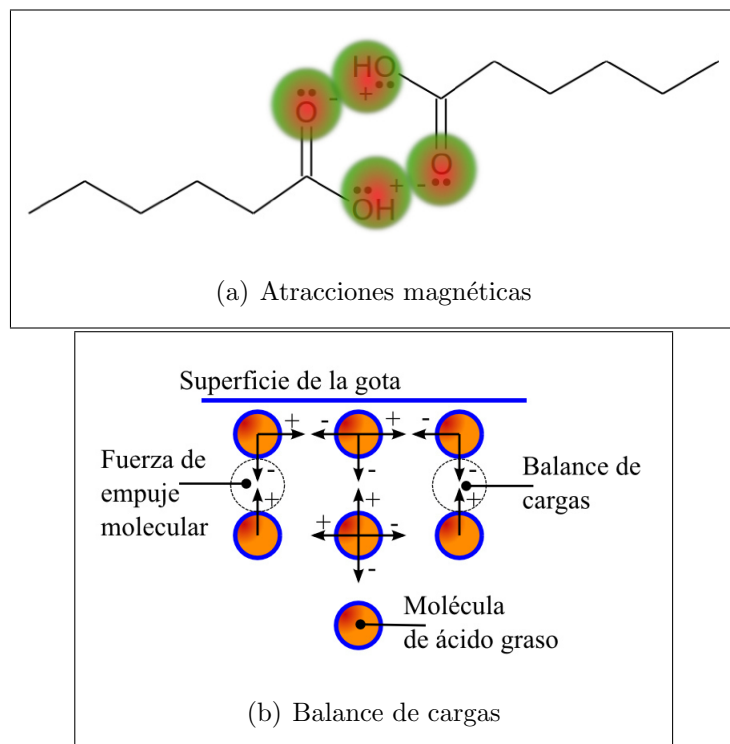


Figura 5.17: (a) Atracciones magnéticas moleculares y (b) Balance de cargas en las moléculas centrales y superficiales

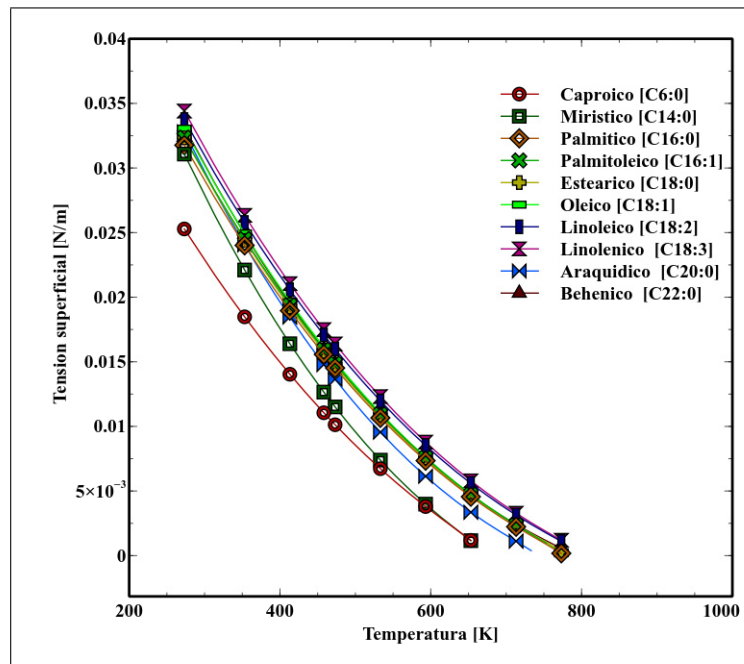


Figura 5.18: Tensión superficial para los ácidos grasos presentes en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina

5.3.2 REGRESIONES NO LINEALES

El objeto de emplear correlaciones empíricas es computar las propiedades mediante modelos universales y aplicables a todo tipo de compuestos, sin embargo programar cada uno de estos métodos sería una tarea compleja y muy limitada puesto que sería para el uso de un biodiesel en particular y no para uno de composición variable, debido a esto los resultados obtenidos serán ajustados a los modelos empleados por el código CFD OpenFOAM presentados en la sección 2.5.1 mediante regresiones no lineales, obteniendo así las constantes empleadas en dichos modelos, por lo tanto conociendo la composición y usando estas constantes se será capaz de simular un chorro de biodiesel de una variada composición o cualquier actividad que involucre una propiedad en función de la temperatura.

Coefficientes para el modelo de la densidad

El modelo descrito en la sección 2.5.1 mediante la ecuación 2.9 empleado por el código CFD OpenFOAM para la determinación de densidad fue propuesto por el sistema nacional de información de referencia entandar y por el instituto Americano de ingenieros químicos, por su siglas en ingles NSRDS-AICHE(National Standard Reference Data Series-American Institute of Chemical Engineers). Dicho sistema propone el uso de la función NSRDS-5, la cual emplea tres coeficientes para la resolución de la densidad. En la Tabla: 5.10 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Ácido graso	A	B	D
[C6:0]	60.34218	0.2343221	0.2857143
[C14:0]	46.47038	0.2055518	0.2857143
[C16:0]	42.16299	0.1989425	0.2857143
[C16:1]	43.0525	0.1998532	0.2857143
[C18:0]	39.5324	0.1926172	0.2857143
[C18:1]	40.45482	0.1936055	0.2857143
[C18:2]	41.00932	0.1943674	0.2857143
[C18:3]	41.86662	0.1952623	0.2857142
[C20:0]	37.64142	0.1865793	0.2857143
[C22:0]	34.9317	0.1808221	0.2857142

Tabla 5.10: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de densidad*

Coefficientes para el modelo de la presión de vapor

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la presión de vapor de cada componente mediante la ecuación 2.10. La NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-1, la cual emplea cinco coeficientes para la resolución de la presión de vapor. En la Tabla: 5.11 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Ácidos grasos	A	B	C	D	E
[C6:0]	142.143	-9621.431	-18.29793	$1.155x10^{-5}$	2.027901
[C14:0]	141.6068	-9836.696	-18.38755	$1.136x10^{-5}$	2.046857
[C16:0]	144.3114	-13210	-17.87378	$1.278x10^{-5}$	1.961082
[C16:1]	144.3827	-13280	-17.8601	$1.284x10^{-5}$	1.958613
[C18:0]	144.4014	-13500	-17.8528	$1.300x10^{-5}$	1.957324
[C18:1]	144.7345	-13880	-17.78892	$1.330x10^{-5}$	1.94797
[C18:2]	144.8519	-14140	-17.76405	$1.339x10^{-5}$	1.940195
[C18:3]	144.9448	-14240	-17.74608	$1.349x10^{-5}$	1.936662
[C20:0]	143.6794	-12490	-18.013	$1.042x10^{-5}$	2.013621
[C22:0]	144.0282	-13240	-17.9388	$1.083x10^{-5}$	1.992583

Tabla 5.11: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la presión de vapor*

Coefficientes para el modelo de la entalpía de vaporización

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la entalpía de vaporización de cada componente mediante la ecuación 2.11, donde la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-6, la cual emplea cinco coeficientes para la resolución de la entalpía de vaporización. En la Tabla: 5.12 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Ácidos grasos	A	B	C	D	E
[C6:0]	580100	-0.4864856	1.577404	-0.8745876	0.1553848
[C14:0]	464600	0.0451086	0.3630416	0.4182971	-0.3872139
[C16:0]	509100	-0.0477377	0.6012561	0.2345074	-0.3527579
[C16:1]	527700	0.1707282	0.0422047	0.8034817	-0.5740778
[C18:0]	420200	-1.127226	3.452901	-2.704719	0.7794714
[C18:1]	419700	-1.105869	3.435544	-2.735753	0.8089476
[C18:2]	544500	0.329401	-0.3270012	1.167298	-0.7131238
[C18:3]	550600	0.4201673	-0.5651482	1.393197	-0.7878864
[C20:0]	383900	-1.225926	3.704695	-2.945191	0.8703534
[C22:0]	478700	-0.1804454	0.9850284	-0.0885607	-0.2669735

Tabla 5.12: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la entalpía de vaporización*

Coefficientes para el modelo de la capacidad calorífica del líquido

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la capacidad calorífica del líquido de cada componente mediante la ecuación 2.13, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-0, la cual emplea seis coeficientes para la resolución de la capacidad calorífica del líquido. En la Tabla: 5.13 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Coefficientes para el modelo de la capacidad calorífica del vapor

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la capacidad calorífica del vapor de cada componente mediante la ecuación 2.14, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-7, la cual emplea cinco coeficientes para la resolución de la capacidad calorífica del vapor. En la Tabla: 5.14 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Ácidos grasos	A	B	C	D	E	F
[C6:0]	-25380	347.4456	-1.72840	0.004241	$-5.115x10^{-6}$	$2.431x10^{-9}$
[C14:0]	-13660	194.4472	-0.96081	0.002363	$-2.857x10^{-6}$	$1.361x10^{-9}$
[C16:0]	-7006.223	104.1835	-0.47576	0.001084	$-1.206x10^{-6}$	$5.237x10^{-10}$
[C16:1]	-6245.297	93.22777	-0.42544	0.000971	$-1.083x10^{-6}$	$4.713x10^{-10}$
[C18:0]	-3833.246	66.41455	-0.30188	0.000695	$-7.803x10^{-7}$	$3.418x10^{-10}$
[C18:1]	-4506.863	73.78019	-0.33531	0.000769	$-8.608x10^{-7}$	$3.762x10^{-10}$
[C18:2]	-310.933	24.29893	-0.10859	0.000262	$-3.057x10^{-7}$	$1.384x10^{-10}$
[C18:3]	-193.9088	22.42990	-0.09977	0.000241	$-2.831x10^{-6}$	$1.287x10^{-10}$
[C20:0]	-4328.674	73.02620	-0.34077	0.000807	$-9.353x10^{-6}$	$4.244x10^{-9}$
[C22:0]	-1644.848	39.75283	-0.17792	0.000416	$-4.737x10^{-6}$	$2.0991x10^{-9}$

Tabla 5.13: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la capacidad calorífica del líquido*

Coefficientes para el modelo del segundo coeficiente virial

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar el segundo coeficiente virial de cada componente mediante la ecuación 2.15, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-4, la cual emplea cinco coeficientes para la resolución del segundo coeficiente virial. En la Tabla: 5.15 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Coefficientes para el modelo de la viscosidad líquida

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la viscosidad líquida de cada componente mediante la ecuación 2.16, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-1, la cual emplea tres coeficientes para la resolución de la viscosidad líquida. En la Tabla: 5.16 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina. Como se mencionó anteriormente la forma de esta ecuación es análoga en su forma extendida a la ecuación 2.10, para la presión de vapor de evaluada por Vetere et al. [12].

Ácidos grasos	A	B	C	D	E
[C6:0]	863.0641	2813.599	-1318.201	1650.199	-602.015
[C14:0]	934.8723	3237.078	-1324.044	1883.329	-604.0795
[C16:0]	942.991	3284.827	-1324.719	1909.726	-604.332
[C16:1]	519.5362	2890.862	-1004.479	1610.728	-451.3841
[C18:0]	949.347	3323.289	-1324.895	1930.621	-604.3603
[C18:1]	909.881	3233.066	-1319.847	1918.008	-602.7147
[C18:2]	869.8065	3141.686	-1314.307	1905	-600.9611
[C18:3]	828.8168	3048.992	-1307.988	1891.333	-598.9709
[C20:0]	1071.723	3765.741	-1325.429	2186.749	-604.568
[C22:0]	1173.373	4135.966	-1325.681	2400.705	-604.6588

Tabla 5.14: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la capacidad calorífica del vapor*

Ácidos grasos	A	B	C	D	E
[C6:0]	0.0016997	-1.45537	-1468000	$-2.786x10^{18}$	$5.177x10^{20}$
[C14:0]	0.0010501	0.1438498	-1994000	$-3.777x10^{18}$	$7.203x10^{20}$
[C16:0]	-0.0024707	4.128352	-4194000	$-8.566x10^{18}$	$1.644x10^{21}$
[C16:1]	-0.0024675	4.065027	-4147000	$-8.479x10^{18}$	$1.627x10^{21}$
[C18:0]	-0.0032635	5.256582	-4642000	$-9.541x10^{18}$	$1.835x10^{21}$
[C18:1]	-0.0030523	4.962927	-4488000	$-9.212x10^{18}$	$1.771x10^{21}$
[C18:2]	-0.0042083	6.182805	-5077000	$-1.054x10^{19}$	$2.026x10^{21}$
[C18:3]	-0.0041854	6.097639	-5023000	$-1.043x10^{19}$	$2.006x10^{21}$
[C20:0]	-0.0017366	3.798791	-3788000	$-7.653x10^{18}$	$1.473x10^{21}$
[C22:0]	-0.0046351	7.262782	-5397000	$-1.124x10^{19}$	$2.167x10^{21}$

Tabla 5.15: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación del segundo coeficiente virial*

Ácido graso	A	B	C
[C6:0]	-14.03049	2008.998	$-4.774x10^{-6}$
[C14:0]	-12.43317	2008.964	-0.0001092
[C16:0]	-12.15945	2008.969	$-9.273x10^{-5}$
[C16:1]	-12.30506	2008.965	-0.0001049
[C18:0]	-11.91489	2009	$-1.505x10^{-7}$
[C18:1]	-12.05864	2009	$-6.629x10^{-8}$
[C18:2]	-12.20197	2008.97	$-9.057x10^{-5}$
[C18:3]	-12.34594	2008.969	$-9.354x10^{-5}$
[C20:0]	-11.69277	2009	$-1.411x10^{-7}$
[C22:0]	-11.48976	2009	$-3.509x10^{-7}$

Tabla 5.16: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la viscosidad líquida*

Coeficientes para el modelo de la viscosidad de vapor

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la viscosidad de vapor de cada componente mediante la ecuación 2.17, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-2, la cual emplea cuatro coeficientes para la resolución de la viscosidad de vapor. En la Tabla: 5.17 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Ácido graso	A	B	C	D
[C6:0]	$3.409x10^{-7}$	0.6417216	519.0745	-56900
[C14:0]	$3.537x10^{-7}$	0.5972528	631.762	-66310
[C16:0]	$2.851x10^{-7}$	0.6219277	631.8172	-69830
[C16:1]	$3.019x10^{-7}$	0.6224427	631.583	-69870
[C18:0]	$2.667x10^{-7}$	0.6235789	631.1192	-69970
[C18:1]	$2.888x10^{-7}$	0.6209825	637.2222	-70440
[C18:2]	$2.853x10^{-7}$	0.6303168	623.7406	-69910
[C18:3]	$3.005x10^{-7}$	0.6316322	621.1359	-69730
[C20:0]	$3.597x10^{-7}$	0.6168413	627.0074	-68440
[C22:0]	$2.416x10^{-7}$	0.6254302	630.2745	-70120

Tabla 5.17: *Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la viscosidad del vapor*

Coeficientes para el modelo de la conductividad térmica del líquido

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la conductividad térmica del líquido de cada componente mediante la ecuación 2.18, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-0, la cual emplea seis coeficientes para la resolución de la conductividad térmica del líquido. En la Tabla: 5.18 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Ácido graso	A	B	C	D	E	F
[C6:0]	0.56735	-0.003983	$1.82x10^{-5}$	$-4.37x10^{-8}$	$5.16x10^{-11}$	$-2.42x10^{-14}$
[C14:0]	0.43825	-0.002990	$1.36x10^{-5}$	$-3.27x10^{-8}$	$3.87x10^{-11}$	$-1.82x10^{-14}$
[C16:0]	0.24271	-0.000639	$2.77x10^{-6}$	$-7.47x10^{-9}$	$9.25x10^{-12}$	$-4.44x10^{-15}$
[C16:1]	0.21697	-0.000487	$2.10x10^{-6}$	$-5.88x10^{-9}$	$7.45x10^{-12}$	$-3.64x10^{-15}$
[C18:0]	0.21021	-0.000297	$1.22x10^{-6}$	$-4.00x10^{-9}$	$5.48x10^{-12}$	$-2.82x10^{-15}$
[C18:1]	0.21539	-0.000371	$1.56x10^{-6}$	$-4.75x10^{-9}$	$6.28x10^{-12}$	$-3.16x10^{-15}$
[C18:2]	0.17047	0.000185	$-9.75x10^{-7}$	$9.13x10^{-10}$	$9.65x10^{-14}$	$-5.10x10^{-16}$
[C18:3]	0.16773	0.000209	$-1.09x10^{-6}$	$1.17x10^{-9}$	$-1.92x10^{-13}$	$-3.82x10^{-16}$
[C20:0]	0.47050	-0.003312	$1.43x10^{-5}$	$-3.20x10^{-8}$	$3.50x10^{-11}$	$-1.50x10^{-14}$
[C22:0]	0.26533	-0.000909	$3.44x10^{-6}$	$-7.78x10^{-9}$	$8.52x10^{-12}$	$-3.73x10^{-15}$

Tabla 5.18: *Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la conductividad térmica del líquido*

Coeficientes para el modelo de la conductividad térmica de vapor

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la conductividad térmica de vapor de cada componente mediante la ecuación 2.19, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-2, la cual emplea tres coeficientes para la resolución de la conductividad térmica de vapor. En la Tabla: 5.19 se presentan los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina. Tanto la viscosidad como la conductividad térmica de la fase gaseosa pueden ser correlacionadas con la misma ecuación, debido a que ambas están en función

de las fuerzas intermoleculares del biodiesel siendo la conductividad térmica de la fase gaseosa dependiente de la viscosidad de dicha fase [26].

Ácido graso	A	B	C
[C6:0]	-1001.519	0.6316545	$-1.210x10^9$
[C14:0]	-916.8921	0.6366765	$-2.088x10^9$
[C16:0]	-999.2526	0.6502713	$-2.857x10^9$
[C16:1]	-1468.091	0.6326444	$-3.904x10^9$
[C18:0]	-1409.032	0.6513606	$-4.653x10^9$
[C18:1]	-1687.966	0.6492542	$-5.258x10^9$
[C18:2]	-2203.431	0.6496575	$-6.580x10^9$
[C18:3]	-2534.194	0.6475219	$-7.110x10^9$
[C20:0]	-2596.475	0.6472523	$-7.032x10^9$
[C22:0]	-2182.362	0.6527651	$-9.338x10^9$

Tabla 5.19: *Coefficientes de los ácidos grasos para la ecuación de la conductividad térmica del vapor*

Coeficientes para el modelo de la tensión superficial

El modelo empleado por el código CFD OpenFOAM para determinar la tensión superficial de cada componente mediante la ecuación 2.20, la NSRDS-AICHE propone la función NSRDS-6, la cual emplea cinco coeficientes para la resolución de la tensión superficial. En la Tabla: 5.20 presenta los coeficientes para cada ácido graso presente en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina. La correlación de Stephan establece la dependencia de la entalpía de vaporización con la tensión superficial, debido a esto es posible utilizar la misma función termodinámica que la entalpía de vaporización dada por la ecuación 2.11, para el cálculo de la tensión superficial [40].

Ácidos grasos	A	B	C	D	E
[C6:0]	0.0683064	3.271168	-5.830284	7.661095	-4.040282
[C14:0]	0.0894928	3.356945	-5.655834	7.441811	-3.982249
[C16:0]	0.0820788	3.417211	-5.648458	7.37469	-3.954829
[C16:1]	0.0834442	3.420459	-5.650959	7.35264	-3.934891
[C18:0]	0.0842265	3.451875	-5.626098	7.320936	-3.931374
[C18:1]	0.0862584	3.453284	-5.628835	7.30272	-3.913807
[C18:2]	0.0859565	3.460851	-5.63617	7.281365	-3.89311
[C18:3]	0.0880193	3.505881	-5.758617	7.394938	-3.929457
[C20:0]	0.091443	3.517796	-5.715133	7.410996	-3.972449
[C22:0]	0.0884578	3.542247	-5.697	7.410063	-3.992918

Tabla 5.20: *Coeficientes de los ácidos grasos para la ecuación de tensión superficial*

Para demostrar la exactitud de los coeficientes se grafican las correlaciones empíricas contra el modelo ajustado del código CFD OpenFOAM para las propiedades de transporte y termo-físicas del ácido oléico; ácido graso de mayor proporción en el biodiesel derivado del aceite usado de cocina. En la Figura: 5.19 a la Figura: 5.21 se presenta la comparativa entre las correlaciones empíricas de grupos funcionales con los modelos empleado por el código CFD OpenFOAM.

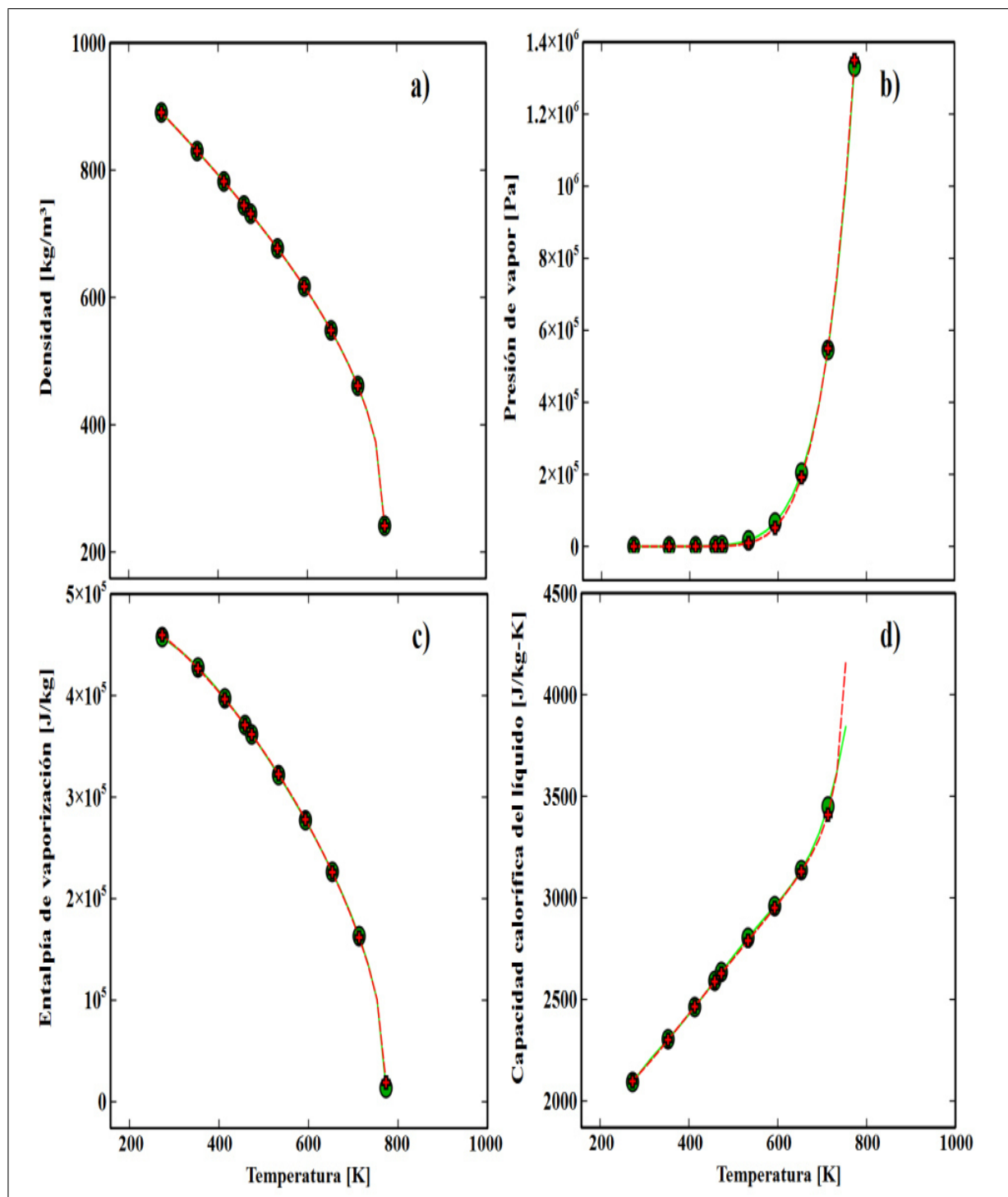


Figura 5.19: Propiedades de transporte y termo-físicas para el ácido oléico (a) densidad, (b) presión de vapor, (c) entalpía de vaporización y (d) capacidad calorífica del líquido

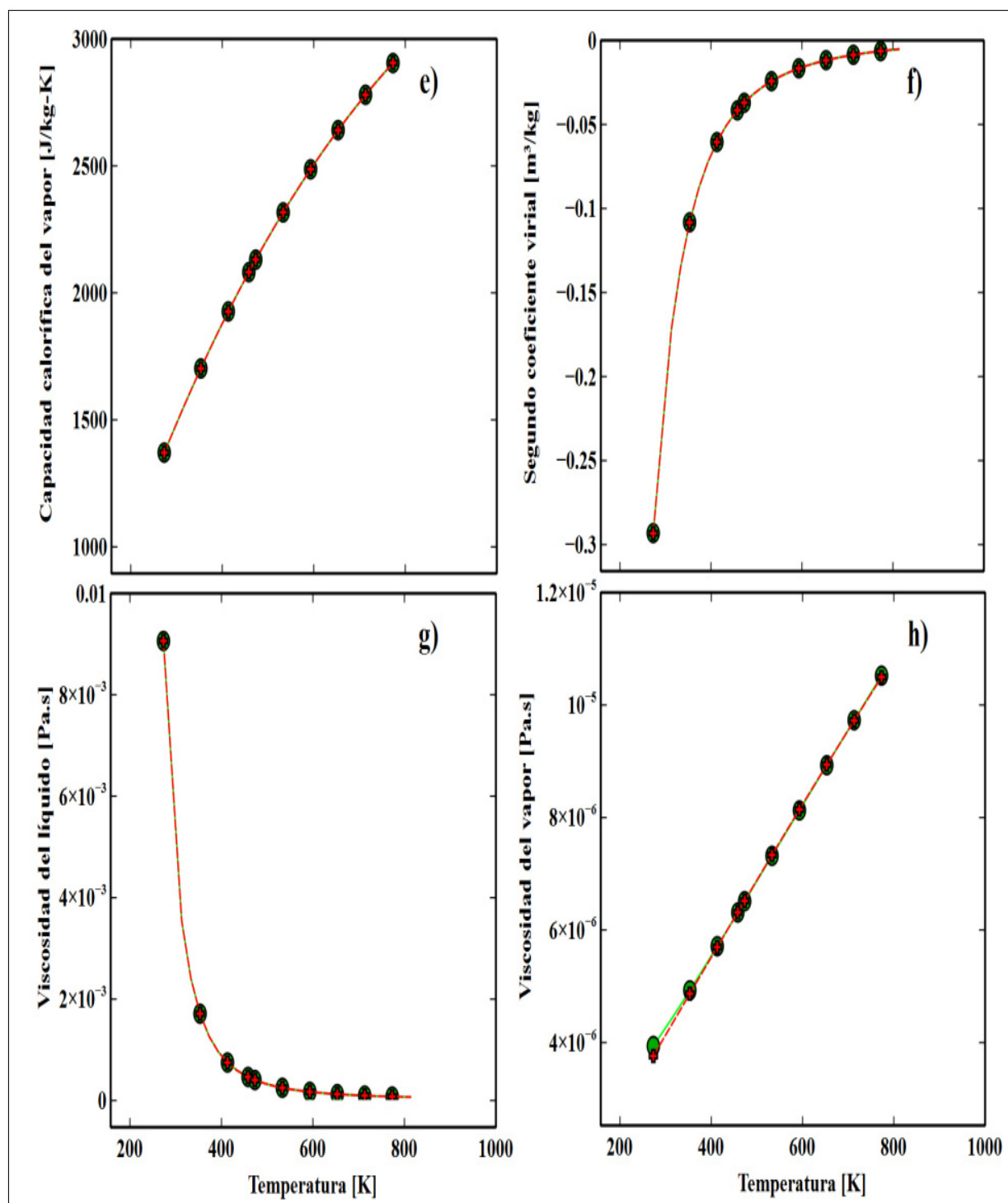


Figura 5.20: Propiedades de transporte y termo-físicas para el ácido oléico (e) capacidad calorífica del vapor, (f) segundo coeficiente virial, (g) viscosidad del líquido y (h) viscosidad del vapor

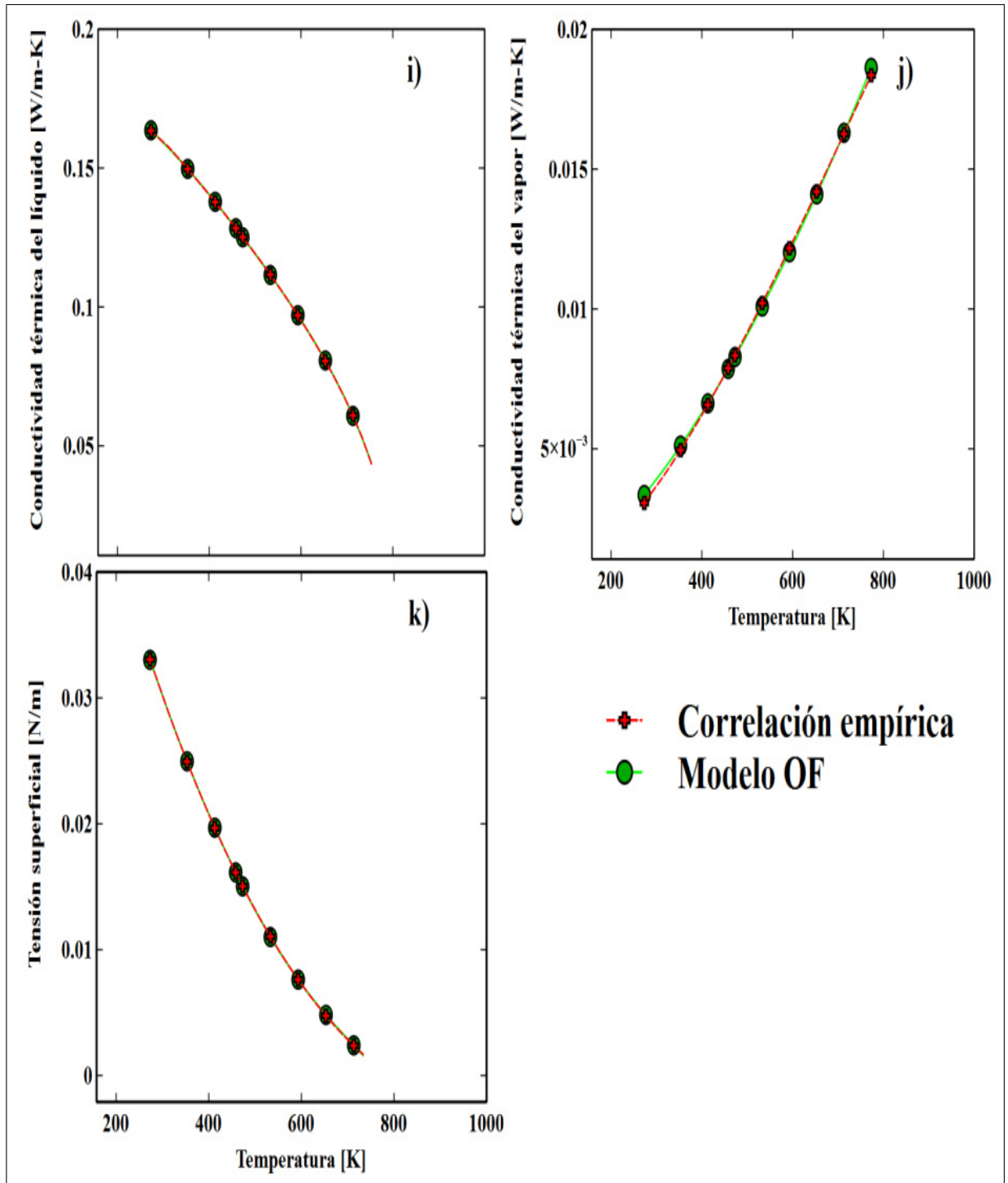


Figura 5.21: Propiedades de transporte y termo-físicas para el ácido oléico (i) conductividad térmica del líquido, (j) conductividad térmica del vapor y (k) tensión superficial

5.3.3 PROPIEDADES DE TRANSPORTE DEL BIODIESEL DERIVADO DEL ACEITE USADO DE COCINA

La información anteriormente expuesta tiene como fin proporcionar información útil y sencilla para la determinación de las propiedades de transporte de diez ácidos grasos que pueden estar presentes en un biodiesel con el objeto que mediante el conocimiento de la composición determinada mediante cromatografía se pueden determinar de manera simple y eficiente las propiedades de transporte de los ácidos grasos o emplear los coeficientes de manera directa para la simulación de la inyección de algún ácido graso, sin embargo el objetivo de este estudio es la simulación de un chorro de biocombustible para esto se utilizaran las ecuaciones propuestas en la sección 5.2.3 para la determinación de las propiedades de transporte de un biodiesel además emulando la metodología usada para la determinación de los coeficientes para el ajuste de los modelos del código CFD OpenFOAM se determinan las propiedades de transporte para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina y los coeficientes para la simulación en el código.

Densidad

En la Figura: 5.22 se muestra la densidad del biodiesel derivado del aceite usado de cocina ($B100$) determinado mediante las correlaciones empíricas y mediante el modelo propuesto por el código CFD OpenFOAM para el cual los coeficientes se reportan en la Tabla: 5.21 estos coeficientes se comparan con los reportados para el diesel ($B0$).

En la Figura: 5.22 se muestra el aumento en la densidad del biodiesel en comparación con la de un diesel, la tendencia de este comportamiento fue reportado por Ramirez et al. [10] y por Phankosol et al. [11].

El aumento en la densidad del biodiesel contribuye a la variación en el proceso de inyección, retraso de la ignición y en el proceso de break-up en general.

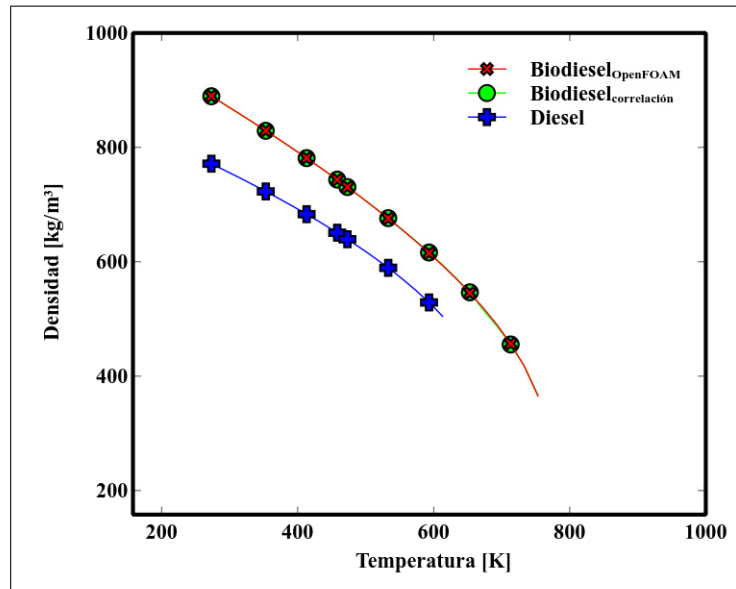


Figura 5.22: Densidad del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	D
B_{100}	35.69372	0.1820349	0.2728745
B_0	60.92023	0.2582	0.26628

Tabla 5.21: Coeficientes para la ecuación de densidad de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Presión de vapor

En la Figura: 5.23 se muestra la presión de vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina ($B100$) determinado mediante las correlaciones empíricas y mediante el modelo propuesto por el código CFD OpenFOAM para el cual los coeficientes se reportan en la Tabla: 5.22 estos coeficientes se comparan con los reportados para el diesel ($B0$). En la Figura: 5.23 se muestra la disminución en la presión de vapor del biodiesel en comparación con la de un diesel, esta disminución se debe a la falta de componentes volátiles presentes en el biodiesel, además esta disminución en la presión de vapor afecta de manera significativa el proceso de evaporación para el cual se requerirá un aumento en la temperatura para igualar la presión vapor de un diesel [1].

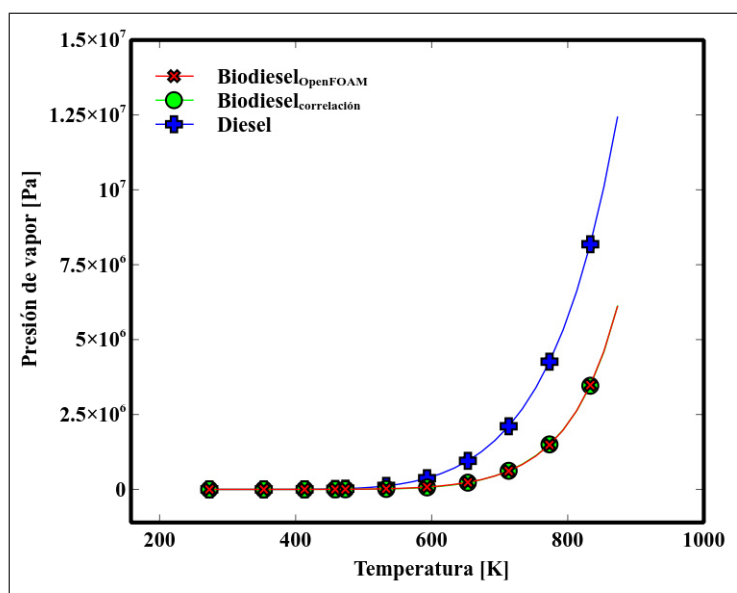


Figura 5.23: Presión de vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C	D	E
$B100$	144.1675	-13310	-17.86923	$1.621x10^{-5}$	1.930388
$B0$	249.21	-16915	-35.195	0.028451	1

Tabla 5.22: Coeficientes para la ecuación de la presión de vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Entalpía de vaporización

La entalpía de vaporización del biodiesel es mayor que la del diesel este comportamiento se muestra en la Figura: 5.24, este aumento en la entalpía de vaporización afecta el proceso de formación de mezcla con el aire puesto que es necesario un aumento en la temperatura para tener una mezcla rápida y eficiente, sin embargo el biodiesel es sensible al aumento de temperatura y en los mismos intervalos de temperatura presenta un cambio más abrupto que el diesel [41]. Este efecto permite administrar de manera más eficiente el gas y las temperaturas dentro de la cámara. En la Tabla: 5.23 se muestran los coeficientes empleados para la entalpía de vaporización de un biodiesel empleados para la simulación en el código CFD OpenFOAM.

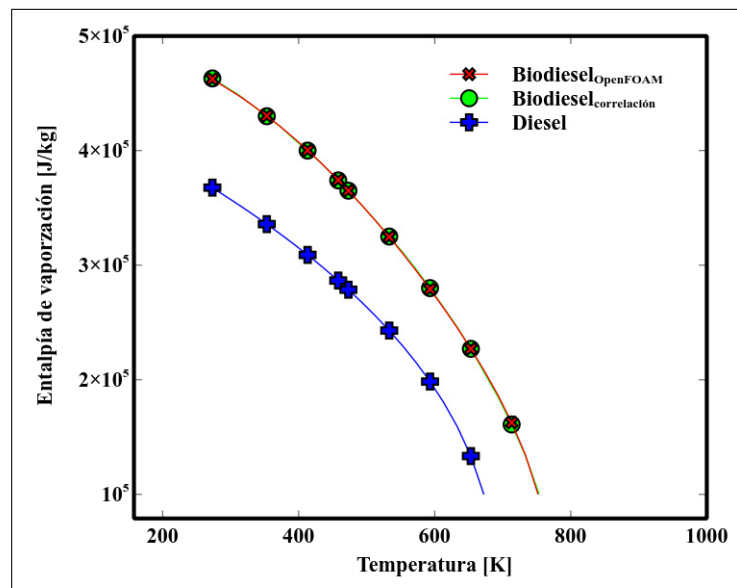


Figura 5.24: Entalpía de vaporización del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C	D	E
<i>B</i> 100	522300	0.2401479	-0.2036213	1.147964	-0.7324267
<i>B</i> 0	455764.34533	0.428	0	0	0

Tabla 5.23: Coeficientes para la ecuación de la entalpía de vaporización de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Capacidad calorífica del líquido

Un aumento en la capacidad calorífica indica que al combustible entrega menor poder calorífico. La capacidad calorífica líquida aumenta conforme aumenta la temperatura, en un biodiesel la cual es menor que la del diesel como se muestra en la Figura: 5.25 lo que implica que el calentamiento de las gotas de biodiesel sea más rápido que las del diesel bajo la misma tasa de entrada de calor.

La diferencia entre la capacidad calorífica entre el biodiesel y el diesel tiende a ser más pronunciada a medida que aumenta la temperatura.

El biodiesel generalmente tiene un poder calorífico menor al diesel y por lo tanto su razón de aumento de temperatura de las gotas de biodiesel tendrá a ser mayor a las gotas de diesel bajo la misma entrada de calor. Por lo tanto, un aumento en esta razón significa un proceso de vaporización mejorado.

En la Tabla: 5.24 se presentan los coeficientes empleados para la simulación del biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

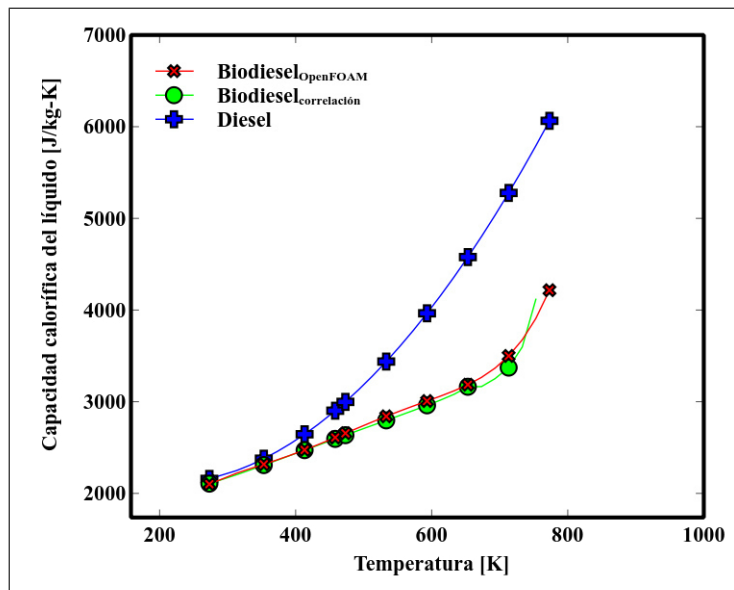


Figura 5.25: Capacidad calorífica del líquido del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C	D	E	F
B100	-7381.771	106.4078	-0.47797	0.00107	-1.168×10^{-6}	4.976×10^{-10}
B0	2565.7284	-4.78114	0.012036	0	0	0

Tabla 5.24: *Coefficientes para la ecuación de la capacidad calorífica del líquido de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

Capacidad calorífica del vapor

La capacidad calorífica del vapor es de especial interés puesto que determina la tasa de transferencia de energía y la distribución de temperaturas en la gota y en la mezcla de aire rica en combustible. La capacidad de vapor del biodiesel es menor que la del diesel como se muestra en la Figura: 5.26, esta variación en la capacidad calorífica genera un proceso de evaporación más eficiente pero con un desempeño del motor deficiente. Para la simulación del chorro se requieren coeficientes que se muestran en la Tabla: 5.25.

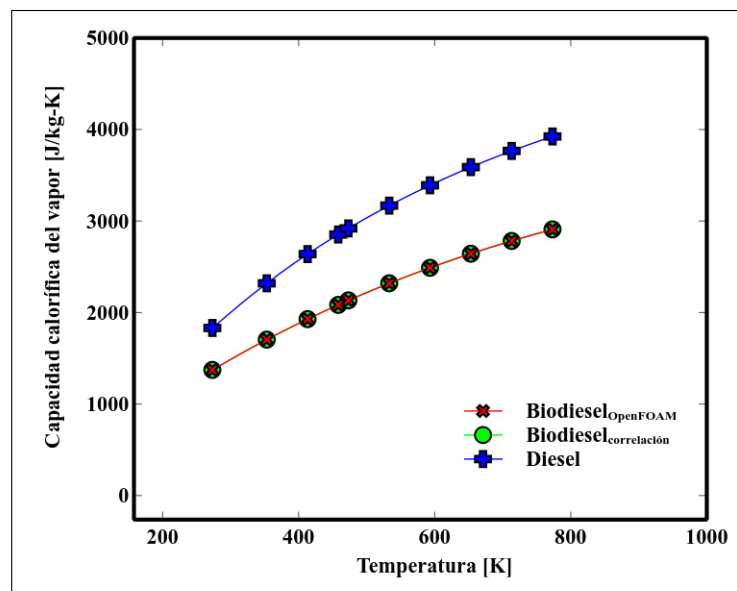


Figura 5.26: Capacidad calorífica del vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C	D	E
B100	912.7285	3234.751	-1319.739	1914.571	-602.6746
B0	1134.118311	3629.178595	-1440.3	2275.293358	-682

Tabla 5.25: *Coefficientes para la ecuación de la capacidad calorífica del vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

Segundo coeficiente virial

El segundo coeficiente virial permite predecir la expansión del gas en la ecuación de estado, este coeficiente en el biodiesel disminuye debido al incremento en la electronegatividad presente en el biodiesel, puesto que al atraer más electrones de los enlaces carbón-carbón por parte de la zona del carboxilo disminuye la capacidad de compartir electrones con el oxígeno presente en la cámara de combustión. En la Figura: 5.27 se puede observar el aumento del coeficiente virial por parte del diesel, esto debido a su nula electronegatividad que permite el uso de los electrones de los enlaces carbón-carbón. En la Tabla: 5.26 se exponen los coeficientes empleados para la simulación del chorro de biodiesel.

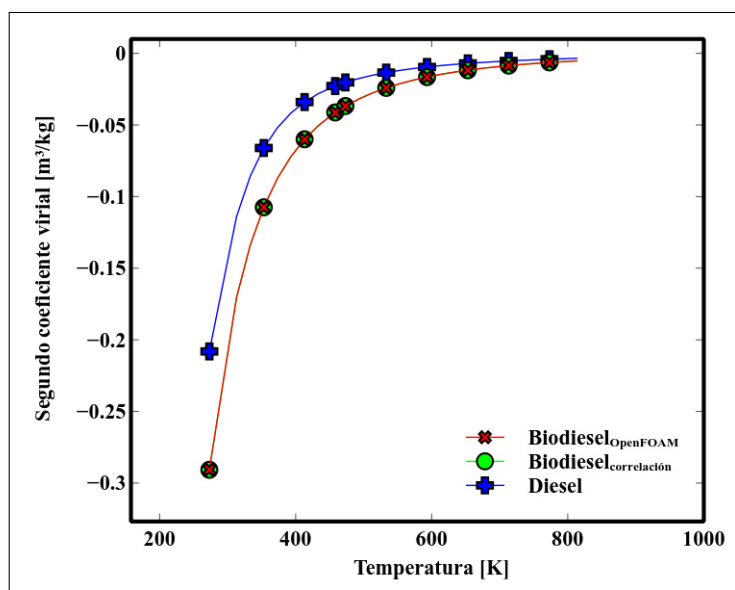


Figura 5.27: Segundo coeficiente virial del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustibles	A	B	C	D	E
B100	-0.0029789	4.84122	-4445000	-9.121×10^{18}	1.753×10^{21}
B0	0.002478	-2.626920	-1427174.48284	-1.682×10^{19}	3.488×10^{21}

Tabla 5.26: Coeficientes para la ecuación del segundo coeficiente virial de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Viscosidad del líquido

La viscosidad líquida es una propiedad de especial interés puesto que es usada para el modelado tanto del flujo de fluido dentro del inyector como para el proceso de break-up y formación de mezcla. Usualmente el combustible se inyecta a temperaturas relativamente bajas aproximadamente entre 27 y 40°C y debido a la alta viscosidad del biodiesel se presentaran diferencias significativas en el proceso de inyección. En la Figura: 5.28 se muestra que existe una amplia diferencia entre la viscosidad del biodiesel y el diesel, esta diferencia conlleva a que el proceso de break-up sea deficiente. Otro efecto derivado del aumento en la viscosidad es la necesidad de aumentar la presión de inyección. En la Tabla: 5.27 se presentan los coeficientes empleados en la simulación para la ecuación de la viscosidad líquida del biodiesel.

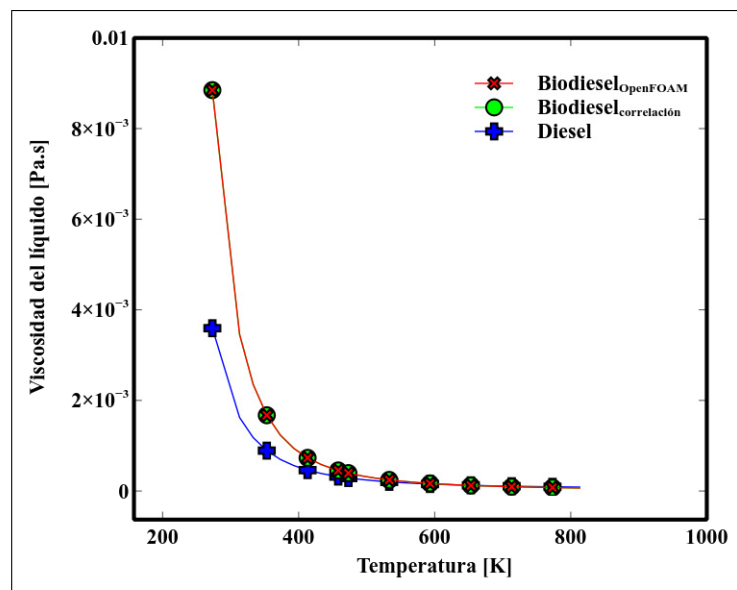


Figura 5.28: Viscosidad del líquido del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C
B_{100}	-12.08264	2009.014	4.041×10^{-5}
B_0	-18.964	2010.9	1.0648

Tabla 5.27: Coeficientes para la viscosidad líquida de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Viscosidad del vapor

La viscosidad de vapor del biodiesel es mayor que la del diesel a bajas temperaturas, sin embargo al aumento de la temperatura aumentan las colisiones moleculares permitiendo que la viscosidad del diesel aumente. El biodiesel se asume como un gas diluido puesto que se conoce que los gases más densos son gases polares. En la Figura: 5.29 se muestra el comportamiento de la viscosidad de vapor en función de la temperatura y en la Tabla: 5.28 se exponen los coeficientes para la simulación del chorro de biodiesel.

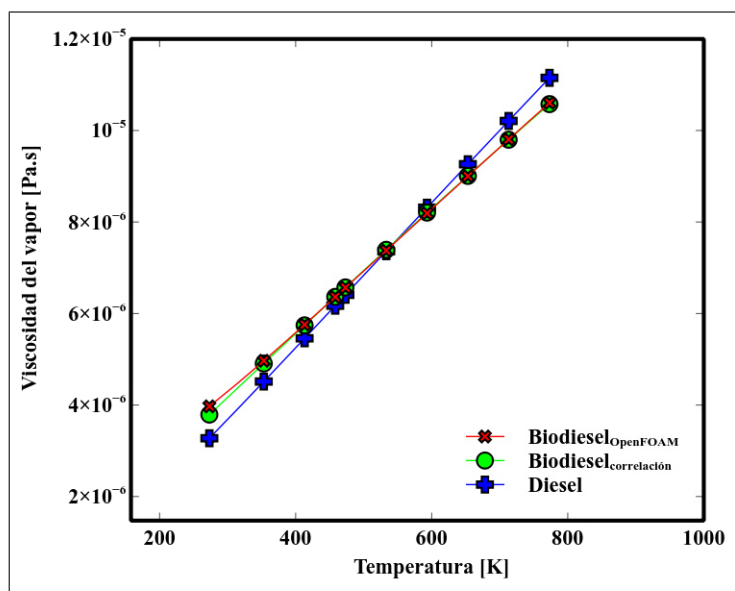


Figura 5.29: Viscosidad del vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Conductividad térmica del líquido

La conductividad térmica del líquido es una propiedad de sumo interés puesto que

Combustibles	A	B	C	D
<i>B100</i>	1.845×10^{-7}	0.675059	500.4932	-58330
<i>B0</i>	4.4565×10^{-8}	0.8684	228.16	-4347.2

Tabla 5.28: *Coefficientes para la viscosidad de vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

es usado en la simulación para determinar la tasa de transferencia de calor entre el interior de la gota y su superficie, asumiendo una distribución transitoria de temperatura. En la Figura: 5.30, se presenta la conductividad del biodiesel derivado del aceite usado de cocina el cual presenta valores superiores al diesel. Este comportamiento entra en contradicción con el reportado por Ismail et al. [1] y por Raitz et al. [41], los cuales reportan conductividad térmica del biodiesel menor que la del diesel, sin embargo una conductividad térmica menor representaría una tasa de transferencia de calor deficiente lo que implicaría que el biodiesel no alcanzará la temperatura de evaporación rápidamente entrando en contradicción con el hecho de que la baja capacidad calorífica permite un proceso de evaporación mejorada por la razón de aumento de temperaturas en las gotas.

Esta propiedad es muy relevante por el hecho de controlar la transferencia de calor por parte del gas circundante a la gota. Sin embargo, no se cuenta con mucha información en la literatura que determinen la conductividad térmica de un biodiesel de manera experimental en un amplio rango de temperaturas. En el trabajo expuesto por Kolodnytska et al. [42] se realiza la determinación de la conductividad térmica del biodiesel de ricino, reportando una conductividad del mismo orden de magnitud al propuesto en este estudio. Un valor similar en la conductividad térmica se encuentra reportado por Janke et al. [43] donde se evalúan mezclas de biodiesel con diesel con valores de conductividad térmica más elevados a su vez el estudio computacional realizado por McCrady et al. [44] exponen valores de conductividad térmica para biodiesel de cuatro diferentes fuentes reportando valores del mismo grado de magnitud a los expuestos en este estudio, cabe mencionar que los valores expuestos

por McCrady et al. son empleado en la hoja de seguridad para diversos combustibles empleada por el Methanol Institute [45]. En la Tabla: 5.29 se presentan los coeficientes para la determinación de la conductividad térmica de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

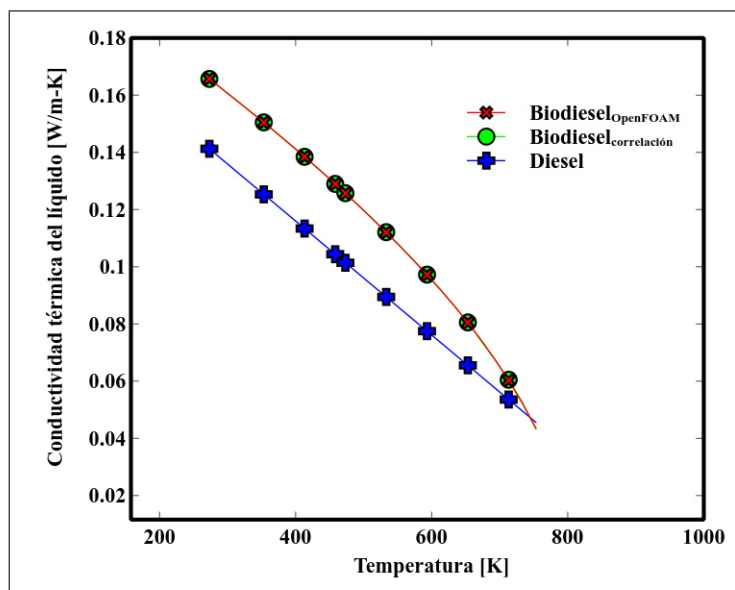


Figura 5.30: Conductividad térmica del líquido del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C	D	E	F
<i>B100</i>	0.27117	-0.000850	3.152×10^{-6}	-7.242×10^{-9}	8.077×10^{-12}	-3.625×10^{-15}
<i>B0</i>	0.1957	-0.000199	0	0	0	0

Tabla 5.29: Coeficientes para la conductividad térmica del líquido de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Conductividad térmica del vapor

El mecanismo de conducción en gases de baja densidad, es primordialmente vía colisiones moleculares, y el valor absoluto de k , para los gases, incrementa con la temperatura, puesto que aumenta la velocidad molecular. Los elementos con electronegatividad más alta atraen con más fuerza electrones de enlace dificultando que

se compartan los electrones libres, esto conlleva a una disminución en las interacciones moleculares y las colisiones, por lo tanto la conductividad térmica del biodiesel disminuye. En la Figura: 5.31 se puede observar el aumento en la conductividad térmica del diesel en comparación en la del biodiesel. En la Tabla: 5.30 se exponen los coeficientes empleados para la determinación de la conductividad térmica de vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

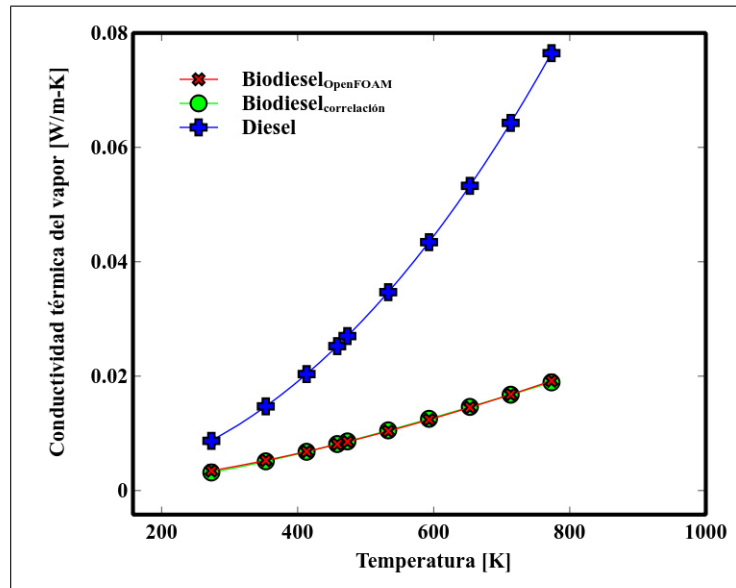


Figura 5.31: Conductividad térmica del vapor del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C
B100	-2813.089	0.6489541	-8.490×10^9
B0	-0.000628	0.994	-5490

Tabla 5.30: Coeficientes para la conductividad térmica del vapor de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Tensión superficial

Como se mencionó anteriormente la tensión superficial es una de las propiedades más relevantes en el proceso de atomización, es la propiedad encargada de contrarrestar la presión dinámica ejercida por la cámara de combustión manteniendo la gota esférica por más tiempo retrasando el proceso de evaporación, mezcla e ignición. Esta propiedad se debe a las atracciones intermoleculares entre cada molécula del biodiesel.

El factor peso propuesto por Allen et al. [27] permite que cada ácido graso que conforma el biodiesel tenga una contribución en la propiedad global. Este aumento en la tensión superficial es una de los factores que intervienen en el incremento de la penetración, retraso de la ignición, entre otros. En la Figura: 5.32 se puede observar el aumento en la tensión superficial del biodiesel, dicho aumento fue reportado por Ejim et al. [39] para diferentes tipos de biodiesel, para diesel puro y para ciertas mezclas a 80°C . En la Tabla: 5.31 se muestran los coeficientes para el computo de la tensión superficial de un bidiesel derivado del aceite usado de cocina.

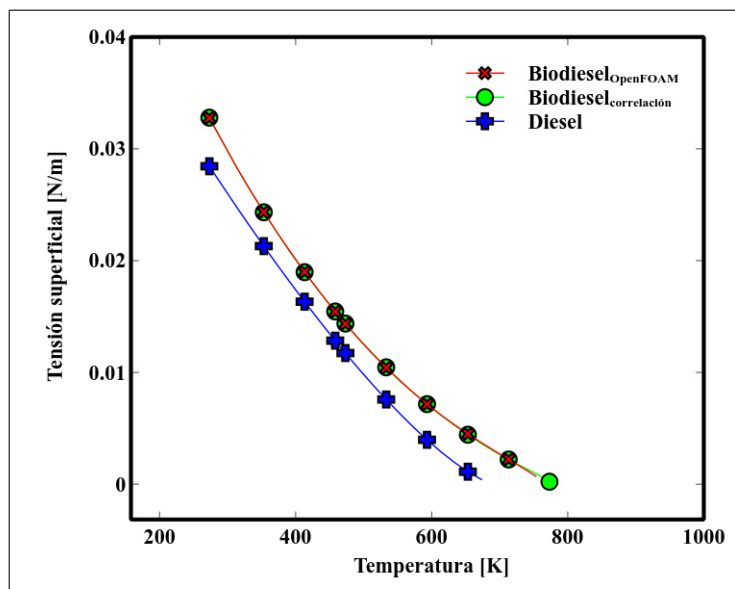


Figura 5.32: Tensión superficial del biodiesel derivado del aceite usado de cocina

Combustible	A	B	C	D	E
B100	0.0928785	3.760398	-6.072409	7.643074	-4.084812
B0	0.056436	1.3658	0	0	0

Tabla 5.31: *Coefficientes para la tensión superficial de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

Difusividad de vapor

La difusividad de vapor es una de las propiedades que rigen la mezcla combustible-aire, sin embargo esta propiedad es función de la presión y de las especies presentes en el sistema, por lo que no existe información experimental para constatar los resultados determinados para un biodiesel en una cámara de combustión, sin embargo el código CFD OpenFOAM emplea una relación directa para la determinación de la difusividad de vapor lo cual facilita el cálculo dada por la ecuación 5.66:

$$\mathcal{D}_{FA} = \frac{3.6059 \times 10^{-3} T^{1.75} \left\{ \frac{1}{P_{M_F}} + \frac{1}{P_{M_A}} \right\}^{0.5}}{P \left[(\sum_1 v_1)^{1/3} + (\sum_2 v_2)^{1/3} \right]^2} \quad (5.66)$$

Dicha relación fue expuesta con anterioridad en la sección 5.2.15, con su cambio a unidades del sistema internacional [29], la cual emplea un factor de contribución, sin embargo no hay un factor de contribución para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina, por lo tanto es necesario determinarlo. Para esto se hace uso de las propiedades de mezcla del biodiesel con el objeto de determinar la difusividad de vapor de un biodiesel dentro de la cámara de combustión con N_2 como gas ambiental a una presión de 35 bares. Con esta información es posible determinar el factor de contribución del biodiesel para el modelo empleado por el código CFD OpenFOAM. El código muestra que para el calculo de la difusividad de cada compuesto se utilice la contribución del *n-heptano*, esto sin duda es empleado con el objetivo de reducir

la complejidad que impone el cálculo de la difusividad de vapor (\mathfrak{D}).

Sin embargo el uso de esta suposición supondrá un error cuando se trate de componentes más pesados o como es el caso de un biodiesel que se compone de una mezcla de ácidos grasos. En la Tabla: 5.32 se presentan los volúmenes de difusión atómica empleados para la simulación del biodiesel derivado del aceite usado de cocina.

Combustible	masa $\frac{gr}{mol}$	Difusión atómica
<i>B100</i>	276.91041	138.5
<i>B0</i>	198.392	147.18
<i>N₂</i>	28.97	17.9

Tabla 5.32: *Volúmenes de difusión atómica de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina*

Una vez determinadas estas contribuciones es posible graficar el comportamiento de la difusividad en función de la temperatura a la presión constante de 35 bares. En la Figura: 5.33 se puede observar el comportamiento de la difusividad el cual aumenta conforme incrementa la temperatura. Cabe mencionar que la difusividad al igual que las otras propiedades del vapor depende de las colisiones intermoleculares razón por la cual tendrán a aumentar conforme la temperatura se incrementa. Como se comentó anteriormente no hay información relacionada con la difusividad para sistemas de combustibles dentro de cámaras a volumen constante, sin embargo estos valores y el comportamiento para sistemas de ácidos grasos fue reportado por Yang et al. [46] para sistemas de ácidos grasos insaturados de dieciocho carbonos en dióxido de carbono super crítico donde se mantiene la tendencia de los valores absolutos. Con respecto a los ácidos grasos saturados Liong et al. [47] probaron sistemas de ácidos grasos saturados confirmando la tendencia y los valores absolutos.

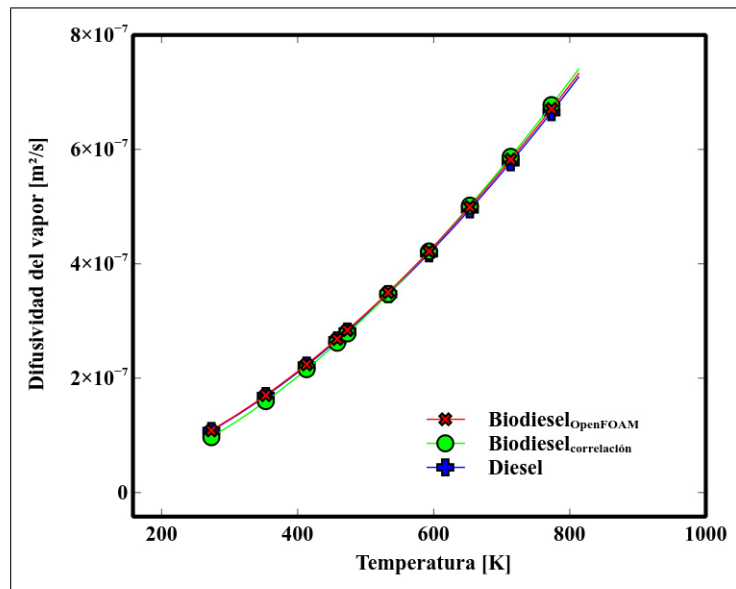


Figura 5.33: Difusividad de vapor del biodiésel derivado del aceite usado de cocina

5.3.4 GENERACIÓN DE LA LIBRERÍA DEL BIODIESEL PARA EL CÓDIGO CFD OPENFOAM

Las propiedades de transporte reales para un biodiésel son de importante interés puesto que son una de las principales causas de las variaciones en el proceso de formación de mezcla, por lo tanto implementarlas en el código CFD OpenFOAM es una tarea que nos permite simplificar la simulación.

Descripción de las propiedades termo-físicas de las librerías

Antes de generar la librería es necesario identificar donde se encuentran los compuestos con los que cuenta el código CFD OpenFOAM, en dado caso si se desea simular algún otro hidrocarburo, estos compuestos se encuentran como componentes puros, uno de los inconvenientes de las librerías de OpenFOAM, puesto que simular el chorro de algún otro compuesto requiere la generación de dicha librería.

Las propiedades de los componentes puros se encuentran en los archivos del sistema ubicados en la carpeta de archivos compartidos de paquetes de aplicación estática

/opt. A continuación se presenta la dirección de la carpeta donde se ubican los compuestos puros.

opt/openfoam230/src/thermophysicalModels

En esta carpeta se encuentran las propiedades de los compuestos puros y las funciones termo-físicas del sistema nacional de información estándar por sus siglas en inglés **NSRDS**, las cuales se encuentran organizadas en seis carpetas que participan en la generación de la propiedad de transporte y termo-físicas.

En esa misma dirección se encuentra la carpeta **properties**, la cual contiene cuatro carpetas entre ellas la más relevante es la carpeta **liquidProperties** esta carpeta contiene una base de datos de diversos hidrocarburos y compuestos inorgánicos líquidos, para la generación de las propiedades de transporte, y las carpetas de compilación **liquidProperties**, **InInclude** y **Make**.

A modo de poder explicar como se realiza el cálculo de las propiedades y la conexión entre los líquidos y las funciones termo-físicas **NSRDS** se presenta la Figura: 5.34, la cual muestra un diagrama de las conexiones entre las funciones y las librerías.

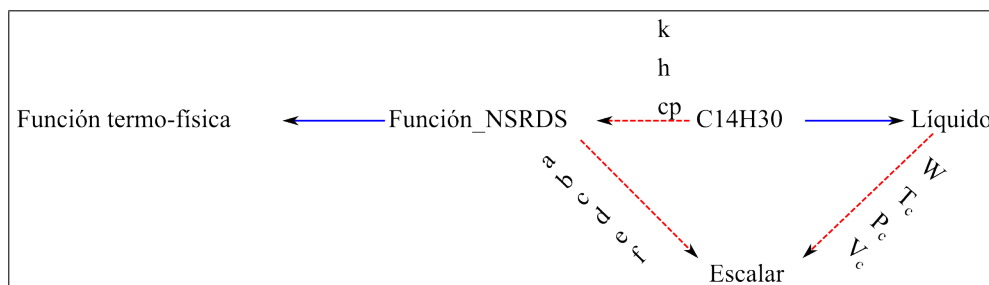


Figura 5.34: Diagrama de colaboración para el tetradecano

La clase **thermophysicalFunctions** es una clase abstracta o clase genérica usada como base para la creación de objetivos específicos que conforman un protocolo, o una serie de operaciones, se usa para la creación de jerarquías, empleados en la programación orientada a objetos. Dicha programación presenta objetos en el dominio computacional del problema en vez de resolverlos como sistemas de ecuaciones.

En estas clases se encuentran sub-clases como las funciones NSRDS: NSRDSfunc0, NSRDSfunc1, NSRDSfunc2, NSRDSfunc4, NSRDSfunc5, NSRDSfunc6, NSRDSfunc7 y APIfunctions. En la sección 2.3.1 se dieron detalles de cada una de estas funciones. En la Figura: 5.34 se muestra como la clase abstracta y las funciones NSRDS están unidas con una línea azul sólida mientras que la clase escalar de las funciones NSRDS están unidas con una línea roja punteada, esta última clase regresa un escalar a través de una función la cual usa una serie de variables escalares como los coeficientes de la a a la f.

Los líquidos como el tetradecano son una clase abstracta, la cual esta conectada a las clases escalares, puesto que el líquido emplea las clases escalares de los coeficientes expuestos en las secciones 5.3.2 y 5.3.3, éstos emplean las funciones escalares y regresan una propiedad escalar.

Implementación de la librería del biodiesel

Los comandos para la terminal de linux se encuentran señalados debidamente y las modificaciones se encuentran subrayadas.

- Crear un carpeta para las propiedades termo-físicas del biodiesel en el directorio del usuario:

```
mkdir -p $WM_PROJECT_USER_DIR/applications
```

- Se accede a ese directorio y se copia el directorio del tetradecano C14H30

```
cd $WM_PROJECT_USER_DIR/applications/myliquidProperties cp -r $FOAM_SRC/src/thermophysicalModels/properties/liquidProperties/C14H30
```

Estas instrucciones deben de crear una carpeta dentro de la carpeta raíz del código CFD OpenFOAM con el nombre **applications** en la cual se encuentra una con el nombre **myliquidProperties**, la cual contiene la librería de **liquidProperties** y los coeficientes para las funciones escalares NSRDS del tetradecano junto

con las dependencias del código. En la Figura: 5.35 se muestran las carpetas creadas donde se encuentra la información para el código.

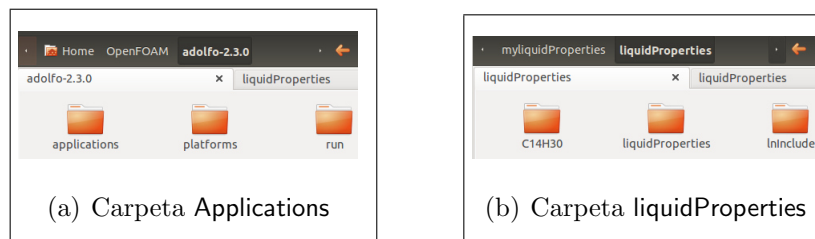


Figura 5.35: Ubicación de las propiedades

- Sin embargo la carpeta del tetradecano, anteriormente copiado, es un hidrocarburo puro no un biodiesel de una amplia composición, por lo tanto es necesario renombrarlo, para este caso se nombrara como el compuesto mayoritario en el biodiesel, el ácido oléico ($C_{18}H_{34}O_2$), sin embargo éste es solo el nombre de las librerías, puesto que los coeficientes que se emplearan serán los expuestos en la Tabla: 5.21 a la Tabla: 5.32, por lo tanto el nombre servirá únicamente para que el código pueda acceder a la librería.

En la carpeta generada para el tetradecano se emplea los siguientes comandos de terminal para cambiar el nombre a todos los archivos que contengan la coincidencia con la palabra $C_{14}H_{30}$

```
mv C14H30 C18H34O2
```

```
cd C18H34O2
```

```
rename C14H30 C18H34O2
```

```
sed -i s/"C14H30"/"C18H34O2"/gC18H34O2.C
```

```
sed -i s/"C14H30"/"C18H34O2"/gC18H34O2.H
```

```
sed -i s/"C14H30"/"C18H34O2"/gC18H34O2I.H
```

```
rmC18H34O2.dep
```

Estos comandos permiten que las coincidencias con $C_{14}H_{30}$ sean reemplazadas

por C18H34O2, tanto en la carpeta como en los códigos. Estos archivos se muestran en la Figura: 5.36.

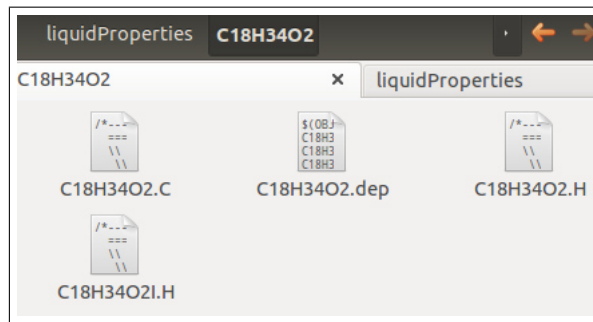


Figura 5.36: Códigos

- Se modifican los coeficientes que se encuentran en ese archivo de librería con los propuestos para los ácidos grasos, en caso de simular un sustituto, o para el biodiesel derivado del aceite usado de cocina o cualquier otro biodiesel de composición conocida y que sus ácidos grasos estén dentro de los propuestos en la Tabla: 4.3. En la Figura: 5.37 se muestra la variación del archivo abstracto para el biodiesel y para el tetradecano.

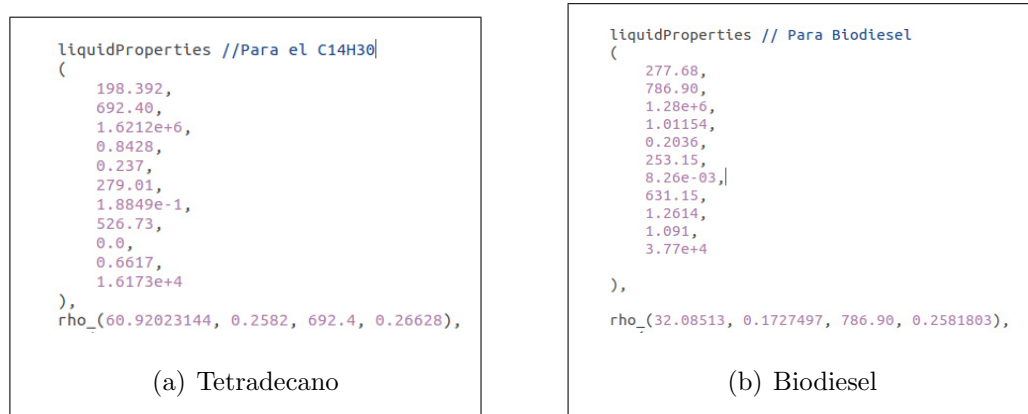


Figura 5.37: Propiedades críticas y coeficientes de densidad para: (a) tetradecano y (b) biodiesel

- Sin embargo es necesario crear dependencia de esta librería para ello se crean

los directorios `Make/file` y `Make/options` con el siguiente comando:

```
cd $WM_PROJECT_USER_DIR/applications
myliquidProperties/liquidProperties
mkdir Make
touch Make/files
```

El contenido del archivo `Make/files` debe de contener lo siguiente:

```
liquidProperties/liquidProperties.C
C18H34O2/C18H34O2.C
LIB = $(FOAM_USER_LIBBIN)/libmyliquidProperties
```

Se crea y modifica el directorio `Make/options` de la siguiente manera:

```
touch Make/files
```

El contenido de este fichero debe contener lo siguiente:

```
EXE_INC = -I$(LIB_SRC)/thermophysicalModels/
thermophysicalFunctions/lnInclude
LIB_LIBS = -lthermophysicalFunctions
```

Con este último comando de terminal es posible generar dependencia del solucionador a la nueva librería.

- Finalmente se compila la nueva librería de la siguiente manera:

```
wmake libso
```

Con esto una nueva librería fue creada, y aparecerá en el directorio `RUN`

A continuación se presentan las conclusiones para las propiedades de transporte y termo-físicas.

5.4 CONCLUSIONES

Este capítulo se enfocó en el desarrollo e implementación de las propiedades de transporte de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina, el cual se usará para la simulación de un chorro libre en condiciones no evaporativas que se abordara en el siguiente capítulo.

Para llevar a cabo la correcta simulación de un chorro de biodiesel es de suma importancia implementar las propiedades de transporte correspondientes para el biodiesel, dichas propiedades juegan un papel muy importante en el proceso de inyección de un biocombustible, por esta razón es indispensable contar con modelos robustos, recientes y capaces de determinar dichas propiedades. Estos modelos a pesar de ser ampliamente citados es necesario comprobarlos con información experimental a modo que se demuestre que son lo más robustos.

Existen diferencias muy amplias entre un biodiesel y un diesel, principalmente debido a que el biodiesel es una mezcla de ácidos grasos y un diesel es una mezcla de hidrocarburos, los cuales a su vez presentan diferencias significativas en sus propiedades principalmente por el hecho de su variada química molecular.

Entre los ácidos grasos que conforman un biodiesel, la diferencia radica en el grado de insaturación de éstos, puesto que la presencia de dobles enlaces desempeñan el papel de depósitos energéticos que tienden a potenciar las propiedades de transporte y termo-físicas que involucran interacciones intermoleculares, sin embargo un biodiesel que cuenta con más ácidos grasos insaturados que saturados los cuales conllevan mayor disposición para un proceso más eficiente de combustión, reducción de hidrocarburos no quemados, pero un aumento en la generación de NO_x , compuestos aromáticos, entre otros.

Los efectos principales ocasionados por las propiedades de transporte entre un biodiesel y un diesel interactúan en cierto grado con el proceso inicial de inyección debido al aumento en la viscosidad y la densidad del fluido. Estas variaciones en estos dos procesos anteriores a la formación del chorro conllevan a variaciones en

le retraso de la ignición, la velocidad de vaporización, la formación de la mezcla, combustión y generación de emisiones.

La metodología empleada para la implementación de las propiedades en el código permite realizar simulaciones del chorro de una manera sencilla y eficiente en un amplia rango de temperaturas para un biodiesel de composición variada. Estos coeficientes permiten la simulación eficiente de cualquier ácido graso, mediante la creación de la librería adecuada para la simulación.

Como se comentó anteriormente la variación en la estructura molecular de cada ácido graso influye de mayor a menor grado en la propiedad global del biodiesel, por lo tanto el uso completo de la composición permite estimar con precisión las propiedades de transporte, sin embargo una estrategia empleada para simplificar la tarea de computo de las propiedades, es mediante el uso de *substitutos*, término que hace referencia al uso del compuesto más abundante en el biodiesel y asumir que las propiedades globales del biodiesel son iguales a las de ese compuesto mayoritario. Esta suposición facilita el cálculo de las propiedades, sin embargo es una suposición aventurada que puede llevar a un grado de inexactitud en los cálculos de las propiedades y de los parámetros macroscópicos del chorro, puesto que cada compuesto juega un papel importante en la formación de mezcla y en las propiedades del biodiesel.

5.4 BIBLIOGRAFÍA

- [1] H. M. Ismail, H. K. Ng, X. Cheng, S. Gan, T. Lucchini, and G. D’Errico, “Development of thermophysical and transport properties for the cfd simulations of in-cylinder biodiesel spray combustion,” *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 8, pp. 4857–4870, 2012.
- [2] M. L. Botero and A. Molina, “Simulation of the evaporation of drops from palm and castor oil biodiesels based on physical properties,” *Revista Facultad de Ingeniería*, no. 56, pp. 40–48, 2013.
- [3] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, O. John Paul, and R. C. Reid, *The properties of gases and liquids*, vol. 4. McGraw-Hill New York, 1987.
- [4] P. Benjumea, J. Agudelo, and A. Agudelo, “Basic properties of palm oil biodiesel–diesel blends,” *Fuel*, vol. 87, no. 10, pp. 2069–2075, 2008.
- [5] J. O. Maloney, *Perry’s Chemical Engineers Handbook*, vol. 1. 8 ed., 2008.
- [6] W. Yuan, A. Hansen, Q. Zhang, *et al.*, “Predicting the physical properties of biodiesel for combustion modeling,” *Transactions of the ASAE*, vol. 46, no. 6, pp. 1487–1493, 2003.
- [7] E. W. Lemmon, M. L. Huber, and M. O. McLinden, “Nist standard reference database 23,” *Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties (REFPROP)*, 2003.
- [8] M. Sales-Cruz, G. Aca-Aca, O. Sánchez-Daza, and T. López-Arenas, “Predicting critical properties, density and viscosity of fatty acids, triacylglycerols and methyl esters by group contribution methods,” in *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering–(ESCAPE20)*, 2010.
- [9] M. E. Tat and J. H. Van Gerpen, “The specific gravity of biodiesel and its blends

- with diesel fuel,” *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, vol. 77, no. 2, pp. 115–119, 2000.
- [10] L. F. Ramírez Verduzco, “Density and viscosity of biodiesel as a function of temperature: empirical models,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 19, pp. 652–665, 2013.
- [11] S. Phankosol, K. Sudaprasert, S. Lilitchan, K. Aryusuk, and K. Krisnangkura, “Estimation of density of biodiesel,” *Energy & Fuels*, vol. 28, no. 7, pp. 4633–4641, 2014.
- [12] A. Vetere, “The riedel equation,” *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 30, no. 11, pp. 2487–2492, 1991.
- [13] J. S. Chickos, H. Zhao, and G. Nichols, “The vaporization enthalpies and vapor pressures of fatty acid methyl esters c18, c21 to c23, and c25 to c29 by correlation-gas chromatography,” *Thermochimica acta*, vol. 424, no. 1-2, pp. 111–121, 2004.
- [14] R. Ceriani and A. J. Meirelles, “Predicting vapor–liquid equilibria of fatty systems,” *Fluid Phase Equilibria*, vol. 215, no. 2, pp. 227–236, 2004.
- [15] W. Yuan, A. Hansen, and Q. Zhang, “Vapor pressure and normal boiling point predictions for pure methyl esters and biodiesel fuels,” *Fuel*, vol. 84, no. 7, pp. 943–950, 2005.
- [16] C.-H. Tu and C.-P. Liu, “Group-contribution estimation of the enthalpy of vaporization of organic compounds,” *Fluid Phase Equilibria*, vol. 121, no. 1, pp. 45–65, 1996.
- [17] P. E. Liley, “Correlations for the enthalpy of vaporization of pure substances,” *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 42, no. 24, pp. 6250–6251, 2003.

- [18] L. W. Fish and J. Lielmezs, “General method for predicting the latent heat of vaporization,” *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, vol. 14, no. 3, pp. 248–256, 1975.
- [19] N. A. Morad, A. M. Kamal, F. Panau, and T. Yew, “Liquid specific heat capacity estimation for fatty acids, triacylglycerols, and vegetable oils based on their fatty acid composition,” *JOURNAL-AMERICAN OIL CHEMISTS SOCIETY*, vol. 77, no. 9, pp. 1001–1006, 2000.
- [20] D. Qian, Y. Xinjian, X. Zhihong, *et al.*, “Study and improvement of rihani-doraiswamy estimation method for cp with computer program,” *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 4, pp. 73–82, 1989.
- [21] N. Obi-Egbedi, I. Obot, and M. I. El-Khaiary, “Quantum chemical investigation and statistical analysis of the relationship between corrosion inhibition efficiency and molecular structure of xanthene and its derivatives on mild steel in sulphuric acid,” *Journal of Molecular Structure*, vol. 1002, no. 1, pp. 86–96, 2011.
- [22] E. Ituen, I. Akpan, and O. Oluwaseyi, “Molecular structure, chemical reactivity, stability and vibrational spectroscopic investigation of stearic and palmitic acid using density functional theory,” *Journal of Applied Chemistry*, vol. 5, no. 1, pp. 08–12, 2014.
- [23] C. A. Allen, K. Watts, R. Ackman, and M. Pegg, “Predicting the viscosity of biodiesel fuels from their fatty acid ester composition,” *Fuel*, vol. 78, no. 11, pp. 1319–1326, 1999.
- [24] R. Ceriani, C. B. Goncalves, and J. A. Coutinho, “Prediction of viscosities of fatty compounds and biodiesel by group contribution,” *Energy & Fuels*, vol. 25, no. 8, pp. 3712–3717, 2011.
- [25] J. Millat, J. H. Dymond, and C. N. De Castro, *Transport properties of fluids: their correlation, prediction and estimation*. Cambridge University Press Cambridge, 1996.

- [26] T. H. Chung, L. L. Lee, and K. E. Starling, “Applications of kinetic gas theories and multiparameter correlation for prediction of dilute gas viscosity and thermal conductivity,” *Industrial & engineering chemistry fundamentals*, vol. 23, no. 1, pp. 8–13, 1984.
- [27] C. A. Allen, K. C. Watts, and R. G. Ackman, “Predicting the surface tension of biodiesel fuels from their fatty acid composition,” *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, vol. 76, no. 3, pp. 317–323, 1999.
- [28] R. Bird, W. Steward, and E. Lightfoot, *Fenómenos de Transporte, Segunda edición Reverté*, vol. 1. SA, Barcelona, España: REVERTÉ, 2006.
- [29] “Technical data book petroleum refining,” tech. rep., America Petroleum Institute, 1997.
- [30] M. M. Batista, R. Guirardello, and M. A. Krahenbuhl, “Determination of the solubility parameters of biodiesel from vegetable oils,” *Energy & Fuels*, vol. 27, no. 12, pp. 7497–7509, 2013.
- [31] K. Liew, C. Seng, and L. Oh, “Viscosities and densities of the methyl esters of some n-alkanoic acids,” *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, vol. 69, no. 2, pp. 155–158, 1992.
- [32] M. J. Pratas, S. Freitas, M. B. Oliveira, S. C. Monteiro, A. S. Lima, and J. A. Coutinho, “Densities and viscosities of fatty acid methyl and ethyl esters,” *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 55, no. 9, pp. 3983–3990, 2010.
- [33] A. Rose and W. R. Supina, “Vapor pressure and vapor-liquid equilibrium data for methyl esters of the common saturated normal fatty acids,” *Journal of Chemical and Engineering Data*, vol. 6, no. 2, pp. 173–179, 1961.
- [34] L. Shen and K. S. Alexander, “A thermal analysis study of long chain fatty acids,” *Thermochimica acta*, vol. 340, pp. 271–278, 1999.

- [35] F. O. Cedeño, M. M. Prieto, and J. Xiberta, “Measurements and estimate of heat capacity for some pure fatty acids and their binary and ternary mixtures,” *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 45, no. 1, pp. 64–69, 2000.
- [36] L. G. Wade, *Química Orgánica*, vol. 1. Ribera del Loira 28, Madrid: Pearson Education, 5 ed., 2004.
- [37] R. A. Perkins and M. L. Huber, “Measurement and correlation of the thermal conductivities of biodiesel constituent fluids: methyl oleate and methyl linoleate,” *Energy & Fuels*, vol. 25, no. 5, pp. 2383–2388, 2011.
- [38] L. F. Ramírez-Verduzco, “Models for predicting the surface tension of biodiesel and methyl esters,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 41, pp. 202–216, 2015.
- [39] C. Ejim, B. Fleck, and A. Amirfazli, “Analytical study for atomization of biodiesels and their blends in a typical injector: surface tension and viscosity effects,” *Fuel*, vol. 86, no. 10, pp. 1534–1544, 2007.
- [40] A. A. Strechan, G. J. Kabo, and Y. U. Paulechka, “The correlations of the enthalpy of vaporization and the surface tension of molecular liquids,” *Fluid phase equilibria*, vol. 250, no. 1, pp. 125–130, 2006.
- [41] Y. Ra, R. D. Reitz, J. McFarlane, and C. S. Daw, “Effects of fuel physical properties on diesel engine combustion using diesel and bio-diesel fuels,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2008.
- [42] R. Kolodnytska, M. Al Qubeissi, and S. S. Sazhin, “Biodiesel fuel droplets: transport and thermodynamic properties,” in *25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Crete, Greece*, 2013.
- [43] I. Janke, M. Marcelino Neto, and J. Barbosa, “Viscosity and thermal conductivity of soybean oil-diesel blends between 293 and 353 k,” in *22nd International Congress of Mechanical Engineering, Riberao, SP, Brazil*, 2013.

- [44] J. P. McCrady, V. L. Stringer, A. C. Hansen, and F. L. Chia-fon, “Computational analysis of biodiesel combustion in a low-temperature combustion engine using well-defined fuel properties,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2007.
- [45] M. Institute, “Physical and chemical properties to manage flammable liquid hazards.” [http://www.methanol.org/Health-And-Safety/Technical-Bulletins/Technical-Bulletins/UsingPhysicalandChemicalPropertiestoManageFlam-\(1\).aspx](http://www.methanol.org/Health-And-Safety/Technical-Bulletins/Technical-Bulletins/UsingPhysicalandChemicalPropertiestoManageFlam-(1).aspx), 2008. [Online; accessed 11-Mars-2015].
- [46] Y. Yang, H. Yan, B. Su, H. Xing, Z. Bao, Z. Zhang, X. Dong, and Q. Ren, “Diffusion coefficients of c18 unsaturated fatty acid methyl esters in supercritical carbon dioxide containing 10% mole fraction ethanol as modifier,” *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 83, pp. 146–152, 2013.
- [47] K. K. Liong, P. A. Wells, and N. R. Foster, “Diffusion of fatty acid esters in supercritical carbon dioxide,” *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 31, no. 1, pp. 390–399, 1992.

CAPÍTULO 6

SIMULACIÓN DEL CHORRO DE BIOCOMBUSTIBLE

6.1. Introducción	234
6.2. Condiciones de trabajo de las mezclas de combustible	
objeto de estudio	237
6.2.1. Geometría de la tobera y condiciones de la cámara de combustión	238
6.2.2. Determinación de los ángulos de chorro	246
6.2.3. Determinación del coeficiente de descarga	252
6.2.4. Determinación de las presiones de inyección	255
6.3. Método numérico	262
6.3.1. Método de volúmenes finitos (FVM)	263
6.3.2. Código CFD OpenFOAM	271
6.4. Simulación de un chorro diesel	291
6.4.1. Simulación del chorro diesel puro <i>B0</i>	291
6.4.2. Simulación del chorro empleando biodiesel puro derivado de aceite usado de cocina, <i>B100</i>	299
6.4.3. Simulación del chorro empleando una mezcla <i>B20</i>	304

6.4.4. Simulación del chorro empleando una mezcla <i>B50</i>	308
6.5. Análisis de la penetración para las diversas mezclas . . .	312
6.6. Conclusiones	317
Bibliografía	319
Apéndice C6: Componentes de la maqueta de visualización	
a volumen constante	324

6.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se describieron los métodos empleados para el desarrollo de las propiedades de transporte, las cuales se emplearan para la correcta simulación de un chorro de biodiesel derivado del aceite usado de cocina (*B100*) y para mezclas con diesel (*B0*).

El objetivo de este trabajo es la simulación de un chorro libre de biodiesel en condiciones no evaporativas, sin embargo como se ha comentado anteriormente en la sección 2.2 son muchos los efectos negativos relacionados con el uso del biodiesel puro (*B100*), por lo tanto una estrategia para mitigar los efectos del biodiesel en el desempeño del motor es la inyección del biodiesel como una mezcla binaria con diesel o con algún otro aditivo tal es el caso de etanol, que permite mitigar el aumento en la entalpía de vaporización y la disminución en la presión de vapor [1, 2].

Las mezclas binarias de biodiesel-diesel han sido ampliamente estudiadas, sin embargo no todas pueden ser empleadas en sistemas de automoción debido a que deben de cumplir con la especificación D6751-07B [3], un estándar impuesto por la Sociedad Americana para Pruebas y Materiales, por sus siglas en ingles (*ASTM*) la cual asegura la calidad del biodiesel empleado en mezclas. Una mezcla que cumpla con estos estándares es registrado legalmente como una mezcla o aditivo.

El biodiesel puede ser mezclado y usado en una amplia variedad de composiciones, sin embargo la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos por sus siglas

en inglés EPA (Environmental Protection Agency), recomienda el uso del 20% de biodiesel y un 80% de diesel en una mezcla para motores de combustión interna. Numerosos estudios han demostrado el aumento en la generación de óxidos de nitrógeno (NO_x) mediante el uso de biodiesel, una emisión dependiente de la carga del motor, la cual además varía dependiendo el ciclo o la aplicación. Este incremento de emisiones es esperado con un aumento en el porcentaje de biodiesel en la mezcla, sin embargo un incremento en la mezcla disminuye la formación de óxidos de carbono (CO) e hidrocarburos sin quemar (HC) [4].

En la Figura: 6.1 se puede observar el aumento de la variación de emisiones en función del porcentaje de biodiesel en la mezcla de biocombustible. Esta es la principal

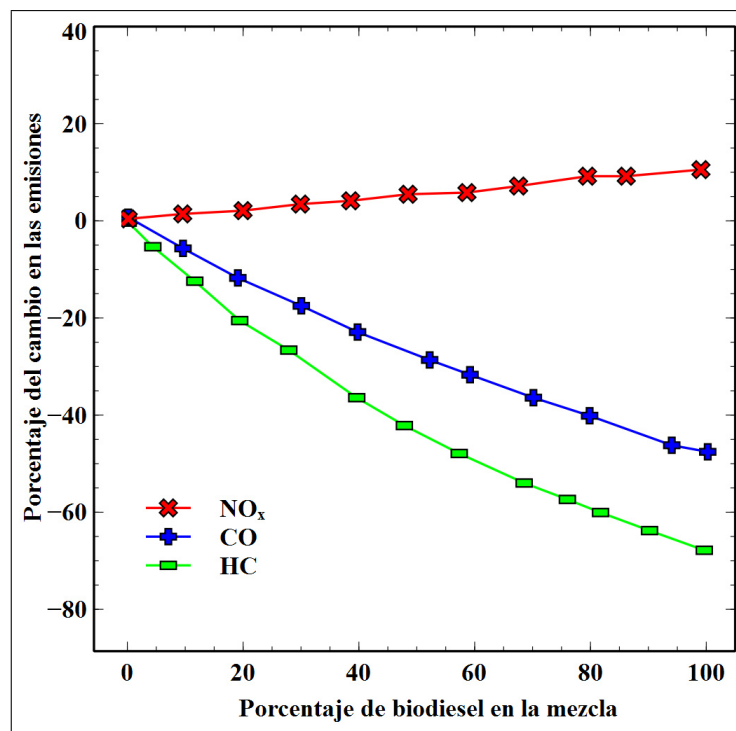


Figura 6.1: Impactos promedio en emisiones al emplear biodiesel en un motor

razón por la que se selecciona la mezcla $B20$ como primera mezcla de estudio, además de las mezclas puras: biodiesel derivado del aceite usado de cocina ($B100$) y diesel puro ($B0$).

En México el panorama no es des-favorecedor, como se comentó en la sección 1.2 la

forma correcta de introducción del biodiesel es mediante un reciclaje que hace que la materia prima sea económica y viable generando así un negocio que sea rentable. Para poder profundizar en el conocimiento de la formación del chorro es necesario emplear las mezclas permitidas y que pueden ser usadas de manera habitual, sin embargo una de las contribuciones de este trabajo, además de la determinación de las propiedades, es la simulación y el análisis de la mezcla permitida de biocombustible además de poder analizar una mezcla adicional con 50 % biodiesel y 50 % diesel con el objetivo de profundizar en el comportamiento del chorro y poder ampliar el uso del biodiesel en las mezclas binarias. En la Tabla: 6.1 se presentan las mezclas de biocombustibles seleccionadas para la simulación de un chorro diesel.

Combustible	 [%] Biodiesel	 [%] diesel
B0	0	100
B20	20	80
B50	50	50
B100	100	0

Tabla 6.1: *Mezclas de biocombustibles empleadas para la simulación de un chorro diesel.*

El escenario en México contempla mezclas con una cantidad inferior al 20 % de biodiesel con un 2.5 %, 5 % y un 10 %, estas mezclas no cumplirán el objetivo de la rentabilidad por esta razón se propone una mezcla donde se aumente la porción de biodiesel sin que las propiedades se vean influenciadas [5].

Este capítulo constará de tres secciones donde se abordaran los temas relacionados con el desarrollo de los parámetros empleados en la simulación para cada mezcla, el método numérico empleado para la simulación y el análisis de la penetración de las diversas mezclas de biocombustibles.

6.2 CONDICIONES DE TRABAJO DE LAS MEZCLAS DE COMBUSTIBLE OBJETO DE ESTUDIO

Como se comento en el capítulo anterior los combustibles se inyectan a temperaturas relativamente frías entre 27 y $40^{\circ}C$, a estas temperaturas el valor absoluto de la viscosidad de un biodiesel es mayor en comparación con un diesel (ver Figura: 5.28), esta variación en la viscosidad genera diferencias en la inyección del fluido y de su transporte dentro del inyector, la velocidad de inyección y el desarrollo del chorro, por lo tanto para compensar este aumento en la velocidad es necesario aumentar la presión de inyección al momento de inyectar biodiesel [6, 7, 8, 9], esta afirmación es cuestionable, puesto que existen restricciones que deben de tomarse para determinar cuanto hay que aumentar la presión de inyección entre cada biocombustible.

Dichas restricciones las imponen las propiedades de transporte de cada biocombustible puesto que de ellas depende la formación del chorro, el ángulo del chorro y la fluidez del combustible dentro del inyector.

La presión de inyección es un parámetro que emplea el código CFD OpenFOAM para simular la velocidad inicial de inyección del chorro, la cual será usada posteriormente para el modelo KH-RT descrito en la sección 2.5.3 usada en la ecuación 2.98, esta presión debe de variar para cada mezcla de biocombustible; además de la presión de inyección el código requiere de la geometría de la tobera, la cual provee al código del diámetro de salida del orificio de la tobera el cual se aprovecha para definir el diámetro inicial de las gotas del combustible y de las condiciones termodinámicas que tiene el gas en el interior de la cámara de combustión.

6.2.1 GEOMETRÍA DE LA TOBERA Y CONDICIONES DE LA CÁMARA DE COMBUSTIÓN

A continuación se describirán las condiciones y los elementos vinculados con el proceso de inyección. Estas condiciones y elementos fueron determinados mediante el trabajo experimental de Gimeno et al. [10].

Tobera del inyector

El inyector es uno de los componentes de mayor relevancia en el desarrollo de un chorro diesel, el cual se encuentra compuesto por una válvula de pistón que permite el flujo de combustible proveniente del common rail, mediante un pulso eléctrico. En la Figura: 6.2 se muestran las partes más relevantes de un inyector diesel.

El código CFD OpenFOAM requiere para la estimación del diámetro inicial de las gotas el diámetro del orificio de la tobera (`outerDiameter`), sin embargo la información proporcionada por los fabricantes es escasa y en ocasiones incorrecta puesto que los valores geométricos proporcionados no necesariamente son correctos, debido a que el diámetro efectivo de la tobera no siempre es posible que sea controlado directamente durante el proceso de fabricación.

Una técnica empleada para obtener la información más precisa de la geometría de la tobera es la técnica experimental empleada por Macian et al. [11] conocida como *técnica de la silicona*.

Dicha técnica consiste en la generación de un molde de silicona, mediante la introducción de un polímero de alta densidad, generalmente se usa vinil-polysiloxona, este polímero permite un estiramiento superior al 300% de su tamaño original sin sufrir ningún daño o deformación.

Este polímero se inyecta a través de un tubo de plástico introducido por la concavidad de la aguja hasta que haga contacto con la punta de la tobera donde se encuentra la información relevante relacionada con el diámetro de salida. Además del diámetro de salida se pueden determinar otros parámetros tales como el radio de

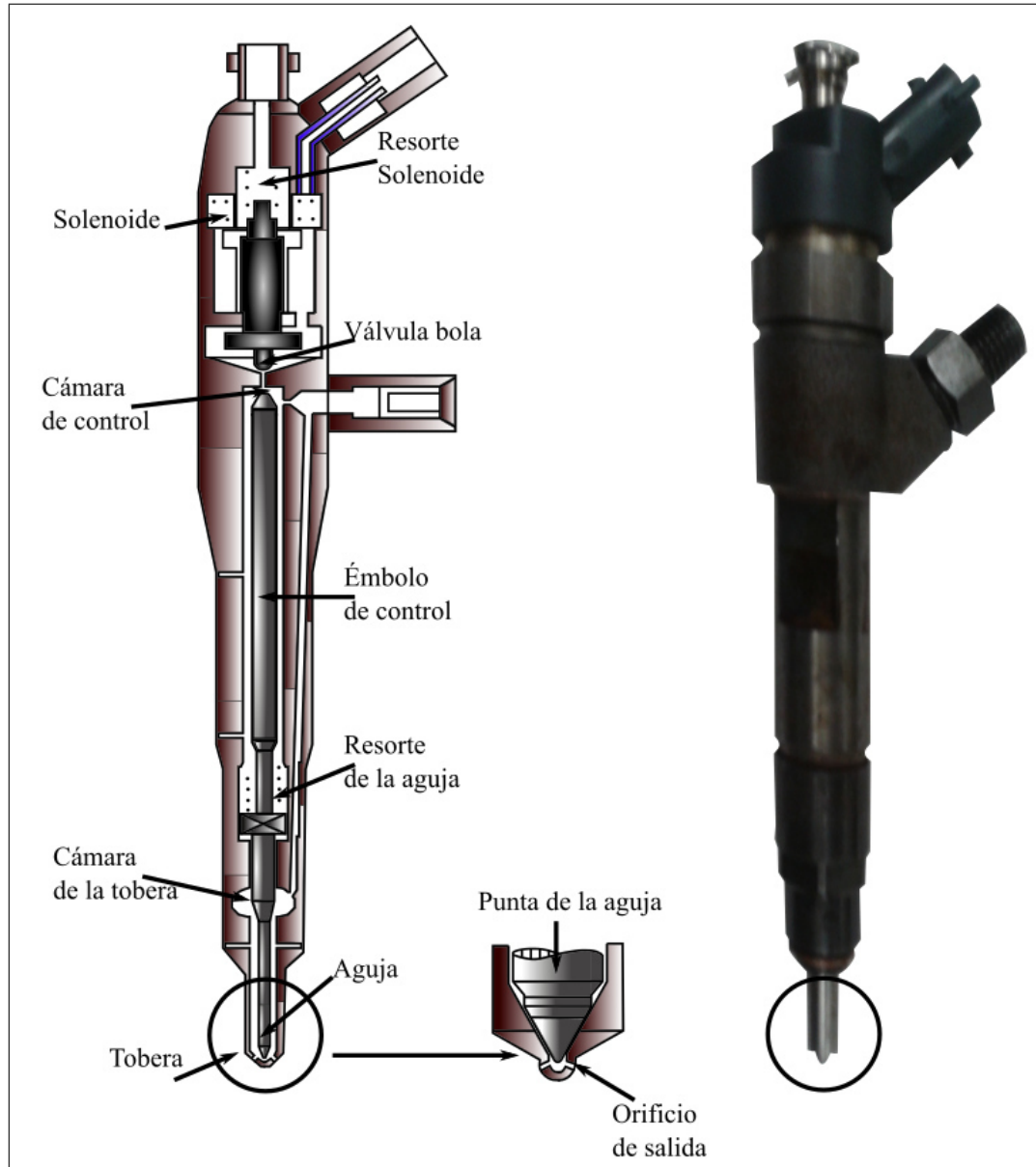


Figura 6.2: Sección transversal de un inyector

acuerdo, el k-factor, reducción de área, entre otros, finalmente una vez solidificada la silicona se procede a extraerla.

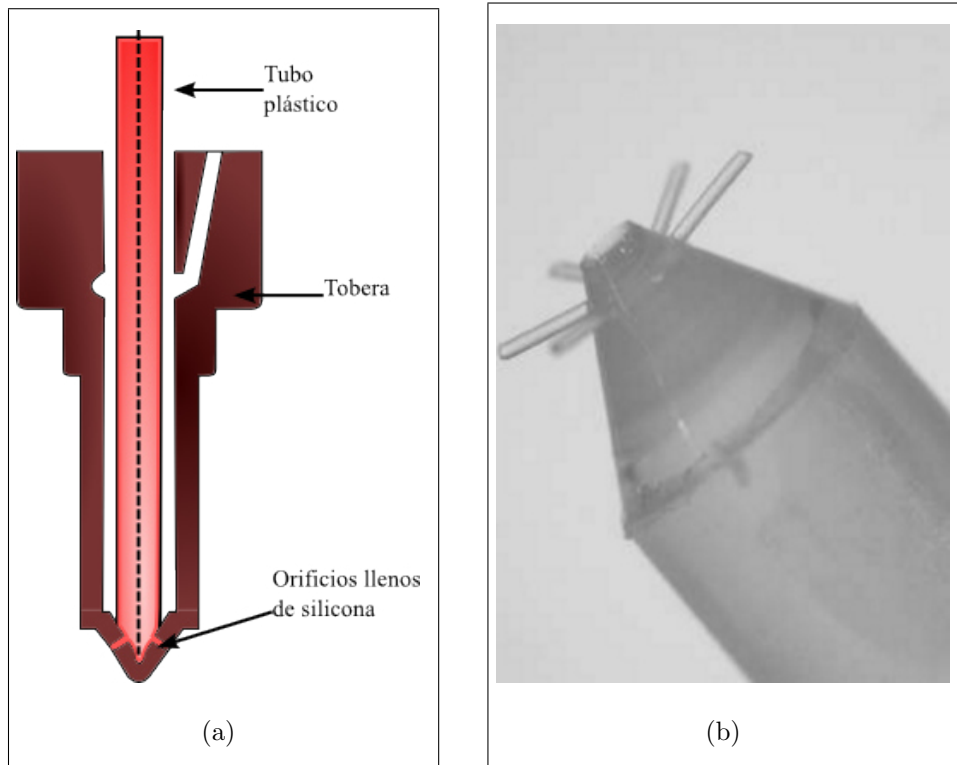


Figura 6.3: (a) Técnica empleada para el molde de silicona (b) Vista general del interior de la tobera [11]

Una vez obtenido este modelo de la tobera es necesario recubrirlo con un material conductor de electricidad, en este caso se recubre con oro para posteriormente introducirlo en un microscopio electrónico de barrido y así obtener la información relevante relacionada con el diámetro de salida de la tobera. En la Figura: 6.3 se muestra la técnica de silicona empleada para determinar la geometría interna de la tobera además de la vista general del interior de la tobera.

Para determinar este factor se empleo la información obtenida por Gimeno et al.[10]. En la Tabla: 6.2 se presentan los parámetros de la tobera empleada para la simulación.

Parámetro	Valor
No. de orificios de la tobera	6
Diámetro de la tobera [micras]	112

Tabla 6.2: *Geometría de la tobera empleada para el desarrollo de la simulación.*

Condiciones de la cámara de combustión

Uno de los parámetros más importantes que afectan el desarrollo del chorro es la contrapresión de la cámara y del gas en el cual se inyecta, este gas inerte presuriza la cámara de combustión e influye en la evolución temporal de la penetración del chorro [12]. Este hecho obliga a controlar, presión y temperatura del gas.

Usualmente se emplea nitrógeno como gas inerte, con el objetivo de igualar en mayor grado el aire que se encuentra dentro de una cámara de combustión de un motor, sin embargo en ocasiones se suele usar hexafluoruro de azufre, gas que tiene mayor densidad y permite una mejor visualización.

Para llevar a cabo estos experimentos se hace uso de una maqueta de volumen controlado como la que se muestra en la Figura: 6.4 la cual controla tres factores principales para un desarrollo del chorro exitoso, la contrapresión, la temperatura y el gas inerte de trabajo. Esta maqueta cuenta con un cuerpo cilíndrico que permite la visualización del chorro mediante la toma de fotografías o vídeo.

El diseño expuesto en la Figura: 6.4 ha sido mejorado con el fin de poder incrementar la contrapresión en el interior de la maqueta de visualización a volumen constante.

En la Figura: 6.5 se presenta el actual diseño de la maqueta de visualización a volumen constante.

La maqueta de visualización a volumen constante cuenta con los siguientes componentes:



Figura 6.4: Maqueta de visualización a volumen constante

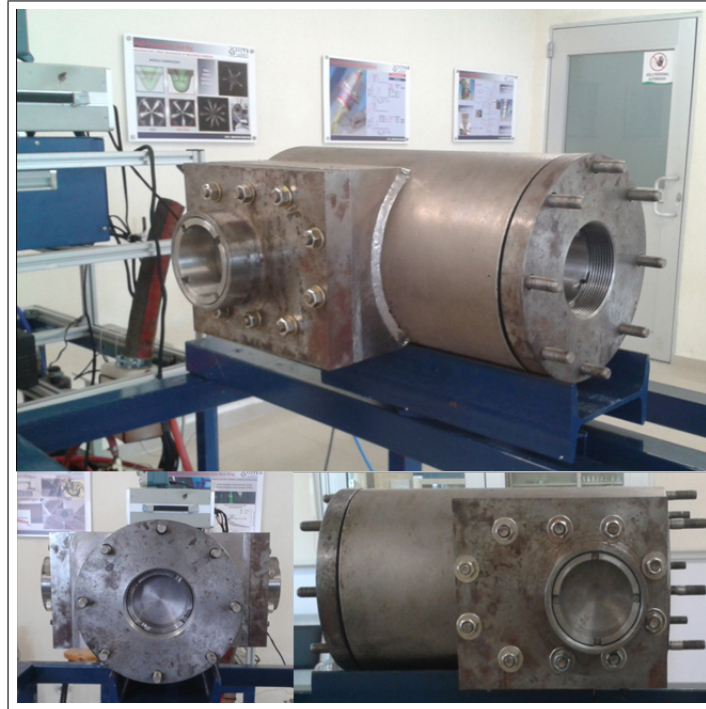


Figura 6.5: Maqueta de visualización a volumen constante.

1. Ventana de zafiro: Se propuso una ventana de zafiro de 80 mm de diámetro por 15 mm de espesor (ver anexo 6.6) puesto que es uno de los materiales más comúnmente empleados para la visualización de chorros en cámaras presurizadas, dicho material tiene un módulo de elasticidad aproximado a 3450 GPa , por lo tanto presenta una mínima deformación a la presión ejercida por la contrapresión en el interior de la maqueta.

Este módulo de elasticidad permite determinar la máxima deformación que presentara dicha ventana y junto con ello el espesor aproximado. El cálculo empleado para la determinación del espesor toma el principio de una placa circular sujeta bajo una carga uniforme distribuida como se muestra en la Figura: 6.6.

Donde el máximo desplazamiento esta definido por la siguiente ecuación:

$$\varphi_{max} = \varphi(r = 0) = \frac{Pr_0^4}{64D} \quad (6.1)$$

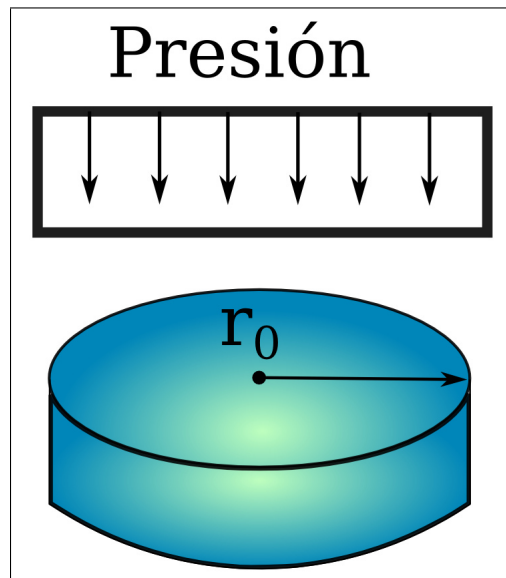


Figura 6.6: Placa circular sujeta bajo una carga uniformemente distribuida

donde P es la carga, r_0 es el radio de la placa y \mathcal{D} es una relación que involucra las propiedades mecánicas de cada material dado por la ecuación 6.2.

$$\mathcal{D} = \frac{Eh^3}{12(1 - \nu^2)} \quad (6.2)$$

donde E es el módulo de elasticidad del material, h es el espesor de la placa y ν es el coeficiente de Poisson, cuyo valor fue determinado por Gercek et al. [13], el cual presenta un valor de 0.234 .

En la Figura: 6.7 se muestra el comportamiento de la deformación de la ventana de zafiro en función del espesor, a tener en cuenta dos niveles de contrapresión en el interior de la maqueta de visualización a volumen constante (110 y 200 *bar*).

2. Marco de la ventana: La ventana de zafiro al ser para visualización del chorro no puede presentar ninguna imperfección o desgaste en el área de visualización y no es recomendable aplicar fuerza directa sobre la ventana, por lo tanto se

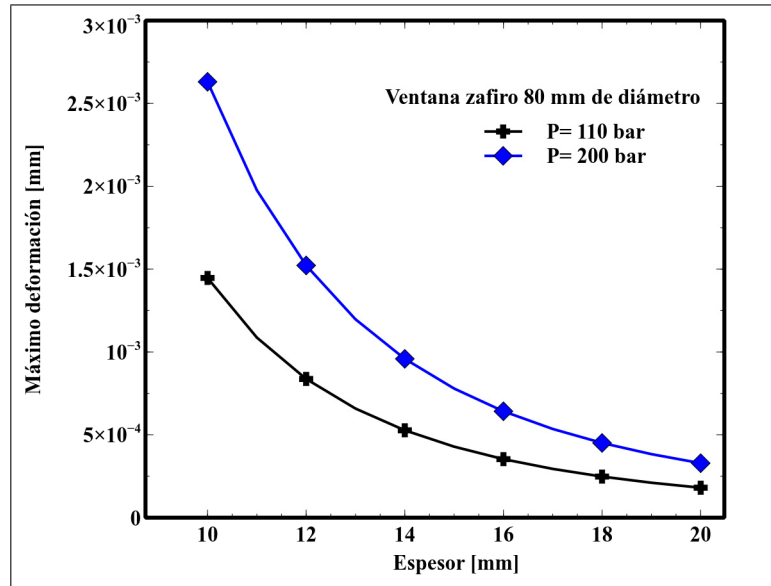


Figura 6.7: Máxima deformación para la ventana de zafiro

diseña un marco que proteja la ventana del contacto directo con otros de los componentes de la maqueta. Como se muestra en el anexo 6.6: este marco no es más que un negativo de la ventana con un área para ejercer presión para el apriete de la ventana.

3. Rosca de sujeción: Tanto el marco como la ventana deben estar sujetas para no permitir que haya fuga de gas ambiental, fuga de combustible, protección del usuario, entre otros. Este componente permite la sujeción de una manera simple sin la necesidad de emplear llaves particulares más que la empleada para la sujeción del mismo. Más detalles de este componente se muestran en el anexo 6.6.
4. Porta ventana: En el diseño del porta consta de una la placa frontal que se se diseña a modo de adaptarse al cuerpo de la maqueta con el fin de cubrir todo el hueco presentes en la maqueta. Estos dos porta ventanas fueron diseños para cubrir toda el área donde, según el diseño anterior, se tenía una placa de acrílico de 1 *in* de espesor; en el anexo 6.6 se describen más detalles sobre este aspecto.

Para esto se emplean las condiciones para la inyección propuesta por Gimeno et al. [10], el cual plantea tres casos de ensayo donde varía tanto la presión de inyección del combustible como la contrapresión del gas inerte, sin embargo el objeto de este estudio no es el de estudiar el comportamiento del chorro a diversas condiciones termodinámicas en la maqueta de visualización a volumen constante, sino el estudio de la eficiencia del proceso de mezcla de un chorro de biocombustible, por lo tanto y a falta de instalaciones experimentales para la realización del estudio se eligen solo las condiciones más favorables para el desarrollo del chorro de biocombustible. En la Tabla: 6.3 se presentan las condiciones empleadas en la cámara de combustión para el desarrollo del chorro libre en condiciones no evaporativas.

Parámetro	Valor
contrapresión [MPa]	3.53
Gas circundante	N_2
Temperatura del gas [K]	306

Tabla 6.3: *Condiciones de la maqueta de visualización a volumen constante.*

Las condiciones y los componentes anteriormente descritos son introducidos en el código CFD OpenFOAM como se muestra en la Figura: 6.8. Estas condiciones pueden variar dependiendo el fenómeno a estudiar, como en este estudio las condiciones son no evaporativas y la intención es el estudio de un chorro libre se manejan condiciones que no permitan la evaporación del combustible.

6.2.2 DETERMINACIÓN DE LOS ÁNGULOS DE CHORRO

Como se comentó en la sección 2.4 un chorro completo de diesel consta de dos parámetros macroscópicos, la penetración y el ángulo del chorro; ambos parámetros son relevantes en el proceso completo de formación de mezcla y ambos parámetros

```

2 //.....Geometría de la tobera:
3
4         outerDiameter  1.12e-4; // Diámetro del orificio de la tobera
5
6 //....Condiciones de la maqueta de visualización:
7
8
9 //...Contra presión [Pa]:
10
11         object      p;
12         dimensions  [1 -1 -2 0 0 0]; // Unidades kg/m-s2
13         internalField  uniform 3.53e+06; //Pascales
14
15
16 //...Gas circundante:
17
18         object      N2;
19         dimensions  [0 0 0 0 0 0];
20         internalField  uniform 1;           // Fracción del componente
21
22
23 //...Temperatura del gas [K]:
24
25         object      T;
26         dimensions  [0 0 0 1 0 0]; // Unidades K
27         internalField  uniform 306; // Kelvin
28

```

Figura 6.8: Geometría de la tobera y condiciones de la maqueta de visualización

pueden ser estudiados mediante técnicas ópticas. Estos dos parámetros son de sumo interés puesto que determinan la eficiencia de la mezcla, la ignición, la eficiencia del combustible y el desempeño del motor, los cuales dependen de las propiedades del combustible y se ven influenciados por las condiciones del motor.

El ángulo del chorro es un parámetro que define la eficiencia del proceso de mezcla aire-combustible, normalmente se define como el ángulo que se forma mediante dos rectas que se ajustan al contorno del chorro en la zona estacionaria del mismo y que llegan al orificio de salida. En la Figura: 6.9 se muestra la morfología esquemática del ángulo de un chorro diesel.

Para medir este parámetro Delacourt et al. [14] proponen la utilización de fotografías del desarrollo del chorro. En la Figura: 6.10 se presenta una foto tomada mediante una cámara de alta velocidad lo que permite convertir el número de pixels de las imágenes en distancia o superficie, con esto se puede describir un arco circular alrededor del chorro C_r en el cual, usando la zona estable, se traza un punto medio

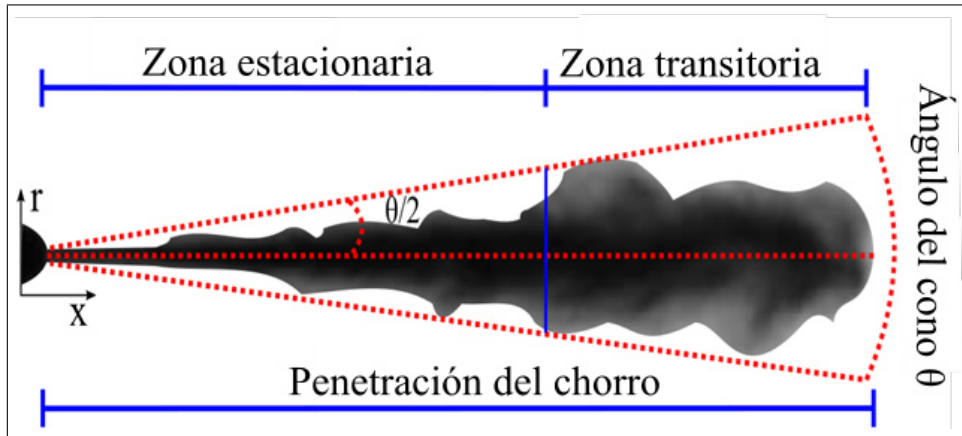


Figura 6.9: Ángulo completo del cono de un chorro diesel

M_r que se divide en dos radios según el eje Θ_r^+ y Θ_r^- . Los puntos de intersección con la frontera I_1 y I_2 del chorro son detectados mediante la iluminación. Por lo tanto para la determinación del ángulo del chorro es la suma de los ángulos medios obtenidos, los cuales representan la proyección del ángulo real del chorro.

Esta es una estrategia que permita una correcta estimación del ángulo, sin embargo sino se cuenta con esta técnica visual es necesario emplear otras estrategias.

El parámetro más importante para el desarrollo del ángulo es la razón de densidades.

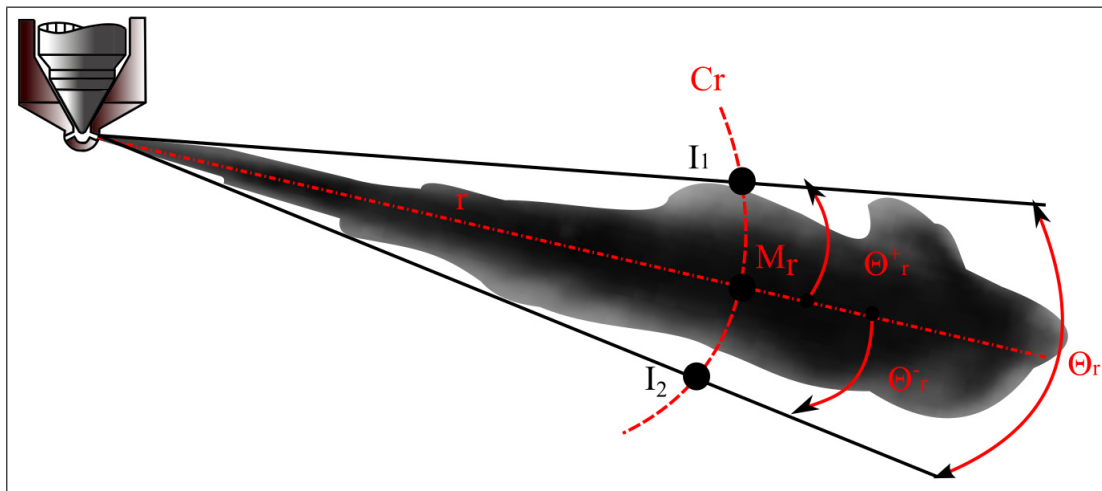


Figura 6.10: Cálculo del ángulo del chorro

Entre mayor densidad del gas circundante, menor la penetración y mayor la masa

de combustible dentro de la cámara de combustión que es empujada por las gotas nuevas; esta afirmación implica que un gas con mayor densidad suministra mayor resistencia al chorro de combustible e inhibe el desarrollo axial del chorro, lo que resulta en un ángulo de chorro más amplio [15]. Sin embargo la contrapresión es un parámetro que se mantiene fijo, por lo tanto esta variación en el ángulo la regirá la variación en la densidad del combustible. Una forma de determinar el ángulo es la mediante la ecuación 6.3 propuesta por Heywood et al. [16]

$$\tan\left(\frac{\Theta}{2}\right) = \frac{4\pi}{A} \left(\frac{\rho_g}{\rho_f}\right)^{1/2} \left(\frac{\sqrt{3}}{6}\right) \quad (6.3)$$

donde A es una constante dependiente de la geometría de la tobera dada por $A = 3.0 + 0.28\left(\frac{L_{hole}}{D_{hole}}\right)$ siendo L es el largo del orificio habitualmente de 1 mm y D es el diámetro del orificio de salida, ρ_g y ρ_f la densidad del gas y del combustible, respectivamente.

Se hace uso de la ecuación 6.3 puesto que no se cuenta con información experimental para la determinación del ángulo, sin embargo se hace uso de los resultados expuestos por Gimeno et al. para la determinación del ángulo del chorro para la tobera de interés para el chorro de diesel. En la Figura:6.11 se muestran los resultados obtenidos del ángulo para la tobera de $112 \mu\text{m}$ de diámetro a una contrapresión de 3.53 MPa . La determinación del ángulo se lleva a cabo empleando la siguiente metodología:

- En la Figura: 6.12 se muestra la evolución temporal del ángulo para tres diferentes niveles de presión de inyección $P_{inj} = 30 \text{ MPa}$, $P_{inj} = 80 \text{ MPa}$ y $P_{inj} = 130 \text{ MPa}$, así mismo en esta figura se representa el área de interés mediante un rectángulo, a partir del cual se obtendrá un valor medio del ángulo.
- Se hace uso de herramientas de digitalización de imágenes para determinar el valor estable del chorro desarrollado.

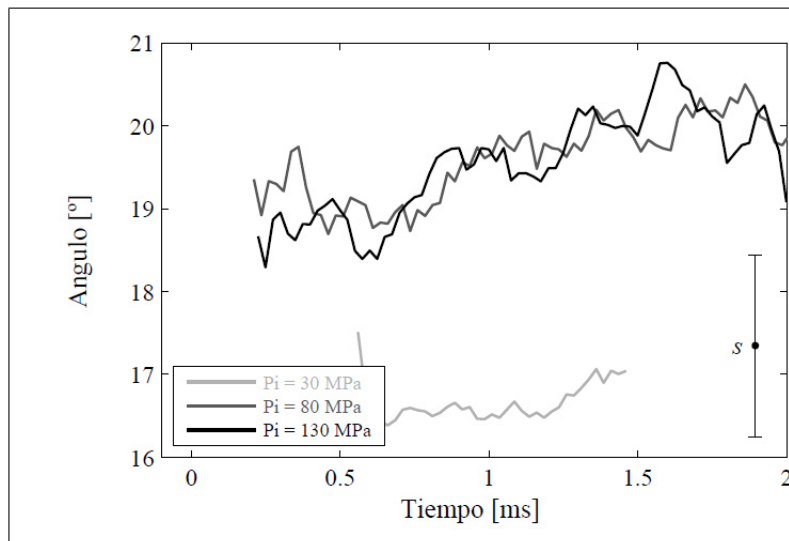


Figura 6.11: Ángulo del chorro. Gimeno et al.[10]

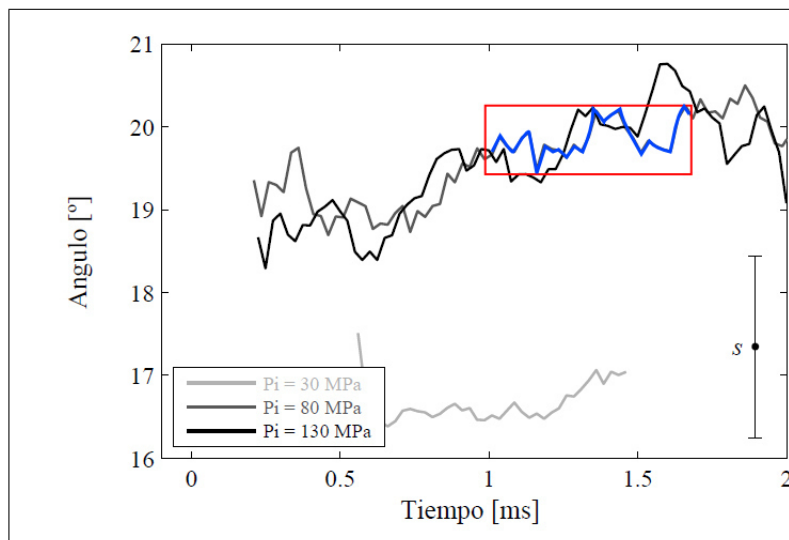


Figura 6.12: Zona estable del ángulo del chorro

- Una vez obtenida esta información se promedia la zona estable para determinar el ángulo del chorro completo.

Este ángulo estable es el empleado para la simulación de un chorro diesel, sin embargo Gimeno no reporta información para chorros de biocombustibles, por lo tanto el ángulo del chorro para un biocombustible es determinado mediante la ecuación 6.3. Esta relación emplea la densidad del fluido y la densidad del gas circundante así como la razón que guarda la geometría del inyector. En la Tabla: 6.4 se muestran los ángulos del chorro determinados para cada biocombustible.

Combustible	Ángulo [°]	Semi ángulo [°]
B0	20.015	10.007
B20	16.8381	8.4190
B50	16.4671	8.2335
B100	15.8998	7.9499

Tabla 6.4: *Ángulos y semi ángulos del chorro para los chorros de biocombustible.*

El ángulo del cono para el biodiesel y las mezclas con diesel disminuye, debido a su alta densidad y su incremento en la cantidad de movimiento, así mismo la densidad del gas circundante interviene, puesto que incrementa la resistencia del chorro y disminuye la penetración axial del chorro lo que conlleva a un ángulo del chorro más ancho [17, 15, 18]. En la Figura: 6.13 se presenta la disminución del ángulo del chorro de un biocombustible donde el ángulo Θ_a es menor al ángulo Θ_b , el cual afecta de manera negativa la eficiencia del proceso de mezcla aire-combustible, aunado a esto el aumento la penetración del biodiesel incrementa la probabilidad del posible impacto en la pared del cilindro; estos factores afectan considerablemente la eficiencia del motor. Sin embargo la adición de diesel, aditivos u otro biocombustible mitigan este comportamiento causado por el aumento en las propiedades de transporte del biodiesel.

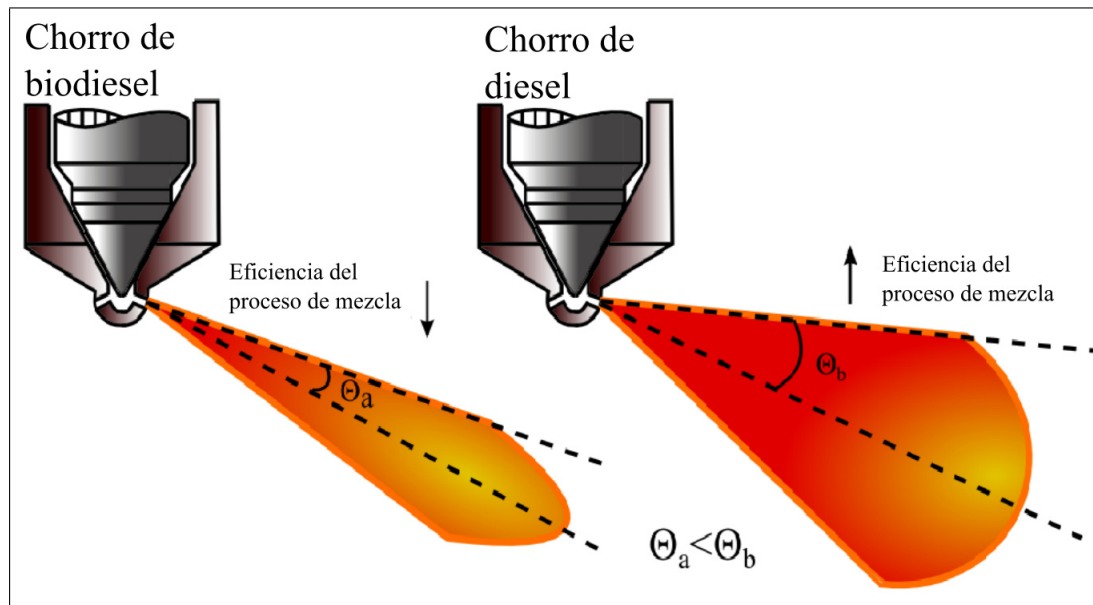


Figura 6.13: Eficiencia en el proceso de mezcla, debida al ángulo del chorro

6.2.3 DETERMINACIÓN DEL COEFICIENTE DE DESCARGA

El código CFD OpenFOAM, además de emplear el medio ángulo del cono precisa el coeficiente de descarga, este parámetro evalúa el flujo a través de orificios de inyección, el cual está definido como el caudal másico real entre el teórico:

$$C_d = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{teórico}} = \frac{\dot{m}}{A_0 \rho_f U_{inj}} \quad (6.4)$$

Este coeficiente de descarga es una medida de las pérdidas de flujo y su paso a través del orificio del inyector además de ser un valor que suele depender de la geometría del inyector.

Los valores del coeficiente de descarga se suelen obtener normalmente de manera experimental, sin embargo a falta de instalación experimental, una manera analítica para determinar el coeficiente de descarga, es mediante un planteamiento de la ecuación de Bernoulli entre un punto aguas arriba y un punto a la salida del orificio despreciando los cambios en energía potencial, trabajo externo suministrado u

obtenido y la velocidad aguas arriba se obtiene:

$$\frac{\rho_f u_1^2}{2} + P_1 = \rho g h_f + \frac{\rho u_{med}^2}{2} + P_2 \quad (6.5)$$

donde ρ es la densidad del combustible, u es la velocidad media en el punto aguas arriba, P es la presión, g es la aceleración de la gravedad y h_f es la disipación por fricción. Empleando factores tabulados para las pérdidas internas y el factor de fricción de Darcy ($h_f = f \frac{L}{D} \frac{u^2}{2g}$) y substituyendo en la ecuación 6.5 se obtiene la siguiente ecuación:

$$P_1 - P_2 = \frac{\rho}{2} u_{med}^2 (1 + \varepsilon + f \frac{L_{hole}}{D_{hole}}) \quad (6.6)$$

Ahora despejando la velocidad media se obtiene:

$$u_{med} = \sqrt{\frac{2\Delta P}{\rho} \frac{1}{(1 + \varepsilon + f \frac{L_{hole}}{D_{hole}})}} \quad (6.7)$$

El factor de descarga esta representado por:

$$C_D = \sqrt{\frac{1}{(1 + \varepsilon + f \frac{L_{hole}}{D_{hole}})}} \quad (6.8)$$

Según la ecuación 6.8 cuanto menos sean los coeficientes de pérdidas, ε y $f \frac{L_{hole}}{D_{hole}}$ mayor será el coeficiente de descarga. Mediante este análisis el coeficiente de descarga queda en función de la geometría del inyector y de las propiedades del fluidos. Sin embargo este factor depende del número de Reynolds siendo para para el caso de estudio, un régimen de velocidad elevada, por lo tanto el valor del coeficiente de descarga será constante según se muestra en la Figura: 6.14.

Esta premisa permite emplear la información obtenida por Gimeno et al. para la determinación del coeficiente de descarga para la tobera de estudio de $112 \mu m$, a partir de la información presentada en esta figura se puede considerar que para

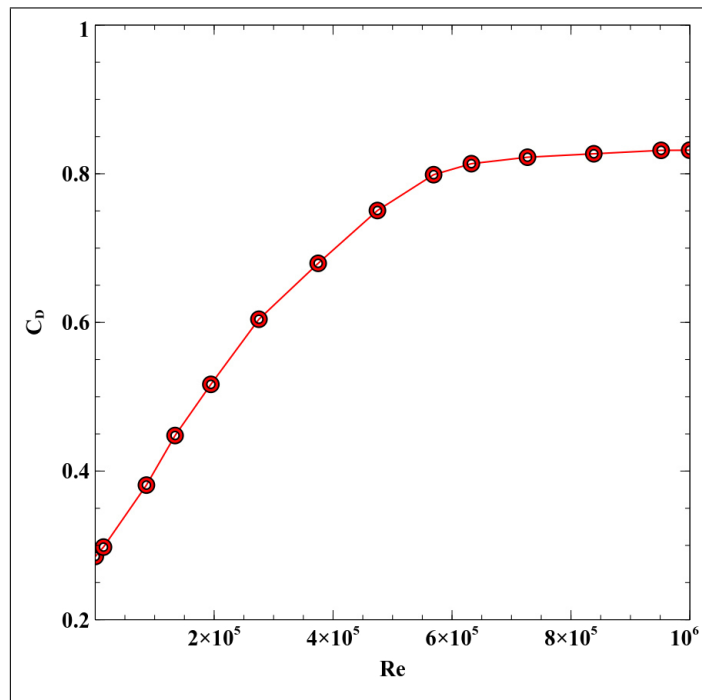


Figura 6.14: Coeficiente de descarga en función del número de Reynolds

una misma tobera el valor del coeficiente de descarga es función, únicamente, de la geometría del inyector más que de las propiedades de transporte, puesto que se mantiene constante a altos números de Reynolds, por lo tanto siguiendo la misma metodología que se empleó para la determinación del ángulo del chorro se puede determinar el coeficiente de descarga.

- En la Figura:6.15 se muestra la evolución temporal del coeficiente de descarga para tres diferentes diámetros geométricos de tobera: 112, 138 y 156 μm , así mismo en esta figura se representa el área de interés mediante un rectángulo a partir del cual se obtendrá un valor medio del coeficiente de descarga.
- Se hace uso de herramientas de digitalización de imágenes para determinar el valor estable del chorro desarrollado.
- Una vez obtenida esta información se promedia la zona estable para determinar el coeficiente de descarga para la tobera de 112 μm de diámetro.

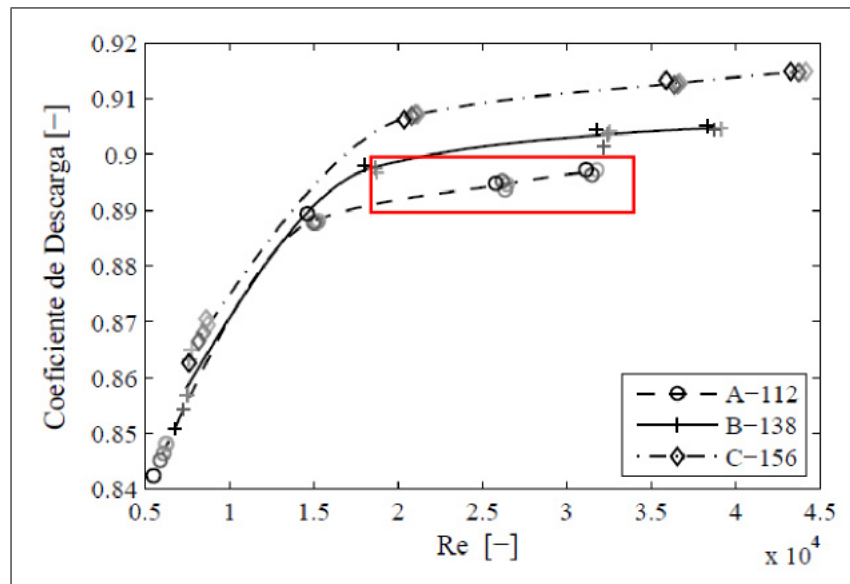


Figura 6.15: Zona estable del coeficiente de descarga

Este coeficiente de descarga estable promedio da como resultado el valor de $C_D = 0.8934$, valor que será empleado para la simulación de cada chorro de biocombustible.

6.2.4 DETERMINACIÓN DE LAS PRESIONES DE INYECCIÓN

Un parámetro crítico empleado por el código CFD OpenFOAM para la simulación del chorro es la masa total dentro del sistema m_{total} , esta masa determina cuántas parcelas de gotas son introducidas a cada celda del dominio, además es empleada en las propiedades termo-físicas que se encuentran en función de la masa.

La masa total del sistema puede ser determinada a partir de la velocidad de inyección, este parámetro se determina a partir de la mediación de las siguientes dos medidas experimentales: caudal másico y flujo de cantidad de movimiento. En la Figura: 6.16 se muestra el esquema del sistema para medir el caudal másico, así como el correspondiente para medir el flujo de cantidad de movimiento.

Gimeno et al. determinaron el flujo másico para el sistema de interés a una

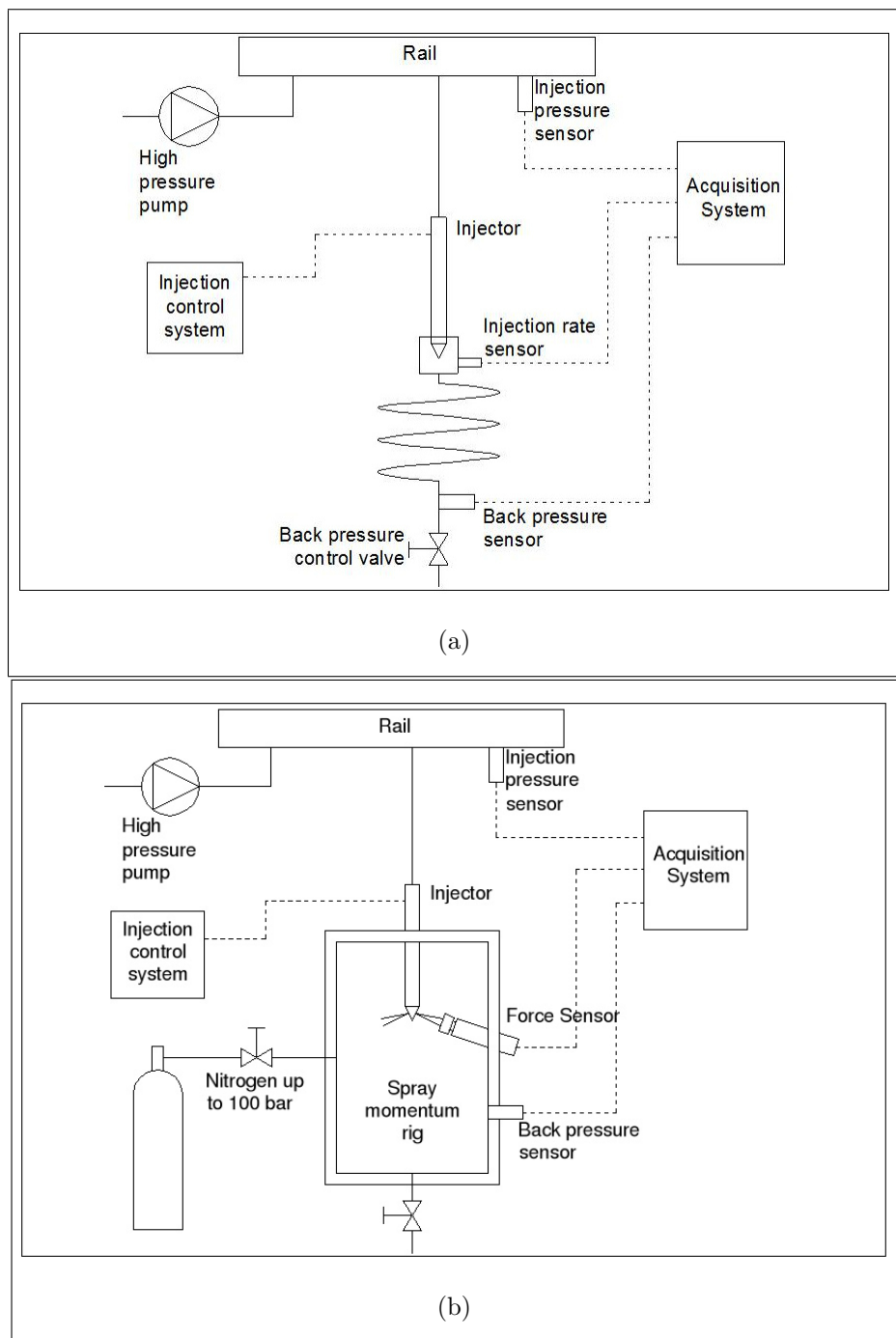


Figura 6.16: (a) Esquema del sistema para la medición del flujo másico y (b) Esquema del sistema para la medición de la cantidad de movimiento [19]

presión de inyección de 80 MPa y una contrapresión de 3.5 MPa para tres toberas con un tiempo de inyección de 2 ms . En la Figura: 6.17 se muestran los resultados obtenidos del flujo másico para los tres casos de estudio. Sin embargo para el presente trabajo se estudia una tobera de $112 \mu\text{m}$, por lo tanto para la determinación del flujo másico de un diesel se emplea la misma metodología expuesta con anterioridad.

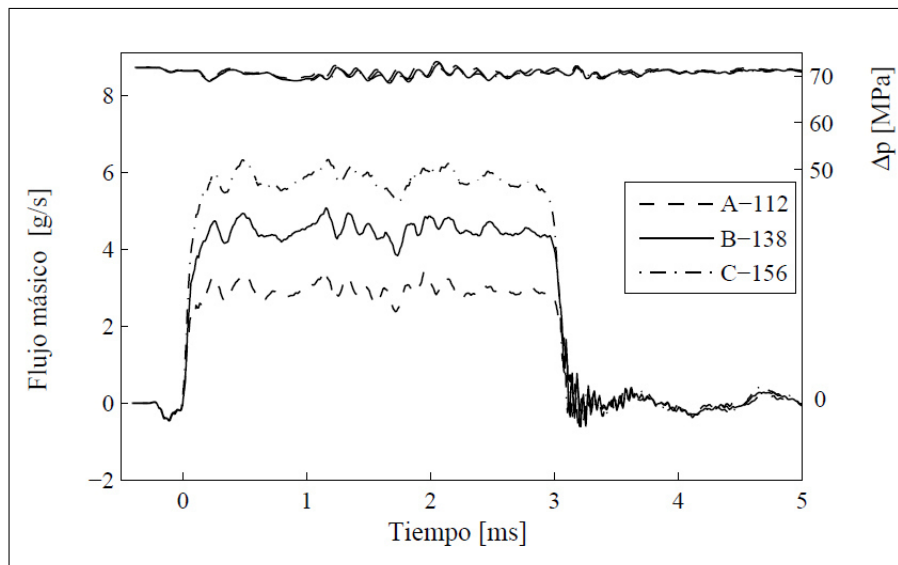


Figura 6.17: Evolución temporal de la tasa de inyección. $P_{inj}=80 \text{ MPa}$, $P_{back}=3.5 \text{ MPa}$

- En la Figura: 6.18 se muestra la evolución temporal del flujo másico para tres diferentes diámetros geométricos de tobera: 112 , 138 y $156 \mu\text{m}$, así mismo en esta figura se representa el área de interés mediante un rectángulo a partir del cual se obtendrá un valor medio del flujo másico.
- Se hace uso de herramientas de digitalización de imágenes para determinar el valor estable del chorro desarrollado.
- Una vez obtenida esta información se promedia la zona estable para determinar la velocidad de inyección, posteriormente se multiplica por el tiempo de inyección y se determina cuanta masa fue suministrada al sistema empleado por Gimeno et al. usando una tobera de $112 \mu\text{m}$ de diámetro.

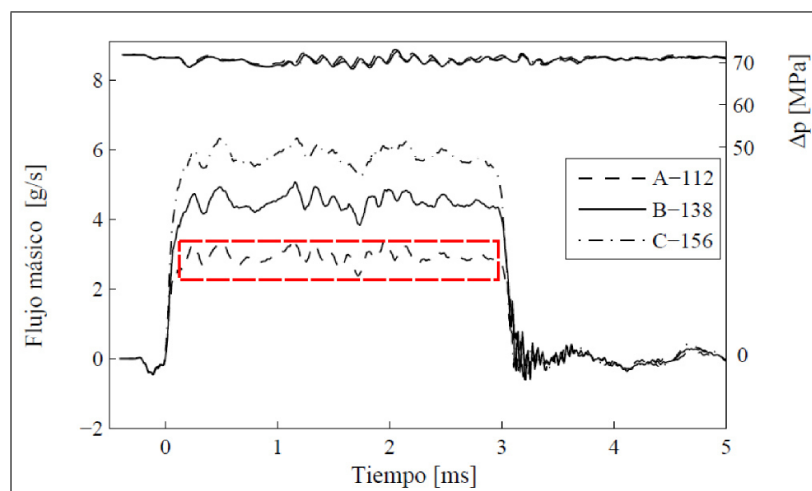


Figura 6.18: Zona estable de la velocidad de inyección

Se podría emplear la misma metodología para determinar la masa suministrada al sistema para un biodiesel, sin embargo Gimeno et al. no muestran resultados de flujo másico para biocombustibles lo que complica la determinación de este valor de masa para una tobera de $112 \mu m$ y bajo las mismas condiciones de inyección, por lo tanto se tiene que hacer uso de otro análisis para la obtención de este valor.

Bang et al. [20] presentan un estudio donde llevan a cabo la inyección de biodiesel y de diferentes mezclas con diesel, además estudiaron los efectos del biodiesel en el retraso de la inyección, la velocidad de inyección entre otros parámetros. Bang et al. exponen un rápido incremento, por parte del biodiesel, en la velocidad de inyección, mientras que el diesel muestra una larga duración en la velocidad de inyección al mismo tiempo de energización para cuatro mezclas propuestas, *B100*, *B75*, *B25*, *B50* y diesel.

La diferencia en la velocidad de inyección, y por lo tanto, en el flujo másico puede ser atribuido al significativo aumento en la viscosidad del biodiesel [21], el mismo comportamiento fue reportado por Desantes et al. [22] donde declaran que el biodiesel derivado del aceite de ricino manifiesta un aumento en la velocidad de inyección muy significativo en comparación con mezclas de *B5* y *B30*.

Como se comentó en la sección 2.2, la presión de inyección debe aumentar al trabajar con biodiesel, con el objetivo de asegurar que se tenga la misma masa de combustible

en el sistema bajo la misma tasa de inyección.

Anteriormente se expusieron las condiciones de trabajo para la inyección de un diesel propuesta por Gimeno et al. empleando una tobera de $112 \mu m$, $80 MPa$ como presión de inyección y con una contrapresión de $3.5 MPa$, por lo tanto la masa constante en el sistema, para un tiempo de energización de $2 ms$, es de $5.95 \times 10^{-6} kg$.

El objetivo de este estudio es la inyección de un bicombustible, por lo tanto se emplea la información geométrica anteriormente expuesta y la masa total suministrada al sistema para extrapolar la presión de inyección a la que debe ser inyectado un biocombustible; para esto se hace uso de la información experimental expuesta por Bang et al. [20]. En la Figura: 6.19 se observa como las mezclas con mayor porcentaje de biodiesel muestran un rápido incremento en la tasa de inyección, mientras que las mezclas como *B25* y el diesel muestran una larga duración en la tasa de inyección a la misma duración del pulso.

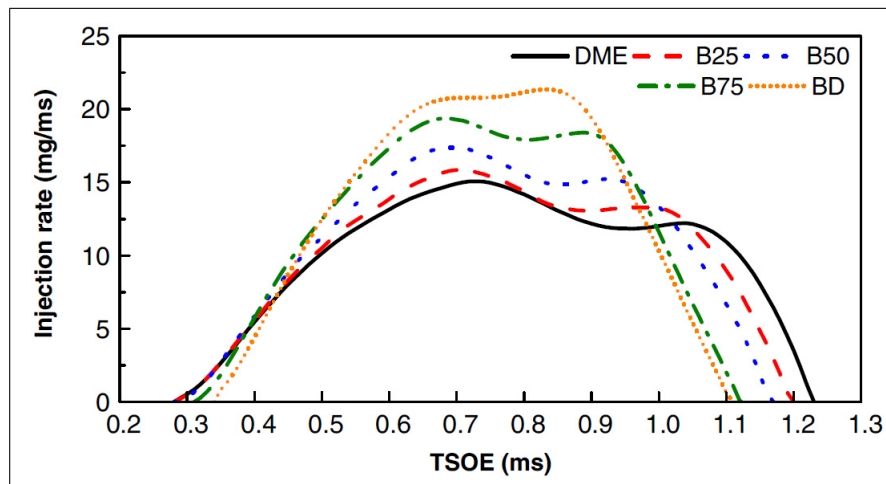


Figura 6.19: Tasa de inyección para el biodiesel y sus mezclas con diesel

Para determinar las presiones de inyección de cada biocombustible se emplea la siguiente metodología:

- Se digitaliza la Figura: 6.19 para cada mezcla de estudio y se obtiene un promedio del flujo másico.

- Se define la masa total en el sistema, mediante el producto del flujo másico por el tiempo en el que ocurre la inyección.
- Es indispensable obtener el tiempo requerido para poder inyectar la misma masa de biodiesel que de diesel en el sistema, para esto la masa total a inyectar de diesel se multiplica por el inverso del flujo másico del biodiesel; esta operación arroja el tiempo en que debería ocurrir la inyección de biodiesel para suministrar la misma masa que un diesel.
- Finalmente, una vez establecido el tiempo requerido para inyectar la misma masa de biodiesel que de diesel al sistema, se determina un factor de tiempo de inyección:

$$\mathfrak{X} = \frac{t_{inj-ideal}}{t_{inj-real}} \quad (6.9)$$

donde $t_{inj-ideal}$ es el tiempo en el que debería de ocurrir la inyección para suministrar la misma masa de biodiesel que de diesel al sistema y $t_{inj-real}$ el tiempo real en el que ocurre la inyección del biodiesel.

- Este procedimiento se aplica a todas las mezclas de biodiesel-diesel obteniendo los siguientes factores de tiempo para cada mezcla mostrados en la Tabla: 6.5.

Biocombustible	Factor de tiempo de inyección
B0	1
B20	0.76
B50	0.63
B100	0.59

Tabla 6.5: *Factores de tiempo para la inyección de biocombustible.*

Una vez determinado el factor de tiempo de inyección es posible determinar la presión de inyección para cada biocombustible necesaria para mantener un sistema de masa constante empleando la siguiente relación:

$$\mathbf{m} = A.C_d.U_{inj}.\rho_f.t_{inj}\mathfrak{X} \quad (6.10)$$

donde A es el área del orificio de salida, C_d es el coeficiente de descarga, ρ_f es la densidad del biocombustible, t_{inj} es el tiempo real de inyección empleado por Gimeno et al., \mathfrak{X} es el factor de inyección y U_{inj} es la velocidad de inyección debida a la presión expresada mediante la siguiente ecuación:

$$U_{inj} = \sqrt{\frac{2\Delta P_{inj}}{\rho_f}} \quad (6.11)$$

donde ΔP_{inj} es la diferencia de la presión de inyección y la contrapresión y ρ_f es la densidad del biocombustible.

Empleando la ecuación 6.10 se determina la presión de inyección necesaria para suministrar la misma masa de biocombustible al sistema para las condiciones geométricas y de operación empleadas por Gimeno et al. En la Tabla: 6.6 se presentan las presiones de inyección definidas para cada biocombustible.

Biocombustible	Presión de inyección [MPa]
B0	80
B20	132.10
B50	182.50
B100	193

Tabla 6.6: *Presión de inyección para los biocombustibles y el diesel*

Se puede observar tanto en la Tabla: 6.5 como en la Tabla: 6.6 la variación que implica el aumento del porcentaje de biodiesel en una mezcla.

En la Tabla: 6.7 se presenta un condensado con las condiciones de trabajo y la representación de la variable empleada en el código CFD OpenFOAM, tomando en

Parámetro	B0	B20	B50	B100
Diámetro de la tobera [micras]	112	112	112	112
Contrapresión [MPa]	3.53	3.53	3.53	3.53
Gas circundante	N_2	N_2	N_2	N_2
Temperatura del gas [K]	306	306	306	306
Medio ángulo del chorro	10.007	8.419	8.233	7.949
Coefficiente de descarga	0.8934	0.8934	0.8934	0.8934
Tiempo de energización del inyector [ms]	1	1	1	1
Masa por orificio [kg]	5.95×10^{-6}	5.95×10^{-6}	5.95×10^{-6}	5.95×10^{-6}
Presión de inyección [MPa]	80	132.10	182.50	193

Tabla 6.7: *Condiciones de operación para la simulación de un chorro de biocombustible*

cuenta que las unidades se encuentran en el sistema internacional mKs . Estas condiciones de operación serán las empleadas para simular un chorro de biocombustible en condiciones no evaporativas. A continuación se presenta el método de resolución empleado para la simulación así como los resultados de cada simulación.

6.3 MÉTODO NUMÉRICO

Como se menciono anteriormente el código CFD OpenFOAM resuelve las ecuaciones de conservación descritas en la sección 2.5.2 mediante el método de volúmenes finitos (**FVM**). Sin embargo el código CFD OpenFOAM emplea su propio lenguaje, por lo tanto antes de explicar la sintaxis de la discretización empleada por el código se abordara el método de volúmenes finitos o método de volúmenes de control. La información expuesta en este sección puede ser consultada en [23, 24].

6.3.1 MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS (FVM)

La dinámica de fluidos computacional o CFD por sus siglas en inglés es una ramificación de la mecánica continua y cubre una amplia variedad de casos, tales como flujo compresible, incompresible, multifásico, entre otros. Todos estos flujos pueden ser descritos mediante una ecuación de conservación genérica

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho u\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (6.13)$$

donde el primer término de la ecuación representa la razón de cambio, la cual es cero para flujos estables, el segundo término representa el término convectivo, el tercero el término difusivo y finalmente el término fuente.

Estos fenómenos de flujo de fluido pueden ser estudiados apropiadamente mediante métodos computacionales que involucren una solución numérica al conjunto de ecuaciones diferenciales parciales, discretización de dominio y de ecuaciones de conservación seguidas de una resolución mediante un sistema de ecuaciones lineales.

Un método para la resolución de estos problemas es el método de volúmenes finitos (FVM) donde las ecuaciones de conservación se aplican a una región específica del espacio conocida como volumen de control donde se hace uso de la naturaleza discreta de los modelos computacionales.

A continuación se describen los pasos a seguir para la resolución de una ecuación mediante el FVM.

1. El primer paso del FVM es dividir el dominio computacional en un número finito de volúmenes de control continuos (medio definido en espacio y tiempo sin conjuntos vacíos) a discretos (medio que permite tomar valores identificados en

el espacio $\phi_{i,j,k}$). Las fronteras de estos volúmenes de control están posicionadas a mitad de camino entre los nodos adyacentes a modo de que cada nodo este rodeado de nodos vecinos unos de tras de otros sin traslapar, el cual se muestra en la Figura: 6.20:

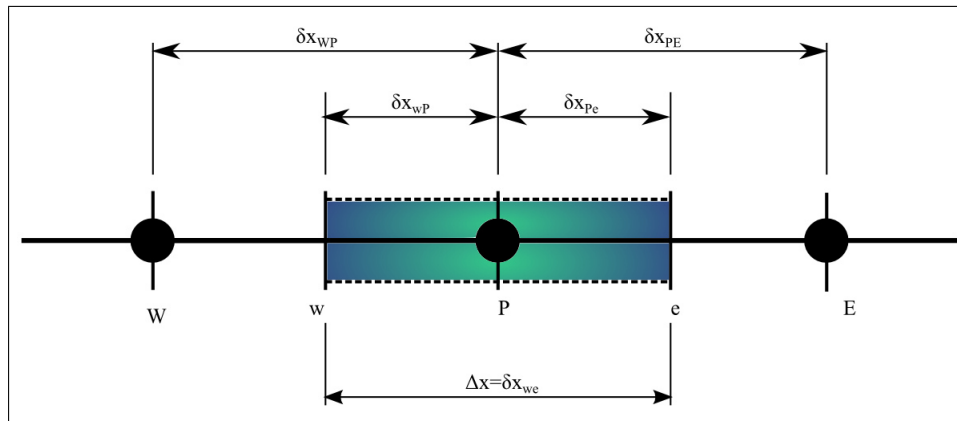


Figura 6.20: Volumen de control unidimensional

donde P es el punto de interés y los puntos W y E son sus vecinos en una geometría de una dimensión, los puntos w y e son los nodos a los costados de las caras del volumen de control, δx_{WP} y δx_{PE} son las distancias entre los nodos W y P y entre los nodos P y E respectivamente. Distancias similares entre la cara w y el punto P y entre P y la cara e están representadas por δx_{wP} y δx_{Pe} . En la Figura: 6.20 se muestra un volumen de control en el cual el nodo de interés (P) está localizado en el centro del volumen de control. En estos volúmenes de control se aplica las ecuaciones de conservación en su forma integral, así como a todo el dominio. Si se realiza la suma de todos los volúmenes de control presentes en el dominio se obtiene la ecuación de conservación global del problema de estudio.

2. Una de las características principales que distinguen a este método de otros métodos CFD, es la integración de las ecuaciones de conservación en un volumen control para cada volumen finito individual, con el objetivo de generar

una ecuación discreta al nodo P . Para el volumen de control de la Figura: 6.20 y la ecuación de conservación 6.12 se tiene que integrar sobre el volumen de control además de una segunda integral sobre un paso finito de tiempo Δt

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{V.C} \left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) + \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \right] dV = 0 \quad (6.14)$$

3. Empleando el teorema de la divergencia de Gauss el cual convierte los términos divergentes de la ecuación 6.12 en integrales de superficie, reduciendo el problema de discretizar estos términos a uno con diferencias aproximadas para flujos en la superficie de control del volumen basados en el valor conocido de la celda central.

$$\int_{V.C} \text{div}(\rho\phi) dV = \int_s (\rho\phi) \cdot \bar{n} dS \quad (6.15)$$

$$\int_{V.C} [\text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi] dV = \int_s (\Gamma \text{grad}\phi) \cdot \bar{n} dS \quad (6.16)$$

4. Aplicando un vector unitario normal a la superficie de control \bar{n} y reorganizando la ecuación 6.14 se tiene:

$$\frac{\rho(\phi - \phi^0)\Delta V}{\Delta t} + [(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w] = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + S_u \quad (6.17)$$

Para ejemplificar los puntos anteriormente mencionados se considerara la conducción de calor transitoria 2-D para una figura rectangular estableciendo los volúmenes de control como puntos en los centros de los volúmenes como se muestra en la Figura: 6.21 en el cual están representados todos los puntos internos.

Después se emplea la correcta ecuación de conservación de la energía para el volumen de control que incluya el incremento temporal de la razón de energía almacenada en el volumen de control siendo esta igualada a la razón a la cual la energía es conducida dentro del volumen la cual puede ser representada por la siguiente relación:

$$\int \int \int_R \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dR + \int \int_S \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (6.18)$$

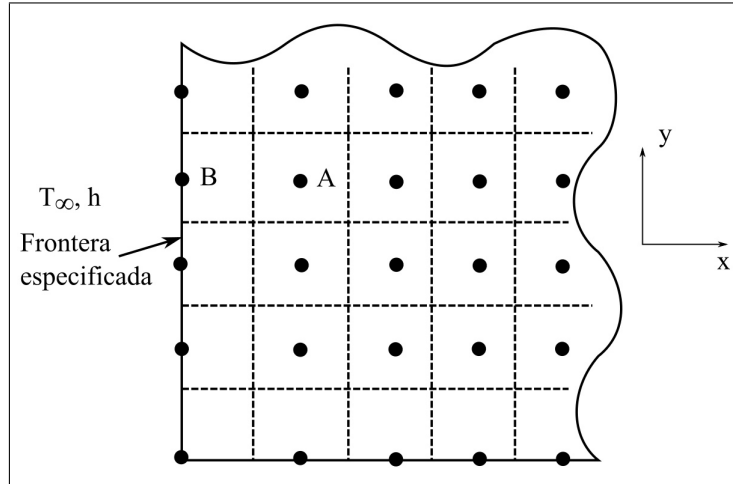


Figura 6.21: Volumen de control A

donde el primer término de la ecuación 6.18 es la integral sobre el volumen de control que representa la razón de incremento de energía almacenada dentro del volumen y el segundo término la integral sobre la superficie del volumen, la cual representa la razón neta a la cual la energía es conducida por la superficie del volumen.

Por otro lado si se tiene la ecuación diferencial parcial es posible emplear el teorema de la divergencia anteriormente mencionado y tratar el fenómeno con la apropiada forma integral:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (6.19)$$

donde k es la conductividad térmica, ρ es la densidad, C_p es la capacidad calorífica y $q = -k \nabla T$ es el vector de flujo de calor. Si se integra la ecuación 6.19 sobre el volumen de control se obtiene:

$$\int \int \int_R \left(\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot q \right) dV = 0 \quad (6.20)$$

Empleando el teorema de la divergencia propuesto en por las ecuaciones 6.15 y 6.15 obtenemos la forma integral de la ley de conservación expuesta por la ecuación 6.18.

En el volumen de control de la Figura: 6.21, con una unidad de profundidad las integrales de superficie de la conducción de calor están representadas por el vector normal a la superficie como $idy-jdx$. Por lo tanto, la integral de superficie del flujo neto de calor saliente por la superficie del volumen puede ser evaluada de la siguiente manera:

$$\oint (q_x dy - q_y dx) \quad (6.21)$$

donde q_x y q_y son las componentes del flujo calor en la dirección x y y , respectivamente. Por lo tanto, la ecuación de conservación queda representada de la siguiente forma:

$$\int \int \int_R \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dV + \int \int_S (q_x dy - q_y dx) = 0 \quad (6.22)$$

Empleando el volumen de control expuesto en la Figura: 6.21, se integra la ecuación 6.22 sobre el volumen de control y sobre un intervalo de tiempo t hasta $t + \Delta t$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (q_x dy - q_y dx) dV dt \quad (6.23)$$

donde el primer término contiene la derivada temporal, la cual puede ser evaluada si se asume que la temperatura al punto (i,j) es el valor promedio para el volumen de control y el segundo término puede ser representado mediante la ley de Fourier para los componentes del flujo de calor en términos de la temperatura $q_x = -kA \frac{\partial T}{\partial x}$ y $q_y = -kA \frac{\partial T}{\partial y}$ tenemos:

$$\int_w^e \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dt \right] dV = \int_t^{t+\Delta t} \left[(kA \frac{\partial T}{\partial x})_e - (kA \frac{\partial T}{\partial x})_w \right] dt \quad (6.24)$$

donde A es el área de la cara del volumen de control, la cual suele escribirse como el producto de los diferenciales ($\Delta y \Delta z$), ΔV es el volumen de control, el cual es

igual a $\Delta y \Delta z \Delta x$, donde $\Delta x = \delta_{we}$ es el ancho del volumen de control. Sin embargo los métodos numéricos tienen restricciones que obligan a realizar aproximaciones para poder resolver los problemas, por lo tanto como la primera aproximación es necesario suponer que no existen variaciones de la temperatura con respecto al tiempo en el interior del volumen de control y aproximando los términos difusivos por diferencias finitas centrales se tiene lo siguiente:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) \Delta x = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(k_e A \frac{T_E - T_P}{\delta x_{PE}} \right) - \left(k_w A \frac{T_P - T_W}{\delta x_{WP}} \right) \right] dt \quad (6.25)$$

Para aproximar el término temporal es necesario utilizar polinomios de interpolación y con la premisa de que el tiempo es una coordenada parabólica de marcha hacia adelante se puede conocer $T(x, t^{t+\Delta t})$ a partir de valores $T(x, t)$ donde $t < t^{t+\Delta t}$. Es común utilizar un método de dos niveles de tiempo, el cual obtiene $T(x, t^{t+\Delta t})$ a partir de un tiempo anterior $T(x, t^t)$, el cual supone una distribución lineal de T con respecto al tiempo.

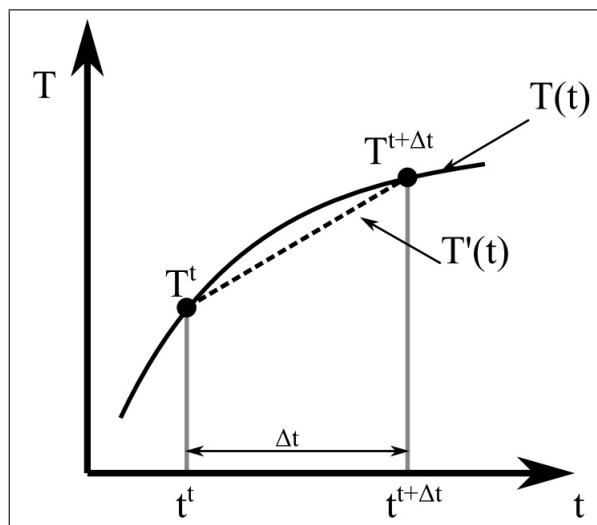


Figura 6.22: Esquema de discretización de la variación de la temperatura con el tiempo

En la Figura: 6.22 se muestra la distribución lineal de la temperatura con el tiempo al ajuste

$$T(t) \approx T'(t) = T^t + \frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} t \quad (6.26)$$

Existen varias posibilidades para evaluar las derivadas temporales:

- Valores anteriores $T = T^t$ los cuales son almacenados en un paso de tiempo previo y se obtienen mediante un método explícito, estos valores son resueltos de manera individual sin necesidad de un método iterativo.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} \quad (6.27)$$

Que es precisamente la expresión en diferencias finitas hacia adelante. Si las derivadas espaciales de la ecuación 6.25 se calculan en el tiempo t^t y se substituye en la ecuación 6.27, es posible determinar la ecuación discreta para conocer explícitamente la $T^{t+\Delta t}$ cuando se conoce el valor previamente calculado, mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} = \frac{k}{\Delta x} (T_E^t - 2T_P^t + T_W^t) \quad (6.28)$$

Esta relación argumenta que para que haya un cambio que repercuta en las condiciones de frontera en el interior del dominio debe de haber transcurrido un intervalo de tiempo Δt .

- Valores posteriores $T = T^{t+\Delta t}$ los cuales son resueltos en el paso de tiempo actual mediante un método implícito, el cual los valores dependientes son resueltos simultáneamente mediante un método iterativo. En este esquema las

derivadas espaciales en la ecuación 6.25 se calculan al tiempo $t^{t+\Delta t}$

$$\frac{T^{t+\Delta t} - T^t}{\Delta t} = \frac{k}{\Delta x} (T_E^{t+\Delta t} - 2T_P^{t+\Delta t} + T_W^{t+\Delta t}) \quad (6.29)$$

Aquí no se conoce la información con el caso anterior por lo tanto la ecuación 6.29 es una ecuación implícita para $T_P^{t+\Delta t}$; existen dos incógnitas adicionales $T_E^{t+\Delta t}$ y $T_W^{t+\Delta t}$, por lo que esta resolución implica iteraciones para cada variable y para cada nodo.

La forma discretizada de la ecuación de gobierno 6.25 para un volumen de control empleando un método explícito y con tiempo mayor a cero conserva la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{T_P - T_P^0}{\Delta t} = f \left[\frac{k_e}{\delta x_e} (T_E - T_P) - \frac{k_w}{\delta x_w} (T_P - T_W) \right] \\ + (1 - f) \left[\frac{k_e}{\delta x_e} (T_E^0 - T_P^0) - \frac{k_w}{\delta x_w} (T_P^0 - T_W^0) \right] \end{aligned} \quad (6.30)$$

donde f es una función de peso de entre 0 y 1 derivada de la suposición de que las temperaturas en los nodos T_P , T_E y T_W no varían con el tiempo en el intervalo de t hasta $t + \Delta t$, esta suposición se puede evaluar mediante la siguiente ecuación:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [fT_P + (1 - f)T_P^0] \Delta t \quad (6.31)$$

Finalmente reordenando la ecuación 6.31, tomando en cuenta que T_P , T_E y T_W son los nuevos valores de temperatura al tiempo $t + \Delta t$, se tiene el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} a_P T_P = a_E [fT_E + (1 - f)T_E^0] + a_W [fT_W + (1 - f)T_W^0] \\ + [a_P^0 - (1 - f)a_E - (1 - f)a_W] T_P^0 \end{aligned} \quad (6.32)$$

donde

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_e}, \quad (6.33a)$$

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_w}, \quad (6.33b)$$

$$a_P = f(a_W + a_E) + a_P^0, \quad (6.33c)$$

$$a_P^0 = \frac{\rho C_p \Delta x}{\Delta x} \quad (6.33d)$$

La ecuación 6.32 es la ecuación discretizada, la cual debe ser extrapolada para cada nodo, cada coordenada y cada ecuación de conservación del problema a resolver. El sistema resultante son ecuaciones algebraicas lineales para coordenada y para cada ecuación de gobierno (continuidad, cantidad de movimiento, energía, turbulencia, especies, entre otras), las cuales pueden ser resueltas por una amplia variedad de métodos; con el objetivo de obtener la distribución de una propiedad para cada nodo.

6.3.2 CÓDIGO CFD OPENFOAM

El código CFD OpenFOAM emplea dos técnicas para el análisis numérico: Método de elemento finito (**FEM**) para análisis estructurales y método de volumen finito (**FVM**) para flujo de fluidos. Este código es un código libre con librerías orientadas a objetos para simulación numérica en mecánica continua en un lenguaje C^{++} , el cual permite una amplia versatilidad en sintaxis y modelos físicos apropiados para la correcta descripción de fenómenos.

Se emplea la información expuesta por Weller et al. [25] relacionada con las librerías de orientación de objetos.

Este código CFD OpenFOAM permite la representación de las ecuaciones diferenciales parciales en un lenguaje natural. La ecuación 6.34 representa la ecuación de

continuidad mientras que en la Figura:6.23 se representa la ecuación de continuidad en lenguaje C^{++} representado por el código CFD OpenFOAM.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot U) = S_{con}. \quad (6.34)$$

```
32 {
33   fvScalarMatrix rhoEqn
34   (
35     fvm::ddt(rho)
36     + fvc::div(phi)
37     ==
38     parcels.Srho(rho)
39     + fvOptions(rho)
40   );
41 }
```

Figura 6.23: Código empleado en la resolución de la continuidad para la densidad.

Este lenguaje permite una naturalidad para la escritura de las ecuaciones de gobierno.

En la sección 2.5.2 se describieron las ecuaciones que se resuelven mediante el solucionador (solver) `sprayFoam` para las ecuaciones de la fase continua y la fase dispersa. El solucionador `sprayFoam` acopla el modelado de las partículas lagrangianas y la solución del flujo de gas. Los términos fuente de las ecuaciones de conservación debido a la interacción del chorro son tratados explícitamente y se acoplan con las variables del gas ambiental (velocidad, temperatura, presión, entre otras) [26].

Esquema de discretización

Discretización: Aproximación de un problema en cantidades discretas.

Los métodos numéricos tales como el FVM, FEM y diferencias finitas todos discretizan un problema de la siguiente manera:

Discretización espacial (malla)

Define el dominio de solución mediante una serie de puntos que unen y llenan una región de espacio cuando se conectan, estos elementos no se sobrepone o traslapan entre ellos, este dominio es llamado *malla*. El código CFD OpenFOAM implementa un manejo de malla poliédrica, en donde una celda esta descrita como una lista de caras contiguas que cerradas crea un volumen. Las variables dependientes y otras propiedades son principalmente almacenadas en el centro de la celda \mathbf{P} . La celda está limitada por una serie de caras planas las cuales pueden ser de dos tipos:

- Caras internas: Aquellas caras que conectan dos celdas. Para cada cara interna el código asigna una celda adyacente para ser la celda principal y la otra celda vecina.
- Caras frontera: Celda que coincide con el valor de la frontera. Estas celdas están agrupadas en parches (*patches*) para simplificar la especificación de la condición de frontera.

El código crea una dominio llamado *polyMesh*, debido a que está basado en poliedros, este dominio se crea usando el mínimo de información necesaria para definir la malla:

1. Puntos: Vectores coordenados para cada vértice de la celda computacional.
2. Cara: Una lista de todas las celdas definida como una lista de vértices.
3. Bloques: Define el tipo de celda y la cantidad de celdas en cada dirección. Estos bloques se les asigna la clasificación del elemento.

4. Frontera: Las fronteras se descomponen en parches. La frontera se subdivide de esta manera a modo de permitir que diferentes condiciones de frontera sean especificadas durante la solución del problema.

En el caso particular del chorro diesel el dominio computacional se trata de una malla completa 3D donde se desarrolla la cámara de combustión interna. En la Figura: 6.24 se presenta el código empleado para el desarrollo del dominio.

```
16
17 convertToMeters 0.001; // Las coordenadas son multiplicadas para tener
18                          // el dominio definido en mm. Factor de escala.
19
20 vertices                  // Vectores coordenados para cada vértice. El inyector se
21 (                          // encuentra en el centro del dominio
22     (-10 0 -10)
23     (-10 0 10)
24     (10 0 10)
25     (10 0 -10)
26     (-10 80 -10)
27     (-10 80 10)
28     (10 80 10)
29     (10 80 -10)
30 );
31
32 blocks
33 (
34     hex (0 1 2 3 4 5 6 7) // Identifica y nombre la forma del bloque
35     (41 41 200) // Número de celdas en cada dirección
36     simpleGrading (1 1 0.5) // Razón de expansión de celdas
37 );
38
```

Figura 6.24: Representación de la geometría en el código CFD OpenFOAM.

Este dominio cuenta con una razón de expansión (`simpleGrading`) que permite que la malla sea más refinada en la dirección axial conforme se desarrolla la penetración del chorro dentro del dominio. Esta razón permite que el ancho de las celdas a lo largo de los bordes disminuya de un mallado simple a hasta la mitad de éste, puesto que el error decrece con el tamaño de la celda.

La tobera de estudio descrita en la sección 6.2.1 se encuentra posicionada en el centro del dominio, el cual tiene una dimensión de $20 \times 20 \times 80$. En la Figura: 6.25 se muestra la técnica del refinamiento de malla y el dominio computacional junto con el nombre de los bloques y los vértices que lo componen para formar la geometría donde se lleva a cabo la simulación del chorro (ver Figura: 6.26)

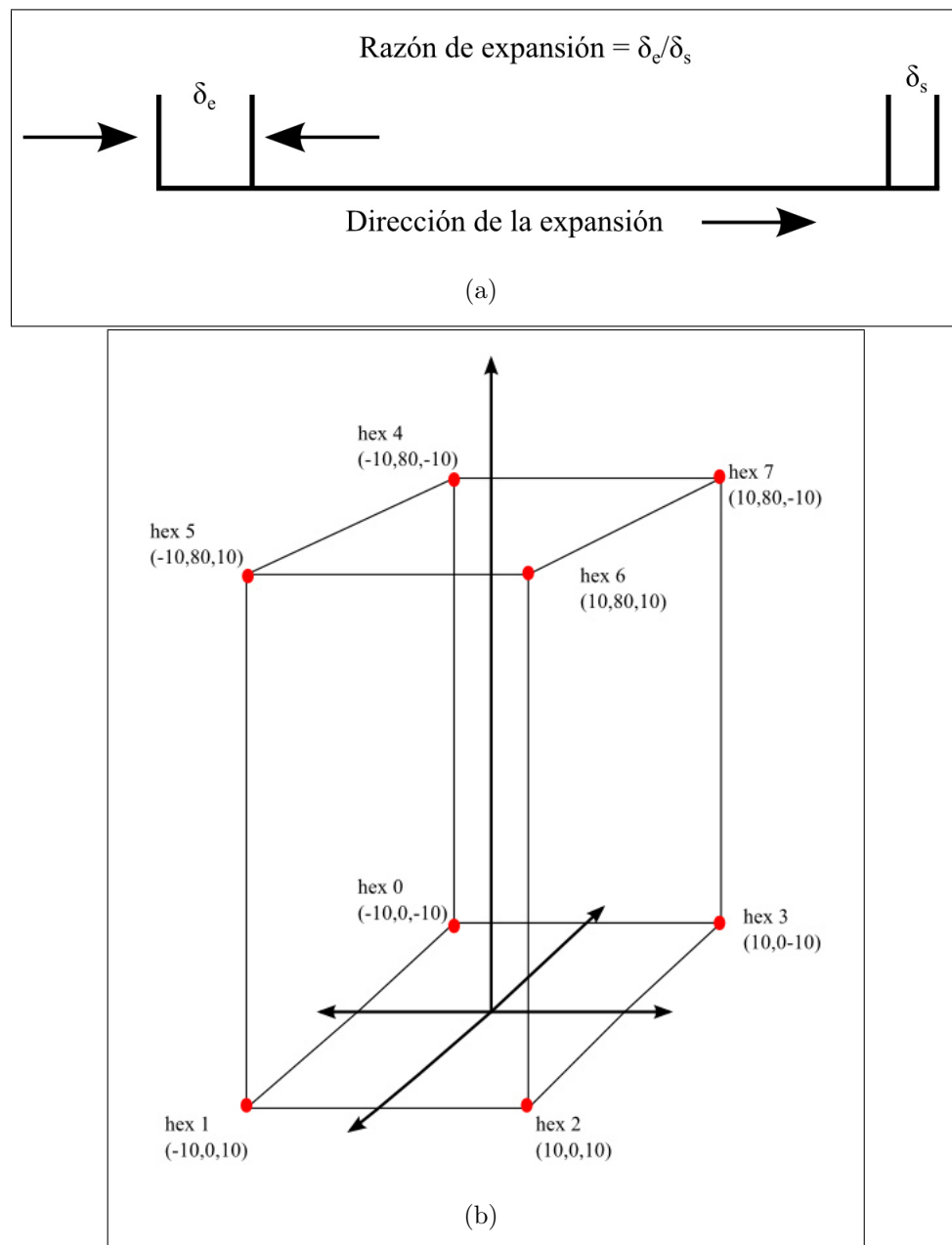


Figura 6.25: (a) Refinamiento de la malla a lo largo del borde del bloque (b) Vértices del dominio computacional

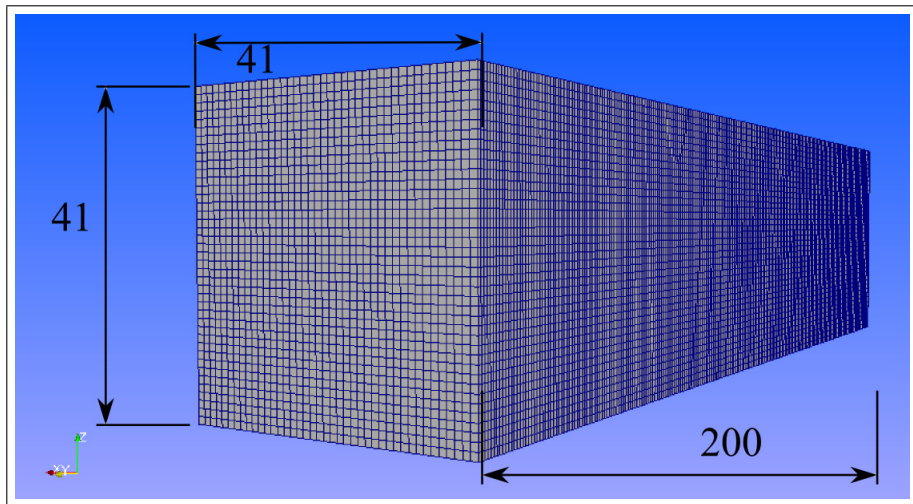


Figura 6.26: Dominio computacional. Malla completa y celdas computacionales.

La discretización de volúmenes finitos emplea información específica que procede de la geometría de la malla y se almacena en el archivo `polyMesh`. Por lo tanto, el código CFD OpenFOAM extiende el archivo `polyMesh` a una malla de volúmenes finitos en la cual se almacena la información adicional necesaria para la discretización de volúmenes finitos. La malla de volúmenes finitos (`fvMesh`) se construye a partir del `polyMesh` y almacena la información para que esta puede ser actualizada durante el tiempo corriente en caso de la que malla sea dinámica.

El código CFD OpenFOAM define una plantilla en la cual se separa la información del dominio, los centros de las celdas y las condiciones de frontera. El campo `geometricField` almacena la información relacionada con el centro de las celdas (`volField`), el centro de las caras de cada celda (`surfaceField`), los fluxes de movimiento de cada celda (`surfaceScalarField`), entre otros.

Condiciones de frontera e iniciales

- Condiciones de frontera :

Una vez generada la malla se dan de alta los campos iniciales. En este caso la información se inicia a tiempo $t = 0$, por lo tanto la información inicial se encuentra almacenada en el subdirectorio cero. El subdirectorio cero contiene 8 archivos relevantes; la contrapresión (p), la temperatura del gas (T), la velocidad (U), la fracción de nitrógeno (N_2) y oxígeno para el caso de emplear aire (air):

Discretización de las ecuaciones

A continuación se describe la forma de resolución de las ecuaciones de gobierno empujando la información almacenada en la plantilla **fvMesh**.

Como se menciona anteriormente la discretización de ecuaciones convierte ecuaciones diferenciales parciales en un grupo de ecuaciones algebraicas incluyendo el término temporal, el cual puede ser discretizado de una forma implícita mediante diferencias finitas los cuales se expresan en forma de una matriz de la siguiente forma:

$$[A][x] = [b] \quad (6.35)$$

donde $[A]$ es la matriz cuadrada, $[x]$ es la columna vector de variables dependientes y $[b]$ es el vector fuente; estos últimos son una lista de valores definida en ubicaciones en la geometría usados en la discretización de volúmenes finitos, mientras que $[A]$ es una lista de coeficientes de ecuaciones algebraicas y no pueden ser descritas por el campo **geometricField**. Por lo tanto, define su propia clase como una **fvMatrix**, una matriz de volúmenes finitos creado a partir de la discretización del dominio, matriz que puede soportar las operaciones comunes con matrices.

El código CFD OpenFOAM emplea su lenguaje particular para la descripción de cada término en una ecuación diferencial parcial y utiliza sus funciones particulares: **fvm** (**finiteVolumeMethod**) y **fvc** (**finiteVolumeCalculus**) ambas clases de funciones contienen funciones estáticas que representan un operador diferencial tales como ∇^2 , $\nabla \cdot$ y $\partial/\partial t$ que se discretiza en el dominio. El propósito de definir estas dos clases **fvm** y

`fv` es el de distinguir:

- `fvm` calcula derivadas implícitas que necesitan ser iteradas y regresa una matriz de volúmenes finitos `fvMatrix` la cual puede ser resuelta mediante el avance de la variable dependiente cada paso de tiempo.
- `fv` calcula derivas explícitas para información predeterminada y regresa un campo tensorial geométrico y corresponde directamente a operadores tensorial diferencial.

Como ya se menciona en la sección anterior el esquema de discretización de los volúmenes finitos es formulado mediante la integración de las ecuaciones de gobierno sobre el volumen de una celda, usando el teorema de la divergencia de Gauss es posible convertir las integrales de volumen en integrales de superficie. Estas integrales de volumen y superficie son linearizadas empleando esquemas apropiados de linearización.

Dichos esquemas se encuentran mencionados en el archivo `fvSchemes` ubicado en el fichero del sistema, en el cual se encuentran los esquemas para la discretización temporal (`ddtSchemes`), convectivo (`divSchemes`), difusivo (`laplacianSchemes`) y esquema de interpolación (`interpolationSchemes`). Finalmente todos los términos implícitos van en la matriz y todos los términos explícitos contribuyen al vector fuente.

A continuación se describen los esquemas empleados para la discretización de las ecuaciones de gobierno.

Término difusivo (Laplacian term)

El término Laplaciano es integrado sobre un volumen de control y linealizado empleando diferencias centrales puesto que se hace la suposición de una distribución lineal de la propiedad entre los puntos de la malla.

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV = \int_S dS \cdot (\Gamma \nabla \phi) = \sum_f \Gamma_f S_f \cdot (\nabla \phi)_f \quad (6.36)$$

En nuestro caso particular contamos con una malla homogénea, en donde la distancia de los nodos es la misma en todo el dominio, lo que permite que la discretización sea implícita, ya que la distancia del vector $\mathbf{d}(\Delta x_i)$ entre el centro de la celda de interés P y el centro de la celda vecina N es ortogonal a la cara del plano y paralela a la superficie, permitiendo aplicar el criterio de la ortogonalidad y ajustar la distribución a una línea recta.

$$S_f \cdot (\nabla \phi)_f = |S_f| \frac{\phi_N - \phi_P}{d} \quad (6.37)$$

La ecuación 6.37 es la discretización del término difusivo mediante diferencias centrales o discretización lineal ortogonal de Gauss (**Gauss linear orthogonal**).

$$\text{laplacian}(\text{muEff}, U) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) \quad (6.38)$$

En el código CFD OpenFOAM el término difusivo se encuentra representado de manera implícita mediante la siguiente interpretación:

`fvm::laplacian(muEff,U), Gauss linear orthogonal`

donde `fvm` devuelve la matriz de volúmenes finitos para el término difusivo del esfuerzo cortante, linealizado mediante diferencias centrales o **Gauss linear orthogonal**.

Término convectivo(Convection term)

El término convectivo es integrado sobre un volumen de control y linealizado de la siguiente forma:

$$\int_V \nabla \cdot (\rho U \phi) dV = \int_S dS \cdot (\rho U \phi) = \sum_f S_f \cdot (\rho U)_f \phi_f = \sum_f F \phi_f \quad (6.39)$$

Un chorro tipo jet, como un chorro diesel es un caso particular donde la convección es el fenómeno dominante, debido a la intensa mezcla inducida por las burbujas que dejan la superficie y la energía absorbida en el cambio de fase, además de la alta velocidad del chorro inducida por la presión de inyección, puesto que la velocidad de

un chorro ronda aproximadamente los 400 a 500 m/s haciendo que el efecto difusivo sea menor en magnitud que el efecto convectivo [27].

En base a esta premisa es posible seleccionar el método de linealización para linealizar el término difusivo en las ecuaciones diferenciales parciales, el cual es posible encontrarlo escrito de la siguiente forma en el código:

$$\text{div}(\text{phi}, \text{U}) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = \nabla \cdot \rho \bar{u}u \quad (6.40)$$

La ecuación 6.40 es la interpretación del término convectivo empleado en la ecuación de cantidad de movimiento, la cual está interpretada de la siguiente manera:

`fvm::div(phi,U), Gauss upwind`

donde `fvm` devuelve la matriz de volúmenes finitos para el término convectivo, linealizado mediante el método `Upwind`.

Esté método se empleo por dos razones:

1. Su bajo coste en tiempo computacional puesto que el valor de la propiedad en el nodo en la superficie del volumen de control es igual al valor que dicha propiedad tiene en el nodo que se encuentra aguas arribas.
2. El método `Upwind` es acertado cuando los valores de fuerza entre la razón de la convección y la difusión son muy elevados. Bottone et al. [28] anuncian el uso del método `upwind`, puesto que las propiedades escalares varían lentamente en el espacio físico, tema que se enlaza con el aumento en la velocidad. Este mismo esquema fue empleado por Sazhin et al. [29] puesto que su problema de estudio demuestra razón entre la convección y la difusión muy elevados.

Esta razón de convección-difusión es conocida como el número de Peclet (Pe), el cual es producto entre el número de Reynolds (Re), el número de Schmidt (Sc) para el caso de la transferencia de masa y el número de Prandtl (Pr) para el caso de fluidos térmicos.

$$Pe = \frac{\text{Convección}}{\text{Difusión}}, \quad (6.41a)$$

$$Pe = ReSc, \quad \text{Transferencia de masa} \quad (6.41b)$$

$$Pe = \frac{uL}{D}, \quad (6.41c)$$

$$Pe = RePr, \quad \text{Fluidos térmicos} \quad (6.41d)$$

$$Pe = \frac{uL}{\alpha} \quad (6.41e)$$

Sazhin et al. reporta valores de $Pe > 500$ lo que justifica que para chorros diesel es posible emplear el método de linealización upwind, el cual se ajusta a la solución exacta para valores muy elevados de Pe como se puede observar en la Figura: 6.27 donde se exhiben los valores del nodo de interés para diversos esquemas de interpolación en función del número de Pe .

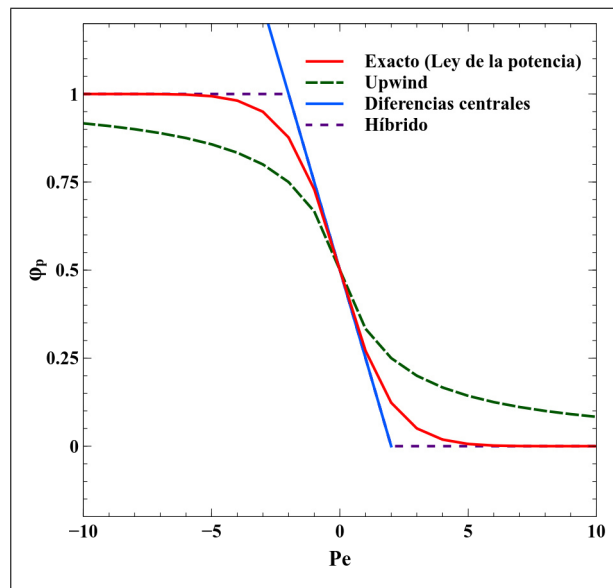


Figura 6.27: Predicción de ϕ_p para los diversos tipos de esquemas en un rango de números de Peclet.

Divergencia

El término de divergencia descrito a continuación es estrictamente un término implícito, lo que implica que no será almacenado en una matriz de volúmenes finitos en su defecto formará parte de la matriz del término fuente y debe ser diferenciado del término convectivo descrito anteriormente el cual es la divergencia del producto de un flux y una variable dependiente. El término es integrado sobre un volumen de control y linealizado de la siguiente forma:

$$\int_V \nabla \cdot (\phi) dV = \int_S dS \cdot (\phi) = \sum_f S_f \cdot \phi_f \quad (6.42)$$

Un ejemplo de la divergencia puede ser encontrada en el código de la siguiente forma:

$$\text{div}(\text{phi}) = \rho \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i) = \rho \nabla \cdot \bar{u} \quad (6.43)$$

En la ecuación 6.43 se muestra la interpretación de la divergencia del producto de la densidad y la velocidad usado en la ecuación de continuidad, término que se interpreta para su discretización de la siguiente manera:

`fvc::div(U), Gauss linear`

donde `fvc::div` es un término que devuelve la matriz de resultados del término fuente, el cual es interpolado mediante diferencias centrales.

Término temporal

La primera derivada temporal $\partial/\partial t$ es integrada sobre un volumen de control, suponiendo que el cambio de la propiedad dentro del volumen de control es uniforme y no existe variación, por lo tanto la integración sería de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho\phi) dV \quad (6.44)$$

Como se comentó anteriormente el tiempo es una coordenada parabólica de "marcha

hacia adelante” donde $t^0 > t^n$, en base a esta suposición es posible determinar un sistema de discretización que emplee los valores futuros de la propiedad en el paso de tiempo corriente. Este método es conocido como método implícito en el cual existen dos incógnitas adicionales al nodo de interés; los valores de los nodos vecinos aguas arribas y aguas abajo, por lo tanto es necesario definir un sistema de ecuaciones algebraicas como tantos nodos existan lo que convierte a este método implícito más costoso pero más estable y con mejores resultados.

El código CFD OpenFOAM solo maneja esquemas implícitos por su estabilidad en el cual la ecuación 6.44 será discretizada de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho\phi) dV = \frac{(\rho_P\phi_P V)^n - (\rho_P\phi_P V)^0}{\Delta t} \quad (6.45)$$

En la ecuación 6.45 se muestra la interpretación del término temporal usado en las ecuaciones de conservación, término que se interpreta para su discretización de la siguiente manera:

`fvm::ddt(rho, U), Euler`

donde `fvm::ddt` devuelve la matriz de volúmenes finitos, el cual es discretizado empleando el esquema de Euler el cual es un esquema implícito iterativo.

Algoritmo para la corrección de la presión, velocidad y energía

Entre los numerosos algoritmos para la corrección de las variables de interés de las ecuaciones de gobierno, el empleado por el código CFD OpenFOAM es el algoritmo llamado PIMPLE, el cual resulta en una combinación del método SIMPLE y el PISO. El algoritmo SIMPLE por sus siglas en ingles Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations [24], es usado para la resolución de problemas en estado permanente donde el tratamiento de los efectos no lineales de los término convectivos durante la resolución tienen mayor peso que la determinación precisa del campo de presión, puesto que no existe otra ecuación de transporte, a parte de las ecuaciones

de cantidad de movimiento, donde intervenga el efecto de la presión. Con objeto de resolver este dilema es necesario el uso de valores supuestos de presión y velocidad, seguidamente se resuelven las ecuaciones discretizadas, la ecuación para la corrección de la presión, se corrigen las velocidades y presiones y se evalúa la convergencia. Por el otro lado el algoritmo PISO, por sus siglas en inglés Pressure Implicit with Splitting of Operators, es empleado para simulaciones transitorias de flujos compresibles donde es necesario resolver un acoplamiento de la velocidad y la presión para cada paso de tiempo. Los efectos relacionados con la no linealidad de las ecuaciones de velocidad son reducidos mediante el establecimiento de pequeños pasos de tiempo caracterizado por números de Courant menores a uno.

$$Co = \frac{U_f \delta t}{\delta x} \ll 1 \quad (6.46)$$

El número de Courant es una buena medida de la precisión de un término temporal de primer orden, donde U_f es la velocidad característica, a través de la celda, δt es el paso de tiempo y δx es el tamaño de la celda.

Este algoritmo es resuelto mediante un paso predictivo que consiste en la suposición de un campo de presión intermedia para obtener componente de velocidad empleando el algoritmo SIMPLE, seguidamente entre el primer campo corrector que no permitirá que la ecuación de continuidad sea satisfecha a menos que el campo de presión sea correcto lo que genera nuevos campos de velocidad que satisfagan la ecuación discreta de la continuidad, finalmente se realiza un segundo paso corrector que discretiza las nuevas ecuaciones de cantidad de movimiento obtenidas en el paso anterior [23].

En casos compresibles temporales el error debido a los efectos no lineales de la velocidad son más importantes debido a la compresibilidad, por lo tanto la ecuación de cantidad de movimiento es necesario que se localice fuera de otro bucle llamado PIMPLE haciendo que la cantidad de movimiento sea recalculada tantas veces el número de las iteraciones en el bucle. La ecuación de la energía puede ser ubicada

en el bucle PIMPLE o en el bucle PISO; esto debido a que si una propiedad termodinámica varía rápidamente en el tiempo la ecuación de la energía debe ser ubicada dentro del bucle PISO a modo de mejorar el acoplamiento presión-temperatura [30]. En la Figura: 6.28 se presenta el esquema del algoritmo de resolución PIMPLE, en la cual se introduce el calculo de la ecuación de la energía en el bucle PISO en caso de que las propiedades cambien drásticamente con el tiempo.

Como se comenta anteriormente la ecuación de cantidad de movimiento contiene el gradiente de presión, sin embargo el código modifica la ecuación con el objetivo de facilitar el cálculo y poder resolver una función explícita.

Finalmente la presión es calculada de manera individual mediante la ecuación de Poisson para la presión dinámica y usa esta presión dinámica para el cálculo de la densidad, mediante el bucle PIMPLE en el fichero `pEqn.H`.

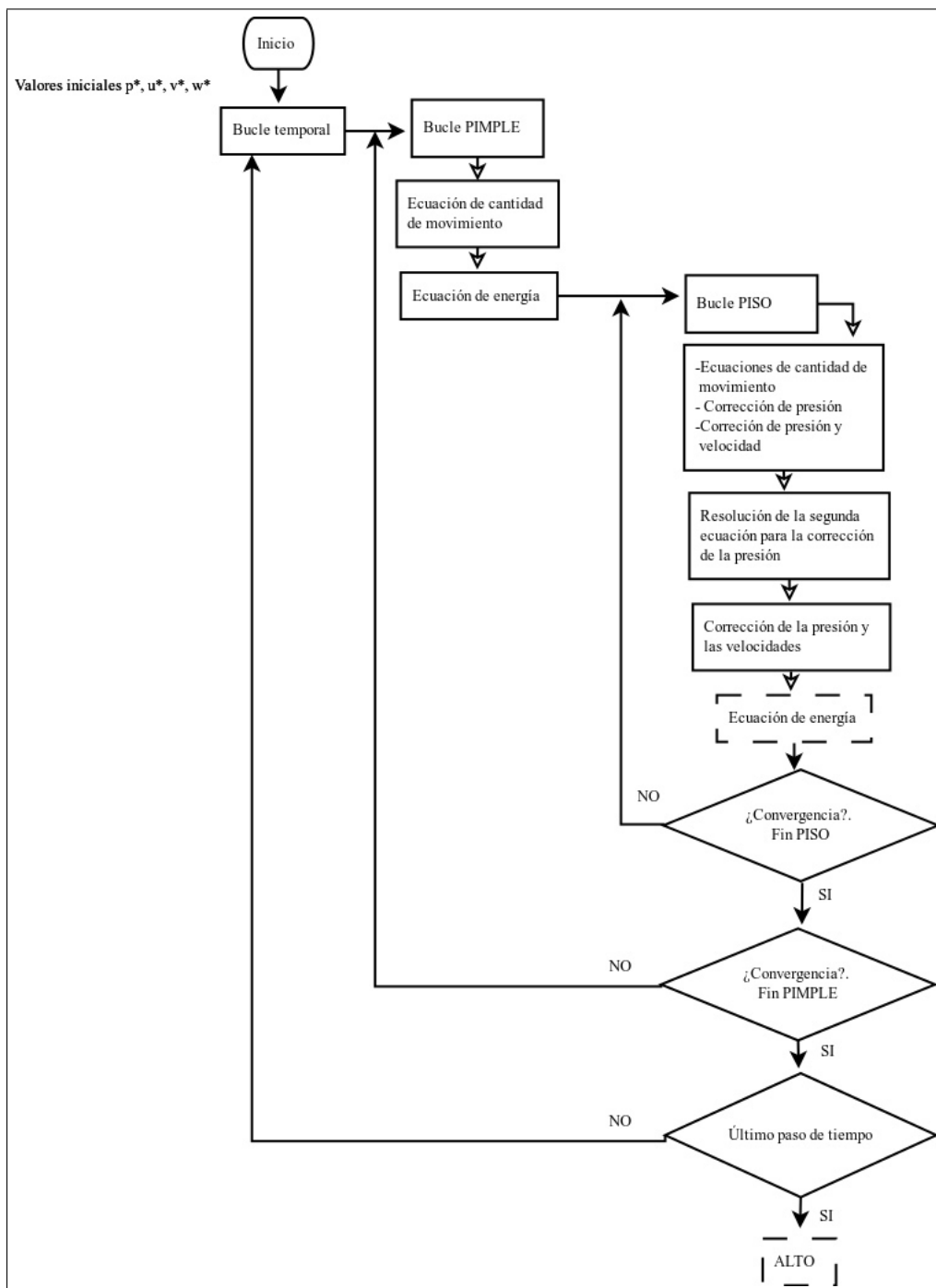


Figura 6.28: Algoritmo PIMPLE

Solución de ecuaciones discretas

Los algoritmos de solución y tolerancias son controlados mediante el fichero `fvSolution`, este fichero es una serie de sub-diccionarios en el que se incluyen los solucionadores, factores de relajación y el algoritmo para la corrección de la presión y las velocidades.

El sub-directorio manda llamar la primera aplicación: `solver` aplicación en la que especifica el método de solución de ecuaciones lineales que es empleado para resolver las ecuaciones discretizadas. Éste hace referencia al método de solución de matriz por eliminación. Cada variable de interés es resuelta mediante un diccionario específico, el cual contiene el tipo de solucionador (`solver`) y los parámetros que dicho solucionador usa.

`solver rho PCG`

donde `rho` representa la variable de interés en este caso la continuidad, `solver` el tipo de solucionador empleado el cual para la densidad se emplea `PCG` solucionador de gradiente conjugado pre-condicionado; este método es muy versátil, puesto que en la mayoría de las aplicaciones reales las matrices no están en buenas condiciones o son muy grandes reduciendo así la eficiencia del algoritmo. La idea de resolución de este método consiste en resolver la matriz $[A][x] = [b]$ a partir de un cambio de variable $[\tilde{A}][\tilde{x}] = [\tilde{b}]$ para el cual \tilde{A} es elegido de tal modo que sea un número condicionado cercano a la unidad [31].

Este cambio de variable es conocido como pre-condicionador, el cual asegura que la convergencia para el sistema sea más rápida, esta variable guía una rápida propagación de información a través de la malla computacional. El código distingue entre matrices simétricas (matriz cuadrada que es igual a su transpuesta) y asimétricas (matriz cuadrada cuya transpuesta es igual a su negativa) las cuales dependen de la estructura de la ecuación a resolver. En la Figura: 6.29 se presenta el solucionador para cada variable junto con su preconditionador empleado el cual permite reducir el número de iteraciones al igual que los solucionadores lineales estos seleccionan el tipo de matriz simétrica o asimétrica.

```

1 solvers
2 {
3   rho // Matriz simétrica
4   {
5     solver          PCG; // Preconditioned conjugated gradient
6     preconditioner  DIC; // Diagonal incomplete Cholesky
7
8 // El solucionador se detiene si alguna de las siguientes condiciones es
9 // alcanzada:
10
11    tolerance        1e-05; // Si el residual cae por debajo de la tolerancia
12                      // del solucionador
13
14    relTol           0.1; // Si la razón del residual actual y el inicial cae por debajo
15                      // de la tolerancia relativa del solucionador
16  }
17
18  "(U|h)" // Matriz asimétrica
19  {
20    solver           PBiCG; // Preconditioned bi-conjugated gradient
21    preconditioner  DILU; // Diagonal incomplete-LU
22    tolerance        1e-05;
23    relTol           0.1;
24  }
25

```

Figura 6.29: Fichero fvSolution para la densidad, la velocidad y la energía total.

Preparación del código y generación del solver

El código CFD OpenFOAM, cuenta con un tutorial para la simulación del chorro diesel en la siguiente dirección:

`run/tutorials/lagrangian/sprayFoam/aachenBomb`

En esta dirección se encuentra la simulación de un chorro, evaporativo y reactivo de heptano, sin embargo el caso de estudio de este trabajo es enfocado en un chorro de diesel y diversos biocombustibles, por lo tanto es necesario la modificación de las condiciones de operación, la generación de una librería para el biodiesel y la generación de un nuevo solver para crear dependencia hacia la nueva librería.

Los comandos empleados para la generación del nuevo solver, la dependencia hacia la nueva librería y la implementación de ésta se encuentran correctamente identificados.

- Copiar el solver al directorio de trabajo en la carpeta `applications` creada con anterioridad.

```
cp -r$FOAM_SOLVERS/lagrangian/sprayFoam $WM_PROJECT_USER_DIR
/applications/solvers/my_sprayFoam
```

- Renombrar el solver `sprayFoam` como `my_sprayFoam`:

```
cp $WM_PROJECT_USER_DIR/applications/solvers/my_sprayFoam/Make
```

- En el archivo de compilación `Make/files` se cambia a modo que se lea lo siguiente:

```
my_sprayFoam.C
EXE = $(FOAM_USER_APPBIN)/my_sprayFoam
```

De la misma manera se cambia el archivo `Make/options` de la línea 13 de la siguiente manera, a modo de generar dependencia de este solver a la nueva librería generada para el biodiesel:

```
-I$(WM_PROJECT_USER_DIR)/applications/myliquidProperties/
liquidProperties/lnInclude
```

Este archivo en la línea 13 anteriormente contenía la dependencia a la librería original del solver `sprayFoam`:

```
-I$(LIB_SRC)/thermophysicalModels/properties/liquidProperties/lnInclude
```

- Se copian los archivos empleados para la resolución de las ecuaciones de continuidad (`rhoEqn.H`), cantidad de movimiento (`UEqn.H`), energía (`EEqn.H`), conservación de especies (`YEqn.H`) y presión (`PEqn.H`).
- Finalmente se pasa a la compilación del nuevo solver mediante los siguientes comandos:

```
cp $WM_PROJECT_USER_DIR/applications/solvers/my_sprayFoam
wclean
rm -r Make
wmake
```

Con esto se compila el nuevo solver y se genera la dependencia a la nueva librería para el biodiesel, por lo tanto el archivo `my_sprayFoam.dep` debe de contener las siguientes líneas:

```
my_sprayFoam.dep : /home/root/OpenFOAM/root - 2.3.0/applications/
myliquidProperties/liquidProperties/lnInclude/liquidProperties.H

my_sprayFoam.dep : /home/root/OpenFOAM/root - 2.3.0/applications/
myliquidProperties/liquidProperties/lnInclude/liquidPropertiesI.H
```

Con esto se genera un nuevo solver para los casos donde se pretenda simular biodiesel o algún otro combustible.

- Finalmente para hacer llamar la nueva librería es necesario crear un nuevo caso del tutorial `aachenBomb` en el cual la carpeta de sistema en el fichero `controlDict` se anexa al final el siguiente comando:


```
libs  
(  
"libmyliquidProperties.so"  
);
```

Con esto aseguramos que el caso de estudio emplea la nueva librería y no entre en conflicto con la anterior.

6.4 SIMULACIÓN DE UN CHORRO DIESEL

A continuación se presentan las simulaciones de un chorro diesel para las mezclas propuestas en la sección 6.1.

6.4.1 SIMULACIÓN DEL CHORRO DIESEL PURO $B0$

Como se comentó anteriormente el chorro diesel fue simulado bajo las condiciones propuestas en la Tabla: 6.7 estas condiciones fueron recopiladas del trabajo expuesto por Gimeno et al. [10] en el cual se obtiene la información experimental necesaria para comprobar la penetración de un chorro diesel; y así de esta manera averiguar la robustez y las capacidades del código. En la Figura: 6.30 se muestra la evolución temporal de la penetración, información experimental que se empleará para validar la penetración del chorro simulado.

Post-procesado y penetración

A continuación se presenta la simulación del chorro, para la cual fue necesario la creación del *solver* previamente descrito que será el encargado de modificar cualquier tema relacionado con las propiedades de transporte, éste permite comprobar que tan

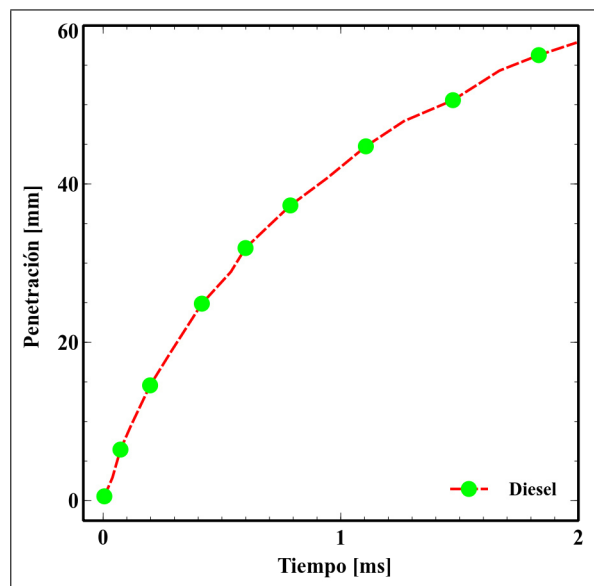


Figura 6.30: Penetración del chorro a una $P_{inj} = 80MPa$ y una contrapresión de $3.53 MPa$.

viable es el código para reproducir la penetración.

El post-procesador por si mismo no da la penetración contra el tiempo como información, por lo tanto para poder hacerse uso de esta información es necesario emplear comandos **bash** con el objetivo de extraer la información de la penetración calculada en la simulación, la cual se sobre-escribe en un fichero de información **log**.

En la Figura: 6.31 se muestra la información relevante de la penetración del chorro y de la formación de la nube escrita en el fichero **log**.

A continuación se presentan los comandos **bash** empleados para el post-procesado del archivo **log** ubicado en la carpeta de destino:

1. `ps -ef | grep "" log | more > time.txt`

El comando **grep** por si solo nos permite buscar y mostrar una línea con la palabra específica en este caso la palabra es **Time**, la cual se repite un n número de veces en el archivo por un n número de líneas, sin embargo por si solo el comando **grep** nos mostrara únicamente una fracción del archivo **log** lo que es

```

169 Cloud: sprayCloud
170 Current number of parcels = 5
171 Current mass in system = 3.41979e-10
172 Linear momentum = (-3.40643e-09 -8.77022e-08 -3.94066e-09)
173 |Linear momentum| = 8.78568e-08
174 Linear kinetic energy = 1.17824e-05
175 model1:
176 number of parcels added = 5
177 mass introduced = 3.41979e-10
178 Parcels absorbed into film = 0
179 New film detached parcels = 0
180 Parcel fate (number, mass)
181 - escape = 0, 0
182 - stick = 0, 0
183 Temperature min/max = 318.634, 319.806
184 Mass transfer phase change = 0
185 D10, D32, Dmax (mu) = 12.4764, 20.4055, 34.6195
186 Liquid penetration 95% mass (m) = 0.00218319

```

Figura 6.31: Penetración expuesta en el fichero log.

no es práctico, por lo tanto para poder acceder a toda la base de datos se usa el comando `more`, el cual nos muestra toda la información del fichero. Debido a que se maneja una cantidad enorme de información y líneas con la palabra `Time` y nos interesa únicamente la palabra al inicio de la línea, por lo tanto se agrega un acento circunflejo antes de la palabra para forzar a que muestre únicamente lo que se busca; de igual forma se aplica para la extracción de la penetración líquida, únicamente substituyendo la palabra `Time` por `Liquid penetration 95 % mass (m)`.

2. `awk '{ $3 = $3 * a; print $3 }' a = 1000 time.txt > time1.txt`

El comando `awk` se usa para manipular texto. Este comando comprueba cada línea de un archivo, buscando patrones que coincidan los datos en la línea de comando.

Si se tiene en este caso un archivo de texto con varias filas y columnas como es el caso de la penetración se tiene que usar el comando `awk` el cual se describe de la siguiente manera: `awk '{patrón + acción (en este caso la de imprimir la columna de interés, la 3)}'`, el nombre del fichero donde se encuentren las coincidencias obtenidas con el comando anterior con esto el `awk` extrae la información de coincidencia y finalmente con el comando `time1.txt` se manda a

escribir la información recabada en un fichero de ese nombre.

3. *paste time1.txt liquid1.txt | awk '{print\$1,\$2}' > LL.txt*

El comando *paste* indica que se va a pegar la información de cada archivo en uno solo para esto es necesario llamar en orden cada archivo siendo primero el archivo donde se escribió el tiempo (*time1.txt*) seguido del archivo de penetración (*liquid1.txt*) antes del comando *awk*, de manejo de datos y con la indicación de que imprima en la columna 1 la información del primer archivo y en la columna 2 la información del segundo archivo, finalmente se le indica que la información la transcriba en un fichero de nombre *LL.txt*. Con esto la información queda escrita y acomodada en un solo archivo. En la Figura: 6.32 se muestra por un lado la evolución temporal de la penetración experimental y modelada, y por el otro lado, el error estandar en torno al 4.48 %.

El error estándar es determinado mediante el uso de la desviación estándar dividido por la raíz cuadrado de la muestra.

$$\tilde{S} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \quad (6.47)$$

Cabe mencionar que los resultados obtenidos por la simulación tienen una representación cualitativa.

Empleando el nuevo solver se realizan la simulación pertinente para comprobar la disminución tanto de la penetración como de las propiedades de transporte, en la Figura: 6.33 es posible observar la variación de las propiedades de transporte para el sustituto de diesel, cabe mencionar que se usa como sustituto el tetradecano $C_{14}H_{30}$, compuesto empleado por su similitud en propiedades de transporte y termo-físicas [32], además se presentan los cambios en el campo de velocidad donde

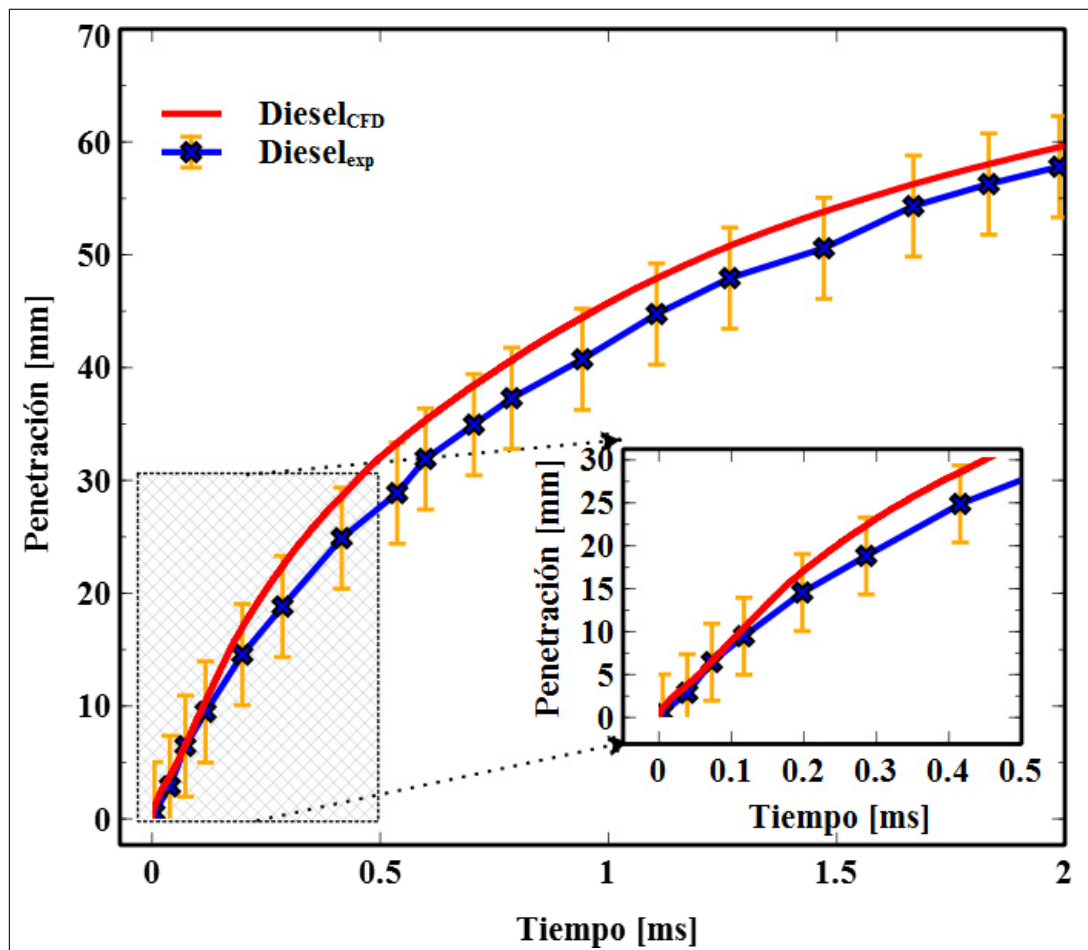


Figura 6.32: Evolución temporal de la penetración experimentada y modelada

es posible observar el comportamiento meramente convectivo del chorro por la alta velocidad, una de las razones por la cual el esquema de interpolación usado es el **upwind**, los campos de presión donde se exhibe la onda de impacto provocada por la inserción del chorro en una atmósfera estacionaria y la temperatura de la cámara la cual se ha mantenido constante para evitar evaporación del chorro.

En la Figura: 6.33 (b) se puede observar un incremento en la velocidad del gas circundante debido al aumento en la cantidad de movimiento proveniente de una gota de líquido con mayor viscosidad y un decremento en la temperatura del gas debido al incremento en la conductividad térmica.

Sin embargo la velocidad del gas no es constante a lo largo del chorro, puesto que inicialmente el chorro se mueve a una alta velocidad el cual empezara a perder cantidad de movimiento acelerando el flujo circundante estacionario. Debido a el arrastre del fluido que rodeo al chorro los gradientes de velocidad decrecen en magnitud en la dirección del flujo. Esto causa el descenso en la velocidad promedio del chorro central.

Este comportamiento se puede observar en la Figura: 6.34 en la cual se presenta la velocidad del chorro y la transferencia de cantidad de movimiento al fluido circundante, para la penetración de un diesel puro (B0).

La velocidad del chorro disminuye drásticamente conforme penetra en la cámara lo que provoca que este intercambie rápidamente cantidad de movimiento con el gas, sin embargo las gotas en la punta tendrán una velocidad inferior a la del chorro a la salida de la tobera hasta antes de 1 *ms*, puesto que este es el tiempo de inyección, tiempo al cual la velocidad del chorro a la salida se mantiene constante, finalizando este periodo, el chorro se desacelerada rápidamente.

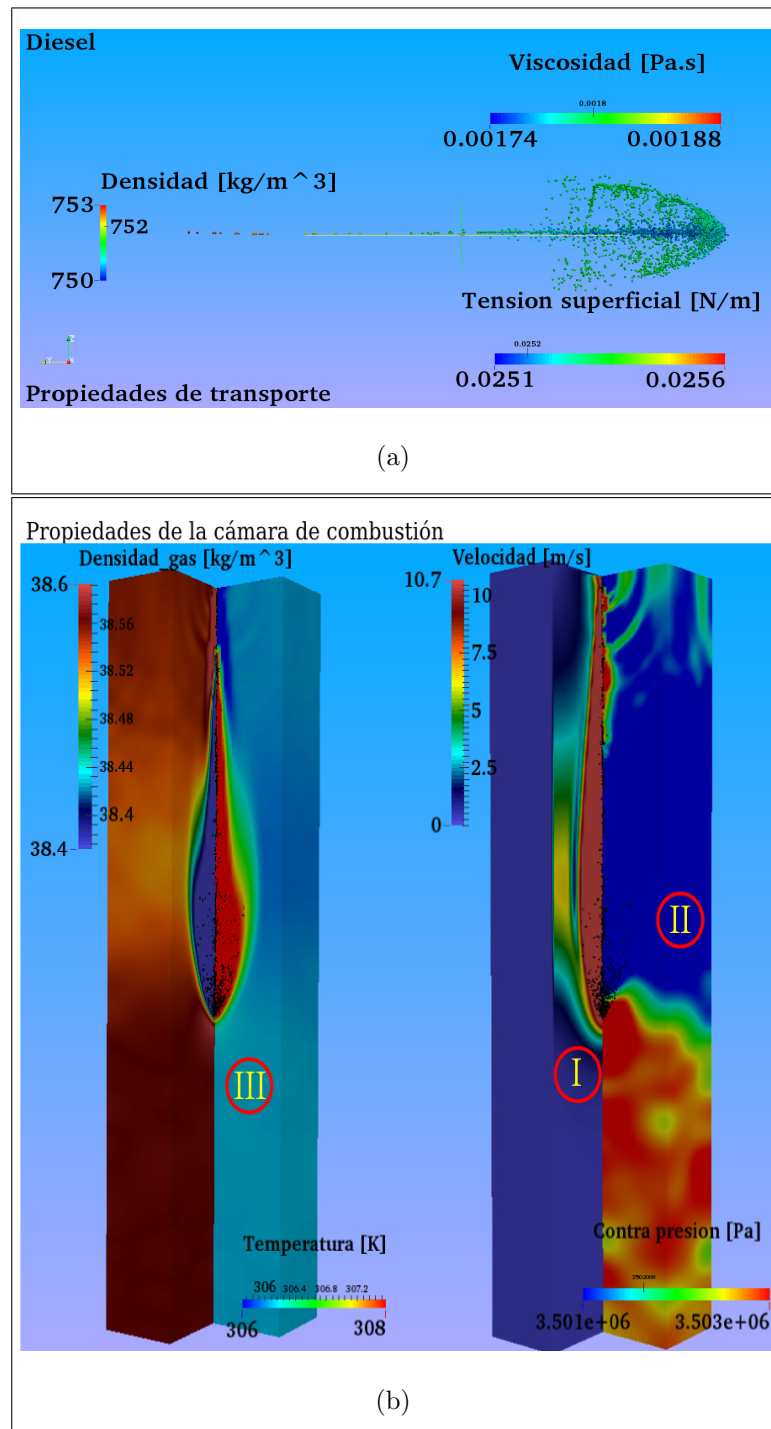


Figura 6.33: (a) Propiedades de transporte del diesel (b) Condiciones en la cámara de combustión. I contornos de velocidad, II campos de presión y III contornos de temperatura

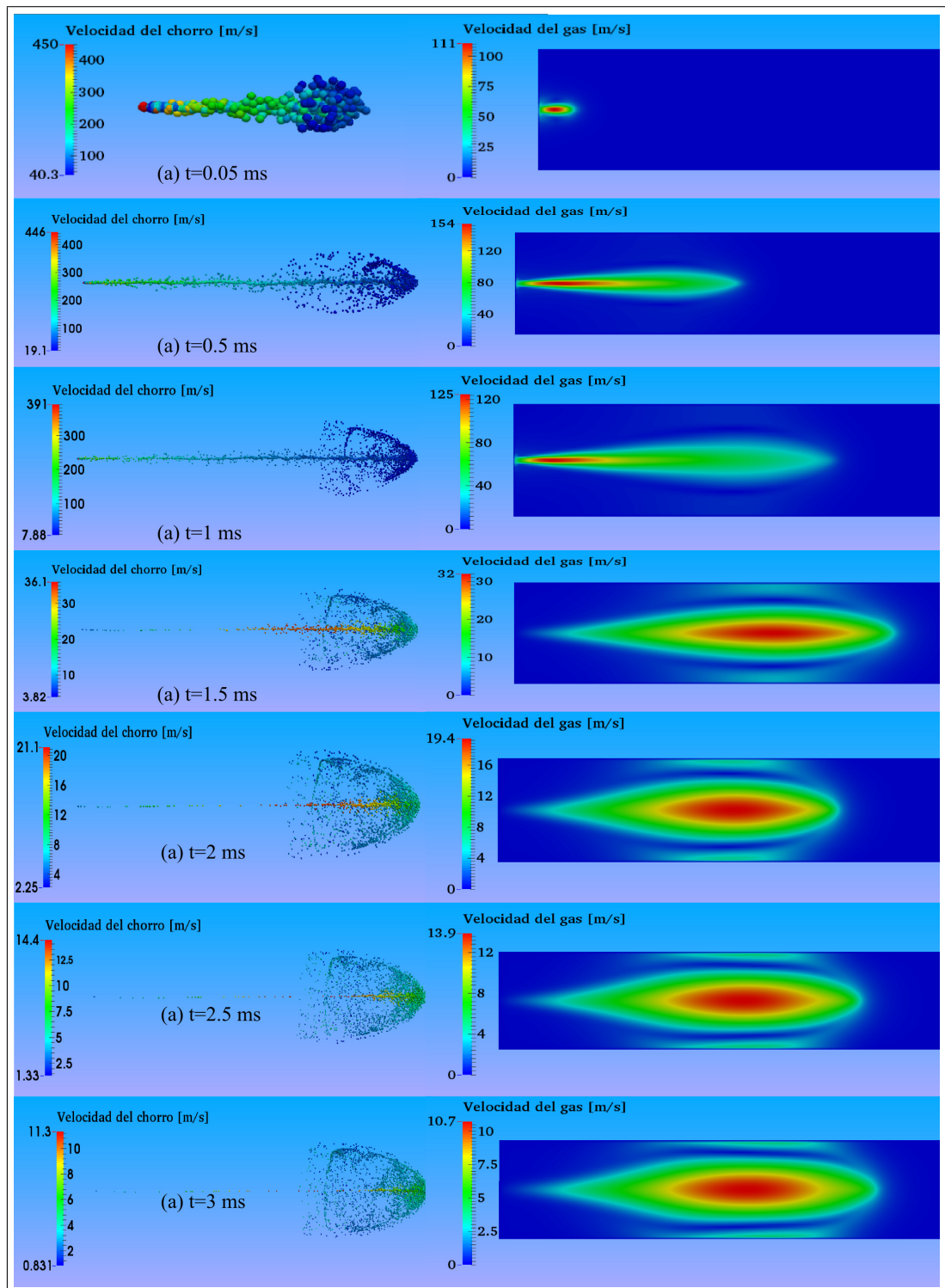


Figura 6.34: Velocidad del chorro y del gas circundante para el B0

6.4.2 SIMULACIÓN DEL CHORRO EMPLEANDO BIODIESEL PURO DERIVADO DE ACEITE USADO DE COCINA, *B100*

Empleando las condiciones de operación expuestas en la Tabla: 6.7 para la simulación del biodiesel puro (*B100*) es posible determinar la penetración del chorro; a partir de este punto se le dará el epíteto al biodiesel como *B100* al diesel puro *B0* y *B20* y *B50* a sus respectivas mezclas.

A diferencia de la penetración del chorro de diesel, que se gráfico en un rango entre 0 – 2 *ms*, la penetración del biodiesel se gráfica en un rango entre 0 – 3 *ms* con el objetivo de poder observar la zona de desarrollo de la nube del chorro con mayor claridad (ver Figura: 6.35).

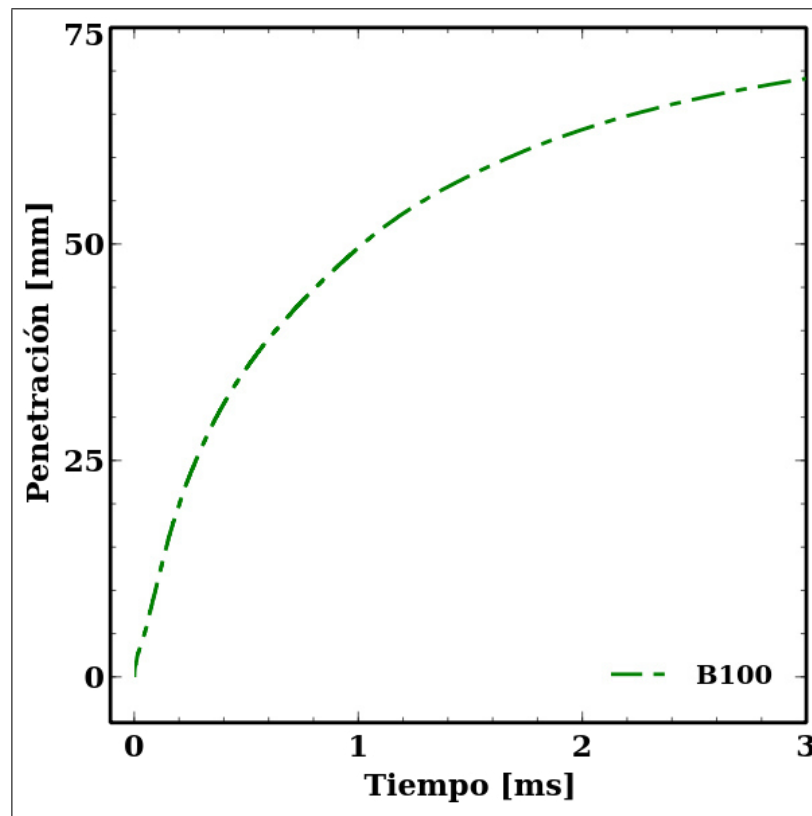


Figura 6.35: Evolución temporal del chorro para *B100*

Post-procesado y penetración

Cabe mencionar que el post-procesado de la penetración es determinado empleando los comandos `bash` para el manejo y manipulación de datos.

La gotas en el chorro de biodiesel al tener mayor viscosidad cuentan con mayor cantidad de movimiento, lo que contribuye en parte a un incremento en la penetración del chorro, además al tener mayor tensión superficial estas gotas presentan mayor esfuerzo a la desintegración ejercida por la presión dinámica de la cámara de combustión propiciado que tarden más tiempo en desintegrarse, y por consiguiente aumentando la penetración del chorro, finalmente la disminución en la presión de vapor debido a la ausencia de componentes volátiles es un factor que determina la rapidez de ebullición y posterior mezcla del chorro con el gas ambiental. Este aumento en la penetración del chorro conlleva a una mejor optimización en el aire de la cámara además el aumento en la presión de inyección conlleva a una mejor atomización debido a la reducción de los diámetros Sauter promedio.

En la Figura: 6.36 se muestra la comparativa entre la penetración del biodiesel puro ($B100$) y el diesel ($B0$) donde claramente es posible observar un aumento en la penetración del chorro este comportamiento es consistente con la literatura [8, 17, 9, 18]. Como se comentó en la sección 5.3.3 las propiedades de transporte y termo-físicas varían entre el biodiesel y el diesel, esta variación en aumento o disminución de algunas propiedades es el causante del aumento en la penetración del chorro, este aumento puede ser observado en la Figura: 6.37 donde se muestra el incremento en las propiedades de transporte y su correcta introducción en el código CFD OpenFOAM, además se muestra en la sub-figura (b) el aumento en las propiedades del gas dentro de la cámara de combustión para la velocidad, la presión y la temperatura.

De manera similar en la Figura: 6.38 se presenta la velocidad del chorro de biodiesel y los contornos de velocidad para el gas circundante donde se puede observar el claro aumento en la velocidad del chorro de biodiesel debida por el incremento en la presión de inyección, sin embargo el aumento en la densidad contrarresta este

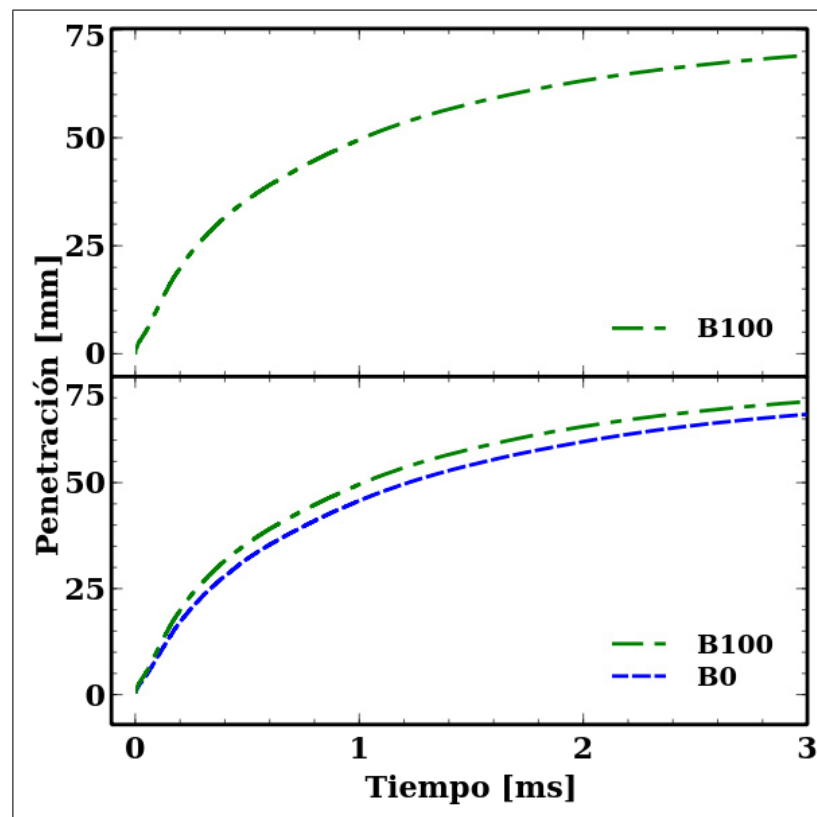


Figura 6.36: Evolución temporal del chorro para un *B100* y un *B0*

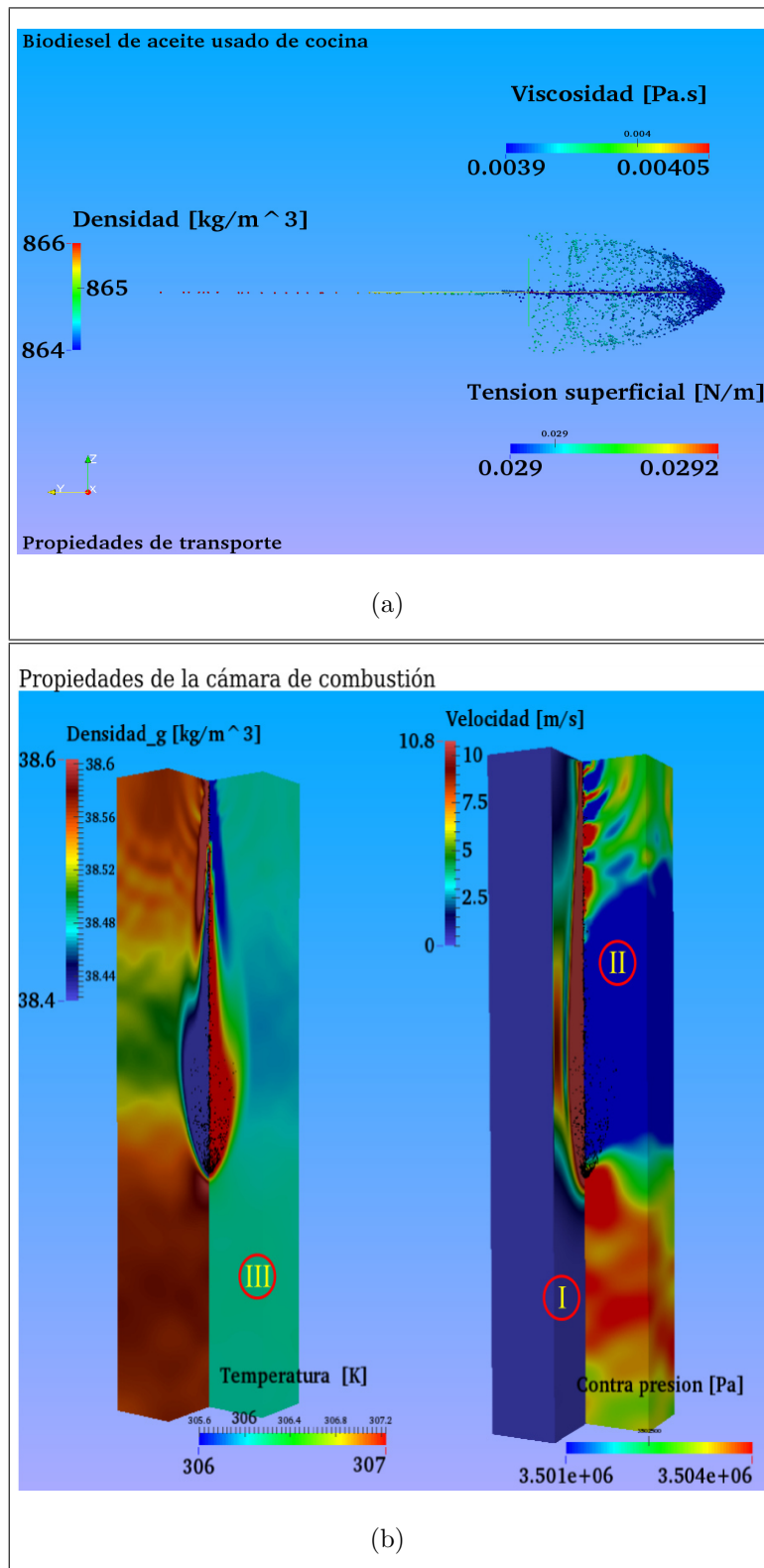


Figura 6.37: (a) Propiedades de transporte del Biodiesel (b) Condiciones en la cámara de combustión. I contornos de velocidad, II campos de presión y III contornos de temperatura

aumento en la velocidad del chorro desacelerando al mismo.

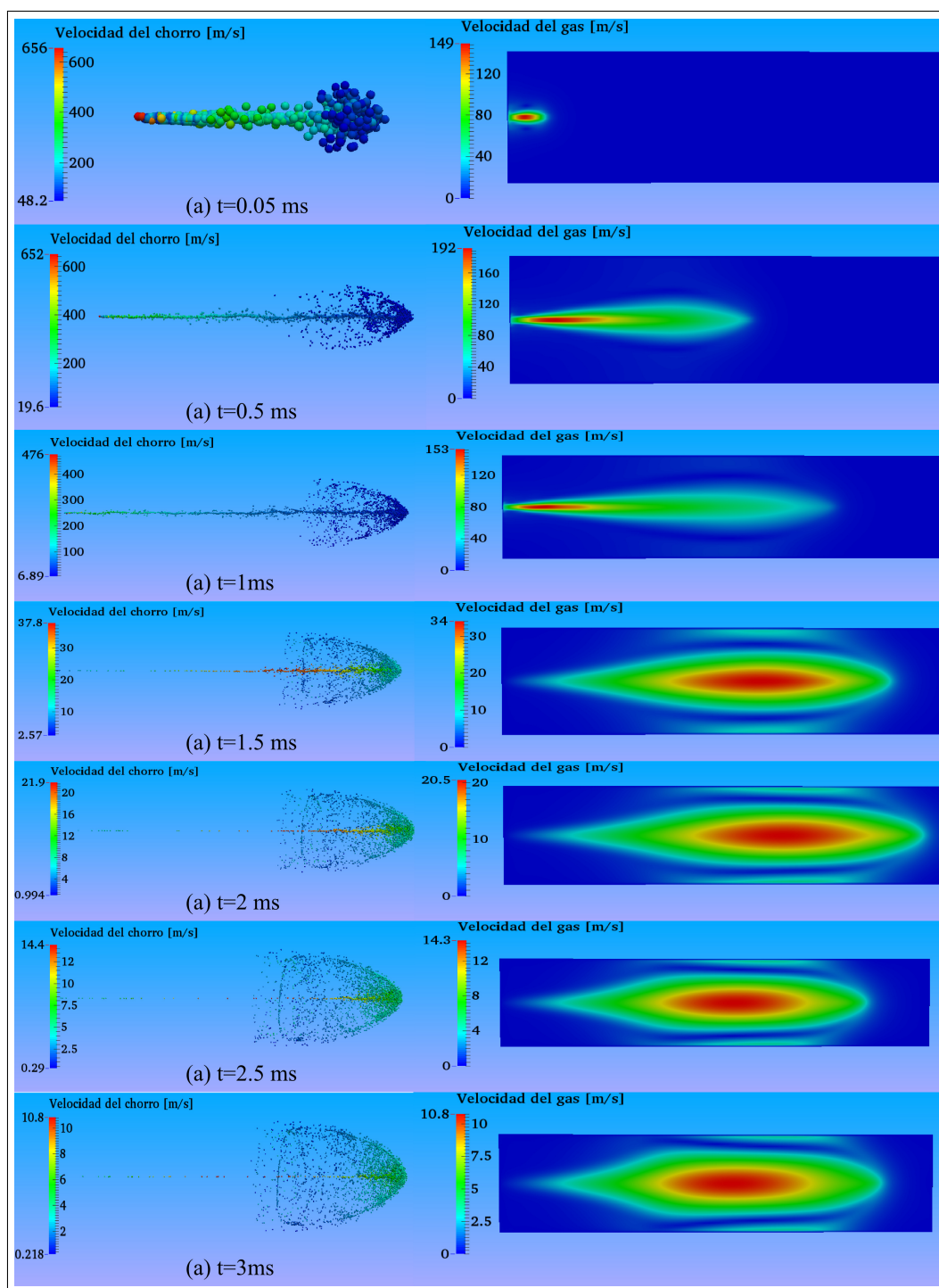


Figura 6.38: Velocidad del chorro y del gas circundante para un B100

Este aumento en las propiedades de transporte del biodiesel es uno de los

factores principales por los que se presentan variaciones en la eficiencia del motor, formación de emisiones y depósitos en los componentes del motor, temas discutidos en la sección 2.2.

Debido a esto es necesario profundizar en el conocimiento de la variación de estas propiedades y su influencia en el proceso de mezcla para un biocombustible entre ellos las mezclas binarias biodiesel-diesel, por esta razón se eligieron las mezclas anteriormente mencionadas empezando con la mezcla avalada por la Agencia de Protección Ambiental EPA [4], la cual contiene un 20 % de biodiesel con un 80 % de diesel (*B20*).

6.4.3 SIMULACIÓN DEL CHORRO EMPLEANDO UNA MEZCLA *B20*

Como se mencionó una de las mezclas propuestas para su reproducción es la mezcla *B20*, la cual al contener un porcentaje de biodiesel la penetración del chorro junto con sus propiedades se ven afectadas. Mohan et al. [18] expone un incremento en la viscosidad con el aumento en la fracción de biodiesel en el biocombustible lo que contribuye substancialmente a un incremento en la penetración (ver Figura: 6.39).

Post-procesado y penetración

Empleando el post-proceso es posible determinar la penetración del chorro contra el tiempo y comparar su comportamiento contra los chorros de los otros dos combustibles y la variación en sus propiedades de transporte las cuales influyen en la formación de la mezcla. En la Figura: 6.40 se pueden observar las propiedades de transporte del *B20* junto con su respectiva fracción de biodiesel en la mezcla. Cabe mencionar que al tener un incremento de viscosidad en comparación con el diesel la transferencia de cantidad de movimiento al aire circundante es mayor que la del diesel y muy parecida a la del biodiesel puro. Este estudio se centra en la penetración líquida por lo tanto no se realizan situaciones donde intervenga la evaporación del

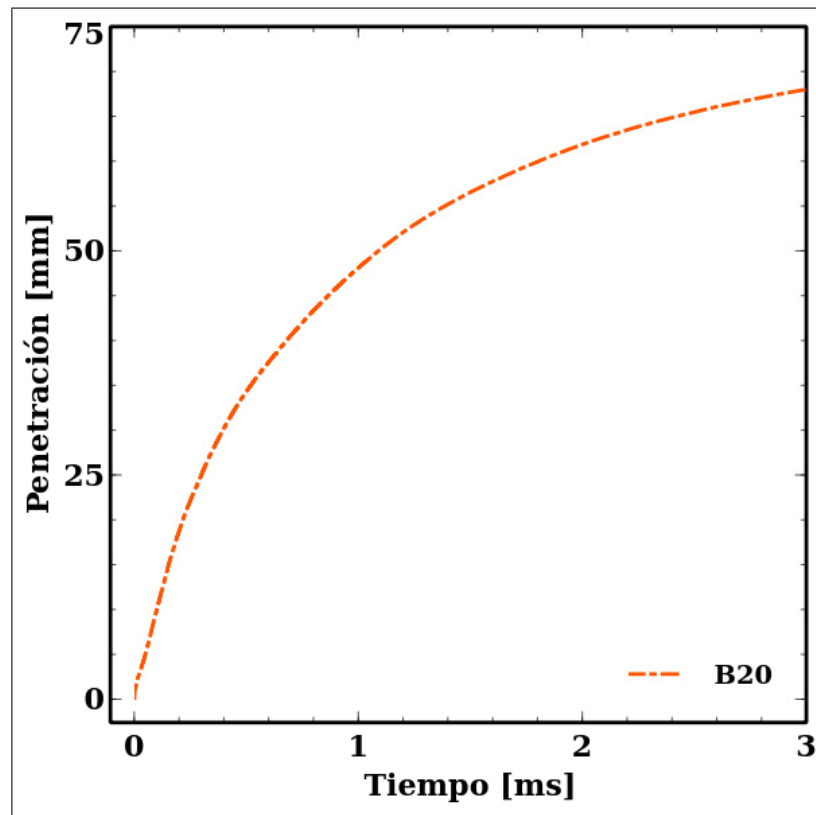


Figura 6.39: Evolución temporal del chorro para un *B20*

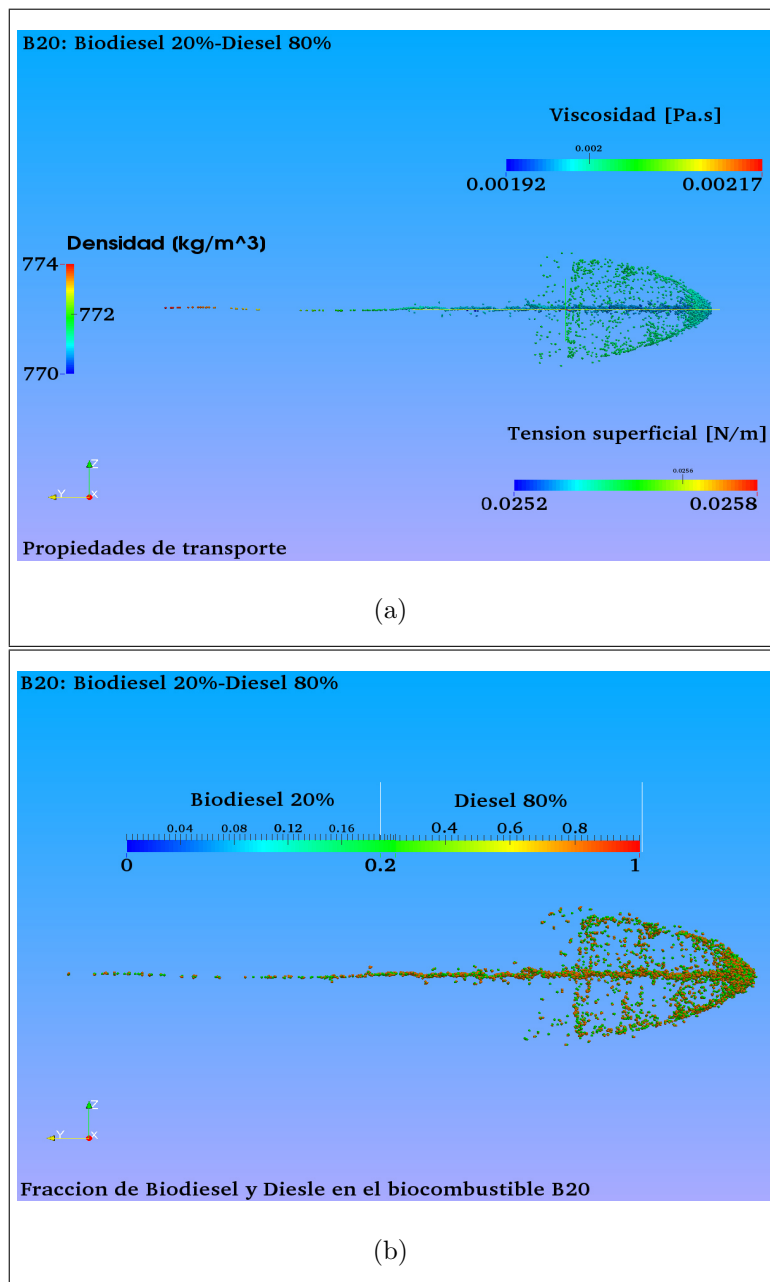


Figura 6.40: (a) Propiedades de transporte del B20 (b) Fracción masa de diesel y biodiesel en el chorro

combustible, sin embargo se presenta una cantidad despreciable de masa de cada combustible en aire circundante

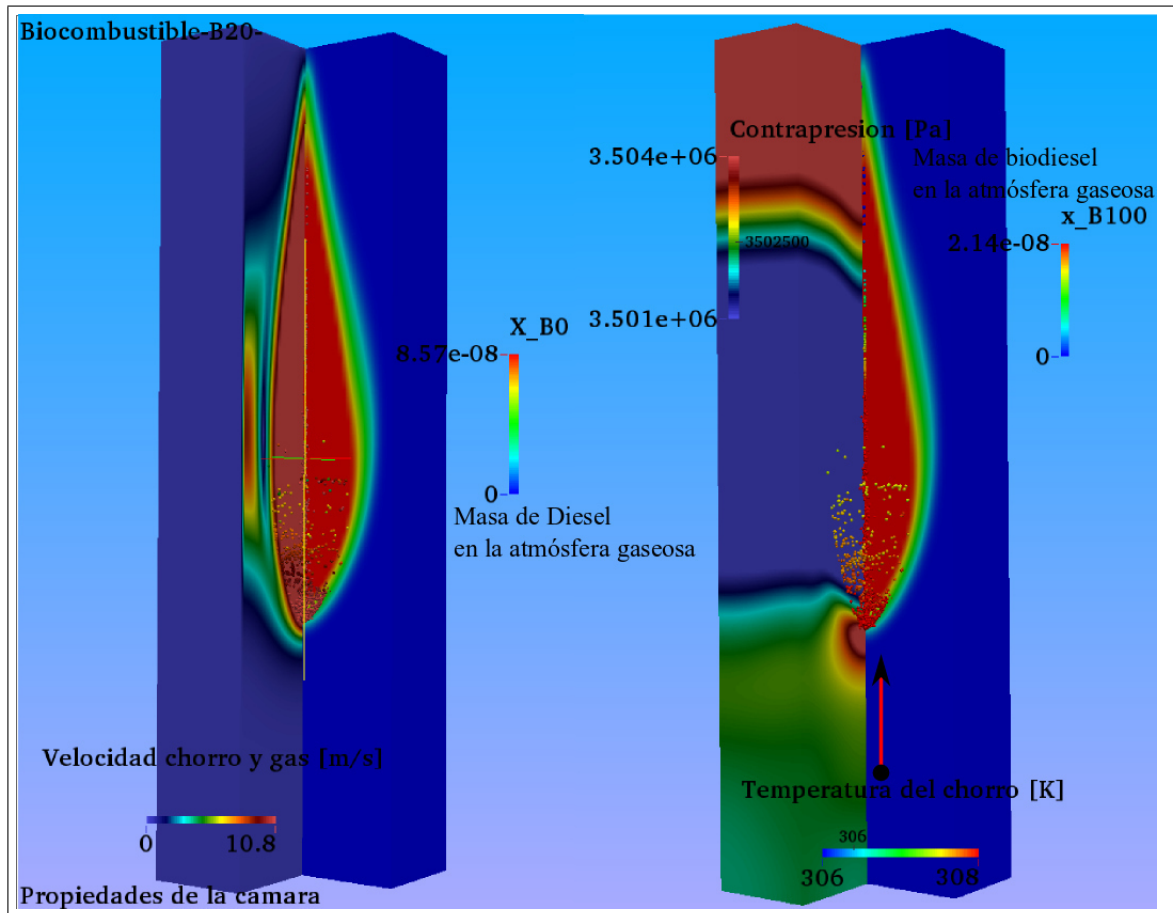


Figura 6.41: Condiciones de la cámara de combustión para un *B20*

La mezcla biodiesel-diesel B20 es una mezcla ampliamente usada, evaluada y de uso legal según la agencia de protección ambiental EPA [4], sin embargo el objetivo de este estudio no solo es el determinar la penetración de un chorro de biocombustible ya propuesto, sino averiguar y profundizar en el conocimiento de una mezcla nueva que sea pertinente para su uso regular en vehículos de automoción; por esto se propone una mezcla adicional que no solo siga la filosofía del uso del biodiesel, sino que además permite un mayor uso de biodiesel.

La mezcla B50 (50% de biodiesel con 50% de diesel) permite un mayor uso de

biodiesel, sin embargo esta mezcla debe ser estudiada ampliamente puesto que con un mayor aumento de biodiesel en la mezcla mayores los defectos ocasionados por su aumento en las propiedades de transporte.

6.4.4 SIMULACIÓN DEL CHORRO EMPLEANDO UNA MEZCLA *B50*

Como se menciona anteriormente con objeto de poder profundizar en el conocimiento de la penetración de un biocombustible y la influencia de las propiedades de transporte en el proceso de mezcla se propone el biocombustible *B50*. Este biocombustible presenta un aumento en las propiedades de transporte y termo-físicas considerable en comparación con su homólogo con 20 % de biodiesel, este aumento permite determinar que tipo de comportamiento presentará un biocombustible. La penetración del chorro de este biocombustible es sumamente similar a la penetración del biodiesel. En la Figura: 6.42 se muestra la penetración determinada para un biocombustible con 50 % de biodiesel.

Post-procesado y penetración

Empleando el post-proceso es posible determinar la penetración del chorro en función del tiempo y comparar su comportamiento contra los chorros de los otros combustibles de la misma manera que el *B20*, el aumento en las propiedades de transporte conlleva a un aumento en la penetración superior al *B0* pero inferior al *B100* sin embargo la penetración del chorro del *B50* se ve seriamente influenciada por el aumento en las propiedades de transporte. En la Figura: 6.43 se pueden observar las propiedades de transporte del *B50* junto con su respectiva fracción de biodiesel en la mezcla. En la Figura: 6.41 se hizo hincapié sobre la nula transferencia de masa del combustible al gas ambiental por esa razón en la Figura: 6.44 se resaltan las condiciones y los cambios a los que se ve sujeta la cámara de combustión. Dichas variaciones se espera que sean más acentuadas si existen condiciones evaporativas en el sistema.

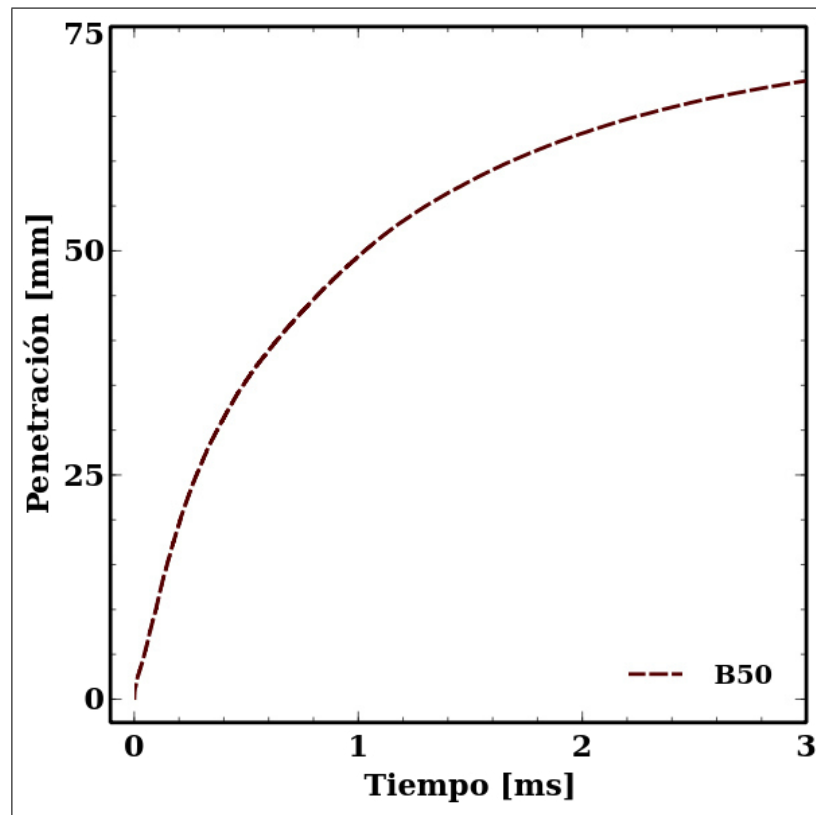


Figura 6.42: Evolución temporal del chorro para un *B50*

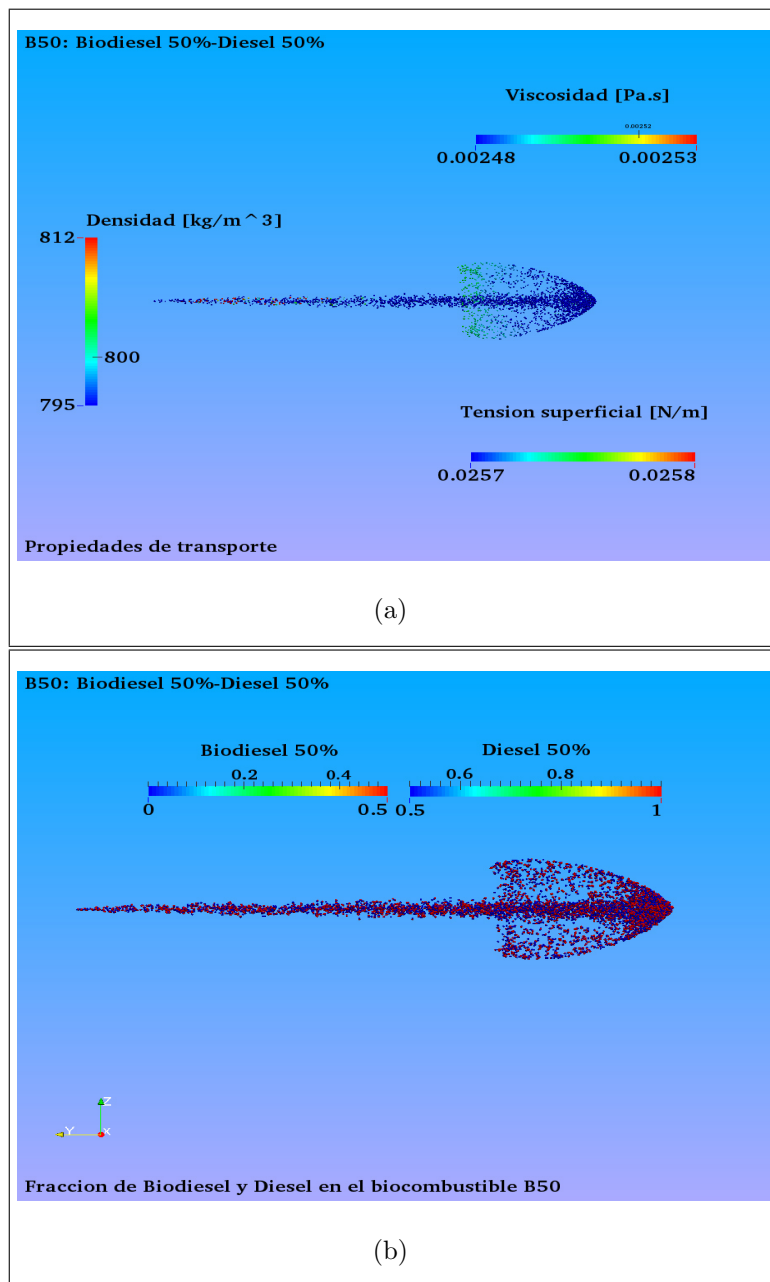


Figura 6.43: (a) Propiedades de transporte del B50 (b) Fracción masa de diesel y biodiesel en el chorro

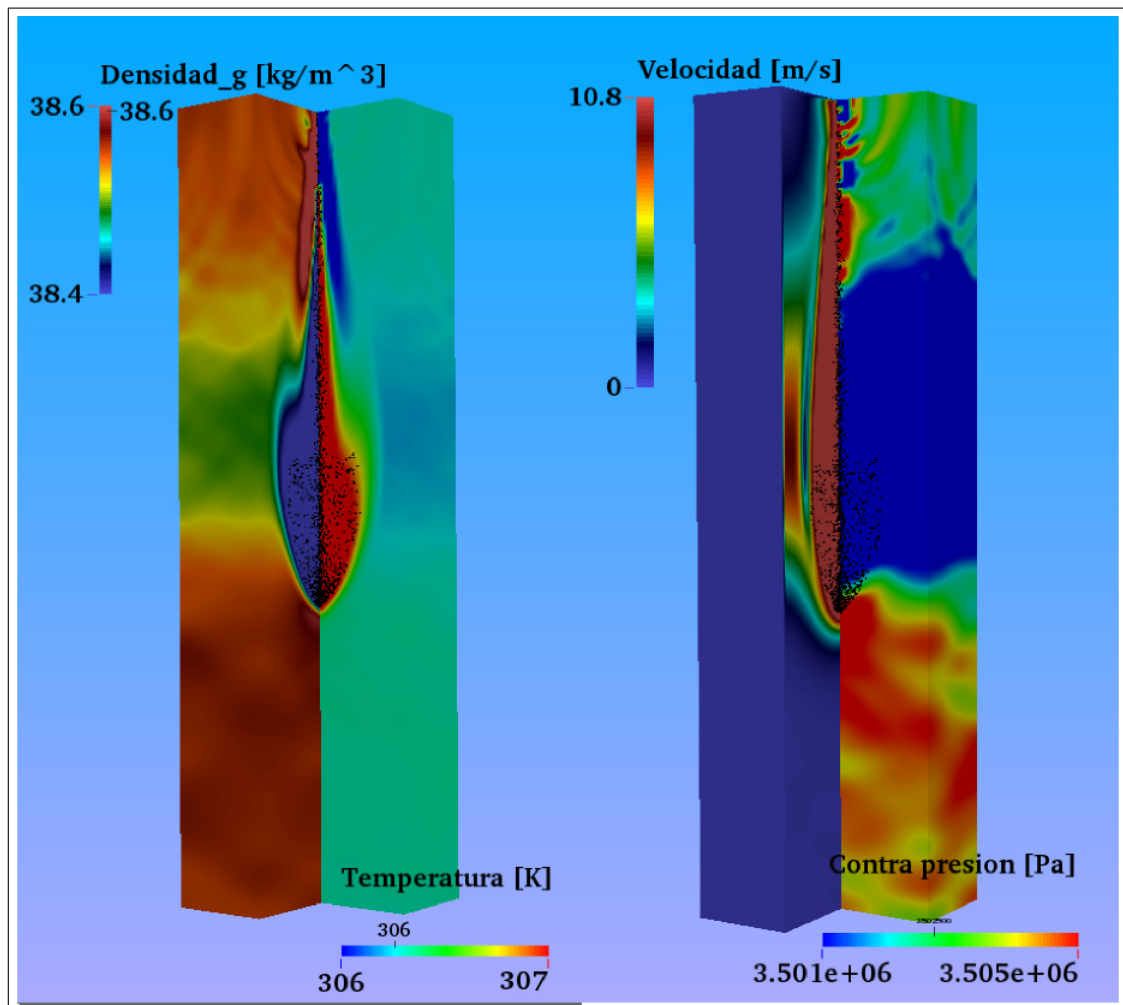


Figura 6.44: Condiciones en la cámara de combustión para un B50

6.5 ANÁLISIS DE LA PENETRACIÓN PARA LAS DIVERSAS MEZCLAS

De la Figura: 6.45 es posible observar un aumento en las propiedades de transporte, dicho aumento es el principal responsable del incremento en la penetración del chorro para una misma duración de inyección; puesto que el aumento en la viscosidad del biodiesel incrementa la cantidad de movimiento, permitiendo que la gota se desplace una mayor distancia que la del diesel, aunado a esto el aumento en la tensión superficial previene la desintegración de la gota provocando que gotas con diámetros más pequeños necesiten mayor presión dinámica para su desintegración, además la falta de componentes volátiles inhibe en cierto grado el proceso efectivo de evaporación, por otro lado la densidad del combustible es un factor determinante en el pre-proceso de inyección puesto que es necesario una modificación en el proceso de inyección para suministrar cierta masa de combustible bajo las mismas condiciones geométricas de una tobera en específico. Esta variación en las propiedades ha sido ampliamente estudiada, aunque no de manera global, sin embargo Ismail et al. [9] reportan una variación en las propiedades similar a la expuesta en este estudio.

Este aumento en las propiedades de transporte es el principal responsable del aumento en la penetración del chorro, como se puede observar en la Figura: 6.46 conforme aumenta la fracción de biodiesel en la mezcla se presenta un considerable aumento en la penetración del chorro, esto influenciado principalmente por el hecho de las dominantes propiedades del transporte del biodiesel, sin embargo cabe destacar el comportamiento de la mezcla *B50*, la cual presenta un comportamiento muy similar al biodiesel puro, este comportamiento fue Gao et al. [17] mientras que la penetración del *B20* exhibe un comportamiento similar al expuesto por Mohan et al. [18]

Como se muestra en la Figura: 6.46 la diferencia entre diesel y biodiesel al inicio de la penetración es muy baja para los primeros 0.2-0.3 *ms* después de la inyección, a partir de los 0.3 *ms* el aumento en la penetración es evidente con el

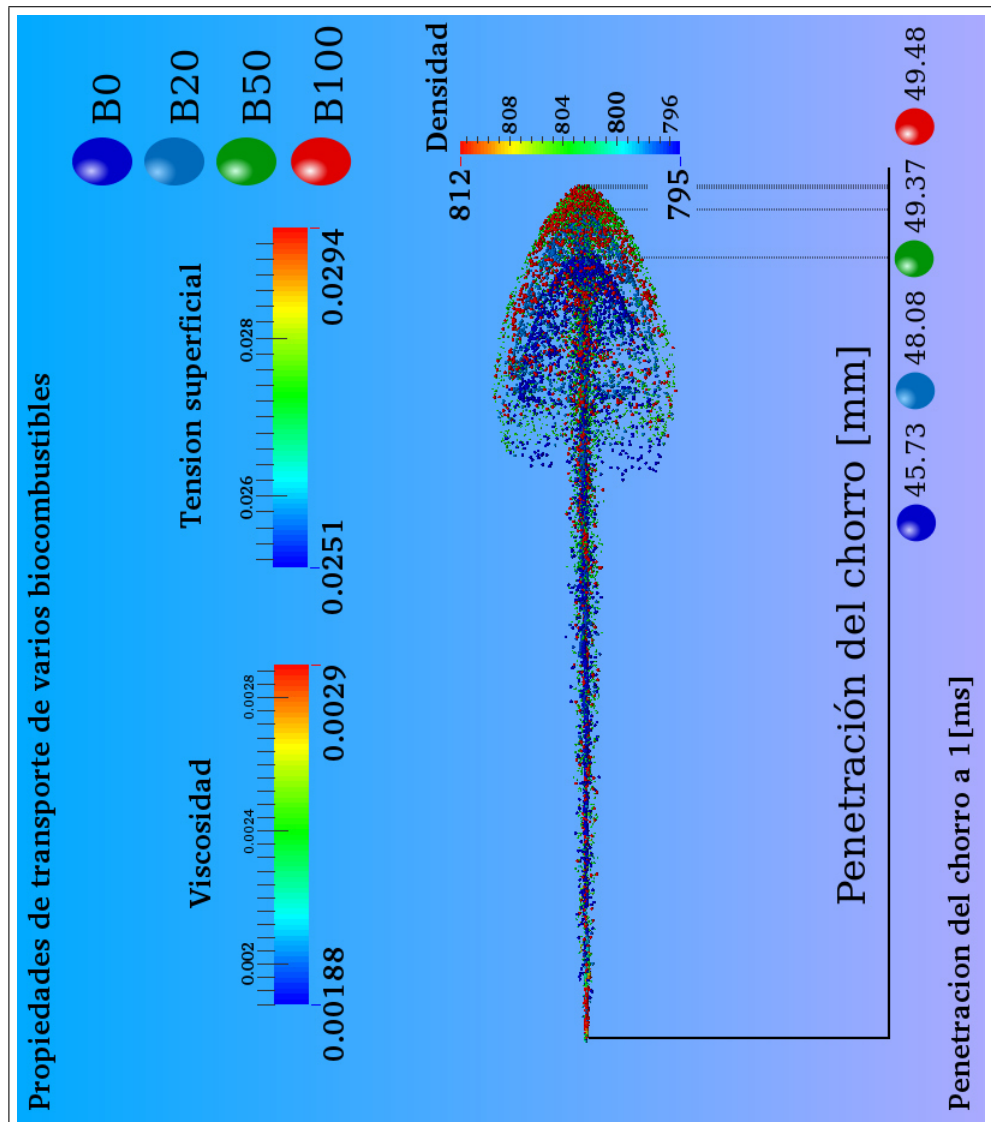


Figura 6.45: Morfología de cuatro diversos chorros de biocombustible

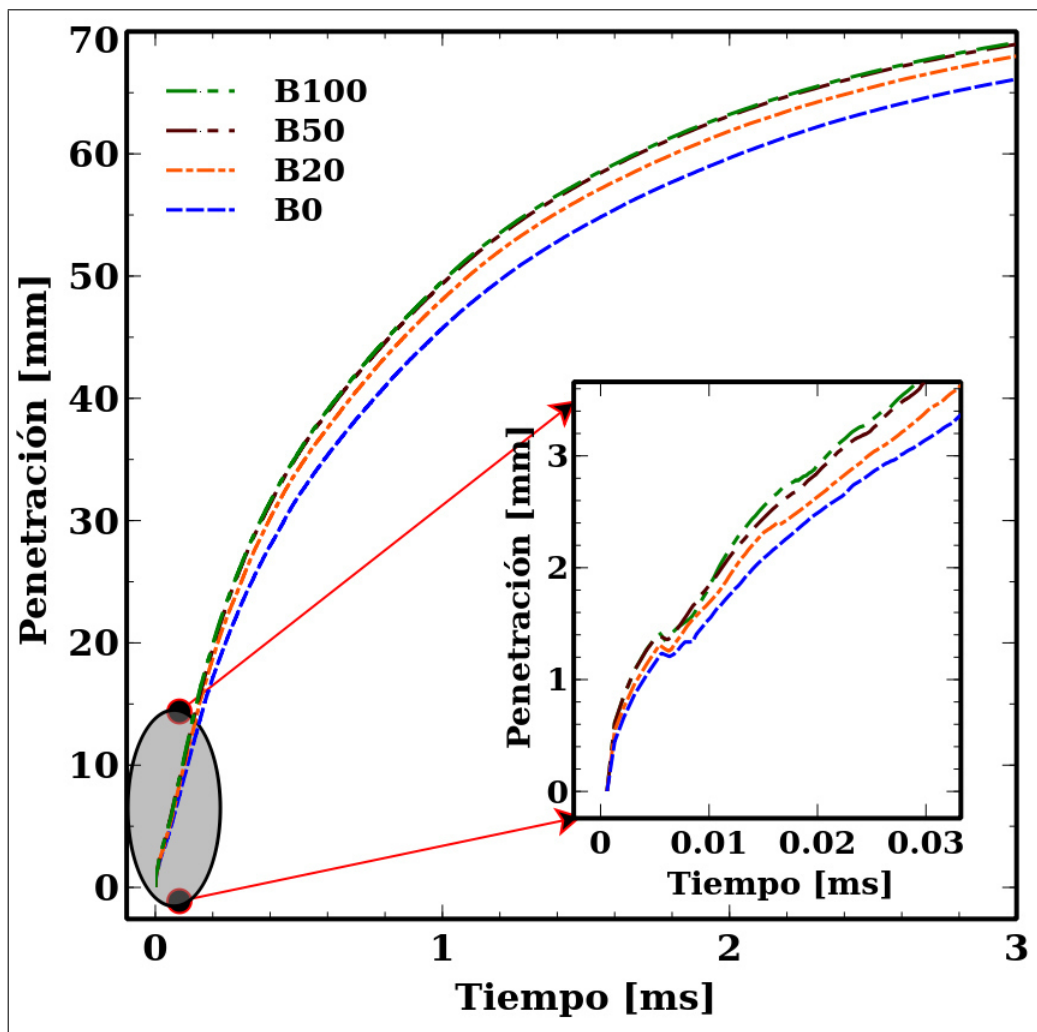


Figura 6.46: Evolución temporal de la penetración del chorro correspondiente a las cuatro mezclas de combustible, objeto de estudio

aumento en el porcentaje de biodiesel teniendo un incremento de aproximadamente 4 mm en la penetración del chorro al mismo tiempo de inyección. El efecto de las propiedades de transporte no solo afecta la penetración del chorro sino también la velocidad de éste. En la Figura: 6.47 se muestra la velocidad de los 4 tipos de chorros de combustibles la cual acelera súbitamente y se desacelera gradualmente conforme el chorro se sigue inyectando. El progresivo chorro pulsante como se muestra en la Figura: 6.48 genera regiones de baja presión lo que permite que las gotas del chorro subsecuentes sean capaces de avanzar a una alta velocidad y colisionar con las gotas del chorro previas, esto también puede contribuir a cambios en la velocidad y a aumentos en los diámetros de las gotas.

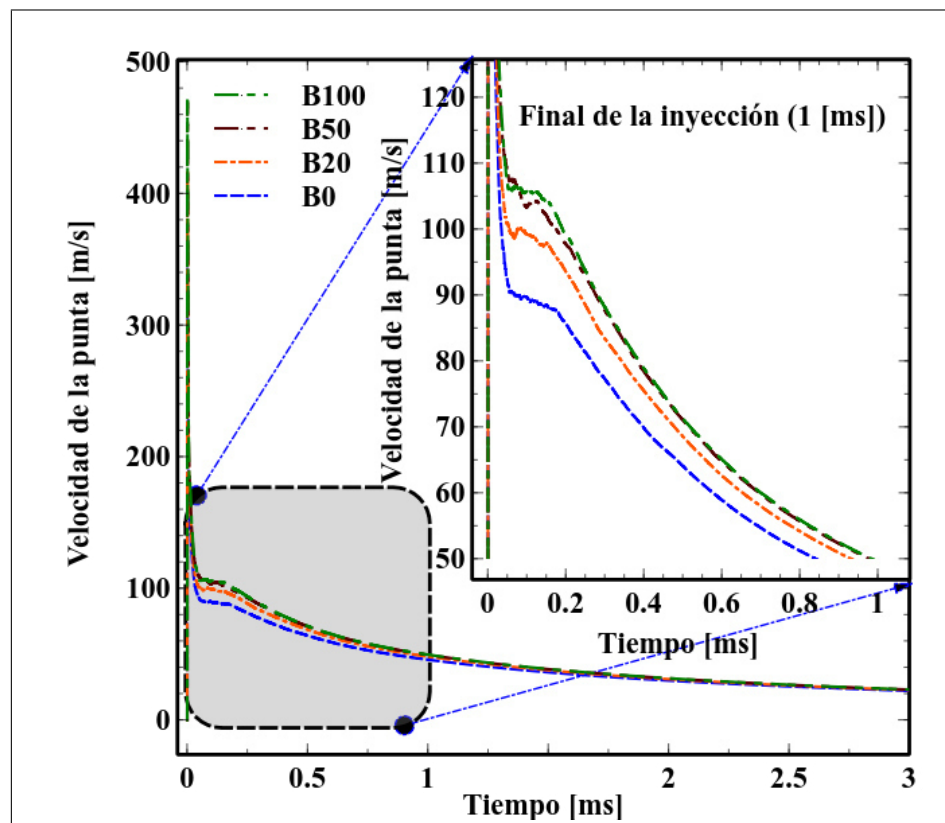


Figura 6.47: Velocidad de la punta del chorro para el diesel y para sus diversas mezclas con biodiesel

La desaceleración de la punta del chorro es similar a la reportado por Gao et al. [17] reportando una zona de estabilidad a partir de 1 ms de inyección aproxi-

madamente con un valor de velocidad de chorro aproximado entre $20 \frac{m}{s}$ y $60 \frac{m}{s}$, muy similar a la zona de estabilidad predicha por el modelado.

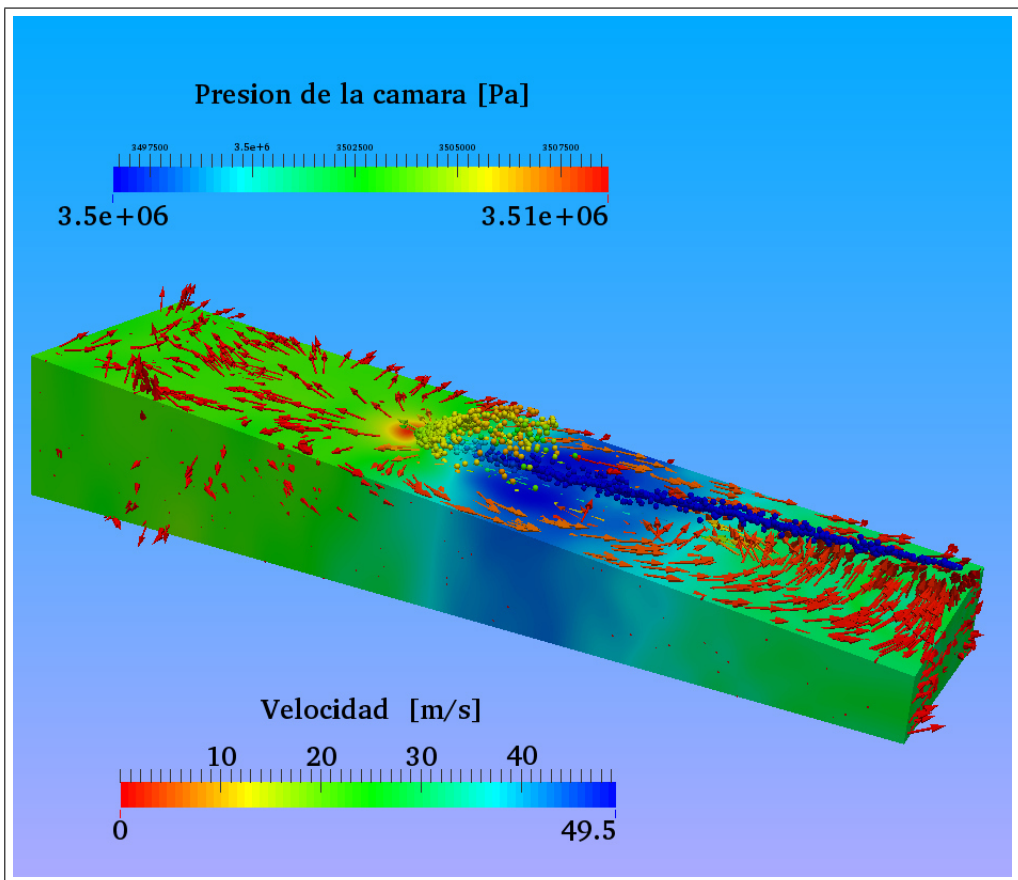


Figura 6.48: Variación en la presión de la cámara por el avance del chorro y vectores de alta velocidad para 1 ms de inyección

El biodiesel puro tiene una mayor penetración y una mayor velocidad del chorro comparado a los demás biocombustibles mientras que el *B50*, *B20* y *B0* muestran una menor penetración y una menor velocidad en la punta del chorro.

Esta variación en la penetración se ve influenciada por el incremento en el porcentaje de biodiesel, el cual a su vez se ve influenciado por el aumento en las propiedades de transporte.

El desarrollo de librerías para la implementación de un biodiesel es una estrategia viable y sencilla que permite realizar la simulación de un biodiesel o en su defecto de un sustituto empleando el ácido graso de mayor porcentaje presente en el biodiesel.

6.6 CONCLUSIONES

El biodiesel es una alternativa viable al tema de los bioenergéticos para la automoción, un combustible biodegradable, orgánico y no tóxico hecho a partir de recursos renovables como aceites vegetales, lo que permite un uso continuo y extendido a cualquier punto en el planeta, sin embargo el uso del biodiesel tiene ciertas desventajas, entre ellas se encuentra el sector económico de impacto, puesto que actualmente el mercado de combustible se centra en el combustible fósil, el cual es más rentable por lo estandarizado del proceso de extracción y producción tema que puede ser solucionado si la materia prima proviene de un reciclaje (aceite usado de cocina) y los efectos negativos que tiene el biodiesel en las auto partes diseñadas para el uso de combustibles fósiles.

Pero a pesar de estas desventajas el biodiesel es un combustible alternativo y prometedor, sin embargo es necesario tomar a consideración sus defectos antes de catalogarlo como la alternativa definitiva al problema de la automoción.

Las propiedades de transporte del biodiesel difieren substancialmente a las del diesel convencional, hecho debido a la composición de ácidos grasos de largas cadenas que conforman el biodiesel en vez de hidrocarburos alifáticos que conforman los combustibles fósiles; esto conlleva a una amplia gama de variaciones en el comportamiento dentro del motor, flujo de combustible, proceso de inyección, generación de emisiones, desempeño y eficiencia, además de la formación de depósitos en las toberas (lo que disminuye el diámetro efectivo de salida) y el daño en los componentes en general. Estas desventajas pueden ser atacadas empleando aditivos en el biodiesel o combinarlo con otros combustibles, tal es el caso del bioetanol o diesel. El análisis de estas opciones para la mejora del biocombustible puede ser a partir de la penetración del chorro, uno de los parámetros principales que caracterizan la eficiencia del proceso de mezcla, el cual es la incidencia de un chorro de combustible dentro de la cámara de combustión y su correcta mezcla con el aire.

La penetración para un biodiesel derivado del aceite usado de cocina aumenta con-

siderablemente permitiendo una estimación de la eficiencia del proceso de mezcla y del comportamiento del motor. Este aumento en la penetración puede ser mitigado disminuyendo el porcentaje de biodiesel mientras se aumenta el porcentaje de diesel en el biocombustible con esto se asegura la disminución de los efectos negativos provocados por la naturaleza del biodiesel.

Sin embargo el biocombustible con un 20 % de biodiesel presenta una penetración superior al diesel comprometiendo el proceso eficiente de mezcla si la inyección durará más de 1 *ms*, esta variación en la penetración disminuye considerablemente antes de la finalización en el tiempo de inyección lo que permite concluir que es posible emplear biodiesel en una amplia composición siempre y cuando el tiempo de inyección de combustible sea menor al tiempo total de la inyección.

La variación en las propiedades de transporte es uno de los factores principales en el desarrollo del proceso global de inyección, por lo tanto es necesario emplear una presión de inyección superior para una correcta introducción de una masa específica a la cámara de combustión con esto es posible disminuir el tamaño de gota, favoreciendo de esta manera al proceso de atomización del combustible.

Las propiedades del biodiesel dominan sobre las del diesel, lo que conlleva a que dependiendo el porcentaje de biodiesel en la mezcla con diesel será el aumento en la propiedad de transporte permitiendo estimar la variación en la penetración como una función del biodiesel en la mezcla, esto lleva a que un biocombustible con un porcentaje máximo de biodiesel del 50 % tenga una penetración similar a la que tendría el biodiesel puro, por lo tanto un aumento superior al 50 % de biodiesel en la mezcla tendría una penetración similar al biodiesel puro lo que sería poco práctico, dando como mejor desempeño mezclas con fracciones entre el rango de 0 al 20 %.

6.6 BIBLIOGRAFÍA

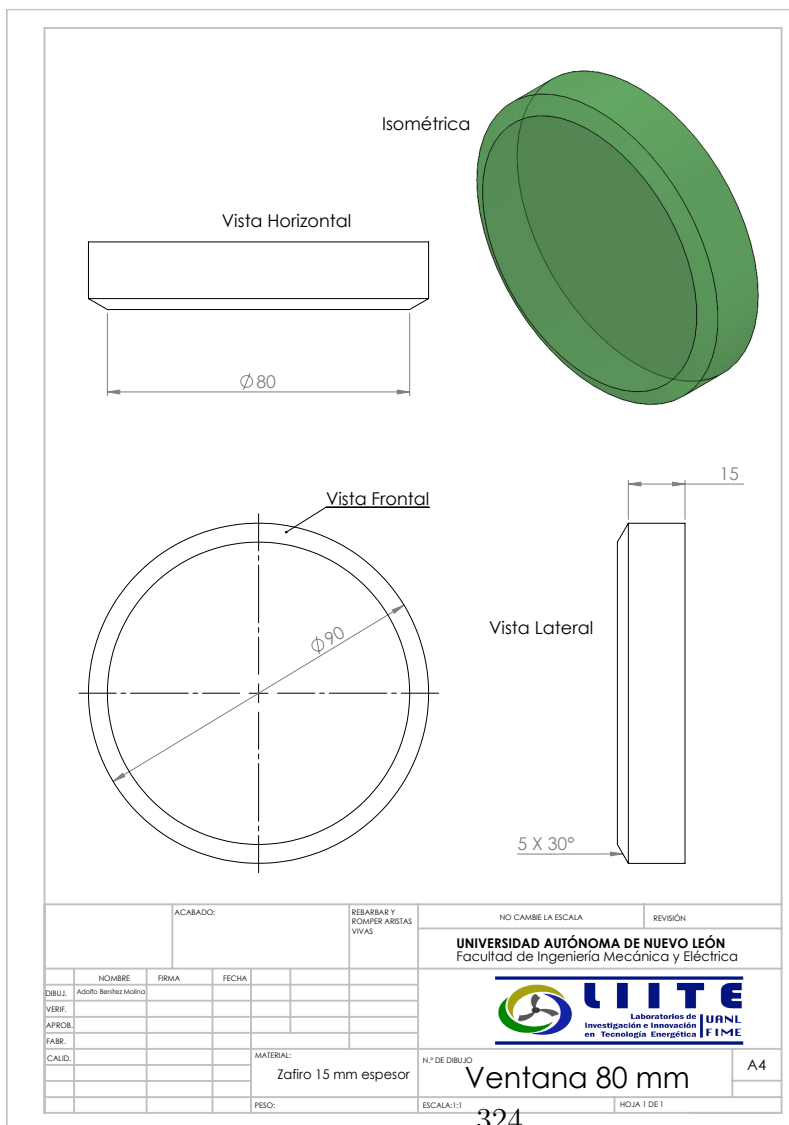
- [1] S. H. Park, H. K. Suh, and C. S. Lee, “Effect of bioethanol- biodiesel blending ratio on fuel spray behavior and atomization characteristics,” *Energy & Fuels*, vol. 23, no. 8, pp. 4092–4098, 2009.
- [2] Y.-S. Lin and H.-P. Lin, “Spray characteristics of emulsified castor biodiesel on engine emissions and deposit formation,” *Renewable Energy*, vol. 36, no. 12, pp. 3507–3516, 2011.
- [3] T. national Biodiesel board, “Specification sheet for biodiesel b100,” *American Society for Testing and Materials (ASTM)*, 2007.
- [4] A. EPA, “Comprehensive analysis of biodiesel impacts on exhaust emissions,” tech. rep., Draft Technical Report, EPA420-02-001, 2002.
- [5] SOLBEN, “Biodiesel en méxico,” tech. rep., Foro de energía Colima, Secretaria de Fomento Económico SEFOME, 2010.
- [6] K. Yamane, A. Ueta, and Y. Shimamoto, “Influence of physical and chemical properties of biodiesel fuels on injection, combustion and exhaust emission characteristics in a direct injection compression ignition engine,” *International Journal of Engine Research*, vol. 2, no. 4, pp. 249–261, 2001.
- [7] B. Kegl and A. Hribernik, “Experimental analysis of injection characteristics using biodiesel fuel,” *Energy & fuels*, vol. 20, no. 5, pp. 2239–2248, 2006.
- [8] C. He, Y. Ge, J. Tan, and X. Han, “Spray properties of alternative fuels: A comparative analysis of biodiesel and diesel,” *International Journal of energy research*, vol. 32, no. 14, pp. 1329–1338, 2008.
- [9] H. M. Ismail, H. K. Ng, X. Cheng, S. Gan, T. Lucchini, and G. D’Errico, “Development of thermophysical and transport properties for the cfd simula-

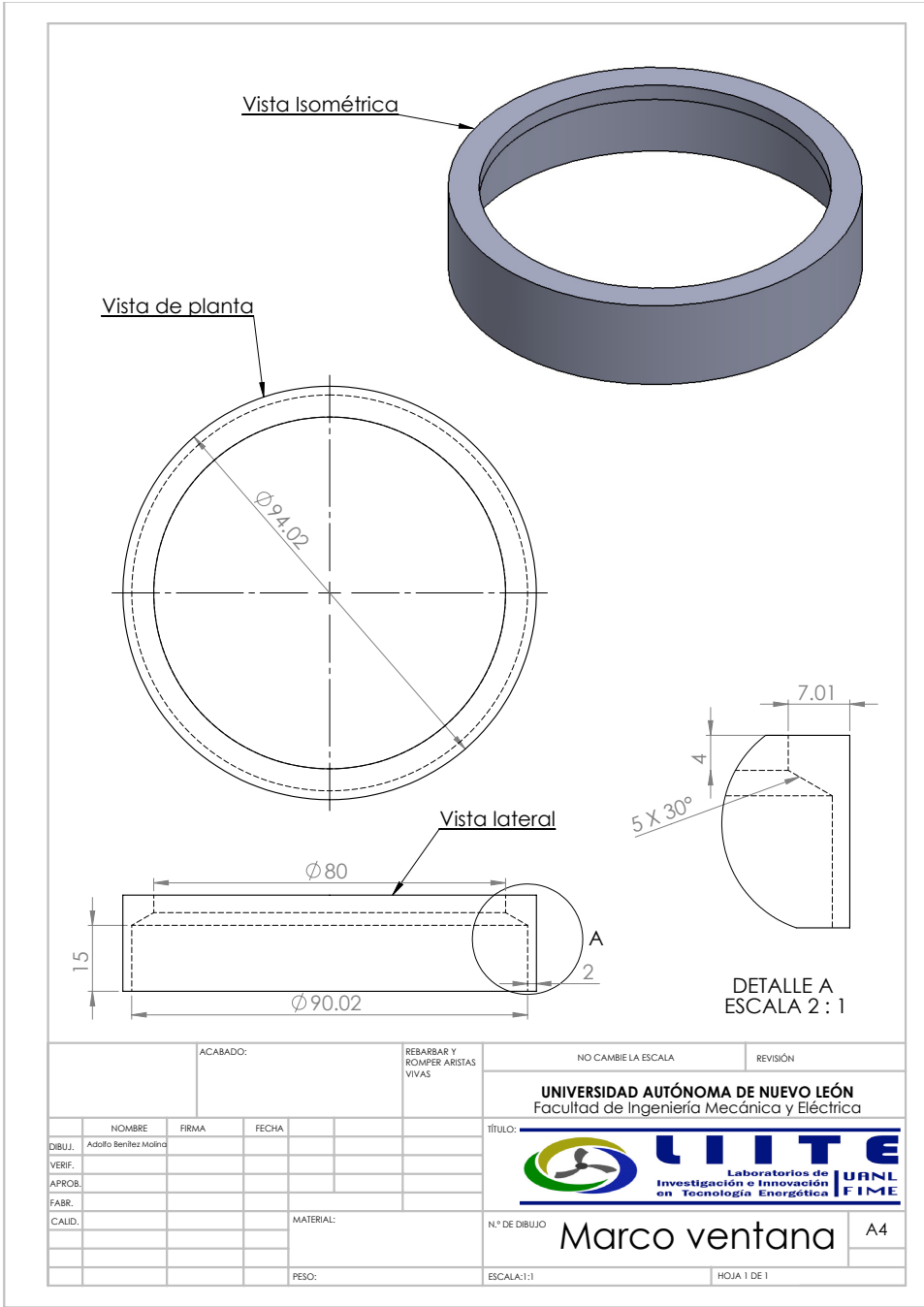
- tions of in-cylinder biodiesel spray combustion,” *Energy & Fuels*, vol. 26, no. 8, pp. 4857–4870, 2012.
- [10] J. Gimeno García, *Estudio de la inyección diésel mediante la medida del flujo de cantidad de movimiento del chorro*. Reverté, 2010.
- [11] V. Macian, V. Bermudez, R. Payri, and J. Gimeno, “New technique for determination of internal geometry of a diesel nozzle with the use of silicone methodology,” *Experimental techniques*, vol. 27, no. 2, pp. 39–43, 2003.
- [12] I. Roisman, L. Araneo, and C. Tropea, “Effect of ambient pressure on penetration of a diesel spray,” *International journal of multiphase flow*, vol. 33, no. 8, pp. 904–920, 2007.
- [13] H. Gercek, “Poisson’s ratio values for rocks,” *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, vol. 44, no. 1, pp. 1–13, 2007.
- [14] E. Delacourt, B. Desmet, and B. Besson, “Characterisation of very high pressure diesel sprays using digital imaging techniques,” *Fuel*, vol. 84, no. 7, pp. 859–867, 2005.
- [15] X. Wang, Z. Huang, O. A. Kutu, W. Zhang, and K. Nishida, “Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra-high injection pressure,” *International journal of heat and fluid flow*, vol. 31, no. 4, pp. 659–666, 2010.
- [16] J. B. Heywood, *Internal combustion engine fundamentals*, vol. 930. Mcgraw-hill New York, 1988.
- [17] Y. Gao, J. Deng, C. Li, F. Dang, Z. Liao, Z. Wu, and L. Li, “Experimental study of the spray characteristics of biodiesel based on inedible oil,” *Biotechnology Advances*, vol. 27, no. 5, pp. 616–624, 2009.
- [18] B. Mohan, W. Yang, K. L. Tay, and W. Yu, “Experimental study of spray characteristics of biodiesel derived from waste cooking oil,” *Energy Conversion and Management*, vol. 88, pp. 622–632, 2014.

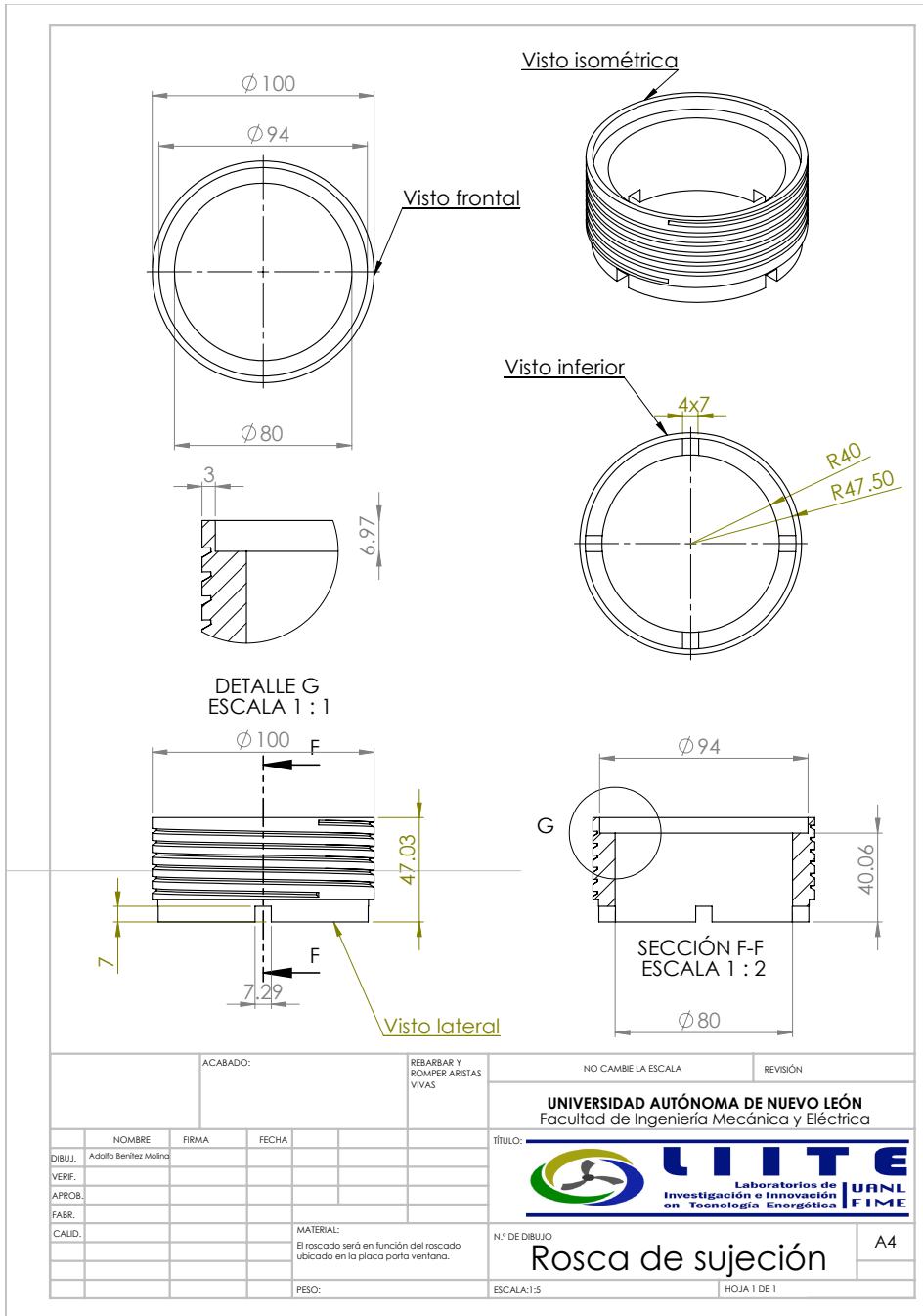
- [19] F. Payri, J. J. Lopez, A. Garcia, A. Oscar, S. Houille, *et al.*, “Effects of cavitation in common-rail diesel nozzles on the soot formation process,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2013.
- [20] S. H. Bang and C. S. Lee, “Fuel injection characteristics and spray behavior of dme blended with methyl ester derived from soybean oil,” *Fuel*, vol. 89, no. 3, pp. 797–800, 2010.
- [21] S. Som, D. Longman, A. Ramirez, and S. Aggarwal, “A comparison of injector flow and spray characteristics of biodiesel with petrodiesel,” *Fuel*, vol. 89, no. 12, pp. 4014–4024, 2010.
- [22] J. M. Desantes, R. Payri, A. Garcia, and J. Manin, “Experimental study of biodiesel blends’ effects on diesel injection processes,” *Energy & Fuels*, vol. 23, no. 6, pp. 3227–3235, 2009.
- [23] W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education UK, 2007.
- [24] S. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC Press, 1980.
- [25] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby, “A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques,” *Computers in physics*, vol. 12, no. 6, pp. 620–631, 1998.
- [26] H. Jasak, A. Jemcov, and Z. Tukovic, “Openfoam: A c++ library for complex physics simulations,” *International Workshop on Coupled Methods in Numerical Dynamics*, 2007.
- [27] D. Wolf, F. Incropera, and R. Viskanta, “Local jet impingement boiling heat transfer,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 39, no. 7, pp. 1395–1406, 1996.
- [28] F. Bottone, A. Kronenburg, D. Gosman, and A. Marquis, “The numerical simulation of diesel spray combustion with les-cmc,” *Flow, turbulence and combustion*, vol. 89, no. 4, pp. 651–673, 2012.

- [29] S. Sazhin, P. Krutitskii, W. Abdelghaffar, E. Sazhina, S. Mikhalovsky, S. Meikle, and M. Heikal, “Transient heating of diesel fuel droplets,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 47, no. 14, pp. 3327–3340, 2004.
- [30] H. Aguerre, S. Márquez, J. Gimenez, and N. Nigro, “Modeling of compressible fluid problems with openfoam using dynamic mesh technology,” *Asociación Argentina de Mecánica Computacional*, vol. 32, pp. 995–1011, 2004.
- [31] T. Behrens, “Openfoam’s basic solvers for linear systems of equations,” *Chalmers, Department of Applied Mechanics*, vol. 18, no. 02, 2009.
- [32] Y. Ra, R. D. Reitz, J. McFarlane, and C. S. Daw, “Effects of fuel physical properties on diesel engine combustion using diesel and bio-diesel fuels,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2008.

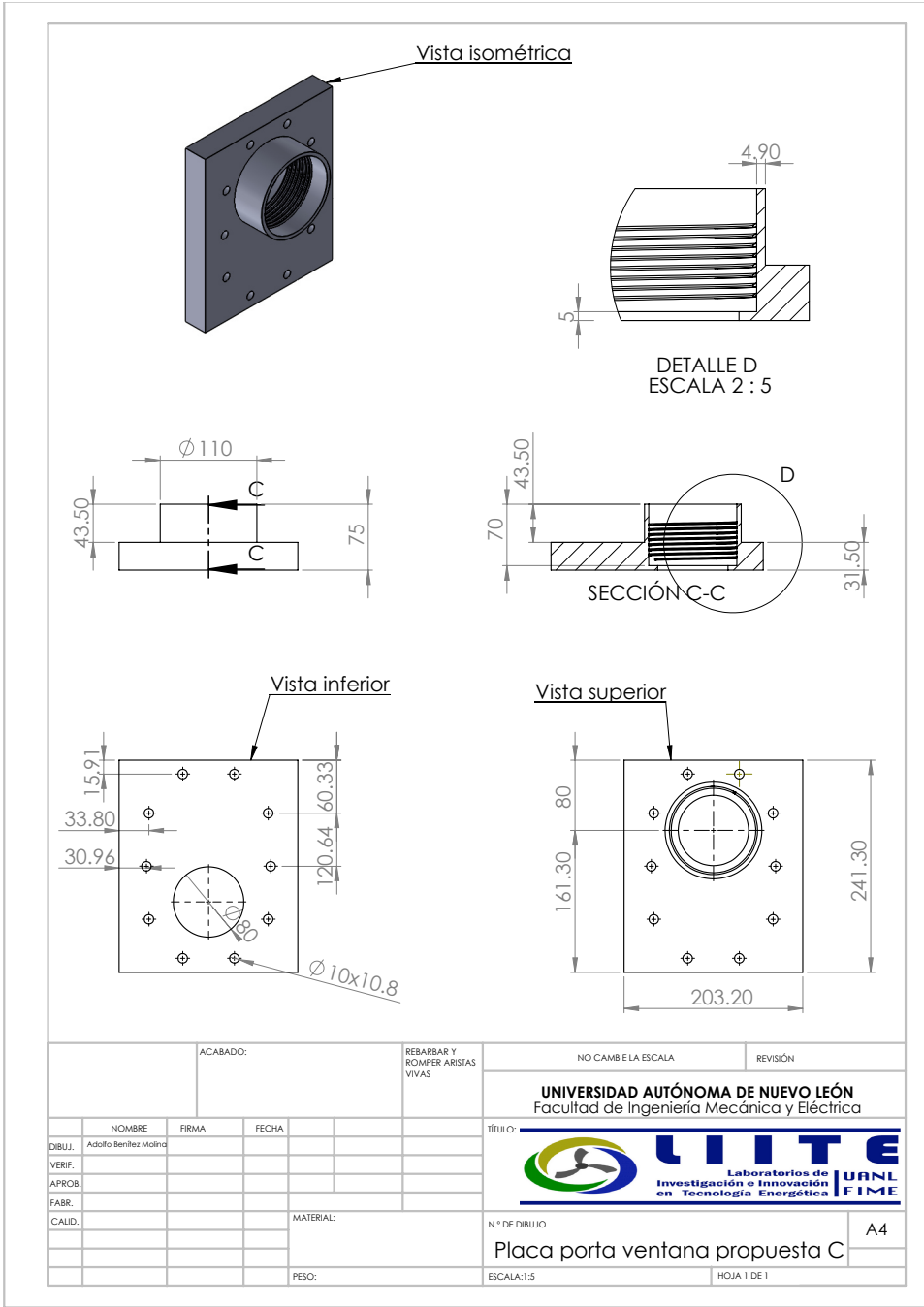
APÉNDICE C6: COMPONENTES DE LA MAQUETA DE VISUALIZACIÓN A VOLUMEN CONSTANTE



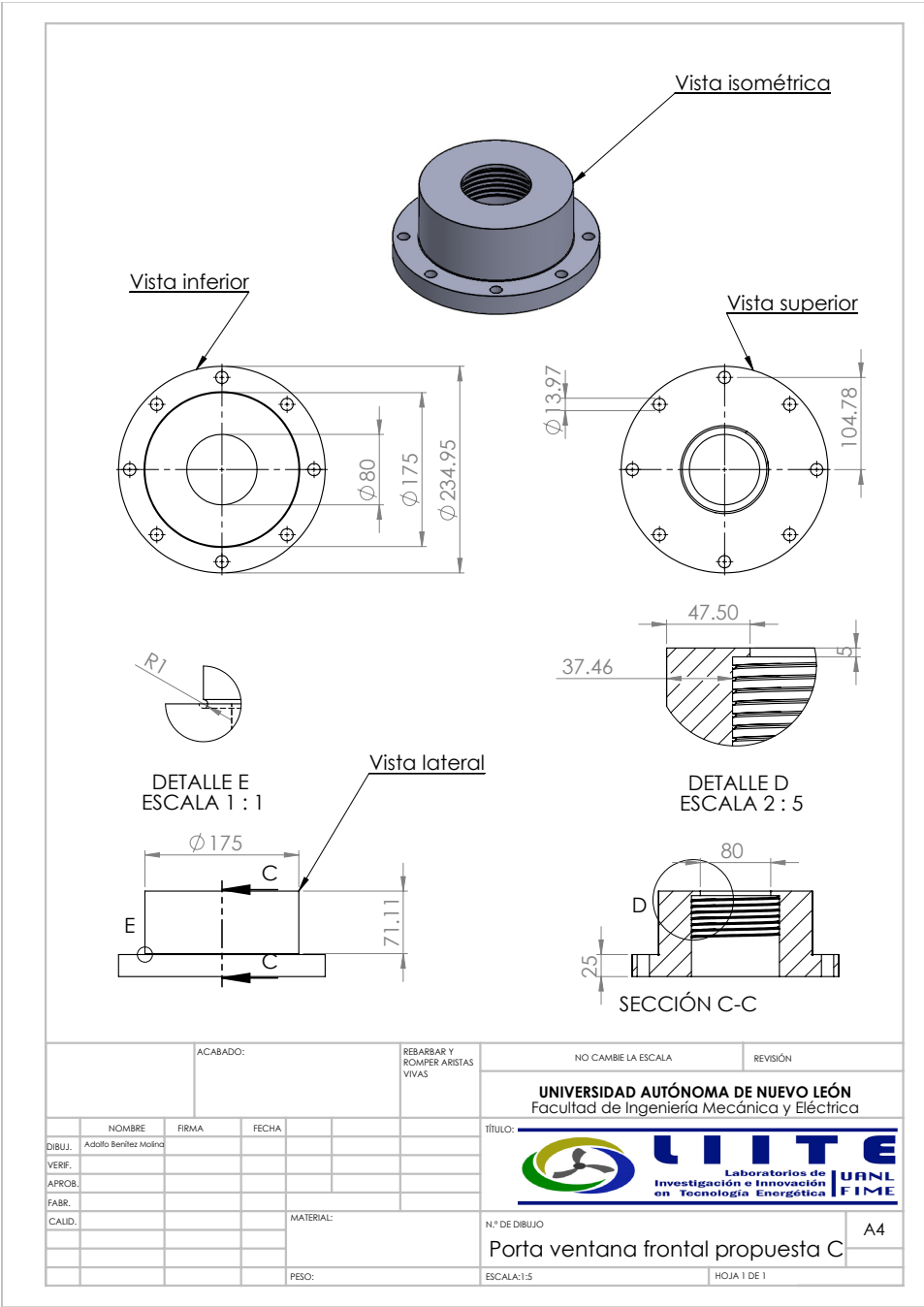




ACABADO:		REBARBAR Y ROMPER ARISTAS VIVAS		NO CAMBIE LA ESCALA		REVISIÓN																									
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica				TÍTULO:																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th>NOMBRE</th> <th>FIRMA</th> <th>FECHA</th> <th></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>DIBUJ. Adolfo Benitez Molina</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>VERIF.</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>APROB.</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>FABR.</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>CALID.</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>				NOMBRE	FIRMA	FECHA		DIBUJ. Adolfo Benitez Molina				VERIF.				APROB.				FABR.				CALID.				LIITE Laboratorios de Investigación e Innovación en Tecnología Energética UANL FIME		N.º DE DIBUJO Rosca de sujeción	
NOMBRE	FIRMA	FECHA																													
DIBUJ. Adolfo Benitez Molina																															
VERIF.																															
APROB.																															
FABR.																															
CALID.																															
MATERIAL: El roscado será en función del roscado ubicado en la placa porta ventana.				ESCALA: 1:5		HOJA 1 DE 1																									
PESO:						A4																									



ACABADO:		REBARBAR Y ROMPER ARISTAS VIVAS		NO CAMBIE LA ESCALA		REVISIÓN	
				UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica			
DIBUJ. Adolfo Benitez Molina VERIF. APROB. FABR. CALID.				TÍTULO: 			
				N.º DE DIBUJO		A4	
				Placa porta ventana propuesta C			
PESO:				ESCALA: 1:5		HOJA 1 DE 1	



TRABAJOS FUTUROS

En la presente tesis de maestría se ha estudiado a profundidad el efecto de las propiedades de transporte y termo-físicas de un biodiesel derivado del aceite usado de cocina en el proceso de formación de mezcla mediante el análisis de la penetración del chorro usando el código libre de CFD OpenFOAM y empleando el computo de las propiedades por medio de correlaciones empíricas de grupos funcionales. A continuación se proponen algunas vías para darle continuidad al trabajo presentado y concluir la investigación.

- Dada la importancia que tiene el desarrollo de los parámetros macroscópicos como medio de análisis de la eficiencia de un motor es necesario profundizar más en su desarrollo, por esta razón es de sumo interés confirmar la penetración del chorro para cada mezcla expuesta en este trabajo con el objetivo de confirmar el aumento de la penetración por parte del biodiesel puro y de sus mezclas en comparación con la penetración del chorro de diesel, a fin de corroborar las posibles variaciones entre el dato simulado y el experimental.
- El código CFD OpenFOAM emplea información experimental para la determinación de la penetración, entre esta información se encuentra la presión de inyección y el medio ángulo del cono. Ésta es información relevante relaciona-

da con el proceso de mezcla. Estos parámetros se han determinado de manera analítica y no pudieron ser determinados de manera experimental, por lo tanto es de suma importancia por su relevancia determinar experimentalmente estos parámetros y el error recabado por cada uno de ellos en comparación con el dato teórico expuesto en el presente trabajo.

- La premisa principal del presente estudio recae en el efecto de las propiedades de transporte y termo-físicas de un biodiesel sobre la estructura dinámica del chorro, sin embargo estas propiedades fueron determinadas mediante correlaciones empíricas de grupos funcionales. A pesar de que estos modelos han sido ampliamente citados y corroborados, es de suma importancia contar con las propiedades más relevantes en el proceso de formación de mezcla con el objetivo de poder generar una librería de propiedades para la simulación y así corroborar el aumento de penetración debido a la variación en las propiedades de los biocombustibles.
- De la misma manera que la penetración y el ángulo del chorro la velocidad del chorro es un parámetro de sumo interés puesto que permite determinar la velocidad de incidencia del chorro así como la factibilidad para una mezcla exitosa, por lo tanto empleando alguna técnica óptica tal como el PIV (*Particle Image Velocity*) es posible determinar la velocidad de la punta del chorro y la incidencia de éste dentro de la fase estacionaria y analizar el efecto generado por la zona convectiva del chorro y la generación de turbulencia para determinar la contra presión adecuada que mejore el proceso de mezcla.
- Finalmente el flujo másico característico para cada biocombustibles esta en función de la densidad y de la presión de inyección, es de sumo interés conocer el flujo másico y la variación de este con el aumento de biodiesel en cada biocombustible.