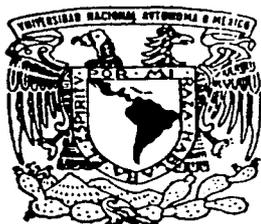


01127
21



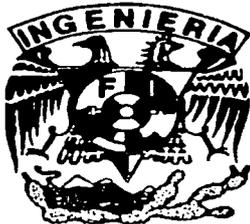
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**“SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA
COMBUSTIÓN Y FORMACIÓN DE
CONTAMINANTES EN LA CÁMARA DE UN
MOTOR ENCENDIDO POR CHISPA QUE
UTILIZA UNA SOBRE-OXIGENACIÓN”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO MECÁNICO
(ÁREA TERMOENERGÍA Y
MEJORAMIENTO AMBIENTAL)
P R E S E N T A:
FELIX RODRIGO NUNGARAY SANDOVAL



DIRECTOR DE TESIS: M. I. ESTEBAN BARRIOS BONILLA
CO-DIRECTOR: DR. WILLIAM VICENTE RODRÍGUEZ

MÉXICO, D.F., CD. UNIVERSITARIA

2003

A

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

PAGINACIÓN

DISCONTINUA

A Dios, por prestarme el tiempo y la sapiencia necesarios para llegar a este momento

A mi Madre, por sus desvelos, fatigas y tribulaciones que me dieron el ejemplo de perseverancia para conseguir esta meta

A mi Padre (que en Gloria esté), por sus oraciones y ejemplo de vida que han forjado al individuo en que me he convertido

A mis Hermanos, Jaime, Manuel, Bernabé y Sonia que siempre confiaron y nunca me permitieron desmayar; espero no defraudarlos

A Vero, por su amor y comprensión inseparables a lo largo de mi carrera, ya que sin ellos el camino hubiera resultado mucho más arduo

Al M. I. Esteban Barrios, por su paciencia, confianza y sabios consejos, espero que, después de todo, este trabajo sea tal como lo concibió

Al Dr. William por la ayuda e interés incondicionales que me prestó; por su disposición y cordialidad le brindo mi gratitud eterna

A mis Compañeros y Amigos de la FI ya que me han demostrado que la amistad es un aliciente incomparable para conseguir objetivos propios; en especial agradezco, por orden cronológico, a Marco, Oscar, Luis, Vladimir, Jorge, Alfredo, Iván, Arturo, Pablo y Eduardo

A la Facultad de Ingeniería, por ser la mejor Institución de enseñanza de Ingeniería en México y haberme permitido pisar sus aulas; espero poner su nombre muy en alto

CONTENIDO

Introducción	
Requerimientos sociales y tecnológicos	1
Métodos de predicción	2
Objetivo de la Tesis	3
Estructura de la Tesis	3
1	
Capítulo 1	
Origen de la contaminación en la Ciudad de México	5
Sector del transporte	5
Los contaminantes del aire	6
Óxidos de azufre	6
Monóxido de carbono	8
Óxidos de nitrógeno	8
Ozono	9
Hidrocarburos	11
Efectos de los contaminantes del aire	11
En la salud	11
En la vegetación y la fauna	11
En los materiales	13
El efecto invernadero	13
Fuentes móviles de contaminación del aire	14
Normas de calidad del aire	16
Índices de calidad del aire	17
Modificaciones realizadas a los vehículos y a los combustibles con la finalidad de disminuir las emisiones a la atmósfera	18
Bibliografía del Capítulo 1	23
2	
Capítulo 2	
2.1 Fundamentos termodinámicos	24
Ecuaciones de estado de gas ideal	24
2.2 Termodinámica química	28
Entalpías de reacción y de formación	28
Energía libre y constantes de equilibrio	30
2.3 Cinética química	38
Velocidades de reacción y su dependencia con la temperatura	38
La expresión de Arrhenius	39
Reacciones simultáneas interdependientes	41

2.4 Ciclos de gas	42
Adición de calor a volumen constante	42
Adición de calor a presión constante	44
Ciclos duales	46
Discusión	47
2.5 Motores encendidos por chispa	49
2.6 Modelo matemático básico de un Motor de Combustión Interna	51
Suministro arbitrario de calor	51
Pérdidas de calor	52
Pérdidas de masa	53
2.7 Estequiometría y composición de los residuos de una mezcla aire-oxígeno-combustible	55
Cálculo de la capacidad térmica específica de la mezcla	58
2.8 Equilibrio de los productos de la combustión	60
Formulación	64
Solución	65
2.9 Procesos isentrópicos y de combustión	71
Combustión	74
2.10 Gases quemados	76
Óxidos de nitrógeno	76
Monóxido de carbono	78
Otras reacciones	79
2.11 Modelo matemático modificado de un Motor de Combustión Interna	81
2.12 Pérdidas de calor y masa	87
Pérdidas de calor por convección	87
Propiedades de transporte en una mezcla de gases	88
Pérdidas de masa	90
Bibliografía del Capítulo 2	92
3 Capítulo 3	
Simulación numérica	94
Bibliografía del Capítulo 3	101
4 Capítulo 4	
Resultados de la simulación	102
Simulación con parámetros fijos	103
Simulación con parámetro variable	111
5 Capítulo 5	
Validación de resultados	119
Bibliografía del Capítulo 5	131
6 Capítulo 6	
Conclusiones y trabajo futuro	132

Apéndices

A	Coefficientes de polinomios ajustados para calcular propiedades de algunas especies químicas según las ecuaciones (2.1.22)-(2.1.24)	136
B	Coefficientes de polinomios ajustados para calcular propiedades de algunas especies químicas según la ecuación (2.1.25)	137
C	Derivación de una fórmula para calcular el volumen instantáneo de la cámara de combustión	138
D	Derivadas termodinámicas	140
E	Fórmulas para el cálculo de áreas y volúmenes	141
F	Eficiencia en los ciclos aire-oxígeno-combustible	150
G	Subrutinas necesarias para realizar la simulación	153

INTRODUCCIÓN

Requerimientos Sociales y Tecnológicos

El motor de combustión interna es, por diversas razones, una opción atractiva como sistema de producción de potencia en numerosas aplicaciones industriales. Para la industria automotriz, el motor de combustión interna es el mecanismo que produce la potencia útil que requieren los vehículos para su locomoción. Versiones adaptadas de estos motores empezaron pronto a usarse para otros usos industriales como estaciones de bombeo y producción de electricidad.

Cuando se realiza un análisis de la viabilidad de los sistemas con motores de combustión interna, sean estacionarios o móviles, la presión social obliga a incluir, como en otros sistemas productores de potencia, consideraciones medioambientales. La mayor eficiencia de estos sistemas reduce, por MW generado, las emisiones de CO₂, cuyo impacto en el llamado "efecto invernadero" ha sido extensamente debatido. Otras sustancias contaminantes producidas en sistemas con combustión incluyen CO, nocivo para la salud, y óxidos de nitrógeno (conocidos colectivamente como NOx), con repercusiones en la lluvia ácida y sobre la capa de ozono.

Las emisiones de NOx de estos sistemas, particularmente, están reguladas por normas medioambientales cada vez más estrictas. Por ejemplo, las emisiones de CO, HC (hidrocarburos no quemados) y humos establecidas por la Norma Oficial Mexicana NOM-CCAT-003-ECOL/1993¹ son de 700 ppm de HC y 6% en volumen de CO para automotores modelo 1979 y anteriores, 500 ppm HC y 4% Vol. CO para modelos 1980-1986, 400 ppm HC y 3% Vol. CO para modelos 1987-1993 y 200 ppm HC y 2% Vol. CO para modelos 1994 y posterior. Además, como se verá en el Capítulo 1, las emisiones de los vehículos automotores son una de las principales fuentes que contribuyen a la contaminación atmosférica en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México.

Por tanto, existe una demanda tecnológica para desarrollar u operar motores de combustión interna que permitan alcanzar bajos niveles de emisiones contaminantes (principalmente HC, CO y NOx) a un bajo costo. En el proceso de combustión, los NOx se producen debido a la disociación del nitrógeno presente en el aire requerido para la combustión por las elevadas temperaturas que se alcanzan durante el proceso. Para esto se han creado y puesto en marcha un gran número de programas e innovaciones tecnológicas que han permitido la reducción de las emisiones contaminantes en tales sistemas. Una de tales innovaciones es la llamada «carburación sobre-oxigenada», proceso que permite, al menos teóricamente, reducir las emisiones de óxidos de nitrógeno (NOx) principalmente, contaminante fundamental como precursor de la formación de ozono en la atmósfera baja del planeta (ver Capítulo 1). La combustión oxigenada consiste en agregar oxígeno puro, O₂, a la combustión que se realiza con el aire atmosférico. Este enriquecimiento consiste en premezclar el oxígeno puro con el aire atmosférico en una relación adecuada de gasto volumétrico y conducir el aire enriquecido a la cámara de combustión donde se mezcla, a su vez, con el combustible.

Sin embargo, el proceso de combustión oxigenada puede traer consigo ciertos problemas, ya que como se logra una mejor asociación del oxígeno con el combustible se origina sobrecalentamiento, que produce mayor desgaste en los componentes del motor; esto sin contar con que la mayor presencia de un oxidante como el oxígeno, con afinidad química con la mayoría de los metales, puede ocasionar corrosión.

¹ *Diario Oficial de la Federación*, 22 de octubre de 1993

Como corolario de lo expuesto, para el diseño y operación de motores de combustión interna limpios y eficientes se hace imprescindible dotarse de herramientas capaces de predecir con precisión el flujo, la combustión y la formación de contaminantes, y sus complejas interacciones. Éste es el contexto en el que se ha desarrollado la presente Tesis.

Métodos de Predicción

En el epígrafe anterior ha quedado establecido que el diseño y operación de motores de combustión que sean eficientes y poco contaminantes requiere un conocimiento de las características del flujo y de su interacción con la cinética química de la combustión.

El sistema a analizar es por tanto de geometría multidimensional y consta de una mezcla multicomponente de gases que están reaccionando químicamente. El flujo dentro de la cámara de combustión, como en la mayoría de las aplicaciones industriales, es turbulento. El sistema se puede analizar mediante dos técnicas: ensayos experimentales en laboratorio y simulación numérica.

El trabajo experimental requiere un prototipo o un modelo físico a escala del sistema donde se puedan hacer los ensayos, cuya construcción y operación es frecuentemente costosa y lenta. Por otro lado, las mediciones requieren técnicas de medida fiables y no intrusivas, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en modelo o en prototipo.

El coste y las escalas temporales asociadas a la experimentación están promoviendo el uso (frecuentemente con carácter complementario) de la simulación numérica. Esta es a menudo más económica que la experimentación, y proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo.

Cuando en un flujo turbulento ocurre un proceso de combustión, como en el problema abordado en esta Tesis, el análisis numérico del problema tiene la dificultad añadida de la interacción entre la aerodinámica y la cinética química, interacción que tiene lugar en las más pequeñas escalas del flujo turbulento. A esta dificultad se suma la complejidad de la cinética química de la combustión, que involucra, incluso para los combustibles más simples, un gran número de reacciones y de especies. Por ejemplo, en la combustión del metano y aire, uno de los mecanismos más generalmente admitidos en la actualidad, es el llamado mecanismo GRI 2.11, que está compuesto de 279 reacciones y 49 especies.

Para simular el flujo, con un enfoque diferencial, se tienen básicamente tres alternativas: la Simulación Numérica directa (Direct Numerical Simulation, DNS), el uso de Ecuaciones Promediadas (Reynolds —o Favre— Averaged Navier-Stokes Equations, RANS) y la Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES).

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo, válidas tanto para flujo laminar como turbulento, y resolverlas numéricamente. Las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las de cantidad de movimiento, la de la energía y las de las especies químicas. La discretización resuelve todas las escalas, espaciales y temporales, de las variables del flujo, y por tanto no requiere de ninguna aproximación o modelo. En un flujo turbulento sin reacción, para capturar todas las escalas el número de puntos de la discretización (espacio temporal) es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo. Si el problema incluye especies reactivas, como es el caso, aparecerán escalas aun menores, que exigirán más detalles en la simulación. Como el flujo del sistema de interés es casi siempre turbulento y con un número de Reynolds alto, la aplicación de este método está limitada por la potencia de los equipos de cálculo.

La aproximación de la Simulación de Grandes Escalas trata de resolver las ecuaciones para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas. Aunque esta técnica puede mejorar sustancialmente la predicción de la aerodinámica del flujo, sobre todo en flujos con estructuras transitorias de vorticidad que denominan los procesos, la mayor parte de las reacciones

químicas asociadas a la combustión siguen sucediendo en estructuras que están por debajo de la resolución de la malla, y por lo tanto hay que modelar su efecto en las estructuras resueltas.

Otra posibilidad de simulación es la de Ecuaciones Promediadas, extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial, y que consiste en promediar todas las escalas, espaciales y temporales, de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema.

Por la complejidad del enfoque diferencial, se emplea (al igual que en esta tesis) un enfoque de tipo global, que describe al flujo de forma integral. Esta alternativa será descrita con más detalle en el Capítulo 2.

Objetivo de la Tesis

El objetivo de la Tesis es simular numéricamente las etapas de compresión, combustión y expansión, de un Motor de Combustión Interna (MCI). Esta simulación permitirá, a partir de algunos datos operacionales del motor simulado, tener un conocimiento de los parámetros importantes de su funcionamiento tales como presión a lo largo del ciclo, trabajo realizado, eficiencia de las etapas, presión media efectiva, etc., además de la composición de la mezcla dentro de la cámara, que incluye 10 especies químicas.

Debido a que algunos de los datos necesarios para la simulación son las características geométricas y mecánicas del motor (diámetro de la cámara, longitud de la carrera, longitud de la biela, razón de compresión y posición de la bujía), es posible afirmar que el programa de simulación obtenido es aplicable a cualquier motor, con la única restricción de que sólo tenga una bujía.

Para efectuar la simulación se parte del análisis de la ecuación diferencial de conservación de la energía aplicada a un sistema abierto, donde el volumen de control representa el contenido del cilindro. Por medio de consideraciones termodinámicas, se derivan de esta ecuación de conservación un sistema de 6 ecuaciones diferenciales interdependientes que relacionan la variación respecto al ángulo del cigüeñal de parámetros tales como *presión, temperatura de los gases no quemados, temperatura de los gases quemados, trabajo realizado, pérdidas de calor y pérdidas de entalpía*. Para modelar la combustión se utilizaron un total de 8 reacciones químicas que muestran la interacción entre las 10 especies químicas de interés (CO_2 , H_2O , N_2 , O_2 , CO , H_2 , H , O , OH y NO), contando, entre ellas, con el mecanismo de Zeldovich para la formación de NO ; con estas 8 reacciones químicas y sus respectivas constantes de reacción, se deriva un sistema de 10 ecuaciones diferenciales que representan las velocidades de formación (o destrucción) de las 10 especies. Ambos sistemas de ecuaciones diferenciales se resuelven con métodos iterativos de Runge-Kutta de orden 4 con valor inicial.

Estructura de la Tesis

Tras este capítulo introductorio, el Capítulo 1 comienza con la presentación del tema de la contaminación atmosférica y se analiza este fenómeno en perspectiva, observando los efectos que tiene sobre la salud, las plantas y animales, los materiales, etc. Además, se da una breve explicación de los esfuerzos que se están llevando a cabo para reducir emisiones en equipos automotores. Posteriormente, se revisa la legislación vigente al respecto, así como los planes de control que se tienen en la Ciudad de México.

En el Capítulo 2 se abordan los temas teóricos medulares para la realización de este trabajo, que son los siguientes:

- Revisión de los fundamentos termodinámicos de los gases ideales.

- Se introduce en los conceptos de termodinámica química para comprender porque el estado de equilibrio de una reacción es equivalente a minimizar la energía libre de Gibbs y como se enlaza este hecho con la definición de las constantes de equilibrio.
- Se estudian de manera breve algunos conceptos de cinética química y como hace uso de las constantes de equilibrio definidas.
- Se analizan los ciclos de gases: Otto, Diesel y Dual, vistos como un primer modelo de una máquina de combustión interna.
- Se revisan los conceptos esenciales de un MCI y se hace (Sección 2.6) un primer y muy básico modelo matemático.
- Se analiza la composición de los residuos de una mezcla aire-oxígeno-combustible para pasar al equilibrio de los productos de la combustión con 10 especies.
- Se revisan los procesos isentrópicos que conducen al cálculo de la temperatura de flama adiabática.
- Se hace un estudio de los gases quemados producto de la combustión para determinar los mecanismos de formación-destrucción de especies químicas (i.e. Zeldovich) y así conseguir (Sección 2.11) un segundo y más completo modelo matemático de un MCI.
- Se revisa el cálculo de las pérdidas de calor y masa de un MCI.

En el Capítulo 3 se detalla la forma en que se realiza la simulación numérica del proceso completo de compresión-combustión-expansión de un MCI, así como las subrutinas desarrolladas.

El Capítulo 4 muestra los resultados obtenidos de la simulación en sus dos vertientes: *simulación con parámetros fijos* y *simulación con parámetro variable*.

En el Capítulo 5 se muestra la validación de los resultados obtenidos por medio de la simulación mediante su comparación con datos de experimentales

En el capítulo 6 se dan las conclusiones que se derivan del trabajo realizado, así como recomendaciones para trabajos futuros con vistas a mejorar el trabajo aquí presentado.

Por último, se presentan 7 Apéndices donde se resumen varias tablas y fórmulas necesarias para la realización de la simulación, así como su código fuente (archivos *.m para Matlab).

CAPÍTULO 1

En este Capítulo se profundiza en el problema de la contaminación atmosférica, observando los efectos que tiene sobre la salud, las plantas y animales, los materiales, etc. Se da una breve explicación de los esfuerzos que se están llevando a cabo para reducir emisiones en equipos automotores y se revisa la legislación vigente al respecto, así como los planes de control que se tienen en la Ciudad de México.

Origen de la contaminación en la Ciudad de México

La Tabla 1.1 muestra las fuentes de contaminación de la Ciudad de México clasificados según su origen y tipo de contaminante, donde se observa el importante lugar que ocupa el transporte.

**Tabla 1.1 Inventario de emisiones 1994,
contribución porcentual de los sectores por contaminante**

Sector	Contaminante (%)											
	PST		SO ₂		CO		NOx		HC		Total	
	año	%	año	%	año	%	año	%	año	%	año	%
Industria	1253	1	8667	82.4	203	0.1	2188	10.2	3406	7.3	15717	3
Servicios	15	ns	206	2	159	0.1	62	0.3	16108	34.7	16550	4
Transporte	2396	2	1649	15.6	268380	99.8	19139	89.5	26967	58.0	318531	68
Vegetación y suelos	119711	97									119711	25
Total	123375	100	10522	100	268742	100	21389	100	46481	100	470509	100

Nota: no incluye distribución de gas L. P.

Fuente: Ine et al., 1998

Sector del Transporte

El parque vehicular de la zona metropolitana ha crecido de manera persistente durante los últimos años con tasas cercanas al 10% anual. Entre 1950 y 1989, los automóviles aumentaron en más de 24 veces, mientras que la población lo hizo en 3.4 veces; si en 1940 existía un vehículo por cada 36 habitantes, en 1989 la proporción era de 1 a 6. se estima que actualmente circulan más de 3 millones de automotores y que aproximadamente un 45% de ellos tienen más de 10 años de uso (Comisión Metropolitana para la Prevención y Control de la Contaminación del Valle de México, 1995).

La Zona Metropolitana de la Ciudad de México supera en casi 150 veces el consumo energético promedio nacional. Como resultado, el sector transporte contribuye con 71.3% de los óxidos de nitrógeno y 70.9% de hidrocarburos.

Destacan los autos particulares (25% a 32% del total), los taxis y los colectivos. La cantidad de combustible que utilizan es muy elevada; entre 1970 y 1988 su consumo se incrementó más del doble y representó un tercio del total nacional. En 1980 los automóviles particulares y taxis consumieron 4,903 millones de litros de gasolina (13.4 millones diarios) y los autobuses y camiones 1,102 millones de litros

de diesel (23 millones diarios). Cabe destacar que un vehículo particular consume 15 veces más combustible por persona que el sistema colectivo.

Por otra parte, en el alto grado de contaminación provocada por el transporte influye también la altitud. En la Ciudad de México, a 2240 msnm, un metro cúbico de aire contiene 212 gramos de oxígeno mientras que al nivel del mar 275. La eficiencia de combustión de un automóvil bien afinado es, por tanto, de 92% al nivel del mar y de 69% en el DF.

Los contaminantes del aire

La cantidad de sustancias que pueden emitirse al aire y permanecer en él es muy grande y variada, por lo que la clasificación de las mismas puede también ser muy amplia.

Podemos, en principio, clasificar a los contaminantes en dos grandes grupos:

- Contaminantes primarios: Son aquellos que proceden directamente de las fuentes de emisión.
- Contaminantes secundarios: Aquellos que se originan por intersección química entre los contaminantes primarios y las sustancias presentes en la atmósfera.

Otra forma de clasificarlos es por sus propiedades fisicoquímicas. En la Tabla 1.2 se presentan los principales contaminantes.

La calidad del aire se establece con base en los contaminantes que se encuentran con mayor frecuencia y en mayores concentraciones en el aire de los grandes centros urbanos e industriales. A estos contaminantes se les denomina «criterio». Para cada uno de ellos se determinan concentraciones límites, permisibles o estándares y cuando la concentración de dichos contaminantes se encuentra por debajo de esas concentraciones, se tiene un aire de buena calidad. Los contaminantes atmosféricos que se consideran en la mayoría de las normas internacionales son: dióxido de azufre, monóxido de carbono, partículas suspendidas totales (actualmente se consideran también las PM_{10} que son partículas menores a 10 micras), los oxidantes fotoquímicos y los óxidos de nitrógeno. Los hidrocarburos no metálicos también se mencionan porque en conjunto con los óxidos de nitrógeno son precursores de los oxidantes.

Las fuentes contaminantes se han clasificado en:

- Fuentes fijas. Toda instalación establecida en un solo lugar, que tenga como finalidad desarrollar operaciones y procesos industriales, comerciales, de servicio o actividades que puedan generar emisiones contaminantes a la atmósfera.
- Fuentes móviles. Aviones, helicópteros, ferrocarriles, tranvías, tractocamiones, autobuses integrales, camiones, automóviles, motocicletas, embarcaciones, equipo y maquinarias no fijos con motores de combustión y similares, que con motivo de su operación generen o puedan generar emisiones contaminantes a la atmósfera.

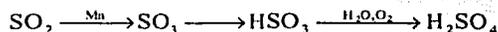
Óxidos de azufre

El dióxido de azufre es un gas incoloro que en altas concentraciones tiene un olor irritante, se difunde fácilmente en el aire, es muy soluble en el agua y forma ácido sulfuroso (H_2SO_3). De sus fuentes naturales la principal es la erupción volcánica. Su presencia en la atmósfera se debe a la quema de combustibles fósiles que contienen azufre, como el Diesel y el combustóleo, utilizados en la industria o por transportes de carga, también los emite la industria de la fundición, la del papel y la del petróleo.

Tabla 1.2
Clasificación de los contaminantes atmosféricos

Clase	Subclase	Contaminantes primarios	Contaminantes secundarios
Gases y vapores inorgánicos	Compuestos de Azufre	SO ₂ , H ₂ S	SO ₃ , H ₂ SO ₄
	Compuestos de nitrógeno	NO, NH ₃	NO ₂ , HNO ₃
	Óxidos de carbono	CO, CO ₂	
	Otros	HCl, HF, C ₂ F ₆ , H ₂	O ₃
Gases y vapores orgánicos	Hidrocarburos	Metano CH ₄ , Butano C ₃ H ₈ , Benceno C ₆ H ₆ , Fenoles, Acetileno, Etileno, Butadieno, etc.	Aldehídos, peroxirradicales, cetonas, ácidos, alcoholes
	Aldehídos, cetonas y otros	Formaldehído, acetona, alcoholes, hidrocarburos clorados, ácidos orgánicos, etc.	
Partículas	Partículas sólidas	Humo, polvo, plomo, cenizas, carbón, asbesto.	
	Partículas líquidas	Aerosoles, grasas, niebla.	

El SO₂ puede reaccionar en forma catalítica o fotoquímica para formar trióxido de azufre SO₃. En el aire, por la presencia de algunos metales como hierro o manganeso que actúan como catalizadores se lleva a cabo la siguiente reacción:



El mecanismo fotoquímico por el cual el SO₂ se convierte en SO₃ depende mucho de la atmósfera que lo rodea y puede deberse al oxígeno, al ozono y a la presencia de óxidos de nitrógeno o hidrocarburos. El trióxido de azufre se disuelve en las gotas de agua presentes en la atmósfera formando el ácido sulfuroso, para después pasar a ácido sulfúrico.

La presencia de este ácido provoca otro tipo de problema en el medio ambiente, ya que cuando llueve se mezcla con el agua y provoca la «lluvia ácida», debido a que al estar presente un ácido en la lluvia, el pH se modifica a valores menores, ocasionando diferentes tipos de daños como es la corrosión de los metales, el deterioro de estructuras de piedra y severos daños a la vegetación. En algunas ciudades

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

europas, el pH de algunos lagos ha descendido a niveles que ponen en riesgo la supervivencia de las especies vegetales y animales que a pH's menores a 4 mueren.

Por otra parte el SO₂ en presencia de amonio puede formar sulfato de amonio en forma de partículas que, por su tamaño, pueden penetrar en la parte más profunda de los pulmones, produciendo graves daños en la salud. El SO₂ y los compuestos que se derivan de él tienen alta tendencia a formar aerosoles ácidos con tiempos de residencia de hasta varios días, durante los cuales el viento puede llevarlos a kilómetros de distancia en lugares donde no se espera la presencia de este tipo de compuestos.

Monóxido de carbono

El monóxido de carbono es un gas incoloro e inodoro. Hasta hace tres décadas la fuente principal de su emisión era la quema de combustibles para la industria y la calefacción, pero, en la actualidad, la fuente más importante, sobre todo en áreas urbanas, son los automóviles con motor de combustión interna. A una escala global, también se producen grandes cantidades de monóxido de carbono a partir de la oxidación del metano por el radical hidroxilo (OH). El monóxido de carbono tiene acción tóxica en el ser humano por su afinidad con la hemoglobina a la cual se enlaza disminuyendo el transporte del oxígeno en el cuerpo. El grado de daño producido dependerá del tiempo de exposición y la concentración del contaminante.

La concentración de monóxido de carbono en áreas urbanas presenta variaciones, diarias y semanales, que se relacionan en gran medida con los patrones del tránsito vehicular donde los horarios picos se presentan en la mañana y en la tarde en los días hábiles, de igual modo hay variaciones estacionales que dependen mucho de las condiciones meteorológicas. Las tendencias anuales son muy dependientes del crecimiento de la población vehicular. El tiempo de residencia del CO en la atmósfera va de 1 mes a 1 año. Se ha observado que el mecanismo de remoción natural del CO involucra su oxidación por el radical hidroxilo para formar dióxido de carbono. También se ha mostrado que la acción biológica de los suelos puede ser un factor importante en la remoción del CO [2].



Óxidos de nitrógeno

Los óxidos de nitrógeno generalmente se representan por el símbolo NO_x; los dos contaminantes principales son el óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂). El primero de ellos es incoloro, pero en la atmósfera por efecto de las reacciones fotoquímicas pasa a NO₂ que es un humo color café rojizo característico de las chimeneas de plantas de ácido nítrico, además es el principal responsable del color característico de la capa de *smog*. Otros óxidos de nitrógeno son el óxido nitroso (N₂O) que es incoloro, y el que más abunda en la baja atmósfera porque es producido por acción biológica, ya en la atmósfera se transforma en NO; el N₂O₃, de color café que es inestable y al reaccionar con agua produce ácido nítrico (HNO₂) y finalmente el N₂O₅, que es incoloro e inestable y al reaccionar con el agua produce ácido nítrico HNO₃.

Los óxidos de nitrógeno emergen en forma natural por la acción biológica en los suelos y se incrementan por la aplicación de fertilizantes artificiales. Las fuentes fijas de ácido nítrico son las plantas de generación de energía y los calentadores industriales. Las fuentes móviles aportan la mayor parte de los contaminantes mencionados, pues se producen en altas temperaturas en los motores de combustión interna, por la presencia del nitrógeno en el aire.

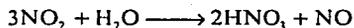
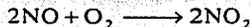
Formación de óxido nítrico en la troposfera alta y estratosfera [2, 3]:



Formación del óxido nítrico a altas temperaturas [2, 3]:



que es seguida de las siguientes reacciones [2, 3]:



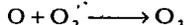
El dióxido de nitrógeno contribuye a la formación de aldehídos y cetonas, así como a la formación de ozono por procesos fotoquímicos.

El NO es irritante y daña los tejidos del tracto respiratorio, principalmente por la formación de ácido nítrico. El vapor de agua se combina con el NO₂ de la atmósfera para producir ácido nítrico, el cual también contribuye al descenso del pH en la formación de la lluvia ácida.

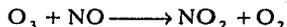
Ozono

El ozono no es un contaminante que se emita directamente a la atmósfera, sino que se forma en la atmósfera a partir de reacciones muy complejas en las que participan los óxidos de nitrógeno los hidrocarburos y la radiación solar. El resultado de todas estas complejas reacciones es la formación de lo que se conoce como *smog* fotoquímico. La palabra *smog* se deriva de la combinación de los vocablos *smoke*, humo y *fog* niebla, el término fotoquímico implica la participación de la energía radiante *hν*.

El mecanismo que inicia la producción de este *smog* fotoquímico es la absorción de energía por el NO₂, lo que ocasiona el rompimiento de la molécula en óxido nítrico y oxígeno atómico. Este último elemento es muy reactivo e inestable y reacciona inmediatamente con el oxígeno para formar ozono [2, 3].



Normalmente hay un ciclo en el cual el ozono reacciona con el NO y regresa a la molécula inicial de NO₂. Sin embargo, en episodios con altas concentraciones de ozono el ciclo se rompe, ya que algunos hidrocarburos reaccionan con el NO impidiendo que reaccione con el ozono [3].



Este grupo de reacciones que forman el llamado ciclo fotolítico del óxido de nitrógeno que se esquematiza en la Fig. 1.1.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

El ozono, a su vez, puede formar compuestos orgánicos complejos en la atmósfera al reaccionar con alquenos para producir compuestos que al igual que el ozono causan irritación en los ojos y el tracto respiratorio. Pruebas con voluntarios han mostrado que exposiciones de 30 ppm en forma intermitente durante dos semanas provocan dolor de cabeza, en el pecho y dificultad para respirar. El *smog* fotoquímico en la actualidad representa uno de los mayores problemas de contaminación en las grandes ciudades con alto flujo vehicular y fuerte radiación como es la de México, Los Ángeles y Nueva York en época de calor. En los lugares en donde se ha suprimido el plomo para mejorar el octanaje de las gasolinas, se ha adicionado una serie de compuestos orgánicos que realizan la misma función del plomo, pero a su vez intervienen en la formación de *smog* fotoquímico.

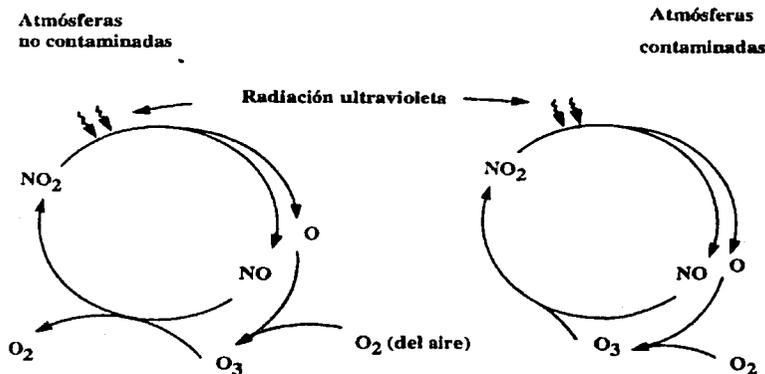


Figura 1.1 Ciclo fotolítico de los óxidos de nitrógeno [2]

El patrón de producción de ozono a partir de dióxido de nitrógeno, durante todo el día, es característico en las ciudades a horas altas de tránsito. El NO comienza a aparecer con el inicio del tránsito vehicular, al comienzo de la radiación solar el NO se oxida a NO₂, la concentración de NO₂ comienza a aumentar y alcanza un máximo cuando se establece un equilibrio entre su velocidad de formación y su velocidad de eliminación debido a la formación de ácido nítrico y nitratos orgánicos. Aproximadamente al mismo tiempo que se alcanza ese máximo comienza a formarse ozono, que alcanza un punto máximo, y disminuye a medida que se eleva la concentración inicial de NO (Fig. 1.2).

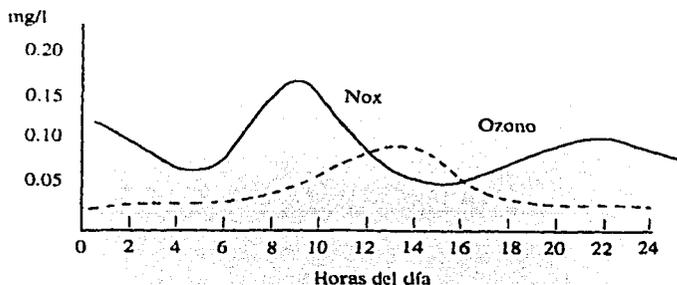


Figura 1.2 Evolución del ozono y los óxidos de nitrógeno a lo largo del día [2].

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Hidrocarburos

Como su nombre lo indica, son compuestos constituidos principalmente por carbono e hidrógeno. Son los componentes principales de combustibles como la gasolina y el petróleo. La gran variedad de hidrocarburos emitidos a la atmósfera por fuentes naturales y artificiales es tan alta que es muy difícil medirla o estimar el grado de emisión de cada una de ellas.

Entre las fuentes naturales de hidrocarburos tenemos la emisión de metano de pantanos y arrozales y los terpenos provenientes de la vegetación, como las más importantes. De entre las fuentes antropogénicas, las más importantes son la combustión incompleta de las gasolinas y la evaporación de la misma, seguida por las actividades industriales de refinación y petroquímica y de la evaporación de productos químicos utilizados en pinturas, tintorerías y producción de químicos. En general, se ha estimado que la vida media de la mayoría de los hidrocarburos en la atmósfera es del orden de días a meses, mientras que la del metano es del orden de años.

El hidrocarburo más común en la atmósfera es el metano, pero como su fuente principal es natural y para todos los efectos químicamente inerte, no se incluye en los hidrocarburos contaminantes del aire y su concentración se sustrae de las concentraciones medidas en las zonas urbanas.

Efectos de los contaminantes del aire

En la salud

La contaminación del aire puede afectar el cuerpo humano mediante el contacto con la piel, los ojos o el aparato respiratorio. En esta última forma es como mayor daño causa a la salud. Las enfermedades respiratorias más importantes en el estudio de los efectos de la contaminación son la bronquitis, el asma, el enfisema y el cáncer pulmonar.

Si dividimos el sistema respiratorio en tres partes: la estructura nasofaríngea, el sistema tractobronquial y los pulmones, podemos ver que si entran por la nariz partículas grandes pueden ser atrapadas por el vello nasal o por la mucosa y expelidas al toser o sonarse; partículas más pequeñas pueden penetrar en el sistema tractobronquial y ser capturadas por las mucosas y removidas al toser o expectorar, las partículas muy pequeñas pueden entrar hasta los alvéolos pulmonares y permanecer ahí indefinidamente causando irritación, o ser expelidas con el aire. Cuando además de las partículas se respiran gases irritantes como el ozono, óxidos de azufre y nitrógeno, las reacciones en todo el sistema respiratorio se vuelven más agudas y puede haber efecto sinérgico, es decir, el efecto total de dos contaminantes es mayor que el de ambos por separado. En la Tabla 1.3 se presentan algunos efectos en la salud de los principales contaminantes.

Las implicaciones de tipo económico simplemente desde el punto de vista salud son muy altas, en México no existen muchos estudios al respecto, pero en otros países al realizar estudios epidemiológicos, han mostrado que aunque el costo del control de la contaminación es muy alto, más alto es el costo que por medicamentos, hospitalización, tratamiento y horas hombre perdidas se ocasiona.

En la vegetación y en la fauna

Durante décadas los científicos han estudiado los efectos de la contaminación atmosférica en las plantas. Se ha observado aspectos visibles como la necrosis, la aparición de manchas, la disminución del crecimiento y la producción de flores y frutos. Se han especificado cuatro distintas clases de daño en la

vegetación: contaminación con compuestos tóxicos, pérdida de calidad, pérdida en la producción y disminución del valor estético.

El dióxido de azufre causa un fuerte daño a las plantas, las hojas aparecen con manchas blancas y en algunos casos con color rojizo; finalmente pierden la clorofila y dejan de crecer. También se ha informado que afecta el crecimiento de los pinos, el del centeno, de la espinaca, la alfalfa y otras especies. Los científicos piensan que la lluvia ácida es responsable de la muerte lenta de casi la tercera parte de los bosques en Alemania. Asimismo, en Norteamérica ha envenenado lagos y destruido muchos árboles. Las partículas gruesas depositadas directamente en la superficie de las hojas pueden reducir el intercambio gaseoso, incrementar la temperatura de la superficie, reducir la fotosíntesis, producir clorosis y causar finalmente la necrosis de las hojas. Si las partículas contienen metales pesados pueden ser tomados por la planta, donde se acumulan, hasta alcanzar concentraciones tóxicas para sus tejidos.

Tabla 1.3
Efectos en la salud de los contaminantes atmosféricos [2]

Contaminante	Efectos en la salud	Fuentes principales
Monóxido de carbono	El monóxido de carbono tiene una afinidad a la hemoglobina 200 veces más alta que el oxígeno, por ello, cuando hay presencia de CO en el cuerpo se enlaza a la hemoglobina de la sangre y forma carboxihemoglobina (COHb) que evita el transporte de oxígeno en la sangre y provoca, debido a que debilita las contracciones del corazón, sensación de asfixia, dolor de cabeza, disminución del rendimiento en el ejercicio y en los reflejos. El deterioro de la función mental en altas concentraciones puede producir un daño irreversible, problemas en la percepción visual, coronariopatías y arterioesclerosis.	Se genera por la combustión incompleta de combustibles. En las grandes urbes principalmente por los automóviles, aunque también lo genera la industria. El humo del cigarrillo contiene monóxido de carbono. Los niveles típicos en zonas urbanas oscilan entre 5 y 100 ppm.
Óxidos de azufre	El dióxido de azufre es muy soluble y se absorbe mediante los conductos del sistema respiratorio. Produce bronco constricción y agrava problemas de enfisema y asma. Su efecto irritante en las vías respiratorias se agudiza con la presencia de partículas en las cuales el gas se adsorbe y penetra a la región inferior del aparato respiratorio; este tipo de combinación ha estado presente en varios de los episodios trágicos por contaminación del aire.	Se emiten en forma natural por volcanes. Se producen también por la quema de combustibles fósiles como el carbón y el diesel y en los procesos de fundición de algunos minerales.
Partículas	La toxicidad y peligrosidad de las partículas depende principalmente de su composición química y de su tamaño. Las partículas mayores a 10 micrómetros se depositan en la región extratorácica del aparato respiratorio, mientras que las menores son las más nocivas, ya que pueden penetrar hasta los alvéolos y provocar enfermedades respiratorias. Las partículas carbónicas pueden absorber sustancias orgánicas que tienen actividad mutagénica y carcinógena. Algunos compuestos de plomo también forman parte de las partículas que producen problemas de tipo neuroconductual en niños y problemas en mujeres en edad reproductora.	Proceden de la quema de combustibles de los vehículos que utilizan diesel, de las chimeneas de las industrias de fundición, de pinturas, de cerámica y de plantas productoras de energía. Las tolvaneras y los incendios forestales constituyen también una fuente natural de partículas en el aire.
Ozono	El ozono es un potente oxidante que puede ejercer acción por dos mecanismos: oxidación de ácidos grasos polinsaturados o por la oxidación de grupos sulfhidrilo y aminoácidos de enzimas, proteínas y péptidos. Esto provoca una baja en la función pulmonar, en exposiciones prolongadas producen padecimientos como fibrosis pulmonar, irritación de ojos, nariz y garganta y depresión en la actividad motora.	Se producen en forma secundaria a partir de los óxidos de nitrógeno y otros oxidantes fotoquímicos.
Óxidos de nitrógeno	El dióxido de nitrógeno es corrosivo y tóxico, se disuelve en la capa soluble que cubre el epitelio bronquial, modificando el pH con lo que lesiona las células, altera los mecanismos de defensa y provoca, a largo plazo, la incidencia a enfermedades respiratorias. El NO parece no tener efectos adversos conocidos en la salud.	Se genera principalmente por los procesos de combustión interna de los automóviles, en las plantas de energía y en la combustión industrial de combustibles.

Algunas investigaciones han demostrado que los óxidos de nitrógeno afectan las hojas de los árboles de cítricos, produciéndoles clorosis y si se exponen a concentraciones de 0.25 ppm durante varios meses, se reduce la producción de naranjas. También se ha reportado que los oxigenantes fotoquímicos han tenido un significativo efecto negativo en el crecimiento de las papas y el frijol de soya.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

En el Valle de México se ha atribuido al ozono el daño provocado a especies como el tabaco, que muestra áreas de tejido decolorado y reducción en su desarrollo; cultivos de avena que muestran lesiones de tipo clorótico en el centro de las hojas; rábano que muestra lesiones cloróticas en el haz, frijol que muestra lesiones necróticas pigmentadas y senectud prematura; pasto que muestra lesiones cloróticas. También se ha evaluado tanto la muerte de una gran cantidad de oyameles como el daño a los pinos en el Desierto de los Leones, ambos ocasionados por los contaminantes oxidantes que les han producido defoliación prematura y lesiones cloróticas.

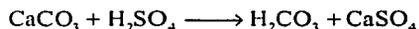
En la actualidad se conoce el efecto de varios contaminantes en los animales. En el caso de los cinco contaminantes principales, las reacciones en vertebrados mayores son muy similares a las del hombre, particularmente, una alta incidencia de enfermedades respiratorias. Los fluoruros que se depositan en el forraje pueden ocasionar que los animales sufran alteraciones en sus dentaduras y la deformación del esqueleto. En los pájaros la ingestión de pesticidas a través de la cadena alimenticia parece adelgazar la cáscara de sus huevos.

La población de ciertas especies de peces parece haber disminuido por efecto de la lluvia ácida y algunos invertebrados acuáticos han desaparecido de los lagos por efecto de altas concentraciones de metales. Aunque muchas veces los contaminantes no parecen tener gran efecto en vertebrados menores, si se acumulan y son consumidos por otros depredadores pueden llegar hasta el hombre.

En los materiales

El ozono degrada el hule, debilita los tejidos manchándolos o decolorándolos. La lluvia ácida corroe los metales y provoca daños en los materiales, principalmente en el mármol y en rocas calizas, ya que ambas contienen carbonato de calcio.

Una gran cantidad de obras de arte y de arquitectura han sido dañadas más en los últimos veinte años que a través de los 2 o 3 siglos anteriores, debido a la presencia de altas cantidades de SO_2 .



La corrosión de alambres eléctricos y telefónicos de níquel-cobre se ha asociado mucho con atmósferas contaminadas con óxidos de nitrógeno, ya que se encuentran altas concentraciones de nitratos. Los óxidos de nitrógeno causan daños a los textiles al igual que el ozono, provocando que se decoloren, además de causar que fibras como el algodón y el nailon se deterioren. El humo mancha varios tipos de telas.

El efecto invernadero

La Tierra, al recibir energía del Sol, la emite en forma de rayos infrarrojos, los cuales no escapan de la atmósfera, ya que especies como el CO_2 absorben esta radiación, manteniendo el calor en la superficie terrestre. A este fenómeno se le conoce como efecto invernadero, ya que el CO_2 actúa como el filtro o cristal de un invernadero que permite que la energía radiante pase a la tierra, pero no permite que salga la energía de ciertas longitudes de onda. Basados en esto, teóricamente un incremento en la concentración de CO_2 implicaría un aumento en la temperatura.

El CO_2 es un gas incoloro e inodoro que en sentido estricto no es un contaminante, ya que se produce en forma natural y no produce ningún daño específico, sin embargo, el hecho de que un aumento en la concentración pudiera ocasionar una modificación global perjudicial ha provocado que cada vez sea más estudiado y considerado como un tópico importante en todo lo que tiene que ver con contaminación

atmosférica. Se sabe que el destino final del CO_2 que se produce en el mundo por las actividades del hombre, son, por una parte, los océanos, en donde el plancton lo transforma y por otra la vegetación que lo utiliza en la fotosíntesis para producir oxígeno, pero en las últimas décadas la quema de combustibles ha sido tan grande que no ha podido ser transformado por la naturaleza y no se sabe a ciencia cierta lo que este excedente en la producción de CO_2 puede provocar.

Existe una enorme controversia sobre si el aumento del CO_2 en la atmósfera está ocasionando que la temperatura global de la tierra esté aumentando por el efecto invernadero mencionado. En 1950 la concentración del CO_2 era de 306 ppm, en 1960 la cifra se había incrementado a 313 ppm, para 1976 en 332 y para el 2000 ha alcanzado las 379 ppm. Por otra parte, la temperatura en la Tierra aumentó en 0.4°C de 1850 a 1940, aunque a partir de 1945 empezó a descender lentamente. Este descenso se ha explicado con el argumento de que cada vez hay mayor turbiedad en la atmósfera debido a la presencia de aerosoles y partículas que aumentan el albedo o reflectividad de la energía hacia el exterior, contrarrestando el efecto invernadero. Otros científicos manifiestan que el aumento o descenso de la temperatura global tiene un ciclo que no ha sido completamente comprendido por el ser humano.

De cualquier forma, se creó un Comité Internacional con fines de investigación sobre los cambios climáticos del mundo. Este comité declaró en noviembre de 1989 que la Tierra está calentándose nuevamente a partir de los 80, por lo que podría haber un incremento de 4°C para el año 2030. También algunos países han comenzado a tomar medidas para disminuir la emisión de gases que favorecen el efecto invernadero, como son el metano, los clorofluorocarbonos y los óxidos de nitrógeno. Los Estados Unidos de América en el año de 1991 destinaron un billón de dólares para la investigación sobre el calentamiento global y están siendo plantados millones de árboles en el mundo para ayudar a combatir el incremento del CO_2 . Más recientemente, por medio de los convenios firmados en Kyoto (1997), gran cantidad de países se comprometieron a una reducción paulatina y constante de emisiones contaminantes que afectan la atmósfera.

Fuentes móviles de contaminación del aire

La mayor parte de las emisiones de Compuestos Orgánicos Volátiles (COV) proceden del tubo de escape. Estas se controlan empleando reactores catalíticos e inyectando aire en los puertos de escape del motor para quemar los hidrocarburos que se emiten en esta zona de alta temperatura. Ninguno de estos procesos recupera energía útil, por lo cual los esfuerzos para modificar el diseño de los motores han sido intensivos, en particular desde 1973, cuando los precios del petróleo subieron de manera espectacular. Sin embargo, más del 20% de las emisiones de COV no controladas de los motores de automóvil provienen del respiradero del cárter (escape de gases de los cilindros y aceite lubricante evaporado) y del desfogue del carburador a la atmósfera. Estas emisiones se controlan utilizando un tubo de desfogue del cárter conectado al conducto de toma de aire del motor (que requiere una válvula de control de contaminación) y una unidad de absorción llamada «cánister de carbón» para las pérdidas por evaporación. A partir de 1985 los sistemas de inyección de combustible comenzaron a tomar el lugar de los carburadores; estos sistemas proporcionan una dosificación más precisa de combustible para los cilindros y una reducción significativa en la emisión de contaminantes. En 1989 se legislaron los límites de volatilidad de los combustibles, con lo cual se redujeron más aún las pérdidas por evaporación. En la actualidad se alienta el uso de combustibles oxigenados para reducir las emisiones de COV en el tubo de escape.

Como ya se ha mencionado, los investigadores han encontrado que es necesario reducir las emisiones de óxidos de nitrógeno para aminorar las emisiones de precursores de *smog* fotoquímico y lluvia ácida. La producción de óxidos de nitrógeno aumenta con gran rapidez con la temperatura de combustión, de modo que se cambió el diseño de los motores para bajar la temperatura de los cilindros,

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

principalmente reduciendo la relación de compresión del motor, modificando la sincronización del encendido (chispa) e introduciendo la recirculación de gases de escape. La Fig. 1.3 muestra el efecto de la recirculación de gases de escape en la producción de óxidos de nitrógeno para un motor de encendido por chispa.

Se generó inquietud por razones de salud en cuanto a que las emisiones de plomo se estaban aproximando a los límites de aceptabilidad en la atmósfera. El uso de gasolina libre de plomo era de hecho obligado, porque el plomo (alrededor de 3g/gal o 0.8 g/L en la gasolina con plomo de alto índice de octano) «envenena» el catalizador de los reactores y reduce en grado significativo su eficacia. La Tabla 1.4 muestra que las emisiones de un motor dependen en gran medida de la manera como se hace trabajar al motor, es decir, del modo de conducir.

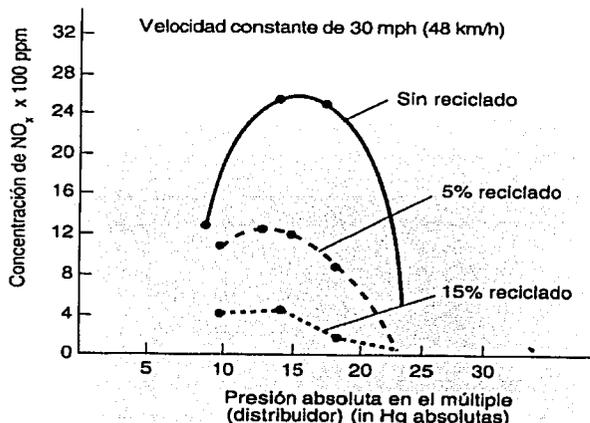


Figura 1.3 Reducción de los óxidos de nitrógeno en los gases de escape de los automóviles como resultado de la recirculación de los gases de escape [1].

Tabla 1.4

Concentración típica de CO, NOx e hidrocarburos en el escape de un motor de cuatro tiempos, encendido por chispa y equipado con carburador [1]

Modo de operación	Emisiones en el escape				
	Relación aire/combustible ^a	Flujo de gas (ft ³ /min)	NOx (ppm) ^b	HC (ppm) ^b	CO (ppm) ^b
Marcha mínima	12	6.5 - 7	30	350	17,000
Crucero					
Ciudad	13.5 - 14	40	1,000	200 - 400	6,000
Carretera	13.5 - 14	35	1,000	200 - 400	5,000
Aceleración					
Estrangulación parcial	13.3	45	1,700 - 2,500	350 - 400	7,000
Máxima	12.7	100 - 125	700 - 1,200	350 - 400	
Desaceleración					
Libre	12	6.8	60	1,200	
Con freno	12	6.8	60	1,200	18,000

^aEn términos de masa

^bEn términos de volumen

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La Fig. 1.4 es un diagrama esquematizado que muestra los componentes de un motor de encendido por chispa (con carburador), los puntos en los cuales se emiten contaminantes y el tipo y la magnitud relativa de la descarga de contaminantes en cada punto.

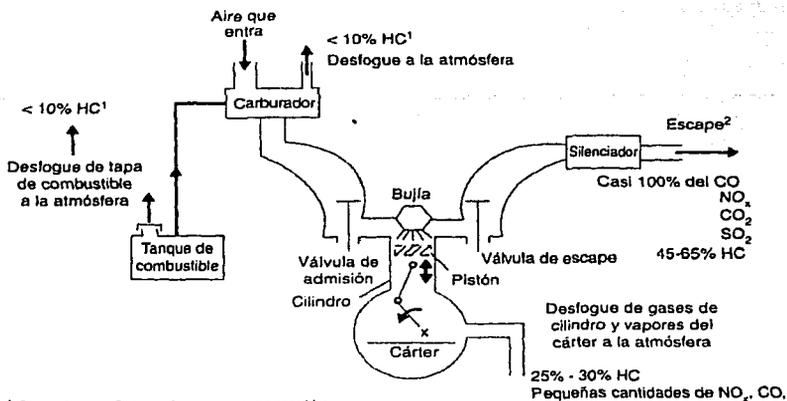


Figura 1.4 Diagrama que resume las cantidades relativas, así como su ubicación y los tipos de emisiones de un motor de encendido por chispa con carburador [1].

¹ Se reduce a 0 con el motor en operación.

² Se reduce a 0 con el motor apagado.

³ Para 1990 las emisiones del cárter casi se redujeron a 0 por modificaciones al motor.

Normas de calidad del aire

Las estaciones de monitoreo que miden la calidad del aire en una localidad involucran, además de las determinaciones de los contaminantes mencionados, sistemas de calibración y adquisición de datos, así como el monitoreo de parámetros meteorológicos. El conjunto de estaciones forman la red de monitoreo. Estas estaciones de monitoreo suelen utilizar métodos automáticos equivalentes a los métodos de referencia para la determinación de los contaminantes. Los sitios de monitoreo deben seleccionarse con base en los objetivos que tenga la estación de monitoreo y deben cumplir una serie de requisitos para su instalación.

En la ciudad de México, por ejemplo, existe una Red Automática de Monitoreo Atmosférico (RAMA) constituida por 25 estaciones y una red manual de 19 estaciones más. Las estaciones están distribuidas en cinco zonas: Centro, Noreste, Noroeste, Sureste y Suroeste, que cubren el Distrito Federal y 17 municipios conurbados.

La calidad del aire se determina con base en la concentración de los contaminantes llamados «criterio», para los cuales se determinan las concentraciones permisibles estándares. El establecimiento de estas concentraciones debe basarse en la información epidemiológica de los efectos adversos de los contaminantes en el medio ambiente, de la magnitud de la población y sus porcentajes correspondientes con los grupos más sensibles a los mencionados efectos, así como a su probabilidad de exposición a los compuestos contaminantes. También se deben tomar en cuenta la geografía y la climatología del lugar para el cual son determinados.

Dependiendo del objetivo, existen normas primarias y secundarias, las primeras son las que protegen a la salud de la población con ciertos márgenes de seguridad y las segundas definen la calidad del aire que protege el bienestar de la población, así como a los recursos naturales de cualquier efecto adverso conocido de los contaminantes.

En México se publicaron por primera vez las normas de calidad del aire en el *Diario Oficial de la Federación*, el 29 de noviembre de 1982 y el 3 de diciembre de 1994 se publicaron las normas que en la actualidad están vigentes en nuestro país.

Índices de calidad del aire

Para que la población en general pueda conocer en forma sencilla la calidad del aire que respira, se han creado los índices de calidad del aire, que ponderan y transforman los datos de concentración de un conjunto de contaminantes atmosféricos en un valor que indica el nivel de contaminación del aire en un determinado lugar. Es decir, estos índices representan una calificación cualitativa de la calidad del aire, determinada cuantitativamente. Para ello se construye una gráfica que debe estar constituida a partir de información científica de los efectos que cada contaminante tiene sobre la salud.

La mayoría de los países consideran cinco contaminantes: monóxido de carbono, dióxido de carbono, azufre, partículas suspendidas totales (PST), óxidos de nitrógeno y ozono. Para la construcción de cada gráfica generalmente se fija el índice en el eje de las *y* que tienen valores de 0 a 500, en el eje *x* van los valores de concentración.

En México se utiliza el IMECA (Índice Metropolitano de la Calidad del Aire) para los cinco contaminantes mencionados, además de una gráfica que mide el efecto sinérgico de las PST con el SO₂. La expresión empleada es:

$$\text{Imeca} = \text{Máx.}\{I(\text{PST}), I(\text{SO}_2), I(\text{CO}), I(\text{NO}_2), I(\text{O}_3), I(\text{PST} \times \text{SO}_2)\}$$

en la cual los términos entre paréntesis representan los subíndices correspondientes a cada uno de los indicadores.

Un valor Imeca de 100 puntos corresponde a la norma para cada contaminante, mientras que un valor Imeca de 500 representa niveles de contaminación para los cuales existen evidencias de daños significativos en la salud. La escala Imeca se define conforme a los criterios y concentraciones que se muestran en la Tabla 1.5.

Tabla 1.5
Concentraciones límite de la escala Imeca y criterios de calificación

Imeca	Calidad del aire	Contaminante y tiempo promedio					
		Promedio de					
		PST	PM10	SO ₂	NO ₂	CO	O ₃
		(24 h) µg/m ³	(24 h) µg/m ³	(24 h) ppm	(1 h) ppm	(8 h) ppm	(1 h) ppm
0-100	Satisfactoria	260	150	0.13	0.21	11	0.11
101-200	No satisfactoria	546	350	0.35	0.66	22	0.23
201-300	Mala	627	420	0.56	1.10	31	0.35
301-400	Mala	864	510	0.78	1.6	41	0.48
401-500	Muy mala	1000	600	1.00	2.00	50	0.60

Adaptado de: Ine et al., 1998

En la Tabla 1.6 se presentan las ecuaciones que permiten calcular el equivalente en puntos Imeca a partir de las concentraciones. Cada contaminante tiene dos ecuaciones, en función del intervalo en que se encuentren las concentraciones registradas.

Tabla 1.6
Algoritmo simplificado para el cálculo del Imeca

Contaminante	Intervalo	Ecuación
PST	0 a 275 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	$I(\text{PST}) = 0.36363636 \text{ CPST}$
	275 a 1000 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	$I(\text{PST}) = 0.36363636 \text{ CPST} - 51.72413$
SO_2	0 a 0.13 ppm	$I(\text{SO}_2) = 769.230769 \text{ CSO}_2$
	0.13 a 1.00 ppm	$I(\text{SO}_2) = 459.770114 \text{ CSO}_2 + 40.22989$
CO	0 a 13 ppm	$I(\text{CO}) = 7.692307 \text{ CCO}$
	13 a 50 ppm	$I(\text{CO}) = 10.8108109 \text{ CCO} - 40.5405$
NO_2	0 a 0.21 ppm	$I(\text{NO}_2) = 476.190476 \text{ CNO}_2$
	0.21 a 2.00 ppm	$I(\text{NO}_2) = 223.463687 \text{ CNO}_2 + 53.07264$
O_3	0 a 0.11 ppm	$I(\text{O}_3) = 909.090909 \text{ CO}_3$
	0.11 a 0.6 ppm	$I(\text{O}_3) = 816.326530 \text{ CO}_3 + 10.20409$

El Imeca tiene varias limitaciones, entre las cuales, quizá, la más importante es que los datos fueron obtenidos principalmente de índices de otras partes del mundo y no con base en estudios científicos que pueden revelar los daños potenciales que pueden producir contaminantes en una ciudad a 2200 m de altura con una orografía muy particular, prueba de ello es que los puntos de quiebre no fueron determinados con algún método que contemplara la información de eventos, sino que quedaron arbitrariamente asignados con base en el trazo de la recta entre los valores de índice 100 y 500.

Modificaciones realizadas a los vehículos y a los combustibles con la finalidad de disminuir las emisiones a la atmósfera

Entre las principales acciones para controlar la emisión de contaminantes a la atmósfera, se tienen las realizadas por los fabricantes de vehículos que han llevado a cabo una serie de modificaciones en el diseño de los mismos. Entre las más comunes se tienen:

- Control en el cárter
- Control de la evaporación
- Cambios en el diseño del motor
- Control de las emisiones en los gases por el uso de convertidores catalíticos
- Recirculación de los gases de escape
- Modificando el avance (tiempo en el cual la bujía proporciona la chispa)

Asimismo, se han realizado también modificaciones en la formulación de combustibles:

- Disminución en la adición de tetraetilo de plomo
- Mejoramiento de los combustibles
- Uso de combustibles alternativos

A continuación se hace una breve descripción de las modificaciones mencionadas.

Control en el cárter. El objetivo es impedir que los gases, por pérdida de compresión, escapen a la atmósfera. Existen varios sistemas de control, pero todos se basan en el mismo principio que es el de reciclar los gases de las pérdidas de compresión desde la bomba de aceite del motor al sistema de toma de aire. Se coloca además una válvula de control de flujo que limita éste cuando la velocidad del motor es baja y el vacío en la entrada de aire es elevado, mientras que cuando la velocidad del motor es alta se permite el flujo libre de los gases de ventilación provenientes de la pérdida de compresión. A este sistema se le conoce como sistema de ventilación positiva del cárter.

Control de la evaporación. Se han desarrollado dos métodos principalmente: El sistema de recuperación de vapor en el cual el cárter se utiliza como depósito de los vapores procedentes del tanque de gasolina y del carburador y una vez que el motor se pone en marcha, los vapores almacenados en el cárter se envían al sistema de toma de aire por medio del sistema de ventilación del cárter; este sistema consta también de un condensador y un separador vapor-líquido al que primero llega el vapor proveniente del tanque de gasolina, y una vez separado envía el vapor al cárter y el líquido de nuevo al tanque de gasolina.

Cambios en el diseño del motor. Antes de que aparecieran los estándares de emisión para NOx, los fabricantes de automóviles se abocaron a la disminución de la emisión de CO y HC utilizando diferentes sistemas cuyas características comunes fueron dar una relación aire-combustible relativamente pobres en ralentí y velocidad de crucero o aumentar la velocidad del motor en ralentí. Estas modificaciones tuvieron éxito ya que disminuyeron las emisiones de los contaminantes mencionados, pero a expensas de aumentar la emisión de NOx.

Para reducir las emisiones de NOx puede usarse una mezcla muy pobre aire-combustible ya que al disminuir la temperatura hay menor producción de NOx. También puede reducirse la emisión de NOx retrasando el encendido para una relación aire-combustible determinada, ya que este aplazamiento reduce la temperatura máxima del ciclo. Otro tipo de motor utilizado en los autos japoneses ha sido el motor rotatorio de Wankel en el que la combustión tiene lugar en una cámara por el árbol que gira. Tiene la ventaja de producir muy poco ruido y disminuir las concentraciones de NOx y las de CO, aunque para los HC es conveniente el uso de un convertidor catalítico.

Uso de los convertidores catalíticos. El uso de los convertidores catalíticos se ha extendido en muchas ciudades industrializadas del mundo. En los Estados Unidos comenzaron a utilizarse en forma irregular desde 1975 y en Europa a partir de 1987. En México su uso es obligatorio para todos los nuevos modelos a partir de 1991.

Los convertidores catalíticos son aditamentos que se colocan en el sistema de escape del vehículo con la finalidad de disminuir la emisión de los gases contaminantes producidos en la combustión en el motor a través de catalizadores, generalmente de metales nobles, que provocan la oxidación del monóxido de carbono y los hidrocarburos y la reducción de los NOx.

Cientos de investigadores han publicado acerca de los convertidores catalíticos, ya que el principal problema estriba en que para la eliminación de los óxidos de nitrógeno se necesitan condiciones reductoras, mientras que para remover los hidrocarburos y el monóxido de carbono se requiere llevar a cabo una oxidación. Una de las formas de resolver el problema fue la de construir un convertidor de dos camas, en la cual las reacciones de reducción y oxidación se llevan a cabo en una secuencia. Después se generó el convertidor de tres vías en el cual se llevan por un lado la oxidación del CO y HC y por el otro lado la reducción de los NOx (Fig. 1.5). Varios de estos catalizadores se basan en la combinación de

platino y rodio soportados sobre bloques de materiales cerámicos con altas superficies. Otras de las cosas que se mejoraron con la introducción de los convertidores catalíticos fue que como son envenenados por el plomo, este elemento ha ido desapareciendo cada vez más en los combustibles.

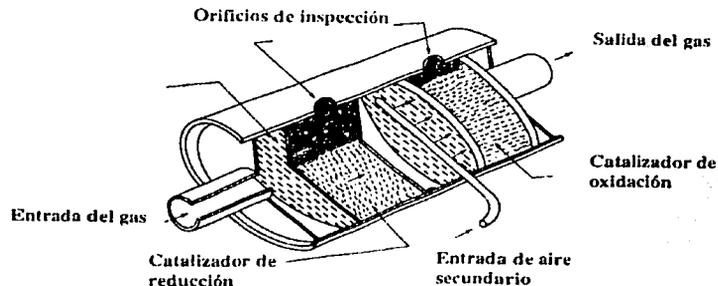


Figura 1.5 Convertidor catalítico de tres vías [2].

Recirculación de los gases de escape. Al aumentar la temperatura máxima de combustión, la concentración de óxidos aumenta. Durante la carrera de expansión la temperatura de los productos de combustión disminuye y los NOx no se descomponen debido a que son muy lentas las reacciones de descomposición y no tienen tiempo de completarse durante el desarrollo del ciclo. Debido a lo anterior es preciso reducir la temperatura de combustión, para poder reducir las emisiones de NOx.

La disminución se puede conseguir, aparte de una correcta relación aire-combustible y un avance del encendido menor al normal, con la dilución de la carga aspirada por el motor con un gas o una mezcla de gases inertes que no interfieran en la combustión. Para estos fines se emplean los gases de escape.

El uso de la recirculación de gases trae, sin embargo, efectos negativos, tales como la reducción de la potencia, ocasionar el engrase del lubricante y de las bujías superior al normal y puede provocar fenómenos de adherencia de los segmentos del pistón. Debido a esto el porcentaje del gas recirculado que se puede manejar es del 5 al 10%, que reduce las emisiones de NOx hasta en un 30%.

Para la recirculación el gas puede ser aspirado por el motor antes del filtro de aire o en la zona del carburador comprendida entre el difusor y la mariposa o, por último, directamente en el múltiple de admisión.

Modificando el avance. Retardando la chispa se disminuye el tiempo disponible para la producción de altas temperaturas. Aumentando el tiempo en el que la combustión ocurre en el ciclo se incrementa el pico de presión del cilindro (ya que es quemado más combustible antes del Punto Muerto Superior, PMS, y el pico de presión se mueve más cerca del PMS donde el volumen del cilindro es menor). Retardando el tiempo disminuye el pico de presión del cilindro (ya que la mayor parte del combustible se quema después del PMS). Picos de presión más altos en el cilindro producen picos en la temperatura de gas quemado y, por tanto, mayor producción de NO.

Disminución en la adición de tetraetilo de plomo. Con la finalidad de aumentar el octanaje de los automóviles, ha sido tradicional el agregar pequeñas cantidades de tetraetilo de plomo (PbC_2H_4)₄. No se conoce exactamente la forma en que opera, pero la adición de 3 g/galón puede mejorar el octanaje 10 unidades. Esta práctica ha provocado que las concentraciones de plomo en la atmósfera se hayan incrementado cada vez más, llegando a límites peligrosos.

Cuando la gasolina se quema, el calor de combustión se transforma en energía mecánica, si esto se hace en una cámara de compresión se tiene una combustión más eficiente, pero al mismo tiempo hay una tendencia a tener preignición del combustible comprimido, teniendo como consecuencia pérdida de poder y una vibración conocida como cascabeleo. Como los autos están contruidos con altas relaciones de compresión, se desarrollaron mejores combustibles para disminuir la tendencia a la preignición y se escogió para evaluar la calidad de los combustibles en ese sentido, un hidrocarburo de referencia llamado isoocatano al que se le atribuye un número de octano de 100, mientras que al heptano, que produce un cascabeleo muy fuerte se le asignó un valor cero. Las distintas mezclas de estos hidrocarburos dan valores intermedios y con ellas se comparan las propiedades de octanaje de otros hidrocarburos. Es importante aclarar que hay hidrocarburos muy ramificados o aromáticos que se queman más suavemente que el isoocatano, pudiendo dar valores de octanaje por arriba de 100, como el benceno que tiene 106.

La reducción y gradual eliminación del plomo en las gasolinas ha venido llevándose a cabo en varios países, incluido el nuestro, principalmente porque envenena a los convertidores catalíticos.

Mejoramiento de los combustibles. Otra de las formas que se han utilizado para disminuir las emisiones contaminantes ha sido el mejoramiento de combustibles, cambiándolos por otros que tengan menos componentes secundarios, como el azufre, que tengan una combustión más eficiente y sean menos volátiles y menos reactivos.

Sin embargo, debe tomarse en cuenta que muchas veces estas modificaciones solamente puede ser de tipo local, ya que las diferentes condiciones climáticas provocan que haya distintos patrones en el manejo de los autos y sus emisiones sean distintas también. Por ejemplo, si se reduce la volatilidad del combustible, ello puede provocar problemas en el encendido y el calentamiento en los climas fríos.

En la ciudad de México los procesos de combustión a gasolina no se realizan en condiciones óptimas debido, entre otros factores, a una altitud de 2200 m sobre el nivel del mar y donde el contenido de oxígeno es menor en aproximadamente un 23%, ocasionando una mayor producción de HC y CO. Por ello, en 1989 se introdujeron en la ciudad de México las gasolinas oxigenadas que tienen aproximadamente un 5% de MTBE (metilterbutil éter) que es un compuesto que compensa el déficit de oxígeno atmosférico y en consecuencia contribuye a aumentar la eficiencia en la combustión y el índice de octano. Lamentablemente, aunque se ha informado disminución en las emisiones de entre 10 y 15% de HC y CO, se ha reportado en varias investigaciones que esta medida incrementó en mucho los niveles de ozono al producirse más oxidantes fotoquímicos por la presencia de hidrocarburos. Se desconoce si este efecto es provocado por MTBE y/o por los aditivos agregados a la gasolina Magna-sin, a la cual para disminuir la cantidad de plomo, se le adicionaron hidrocarburos que aumentan el octanaje.

Otro de los combustibles que se han mejorado en México es el diesel utilizado por industrias y camiones. El diesel mexicano tiene un alto contenido de azufre, de aproximadamente 0.5%, que provoca emisiones de SO_2 a la atmósfera. Se han instalado cuatro plantas hidrosulfuradoras para reducir el contenido de azufre al 0.1%.

Uso de combustibles alternativos. Hay un interés considerable por un cambio radical en los combustibles. Se han propuesto alternativas como el gas natural (que es principalmente metano), el gas de petróleo (que es principalmente una mezcla de propano y butano), el metano y el etanol. Todos estos combustibles tienen la ventaja de que las modificaciones a los actuales motores de combustión son pequeñas, la emisión de contaminantes se reduciría en alto grado, ya que la eficiencia en la combustión para estos hidrocarburos aumenta y, por último, las emisiones que producirían serán mucho menos reactivas ya que son menos capaces de formar *smog* fotoquímico. El problema principal con estos combustibles sería su manejo y distribución, ya que la mayoría de ellos requieren tanques presurizados.

En países como Brasil, debido a su alta producción de caña de azúcar, se optó por la fabricación de automóviles que consumieran alcohol en lugar de gasolina. Esta medida fue tomada no por reducción de emisiones contaminantes, sino por un problema económico para la adquisición de energéticos a principio de la década de los 80, sin embargo, en la actualidad se ha regresado al combustible tradicional debido al aumento en los precios del azúcar y a la baja en los precios del petróleo.

Ha resultado mejor la alternativa para algunos autobuses pequeños el uso de gas natural o de gas de petróleo; en la ciudad de México ya circulan una buena cantidad de estos autobuses, sin embargo todavía existen problemas de distribución, mantenimiento y seguridad por el que aún esta práctica no se ha generalizado.

La investigación sobre automóviles eléctricos es muy alta en la actualidad, pero existe la fuerte controversia de que para la recarga de estos autos se requieren grandes cantidades de energía eléctrica, por lo que su generalización provocaría una demanda muy alta de electricidad, cuya producción produce también grandes cantidades de contaminación.

BIBLIOGRAFÍA DEL CAPÍTULO 1

- [1] Henry J. Glynn, Heinke Gary W. *Ingeniería Ambiental*. México: Prentice Hall, 1999. 800 pp.
- [2] Jiménez Cisneros, Blanca E. *La Contaminación ambiental en México: causas, efectos y tecnología apropiada*. México: Limusa, Colegio de Ingenieros Ambientales de México, A. C., Instituto de Ingeniería de la UNAM y FEMISCA, 2001. 926 pp.
- [3] Mugica Álvarez Violeta, Figueroa Lara José de Jesús. *Contaminación ambiental: causas y control*. México: Universidad Autónoma Metropolitana, UAM, 1996. 367 pp.
- [4] Villaseñor Franco, Edgar. *Carburación Oxigenada: un método para reducir emisiones en un motor de combustión interna a gasolina*. Tesis de Licenciatura. UNAM, 1998.

CAPÍTULO 2

2.1 Fundamentos Termodinámicos [5, 8, 19, 26]

En esta sección se muestra una revisión de algunos conceptos termodinámicos que se emplearán posteriormente para el análisis del ciclo de la combustión en un Motor de Combustión Interna (MCI) adecuándolos de forma conveniente para su aplicación en estas máquinas.

Ecuaciones de estado del gas ideal

La masa de una mezcla es la suma de las masas de sus J componentes

$$m = \sum_{i=1}^J m_i \quad (2.1.1)$$

La fracción en masa de cualquier especie dada, se define como

$$x_i = \frac{m_i}{m} \quad (2.1.2)$$

de donde resulta que

$$\sum_{i=1}^J x_i = 1 \quad (2.1.3)$$

La energía interna de una mezcla es la suma de las energías internas de sus J componentes

$$U = \sum_{i=1}^J m_i u_i \quad (2.1.4)$$

donde u_i es una propiedad intensiva másica, que se puede calcular, para una mezcla, como

$$u = \sum_{i=1}^J x_i u_i \quad (2.1.5)$$

Para la entalpía de una mezcla se obtienen las siguientes relaciones análogas

$$H = \sum_{i=1}^J m_i h_i \quad (2.1.6)$$

$$h = \sum_{i=1}^J x_i h_i \quad (2.1.7)$$

Los moles de una mezcla son la suma de los moles de los J componentes

$$N = \sum_{i=1}^J N_i \quad (2.1.8)$$

y la fracción molar de cualquier especie dada es

$$y_i = \frac{N_i}{N} \quad (2.1.9)$$

La energía interna de una mezcla puede ser escrita también como

$$U = \sum_{i=1}^J N_i u_i \quad (2.1.10)$$

donde, ahora, u_i es una propiedad intensiva molar que, para una mezcla, se calcula como

$$u = \sum_{i=1}^J y_i u_i \quad (2.1.11)$$

De la misma forma, la entalpía de una mezcla es

$$H = \sum_{i=1}^J N_i h_i \quad (2.1.12)$$

$$h = \sum_{i=1}^J y_i h_i \quad (2.1.13)$$

Debe notarse que las letras mayúsculas han sido referidas a variables extensivas y las letras minúsculas están reservadas a variables intensivas.

La masa molecular de una mezcla

$$M = \sum_{i=1}^J y_i M_i \quad (2.1.14)$$

es el factor de conversión requerido entre unidades intensivas molares y másicas. Por ejemplo, la constante específica del gas (intensiva másica) se relaciona con la constante universal (intensiva molar) por

$$R = \frac{R_u}{M} \quad (2.1.15)$$

El subíndice u puede o no ser usado dependiendo del contexto en el que se hable.

Las relaciones comunes entre presión, temperatura y volumen son

$$\begin{aligned} PV &= NRT \\ PV &= mRT \\ Pv &= RT \end{aligned} \quad (2.1.16)$$

La entropía de una mezcla es, también, la suma de las entropías individuales de cada componente

$$S = \sum_{i=1}^J m_i s_i = \sum_{i=1}^J N_i s_i \quad (2.1.17)$$

pero, al contrario de la entalpía, donde cada componente se evalúa empleando la presión total ($h_i = u_i + Pv_i$), la entropía de un componente es evaluada a su presión parcial. La presión parcial de un componente es

$$p_i = y_i P \quad (2.1.18)$$

y la entropía de cualquier componente es

$$s_i = s_i^o - R_i \ln \left(\frac{p_i}{P_o} \right) \quad (2.1.19)$$

donde s_i^o depende sólo de la temperatura y es la entropía del componente cuando $p_i = P_o$ (presión estándar). Substituyendo la ecuación (2.1.19) en la ecuación (2.1.17) que proporciona la entropía de una mezcla, se obtiene

$$s = -R \ln \left(\frac{P}{P_o} \right) + \sum_{i=1}^J x_i (s_i^o - R_i \ln y_i) \quad (2.1.20)$$

$$s = -R \ln \left(\frac{P}{P_o} \right) + \sum_{i=1}^J y_i (s_i^o - R \ln y_i) \quad (2.1.21)$$

Los datos termodinámicos para los elementos, los productos de la combustión y algunos contaminantes están disponibles en una compilación publicada por el Departamento Nacional de Estándares de Estados Unidos, llamadas las tablas JANAF.

Para aplicaciones computacionales resulta complicado trabajar con datos tabulares. Por esta razón las capacidades térmicas específicas son aproximadas mediante curvas polinomiales por métodos como el de los mínimos cuadrados. La función que se empleará para cualquier especie es

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (2.1.22)$$

De donde se deduce que la entalpía y la entropía a presión atmosférica son

$$\frac{h}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (2.1.23)$$

$$\frac{s''}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7 \quad (2.1.24)$$

donde a_6 y a_7 son constantes de integración determinadas midiendo la entalpía y la entropía a alguna temperatura de referencia. Los valores de las constantes de las especies que nos interesan, se dan en el Apéndice A. La temperatura de referencia se escogió como 298 K con la entalpía de H_2 , O_2 y $C(s)$ igual a cero.

Para el cálculo de las propiedades de los combustibles como gas ideal, en ocasiones, las propiedades termodinámicas vienen expresadas en términos de las siguientes relaciones,

$$\begin{aligned} \frac{c_p}{R} &= a_0 + b_0 T + c_0 T^2 \\ \frac{h}{RT} &= a_0 + \frac{b_0}{2} T + \frac{c_0}{2} T^2 + \frac{d_0}{T} \\ \frac{s''}{T} &= a_0 \ln T + b_0 T + \frac{c_0}{2} T^2 + e_0 \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

donde d_0 y e_0 son constantes de integración, mientras que en otras ocasiones se expresan según las ecuaciones (2.1.22) – (2.1.24).

Los valores de tales coeficientes para algunos combustibles se muestran en el Apéndice B, donde se observa que para la aplicación particular de este trabajo (gasolina como combustible), se emplearán las ecuaciones (2.1.25).

2.2 Termodinámica Química [14, 19, 27]

Entalpías de Reacción y de Formación

Todas las reacciones químicas están siempre acompañadas por una absorción o expulsión de energía que se manifiesta, usualmente, como calor. Es posible determinar esta cantidad de calor y, por consiguiente, la temperatura y la composición de los productos basados en principios básicos.

Para una reacción química en la que ocurran cambios despreciables de energía cinética, potencial y sin algún trabajo realizado, el calor añadido es igual al incremento de entalpía del sistema

$$q = \Delta h$$

donde Q es el calor añadido y H es la entalpía. Si la reacción ocurre a presión constante, la fórmula se expresa de la siguiente forma:

$$q_p = \Delta h$$

Uno de los conceptos termodinámicos más importantes que deben conocerse para cualquier reacción química dada es el cambio de energía o la cantidad de calor asociada con la reacción (absorbido o emitido) a alguna temperatura determinada, tomando los reactivos y productos en algún estado de referencia apropiado. Este cambio es conocido como *entalpía de reacción* a la temperatura especificada.

Para los gases, el estado termodinámico de referencia estándar se toma igual que el estado del gas ideal a presión atmosférica y una temperatura determinada (generalmente 298 K o 25°C)

El símbolo termodinámico que representa la propiedad de la sustancia en el estado estándar a una temperatura dada se escribe, por ejemplo, como h_T° , u_T° , etc., donde el superíndice $^\circ$ denota el estado estándar y el subíndice T la temperatura especificada.

Para un mol de gas ideal en el estado de referencia, de la ecuación (2.1.16)

$$PV = RT$$

y para la entalpía

$$h^\circ = u^\circ + (PV)^\circ = u^\circ + RT \quad (2.2.1)$$

que a 0 K se reduce a

$$h^\circ = u^\circ \quad (2.2.2)$$

Entonces, la entalpía para cualquier temperatura que se quiera tomar como referencia, en relación a la entalpía existente a 0 K se puede conocer por la siguiente fórmula,

$$(h_T^\circ - h_0^\circ) = (u_T^\circ - u_0^\circ) + RT = (u_T^\circ - u_0^\circ) + PV \quad (2.2.3)$$

El valor $(u^\circ - u_0^\circ)$ se determina por información espectroscópica y representa la energía que posee la molécula en virtud de sus grados de libertad internos (rotacional, vibracional y electrónico) y externos (traslacional). La entalpía $(h^\circ - h_0^\circ)$ sólo tiene significado cuando hay un conjunto de moléculas y representa la capacidad del conjunto de moléculas, con su energía interna, de realizar el trabajo PV .

De la definición de la entalpía de reacción, q_p dependerá de la temperatura a la cual la reacción y la entalpía de los productos son evaluados. La entalpía de reacción a una temperatura T_0 puede relacionarse a cualquier otra temperatura T_1 . Considérese la configuración de reacción mostrada en la Fig. 2.1.

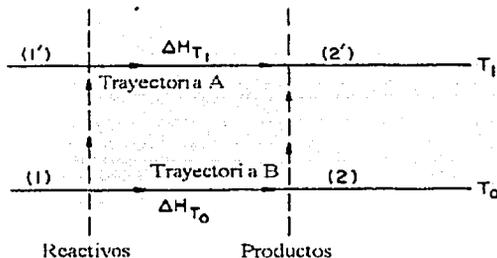


Figura 2.1 Entalpías de reacción a diferentes temperaturas

De acuerdo con la primera ley, el cambio de energía calorífica que ocurre a partir de los reactivos a temperatura T_0 hasta los productos a temperatura T_1 a través de cualquiera de las trayectorias mostradas A o B, debe ser el mismo. A través de la trayectoria A, se eleva la temperatura de los reactivos desde T_0 hasta T_1 y se hacen reaccionar a esta temperatura. En la trayectoria B, los reactivos reaccionan a T_0 y finalmente se eleva la temperatura de los productos hasta T_1 . Esta igualdad de energía, que relaciona las entalpías de reacción a dos diferentes temperaturas, se escribe como

$$\left\{ \sum_{j \text{ reactivos}} n_j [(h_T^\circ - h_0^\circ) - (h_{T_0}^\circ - h_0^\circ)]_j \right\} + \Delta h_r$$

$$= \left\{ \sum_{i \text{ productos}} n_i [(h_T^\circ - h_0^\circ) - (h_{T_0}^\circ - h_0^\circ)]_i \right\} + \Delta h_r \quad (2.2.4)$$

Entonces, conociendo las diferencias de entalpía involucradas a diferentes temperaturas entre los reactivos y los productos, es posible determinar la entalpía de reacción a cualquier temperatura a partir de la entalpía de formación a alguna otra temperatura.

No es necesario tener una lista extensiva de entalpías de reacción para determinar el calor absorbido o emitido en alguna reacción química dada. Una forma más conveniente y lógica de proceder es enlistar las entalpías de reacción de las sustancias que se conozcan, así como las entalpías de formación estándar de las sustancias químicas. La *entalpía de formación* estándar se define como el cambio de entalpía que ocurre cuando un compuesto químico se forma isotérmicamente a partir de sus elementos estables a presión constante. La forma de denotar la entalpía de formación de una sustancia es Δh_f° .

Una consecuencia de lo dicho es que, dadas las entalpías de formación de las sustancias que participan en una reacción, se puede determinar directamente la entalpía de reacción a la temperatura de referencia T_0 como sigue

$$\Delta h_r = \sum_{i \text{ productos}} n_i (\Delta h_f^\circ)_{T_0, i} - \sum_{j \text{ reactivos}} n_j (\Delta h_f^\circ)_{T_0, j} = -q_p \quad (2.2.5)$$

Energía Libre y Constantes de Equilibrio

Para los casos en que los productos se miden a una temperatura T_2 diferente a la de referencia T_0 , y los reactivos entran al sistema a una temperatura T_0' , también distinta, la entalpía de reacción queda de la siguiente forma,

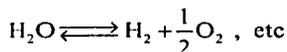
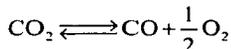
$$\Delta h = \sum_{i \text{ productos}} n_i \left\{ \left[(h_{T_2}^{\circ} - h_0^{\circ}) - (h_{T_0}^{\circ} - h_0^{\circ}) \right] + (\Delta h_f^{\circ})_{T_0} \right\}_i - \sum_{j \text{ reactivos}} n_j \left\{ \left[(h_{T_0'}^{\circ} - h_0^{\circ}) - (h_{T_0}^{\circ} - h_0^{\circ}) \right] + (\Delta h_f^{\circ})_{T_0} \right\}_j = -q_p \quad (2.2.6)$$

La mayoría de los sistemas consideran que los reactivos entran a la temperatura de referencia estándar de 298 K (25°C). Consecuentemente los términos de entalpía entre llaves para los reactivos se hacen cero.

Cuando todo el calor desprendido se emplea en calentar los gases producto, Δh y q_p se hacen cero. La temperatura de los productos, T_2 , es llamada, en este caso, *temperatura de flama adiabática*, y la ecuación (2.2.6) se convierte en

$$\sum_{i \text{ productos}} n_i \left\{ \left[(h_{T_2}^{\circ} - h_0^{\circ}) - (h_{T_0}^{\circ} - h_0^{\circ}) \right] + (\Delta h_f^{\circ})_{T_0} \right\}_i = \sum_{j \text{ reactivos}} n_j \left\{ \left[(h_{T_0}^{\circ} - h_0^{\circ}) - (h_{T_0}^{\circ} - h_0^{\circ}) \right] + (\Delta h_f^{\circ})_{T_0} \right\}_j \quad (2.2.7)$$

Si se conocen las concentraciones molares de cada producto, n_i , la ecuación (2.2.7) puede resolverse para la temperatura de flama adiabática. Para un sistema reactivo cuya temperatura en los productos es menor a, por ejemplo, 1250 K, los productos son las especies estables CO_2 , H_2O , N_2 y O_2 , cuyas cantidades molares pueden determinarse por simples balances de masa. Sin embargo, la mayoría de los sistemas de combustión alcanzan temperaturas apreciablemente mayores a 1250 K, lo que origina la aparición de mecanismos de disociación de las especies estables. Dado que los procesos de disociación son, intrínsecamente, endotérmicos, un porcentaje del calor generado se gasta en ellos, por lo que decrece substancialmente la temperatura de flama adiabática. Los productos estables de un sistema reactivo C-H-O pueden disociarse por alguna cualquiera de las siguientes reacciones,



Cada una de estas reacciones de disociación define una concentración de equilibrio determinada de cada producto a una temperatura dada; consecuentemente, las reacciones son escritas como reacciones de equilibrio. En los experimentos realizados para medir las entalpías de reacción o aquellos de combustión a bajas temperaturas, los productos pueden especificarse a partir de balances estequiométricos, pero, como se observa, cuando interviene la disociación, la especificación de la concentración de los productos se hace mucho más compleja y las n_i en la ecuación (2.2.7) son desconocidas, así como la propia temperatura

de flama adiabática. De tal forma, para resolver la ecuación (2.2.7) para las n_i y T_2 , se necesita algo más que un simple balance de masa. Las ecuaciones necesarias se encuentran en las relaciones de equilibrio que existen entre la composición de los productos en el sistema en equilibrio.

Las condiciones de equilibrio se determinan a partir de una combinación de la primera y segunda leyes de la termodinámica. Se sabe que,

$$du = Tds - PdV \quad (2.2.8)$$

donde s es la entropía. Esta condición se aplica para cualquier cambio que afecta al sistema de masa constante en ausencia de fuerzas gravitacionales, eléctricas y de superficie. Sin embargo, la energía dentro del sistema puede cambiar introduciendo más masa. Considérese la contribución de energía al sistema al añadir una molécula i y llámesele μ_i . La introducción de un pequeño número dn_i de moléculas del mismo tipo, contribuye a una ganancia de energía en el sistema de $\mu_i dn_i$. Todos los posibles incrementos de energía reversibles del sistema debido a cada tipo de molécula i pueden sumarse para dar

$$du = Tds - PdV + \sum_i \mu_i dn_i \quad (2.2.9)$$

De la definición de entalpía e introduciendo el concepto de energía libre de Gibbs, g ,

$$g = h - Ts \quad (2.2.10)$$

se sigue que,

$$dh = Tds + VdP + \sum_i \mu_i dn_i \quad (2.2.11)$$

y

$$dg = -sdT + VdP + \sum_i \mu_i dn_i \quad (2.2.12)$$

Es necesario recordar que P y T son propiedades intensivas independientes de la cantidad de masa del sistema; mientras que u , h , g y s (así como V y n) son propiedades extensivas por lo que aumentan en proporción a la cantidad de masa. Escribiendo la relación general para la derivada total para la ecuación (2.2.12), se obtiene

$$dg = \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{P,n} dT + \left(\frac{\partial g}{\partial P} \right)_{T,n} dP + \sum_i \left(\frac{\partial g}{\partial n_i} \right)_{P,T,n_{j \neq i}} dn_i \quad (2.2.13)$$

Entonces, por comparación

$$\mu_i = \left(\frac{\partial g}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} \quad (2.2.14)$$

o, de manera más general, haciendo lo mismo con las ecuaciones para g y h ,

$$\mu_i = \left(\frac{\partial g}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} = \left(\frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{S,V,n_j} = \left(\frac{\partial h}{\partial n_i} \right)_{S,P,n_j} \quad (2.2.15)$$

donde μ_i es llamado *potencial químico*. La condición de equilibrio es que la entropía del sistema tenga un valor máximo para todas las posibles configuraciones que son consistentes con la primera ley. Si la

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

entropía de algún sistema a volumen y temperatura constantes esta en su valor máximo, el sistema está en equilibrio y, por consiguiente, para cualquier cambio de este estado ds será cero. De la ecuación (2.2.9) se sigue que la condición de equilibrio es

$$\sum \mu_i dn_i = 0 \quad (2.2.16)$$

La introducción del concepto de potencial químico es debido a la importancia que esta propiedad desempeña en los sistemas reactivos. En este contexto, se considerará que la reacción se mueve en la dirección en que disminuye el potencial químico y alcanza el equilibrio sólo cuando el potencial de los reactivos es igual al de los productos.

Entonces, de la ecuación (2.2.12), el criterio para el equilibrio de los productos de la combustión de un sistema reactivos a P y T constantes, es

$$(dg)_{T,P} = 0 \quad (2.2.17)$$

y resulta entonces posible determinar la relación entre la energía libre de Gibbs y las presiones parciales en el equilibrio de una mezcla de productos de combustión.

Se tratará con gases perfectos como si no hubiera fuerzas de interacción entre las moléculas excepto en el instante de la reacción, por lo que cada una de ellas actúa como si estuviera sola en el contenedor. Hágase g a la energía libre total de una mezcla de productos y represéntesele por

$$g = \sum n_i g_i, \quad i = A, B, \dots, R, S \quad (2.2.18)$$

para una reacción en equilibrio entre varios productos arbitrarios:



donde A, B, \dots, R, S, \dots representan las especies presentes, mientras que a, b, \dots, r, s, \dots son los coeficientes estequiométricos que gobiernan la reacción. Los n_i son los moles instantáneos de cada compuesto. Considerando que se trata de un gas ideal, la energía libre es aditiva de la forma mostrada en la ecuación (2.2.18). Entonces, como se había mencionado,

$$g(P, T) = h(T) - Ts(P, T) \quad (2.2.20)$$

dado que la presión del estado estándar para un gas es $P_0 = 1$ atm, se puede escribir

$$g^0(P_0, T) = h^0 - Ts^0(P_0, T) \quad (2.2.21)$$

Restando las últimas dos ecuaciones, se obtiene

$$g - g^0 = (h - h^0) - T(s - s^0) \quad (2.2.22)$$

Y ya que h no es una función de la presión, $h - h^0$ debe ser cero, por lo que

$$g - g^0 = -T(s - s^0) \quad (2.2.23)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La ecuación (2.2.23) expresa la diferencia de energía libre entre un gas a cualquier presión y temperatura y el estado estándar a temperatura constante. Aquí $dh = 0$ y, por la ecuación (2.1.19), la relación entre la entropía y la presión es

$$s - s^{\circ} = -R \ln \left(\frac{p}{P_0} \right) \quad (2.2.24)$$

De donde se sigue que

$$g(p, T) = g^{\circ} + RT \ln \left(\frac{p}{P_0} \right) \quad (2.2.25)$$

La relación (2.2.25) expresa la energía libre de Gibbs de una mezcla de gases. En la ecuación (2.2.25), p es la presión parcial p_i de cada componente particular que, como es sabido, tiene la siguiente relación con la presión total P :

$$p_i = \left(\frac{n_i}{\sum_i n_i} \right) P \quad (2.2.26)$$

donde $\left(\frac{n_i}{\sum_i n_i} \right)$ es la fracción molar de la especie gaseosa i . La ecuación (2.2.25) se convierte, entonces, en

$$g(P, T) = \sum_i n_i \left\{ g_i^{\circ} + RT \ln (p_i / P_0) \right\} \quad (2.2.27)$$

Como se mencionó antes [ecuación (2.2.17)], el criterio para el equilibrio es $(dg)_{T,P} = 0$. Tomando la diferencial de g en la ecuación (2.2.27), se obtiene

$$\sum_i g_i^{\circ} dn_i + RT \sum_i (dn_i) \ln \left(\frac{p_i}{P_0} \right) + RT \sum_i n_i \left(\frac{dp_i}{p_i} \right) = 0 \quad (2.2.28)$$

Evaluando el último término de la ecuación (2.2.28), se tiene

$$\sum_i n_i \frac{dp_i}{p_i} = \sum_i \left(\frac{\sum_i n_i}{P} \right) dp_i = \frac{\sum_i n_i}{P} \sum_i dp_i = 0 \quad (2.2.29)$$

dado que la presión total es constante, entonces $\sum_i dp_i = 0$. Ahora, considérese el primer término de la ecuación (2.2.28).

$$\sum_i g_i^{\circ} dn_i = (dn_A) g_A^{\circ} + (dn_B) g_B^{\circ} + \dots - (dn_R) g_R^{\circ} - (dn_S) g_S^{\circ} - \dots \quad (2.2.30)$$

Por definición de los coeficientes estequiométricos:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$dn_i \propto a_i, \quad dn_i = \kappa a_i \quad (2.2.31)$$

donde κ es una constante de proporcionalidad; por lo tanto,

$$\sum_i g_i^\circ dn_i = \kappa \{ a g_A^\circ + b g_B^\circ + \dots - r g_R^\circ - s g_S^\circ - \dots \} \quad (2.2.32)$$

De manera similar, la constante de proporcionalidad κ aparecerá como un múltiplo en el segundo término de la ecuación (2.2.28). Dado que esta ecuación debe ser igual a cero, el último término, como se ha demostrado, es cero y κ no puede ser cero, se obtiene,

$$-(a g_A^\circ + b g_B^\circ + \dots - r g_R^\circ - s g_S^\circ - \dots) = RT \ln \left\{ \frac{(p_R/P_0)^r (p_S/P_0)^s}{(p_A/P_0)^a (p_B/P_0)^b} \right\} \quad (2.2.33)$$

Se define entonces

$$\Delta g^\circ = a g_A^\circ + b g_B^\circ + \dots - r g_R^\circ - s g_S^\circ - \dots \quad (2.2.34)$$

donde Δg° es llamada la *energía libre de cambio en el estado estándar*. Este nombre es razonable puesto que Δg° es el cambio de energía libre si la reacción (2.2.19) toma lugar en condiciones estándar y se completa la reacción con las especies a la derecha. Como la presión estándar P_0 es una atmósfera, la condición de equilibrio se convierte en

$$-\Delta g^\circ = RT \ln \left(\frac{p_R^r p_S^s}{p_A^a p_B^b} \right) \quad (2.2.35)$$

donde las presiones parciales se miden en atmósferas. Se define entonces la *constante de equilibrio a presión constante* a partir de la ecuación (2.2.35) como

$$K_p \equiv \frac{p_R^r p_S^s}{p_A^a p_B^b} \quad (2.2.36)$$

Entonces

$$-\Delta g^\circ = RT \ln(K_p), \quad K_p = e^{\frac{-\Delta g^\circ}{RT}} \quad (2.2.37)$$

donde K_p no es función de la presión total sino únicamente de la temperatura.

Las ecuaciones de conservación de masa y energía empleadas en la determinación de las temperaturas de flama se escriben de manera más conveniente en términos de moles, por lo que resulta apropiado escribir las constantes de equilibrio en función de los moles y la presión total P . Esta conversión se sirve de la ecuación (2.2.26) que relaciona las presiones parciales p con la presión total P .

Substituyendo la expresión (2.2.26) para p_i en la definición de la constante de equilibrio [ecuación (2.2.36)], se obtiene

$$K_p = \left(\frac{n_R^r n_S^s}{n_A^a n_B^b} \right) \left(\frac{P}{\sum_i n_i} \right)^{r+s-a-b} \quad (2.2.38)$$

que se escribe, algunas veces, como

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$K_p = K_N \left(\frac{P}{\sum n_i} \right)^{r+s-u-h} \quad (2.2.39)$$

donde

$$K_N = \frac{n_R^r n_S^s}{n_A^a n_B^b} \quad (2.2.40)$$

Cuando

$$r + s - a - b = 0 \quad (2.2.41)$$

se dice que la reacción de equilibrio es insensible a la presión.

La constante de equilibrio basada en concentraciones (moles/cm³) es empleada ampliamente en los análisis de cinética química que se discutirán más adelante. Esta constante se deduce recordando la ley de los gases perfectos, que establece que,

$$PV = \sum n_i RT$$

o

$$\frac{P}{\sum n_i} = \frac{RT}{V} \quad (2.2.42)$$

donde V es el volumen. Sustituyendo la ecuación (2.2.42) en (2.2.39), queda

$$K_p = \left(\frac{n_R^r n_S^s}{n_A^a n_B^b} \right) \left(\frac{RT}{V} \right)^{r+s-u-h} \quad (2.2.43)$$

o

$$K_p = \frac{(n_R/V)^r (n_S/V)^s}{(n_A/V)^a (n_B/V)^b} (RT)^{r+s-u-h} \quad (2.2.44)$$

Se puede ahora escribir la ecuación (2.2.44) como

$$K_p = \left(\frac{C_R^r C_S^s}{C_A^a C_B^b} \right) (RT)^{r+s-u-h} \quad (2.2.45)$$

donde $C = n/V$. De la ecuación (2.2.45) se observa que la definición de la constante de equilibrio para concentraciones es,

$$K_C \equiv \frac{C_R^r C_S^s}{C_A^a C_B^b} \quad (2.2.46)$$

De esta forma, dadas una temperatura y presión, todas las constantes de equilibrio (K_p , K_N y K_C) pueden determinarse termodinámicamente a partir de ΔG° para cada reacción de equilibrio escogida.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

En ocasiones es necesario conocer la variación de la constante de equilibrio con la temperatura. Considérese, en primer lugar, la siguiente derivada

$$\frac{d(g/T)}{dT} = \frac{T(dg/dT) - g}{T^2} \quad (2.2.47)$$

Recordando que la energía libre de Gibbs puede escribirse como

$$g = u + PV - Ts \quad (2.2.48)$$

o, a presión constante,

$$\frac{dg}{dT} = \frac{du}{dT} + P \frac{dV}{dT} - s - T \frac{ds}{dT} \quad (2.2.49)$$

En el equilibrio, de la ecuación (2.2.8), en condiciones de presión constante

$$T \frac{ds}{dT} = \frac{du}{dT} + P \frac{dV}{dT} \quad (2.2.50)$$

Combinando las ecuaciones (2.2.49) y (2.2.50), se obtiene

$$\frac{dg}{dT} = -s \quad (2.2.51)$$

Por lo que la ecuación (2.2.47) se convierte en

$$\frac{d(g/T)}{dT} = \frac{-Ts - g}{T^2} = -\frac{h}{T^2} \quad (2.2.52)$$

Esta expresión es válida para cualquier sustancia bajo condiciones de presión constante. Aplicado a un sistema reactivo en el que cada sustancia se encuentra en su estado estándar, se obtiene

$$d\left(\frac{\Delta g^\circ}{T}\right) = -\left(\frac{\Delta h^\circ}{T^2}\right)dT \quad (2.2.53)$$

donde Δh° es la entalpía de reacción en el estado estándar para cualquier reacción arbitraria:



a temperatura T (y, desde luego, presión de 1 atmósfera). Substituyendo la expresión para Δg° , ecuación (2.2.37), en la ecuación (2.2.53), se obtiene

$$\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta h^\circ}{RT^2} \quad (2.2.54)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Si se considera que Δh^0 varía muy poco con la temperatura, se llega a

$$\ln \left(\frac{K_{p_2}}{K_{p_1}} \right) = -\frac{\Delta h^0}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (2.2.55)$$

Entonces, para pequeños cambios en T ,

$$(K_{p_2}) > (K_{p_1}) \quad \text{cuando } T_2 > T_1$$

En la misma forma que las entalpías de formación, en las tablas JANAF aparecen tabuladas la mayoría de las constantes de equilibrio de formación para, prácticamente, cualquier sustancia que nos concierna en los sistemas de combustión. La constante de equilibrio de formación ($K_{p,f}$) esta basada en la ecuación de equilibrio de formación de la especie a partir de sus elementos en los estados estándar. De esta forma, y mediante manipulaciones algebraicas, es posible determinar la constante de equilibrio de cualquier reacción. Desde luego, las constantes de equilibrio de formación para los elementos en sus estados normales, son cero.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

2.3 Cinética Química [12, 16, 24, 29]

Las flamas se propagarán únicamente a través de aquellas mezclas químicas capaces de reaccionar lo suficientemente rápido para ser consideradas explosivas en su naturaleza. El término «explosivo» empleado hace referencia a reacciones muy rápidas.

En esta sección se consideran algunos aspectos esenciales referentes a los fenómenos de combustión que pueden solucionarse apoyándose en la teoría cinética.

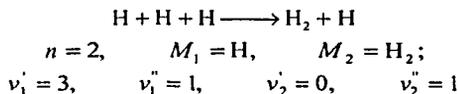
Velocidades de reacción y su dependencia con la temperatura

Todas las reacciones químicas toman lugar a una velocidad definida y dependiente de las condiciones del sistema. Algunas de las más importantes son la concentración de los reactivos, la temperatura y la presencia de catalizadores o inhibidores. Las velocidades de reacción pueden expresarse en términos de la concentración de cualquiera de las sustancias reactivas o cualquiera de los productos de la reacción; es decir, esta velocidad puede expresarse como la tasa de disminución de la concentración de algún reactivo o como la tasa de incremento de la concentración de un producto de la reacción.

Cualquier relación estequiométrica que describa una reacción química de una etapa, se puede representar como

$$\sum_{j=1}^n v_j' M_j = \sum_{j=1}^n v_j'' M_j \quad (2.3.1)$$

donde v_j' representa los coeficientes estequiométricos de los reactivos, v_j'' los coeficientes estequiométricos de los productos, M es cualquier especie química presente y n es el número total de especies involucradas. Si alguna especie especificada como M_j no constituye un reactivo, su v_j es igual a cero. Como ejemplo, considérese la recombinación de átomos H en presencia de átomos H; esto es, la reacción



La ley de acción de masas, que se confirma experimentalmente, establece que la velocidad a la cual va desapareciendo la especie química i , definida como RR_i , es proporcional al producto de las concentraciones de las especies químicas reactivas, donde cada concentración está elevada a un exponente igual a su coeficiente estequiométrico correspondiente, es decir,

$$RR_i \propto \prod_{j=1}^n (M_j)^{v_j'}, \quad RR_i = k \prod_{j=1}^m (M_j)^{v_j} \quad (2.3.2)$$

donde k es una constante de proporcionalidad llamada *coeficiente de velocidad de reacción específica*. En la ecuación (2.3.2), $\sum v_j'$ también tiene el símbolo n , llamado orden global de la reacción; v_j' sólo, representa el orden de la reacción con respecto a la especie j . En los sistemas reactivos, la razón de cambio de la concentración de cualquier especie i está dada por

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\frac{d[M_i]}{dt} = [v_i'' - v_i'] RR = [v_i'' - v_i'] k \prod_{j=1}^m (M_j)^{v_j} \quad (2.3.3)$$

ya que v_i' moles de M_i se forman por cada v_i'' moles de M_i consumidos. En el ejemplo anterior, $d(H)/dt = -2k(H)^3$. El uso de esta compleja representación evita errores de signo y elimina la confusión cuando los coeficientes estequiométricos son distintos de uno.

La expresión de Arrhenius

La velocidad de la mayoría de las reacciones químicas es dominada por colisiones moleculares de dos especies que tienen la capacidad de reaccionar. Entonces, las reacciones más simples son de segundo orden.

Una ecuación arbitraria de segundo orden tiene la siguiente expresión



Para esta reacción arbitraria, la razón de cambio toma la forma

$$RR = \frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] = -\frac{d[C]}{dt} \quad (2.3.5)$$

A continuación se empleará la siguiente convención: los corchetes que encierran a cualquier símbolo químico se refieren a la concentración de tal especie en moles sobre centímetro cúbico. De la manera como está especificada la reacción, no significa que cada colisión de los reactivos A y B genere algún producto o cause la desaparición de cierta cantidad de cualquiera de ellos. Arrhenius, tomando en cuenta este factor y mediante el uso de una teoría relativamente simple, postuló una dependencia de la temperatura para k . Ésta establece que sólo las moléculas que posean una energía mayor a cierta cantidad E pueden reaccionar. Las moléculas adquieren la energía adicional que necesitan para las colisiones a partir de las condiciones térmicas que existan. Estas moléculas activadas de «alta energía» son las que generan los productos. El postulado de Arrhenius puede escribirse de la siguiente forma

$$RR = Z_{AB} e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.3.6)$$

donde Z_{AB} es la frecuencia cinética de colisión del gas y $e^{-\frac{E}{RT}}$ es el factor de Boltzmann. La teoría cinética demuestra que el factor de Boltzmann da la fracción total de colisiones que tienen una energía mayor a E .

Considérese la ecuación (2.3.6), llamándole a E energía de activación y centrando la atención en el factor de colisión Z_{AB} que, por medio de la teoría cinética, se puede representar como

$$Z_{AB} = [A][B] \sigma_{AB}^2 \left[\frac{8\pi k_B T}{\mu} \right]^{1/2} \quad (2.3.7)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

donde σ_{AB} es el diámetro esférico de colisión, k_B es la constante de Boltzmann, μ es la masa reducida de modo que si se representa como m la masa de cada especie, toma la forma $[m_A m_B / (m_A + m_B)]$. Se puede escribir Z_{AB} de la siguiente forma

$$Z_{AB} = Z'_{AB} [A][B] \quad (2.3.8)$$

Entonces, la ecuación de Arrhenius puede escribirse como

$$RR = Z'_{AB} [A][B] e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.3.9)$$

Cuando se compara con la velocidad de reacción escrita a partir de la ley de acción de masas [ecuación (2.3.2)], se encuentra que

$$k = Z'_{AB} [A][B] e^{-\frac{E}{RT}} = Z'_{AB} T^{1/2} e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.3.10)$$

Por lo que se concluye que la constante específica de reacción k depende únicamente de la temperatura y es independiente de la concentración.

De manera más general, la ecuación de Arrhenius para la constante de reacción se escribe como

$$k = \text{constante} \cdot T^{1/2} e^{-\frac{E}{RT}} = A e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.3.11)$$

donde la constante A toma en cuenta los factores hasta aquí explicados y se conoce como el *coeficiente pre-exponencial cinético*. El factor A representado en la ecuación (2.3.11) tiene muy poca dependencia con la temperatura $T^{1/2}$ que, generalmente, se ignora en las tablas. La forma que tiene esta ecuación funciona muy bien para una gran cantidad de reacciones y muestra un adecuado incremento de k cuando aumenta T .

Existen, sin embargo, algunos tipos de reacciones para las cuales la ecuación (2.3.11) no es apropiada. Por ejemplo, para las reacciones con radicales libres con bajas energías de activación, la dependencia de la temperatura en el término pre-exponencial toma una especial importancia. Por ello, la mayoría de los investigadores en cinética química han visto la necesidad de adoptar una forma general común para expresar la dependencia con las variaciones de temperatura de las constantes de reacción, la cual es

$$k = AT^n e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.3.12)$$

Debido a que muchas de las reacciones binarias elementales exhiben un comportamiento de Arrhenius para algunos rangos estrechos de temperaturas, usualmente la dependencia con la temperatura puede incorporarse con suficiente precisión en el término exponencial; entonces, para una gran cantidad de reacciones, tomar $n = 0$ resulta adecuado. Sin embargo, para los amplios rangos de temperaturas con los que se trabaja en combustión, existen una buena cantidad de reacciones que exhiben un comportamiento que no es el de Arrhenius, así que se hace necesario introducir, para un adecuado ajuste de los datos experimentales, una dependencia general con T^n donde, en la mayoría de los casos, se tiene un rango de $n = \pm 1 - 2$.

Las unidades para las constantes de reacción k cuando la reacción es de orden n (no confundir esta n con el exponente de T visto) son de $[(\text{concentración})^{n-1}(\text{tiempo})]^{-1}$. Entonces, para una reacción de primer orden, las unidades de k son s^{-1} y, para una reacción de segundo orden, $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Reacciones simultáneas interdependientes

En sistemas reactivos complejos, tales como los que se dan en la combustión, no son suficientes las reacciones simples de una etapa para describir el fenómeno. Generalmente se presentan reacciones simultáneas e interdependientes.

Como ejemplo particular, para explicar este tipo de reacciones, tómcse la reacción del yoduro de hidrógeno,



La velocidad de formación de HI es, entonces, afectada por dos constantes, k^+ y k^- , y se escribe como

$$\frac{d[\text{HI}]}{dt} = 2k^+ [\text{H}_2][\text{I}_2] - 2k^- [\text{HI}]^2 \quad (2.3.14)$$

En el equilibrio, la rapidez de formación de HI es cero, por lo que

$$2k^+ [\text{H}_2]_{eq} [\text{I}_2]_{eq} - 2k^- [\text{HI}]_{eq}^2 = 0 \quad (2.3.15)$$

donde el subíndice *eq* designa la concentración en el equilibrio. Entonces,

$$\frac{k^+}{k^-} = \frac{[\text{HI}]_{eq}^2}{[\text{H}_2]_{eq} [\text{I}_2]_{eq}} \equiv K_c \quad (2.3.16)$$

de esta forma, las constantes de formación hacia adelante y hacia atrás se relacionan con la constante de equilibrio K basada en concentración (K_c). Las constantes de equilibrio se calculan a partir de los principios termodinámicos básicos discutidos en la Sección 2.2 y la relación $k^+/k^- \equiv K_c$ funciona para cualquier sistema reactivo. Los cálculos para las constantes de equilibrio son mucho más precisos que las mediciones experimentales de las constantes específicas de reacción. Entonces, dada una medición de alguna de las constantes específicas de reacción, la constante inversa se determina por la reacción anterior.

Con estas consideraciones, la expresión para las velocidades de formación de HI se convierte en

$$\frac{d[\text{HI}]}{dt} = 2k^+ [\text{H}_2][\text{I}_2] - 2k^- [\text{HI}]^2 = 2k^+ [\text{H}_2][\text{I}_2] - 2\frac{k^+}{K_c} [\text{HI}]^2 \quad (2.3.17)$$

donde se muestra que sólo hay dependencia de una constante de formación.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

2.4 Ciclos de Gas [9, 13, 18, 23, 26]

Un estudio de los ciclos de gas como modelo de las máquinas de combustión interna es bastante útil para ilustrar cualitativamente algunos de los parámetros más importantes que tienen influencia en el buen funcionamiento de estas máquinas, es decir, la eficiencia y el trabajo de salida. Básicamente, los ciclos de gas tratan al proceso de la combustión como un proceso de transferencia de calor. La eficiencia es, entonces, definida en términos de esta transferencia de calor.

Eventualmente se modelará el proceso de la combustión empleando relaciones básicas pero que en muy pocas ocasiones se aplican al análisis conjunto con los ciclos de gas.

El ciclo de gas también funciona para introducir algunos de los procesos ideales que se emplearán en los modelos posteriores llamados ciclos aire-oxígeno-combustible.

Adición de calor a volumen constante

Este ciclo es también conocido como ciclo Otto y modela el caso especial de una máquina de combustión interna tal que la combustión es tan rápida que el pistón apenas si tiene tiempo de moverse durante el evento, así que se considera que la combustión ocurre a volumen constante. El ciclo se muestra en la Fig. 2.2 y los cuatro procesos básicos que involucra son:

- 1-2 compresión isentrópica
- 2-3 suministro de calor a volumen constante
- 3-4 expansión isentrópica
- 4-1 expulsión de calor a volumen constante

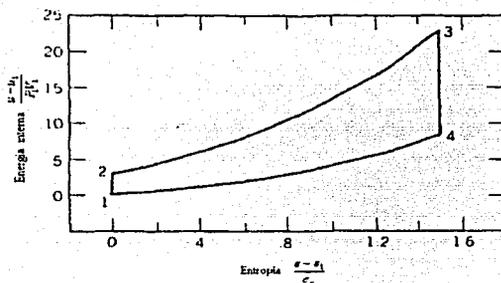
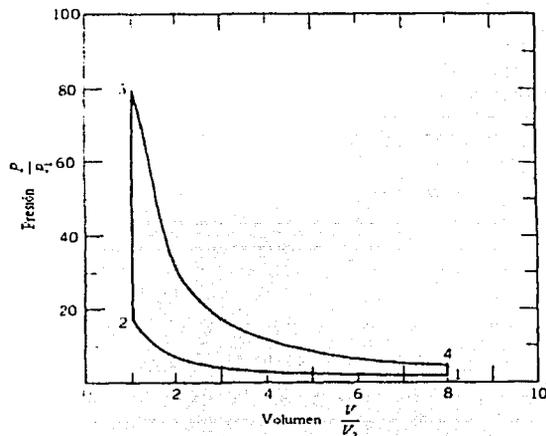


Figura 2.2 Ciclo Otto

El fluido de trabajo se considera un gas ideal y se supone que las capacidades térmicas específicas permanecen constantes.

Las siguientes relaciones son válidas para este ciclo

Suministro de calor

$$Q_{ent} = mc_v(T_3 - T_2) \quad (2.4.1)$$

Expulsión de calor

$$Q_{sal} = mc_v(T_4 - T_1) \quad (2.4.2)$$

Compresión

$$\frac{P_2}{P_1} = r^\gamma \quad \frac{T_2}{T_1} = r^{\gamma-1} \quad (2.4.3)$$

Expansión

$$\frac{P_4}{P_3} = \left(\frac{1}{r}\right)^\gamma \quad \frac{T_4}{T_3} = \left(\frac{1}{r}\right)^{\gamma-1} \quad (2.4.4)$$

donde

m = masa de gas en el cilindro

c_v = calor específico a volumen constante

r = relación de compresión

γ = exponente adiabático

La relación de compresión (vca la Sección 2.5), para este caso particular, se define como

$$r = \frac{V_1}{V_2} \quad (2.4.5)$$

En este ciclo, la relación de compresión y la relación de expansión son las mismas, esto es,

$$\frac{1}{r} = \frac{V_3}{V_4} = \frac{V_2}{V_1} \quad (2.4.6)$$

Para un ciclo termodinámico como éste, la eficiencia térmica es

$$\eta = \frac{W_{sal}}{Q_{ent}} = 1 - \frac{Q_{sal}}{Q_{ent}} \quad (2.4.7)$$

Si se substituyen los valores de Q_{ent} y Q_{sal} de las ecuaciones (2.4.1) y (2.4.2), se tiene

$$\eta = 1 - \frac{T_4 - T_1}{T_3 - T_2} = 1 - \frac{1}{r^{\gamma-1}} \quad (2.4.8)$$

La eficiencia del ciclo Otto depende del exponente adiabático y de la relación de compresión. Una gráfica de la eficiencia calculada contra las razones de compresión encontradas en las máquinas modernas se muestra en la Fig. 2.3. Las eficiencias aquí calculadas son de alrededor del doble de las medidas en las máquinas reales. Existen varias razones para ello: no se han considerado las pérdidas por fricción; los motores reales queman combustible y no emplean la transferencia de calor para incrementar la entropía de la carga y, por último, se han ignorado las pérdidas de calor.

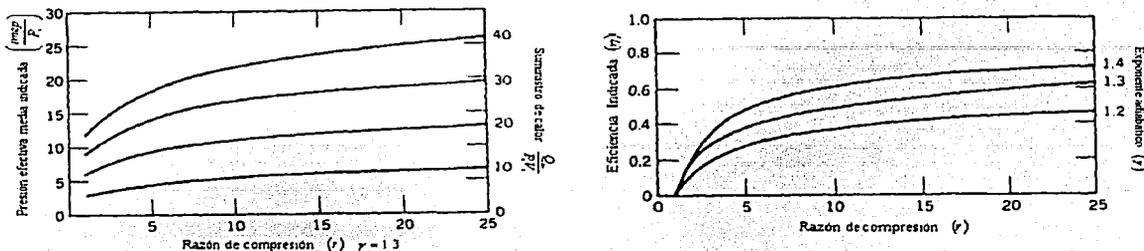


Figura 2.3 Características de ciclo Otto

Adición de calor a presión constante

Este ciclo es también conocido como ciclo Diesel y modela el caso especial de una máquina de combustión interna cuya combustión es controlada de tal forma que el principio de la carrera de expansión ocurre a presión constante. El ciclo se muestra en la Fig. 2.4 y sus cuatro procesos básicos son:

- 1-2 compresión isentrópica
- 2-3 adición de calor a presión constante
- 3-4 expansión isentrópica
- 4-1 rechazo de calor a volumen constante

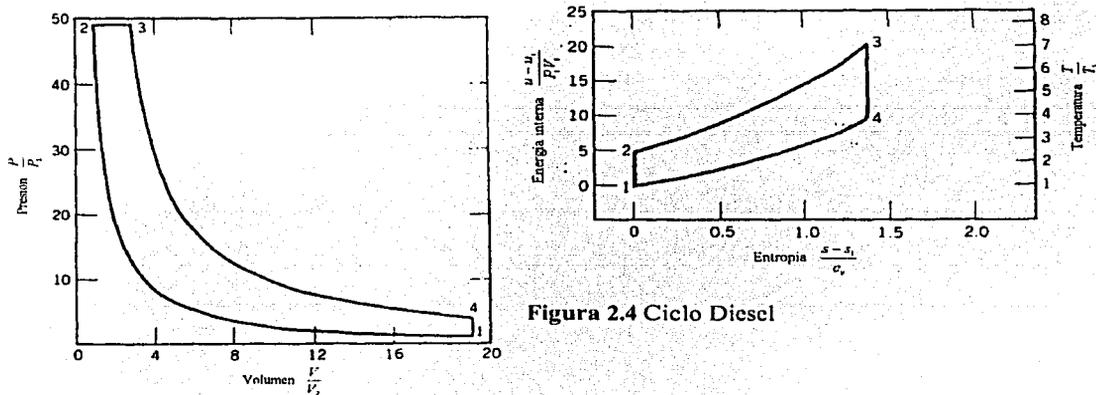


Figura 2.4 Ciclo Diesel

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

Nuevamente, suponiendo capacidades térmicas específicas constantes, se consideran validas las siguientes expresiones

Adición de calor

$$Q_{ent} = mc_p(T_3 - T_2) \tag{2.4.9}$$

Expansión

$$\frac{P_3}{P_2} = \left(\frac{\beta}{r}\right)^\gamma \quad \frac{T_3}{T_2} = \left(\frac{\beta}{r}\right)^{\gamma-1} \tag{2.4.10}$$

donde se ha definido el parámetro β como

$$\beta = \frac{V_3}{V_2} \tag{2.4.11}$$

En este caso, la eficiencia indicada es:

$$\eta = 1 - \frac{1}{r^{\gamma-1}} \frac{\beta^\gamma - 1}{\gamma(\beta - 1)} \tag{2.4.12}$$

Aunque la ecuación (2.4.12) es correcta, no es de mucha utilidad, ya que β no es una elección natural de una variable independiente. Resulta más conveniente pensar en términos de calor transferido. Ambos términos quedan relacionados en la ecuación (2.4.13)

$$\beta = 1 + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \left(\frac{Q_{ent}}{P_1 V_1} \right) \frac{1}{r^{\gamma-1}} \tag{2.4.13}$$

La eficiencia del ciclo Diesel se muestra en la Fig. 2.5. En ella se observa que la eficiencia crece según la razón de compresión y decrece según el calor añadido.

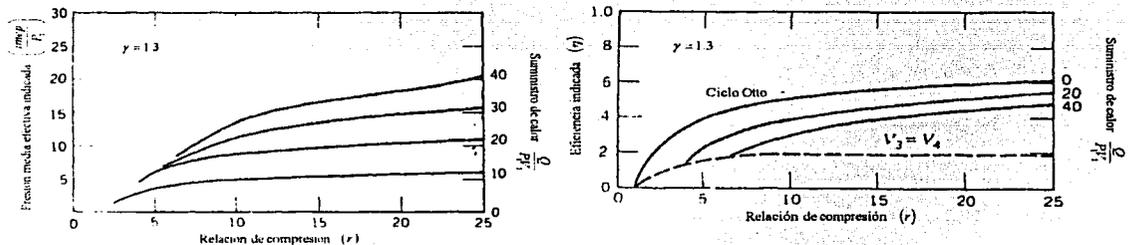


Figura 2.5 Características del ciclo Diesel

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Ciclos Duales

En realidad, las máquinas modernas de compresión-ignición no se parecen a ninguno de los dos ciclos mencionados con anterioridad; sin embargo, se asemeja a un ciclo *intermedio* en el cual una parte del calor se añade a volumen constante y el restante, a presión constante. La distribución de calor añadido en ambos procesos es, aproximadamente, la que el diseñador del motor pueda especificar de acuerdo con el combustible, el sistema de inyección del mismo y la geometría de la cámara, quedando, generalmente, limitada la presión máxima. Por ello algunas ocasiones se conoce este ciclo como el ciclo de presión limitada.

El ciclo se ilustra en la Fig. 2.6.

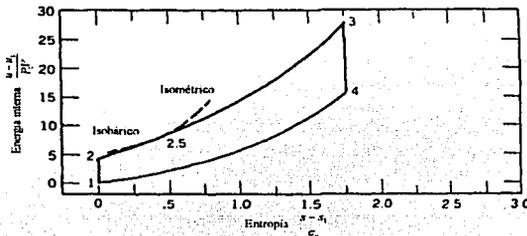
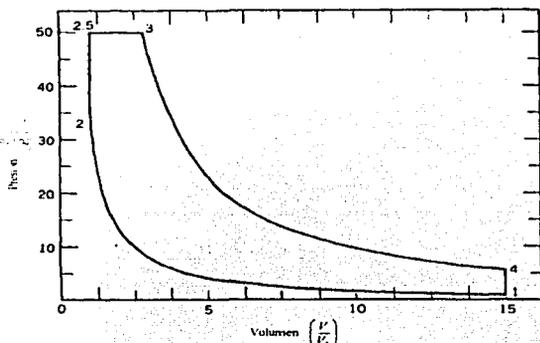


Figura 2.6 Ciclo Dual

En este caso se tiene la siguiente relación para la *adición de calor*,

$$Q_{ent} = mc_v(T_{2.5} - T_2) + mc_p(T_3 - T_{2.5}) \tag{2.4.14}$$

La carrera de expansión sigue siendo descrita por la ecuación (2.4.11), con tal de que $\beta = V_3/V_{2.5}$. En términos de $\alpha = P_3/P_2$ puede demostrarse que

$$\eta = 1 - \left(\frac{1}{r}\right)^{\gamma-1} \left[\frac{\alpha\beta^\gamma - 1}{(\alpha - 1) + \gamma\alpha(\beta - 1)} \right] \tag{2.4.15}$$

Los ciclos a volumen constante y a presión constante son casos especiales del ciclo Dual, cuando $\beta=1$ y $\alpha=1$ respectivamente. Este resultado *intermedio* se muestra en la Fig. 2.7. Si se transforma a β y α en términos de otras variables naturales, se obtiene

$$\beta = 1 + \frac{\gamma-1}{\alpha\gamma} \left[\frac{Q_{ent}}{P_1V_1} \frac{1}{r^{\gamma-1}} - \frac{\alpha-1}{\gamma-1} \right] \tag{2.4.16}$$

$$\alpha = \frac{1}{r^\gamma} \frac{P_3}{P_1} \tag{2.4.17}$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

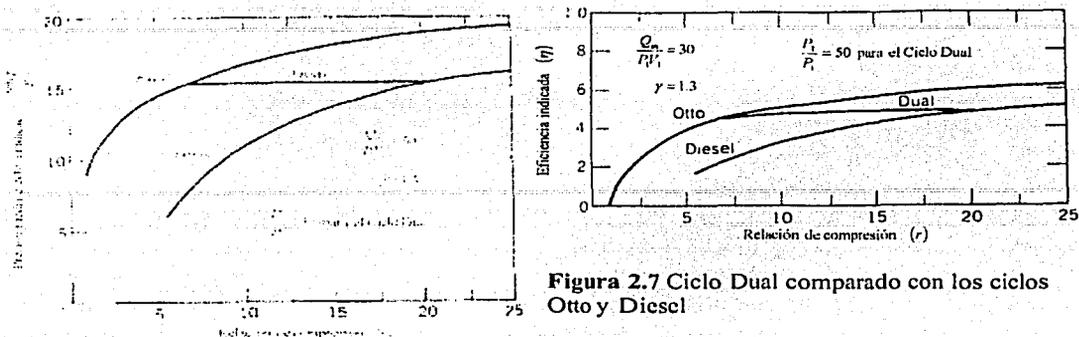


Figura 2.7 Ciclo Dual comparado con los ciclos Otto y Diesel

Discusión

El diagrama presión-volumen de un motor se conoce como el diagrama indicador. El área dentro del ciclo es una buena aproximación al trabajo realizado por el gas. Alguna parte de ese trabajo se disipa por efecto de la fricción de las partes móviles, de tal forma que el trabajo entregado se reduce. Es posible hacer mediciones tanto del trabajo realizado por el gas como del trabajo entregado al cigüeñal. Para distinguir entre ambos, se define

El trabajo indicado es el trabajo realizado por el gas
El trabajo de freno es el trabajo realizado por el cigüeñal

La diferencia entre el trabajo indicado y el trabajo de freno es el trabajo hecho en contra de la fricción que se disipa en forma de calor, y el trabajo requerido para bombear los fluidos dentro y fuera del motor.

En ciclos teóricos, tales como los ciclos de aire que se han discutido y los ciclos con combustible que se verán posteriormente, lo que se calcula es la eficiencia indicada.

Desde el punto de vista de la termodinámica de estos motores, la eficiencia y el trabajo por unidad de masa son parámetros de interés primario. Expresar el trabajo como una propiedad termodinámica intensiva, es decir, por unidad de masa, es conveniente, ya que de esta forma en la mayoría de los sistemas el análisis será independiente del tamaño del mismo.

La cantidad de masa dentro del cilindro varía dependiendo de la carga del motor. Por ello se ha visto conveniente comparar motores de distintos tamaños en términos del trabajo por unidad de volumen desplazado de un motor. El trabajo así expresado se conoce como *presión efectiva media* ya que tiene unidades de presión y si se emplea como si fuera una presión constante que se aplica al pistón a todo lo largo de la carrera de expansión; con ella se puede obtener el trabajo del ciclo. La presión efectiva media indicada, *imep (indicated mean effective pressure)*, de acuerdo con cualquiera de los modelos de ciclos presentados es

$$\frac{imep}{P_1} = \frac{Q_{ent}}{P_1 V_1} \frac{r}{r-1} \eta \tag{2.4.18}$$

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

Maximizar la presión efectiva media es muy importante en el diseño de motores; así, sería posible construir un motor más pequeño, más ligero, que produzca una cantidad dada de trabajo. Existen dos formas evidentes de hacer esto: incrementar la razón de compresión e incrementar el calor añadido. Sin embargo, existen importantes limitaciones prácticas para el desarrollo de estas mejoras. Por ejemplo, para los motores encendidos por chispa convencionales, la razón de compresión debe ser lo suficientemente pequeña para evitar el golpeteo; y por otro lado, para los motores diesel, debido al incremento de las fuerzas de fricción internas de la máquina se limita la utilidad de incrementar la razón de compresión. Algunos otros factores más complicados tienen gran influencia en la selección de una adecuada razón de compresión, especialmente restricciones impuestas por estándares de emisión.

Podría pensarse que es posible incrementar Q_{ent} aumentando el flujo de combustible hacia el motor. Sin embargo, como se discutirá en los ciclos de aire-oxígeno-combustible [Sec. 2.7 y 2.8], esto no es siempre cierto; por ejemplo, para mezclas ricas en combustible, una gran cantidad de energía no es usada porque no hay suficiente cantidad de oxígeno para quemar el monóxido de carbono en dióxido de carbono o el hidrógeno en agua. El ciclo de aire-oxígeno-combustible predice que la eficiencia decrece con la riqueza de la mezcla más allá de la relación estequiométrica.

De acuerdo con el ciclo de gas (y con el ciclo aire-oxígeno-combustible que se discutirá posteriormente), la eficiencia es mayor si el calor puede añadirse a volumen constante

$$\eta_{Otto} > \eta_{Dual} > \eta_{Diesel} \quad (2.4.19)$$

Podría preguntarse la razón por la que se construyen máquinas que se asemejan a un proceso de adición de calor a presión constante cuando se reconoce que añadirlo a volumen constante resulta mucho mejor. Para ilustrar lo complicado de este cuestionamiento piénsese en lo siguiente: si se supone que la presión máxima en el ciclo debe ser menor que P_{max} , ¿cómo debe suministrarse el calor para producir el trabajo requerido? La respuesta es, ahora

$$\eta_{Diesel} > \eta_{Dual} > \eta_{Otto} \quad (2.4.20)$$

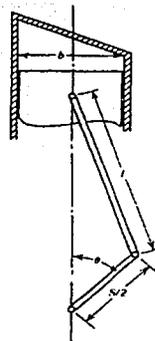
Se puede emplear el lenguaje matemático para demostrar que esto es cierto, pero resulta mucho más simple demostrarlo en términos de un diagrama temperatura-entropía (que no se muestra). El ciclo Otto y el ciclo Diesel se dibujan en tal diagrama de forma que el trabajo hecho por cada ciclo sea el mismo. Entonces se observa que el ciclo Diesel rechaza menos calor y, por ende, tiene una mayor eficiencia.

2.5 Motores Encendidos por Chispa [5, 9, 13, 21, 23]

El conjunto formado por el cilindro, el cigüeñal, la biela y el pistón puede representarse por medio del mecanismo mostrado en la Fig. 2.8. Las siguientes dimensiones son de particular interés:

- diámetro del cilindro, b
- longitud de la biela, l
- longitud de la carrera, S
- ángulo del cigüeñal, θ

Figura 2.8 Geometría del ensamble cigüeñal-biela-pistón del cilindro de un motor de combustión interna encendido por chispa.



El *punto muerto superior* de un motor se refiere al momento en el que el cigüeñal se encuentra a $\theta = 0^\circ$, es decir, cuando el pistón se encuentra en la parte más alta de su carrera. En esta posición el volumen es mínimo y se le conoce como *volumen libre*, V_0 . El *punto muerto inferior* se refiere a la posición del cigüeñal en la que $\theta = 180^\circ$, donde el pistón se encuentra en la parte más baja de su carrera. El volumen V_1 , es máximo en el punto muerto inferior.

La *relación de compresión* se define como la razón entre el volumen máximo y el mínimo,

$$r = \frac{V_1}{V_0} \quad (2.5.1)$$

El *volumen desplazado* es la diferencia entre el volumen máximo y el mínimo; para un único cilindro se tiene

$$V_d = V_1 - V_0 = \frac{\pi}{4} b^2 S \quad (2.5.2)$$

Para un motor de varios cilindros, este valor se multiplica por el número de cilindros existentes, N_c .

La *velocidad del motor* R_s se refiere a la velocidad rotacional del cigüeñal que se expresa, comúnmente, en revoluciones por minuto (rev/min, rpm). La *frecuencia del motor* ω , también se refiere a la razón de rotación del cigüeñal, pero expresada en radianes por segundo (rad/s).

Empleando el esquema de la Fig. 2.8 como modelo, es posible derivar una relación teórica funcional para calcular el volumen instantáneo (ver Apéndice C) y la velocidad del pistón para cualquier ángulo del cigüeñal y frecuencia del motor.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Para el volumen, se tiene

$$V = V_0 \left[1 + \frac{r-1}{2} \left(1 - \cos \theta + \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2 \sin^2 \theta} \right) \right) \right] \quad (2.5.3)$$

$$\text{con } \varepsilon = \frac{S}{2l}.$$

La *velocidad media del pistón*, \bar{U}_p , es un parámetro importante en el diseño del motor que se emplea constantemente. Dado que el pistón viaja una distancia igual al doble de la carrera por cada revolución, se tiene que

$$\bar{U}_p = 2SR_s \quad (2.5.4)$$

Los *anillos* del pistón se usan como un sello para mantener los gases dentro del cilindro, así como conservar el aceite lubricante fuera. Es de notarse que los anillos tienen *claros* para permitir la expansión térmica durante el calentamiento del motor. Como resultado de estos claros, los sellos son menos efectivos y una cierta cantidad de gases se fuga del cilindro. Estas fugas menoscaban el rendimiento del motor. De manera similar, cierta cantidad de aceite «se fuga» hacia la cámara de combustión.

Los gases son admitidos y expelidos del cilindro por medio de *válvulas* que abren y cierran en el momento adecuado. El *tiempo de apertura de cada válvula* se controla por medio de un árbol de levas que gira a la mitad de la velocidad del motor en un ciclo de cuatro tiempos.

El aire y el combustible entran en el motor por medio de un *carburador*, cuya función es mezclar el combustible en proporción al flujo de aire entrante. La *garganta* es la parte del carburador que se emplea para controlar el aire inducido. Dado que el flujo de combustible se mide con relación al flujo de aire, la garganta, en esencia, controla la *potencia* del motor. El *múltiple de admisión* es un conjunto de conductos que distribuyen la mezcla de aire y combustible a cada cilindro. El *múltiple de salida* conduce a los gases quemados de cada cilindro a una tubería central para su expulsión.

La *potencia al freno* P_f es la rapidez la cual el trabajo del motor es realizado, mientras que el *par de torsión* o *torque* τ es una medida del trabajo realizado por unidad de giro (radianes) del cigüeñal. Ambas cantidades se relacionan por

$$P_f = 2\pi\tau R_s \quad (2.5.5)$$

Otro importante parámetro de funcionamiento del motor es la *eficiencia volumétrica*, e_v . Se define como la masa de aire y combustible inducida en el cilindro dividido por la masa que ocuparía el volumen desplazado a la densidad ρ_i que prevalece en el múltiple de admisión.

$$e_v = \frac{4\pi(\dot{m}_a + \dot{m}_c)}{\rho_i V_d \omega} \quad (2.5.6)$$

Un parámetro más, que sirve como punto de comparación entre motores, sin importar el tamaño relativo de estos, es la *presión efectiva media al freno*, bmep. Este parámetro se define como el trabajo hecho por unidad de volumen desplazado; de tal forma, para un motor de cuatro tiempos,

$$\text{bmep} = \frac{4\pi\tau}{V_d} = \frac{2P_b}{V_d R_s} \quad (2.5.7)$$

2.6 Modelo Matemático Básico de un Motor de Combustión Interna

[9, 13, 15, 18, 23]

Suministro arbitrario de calor

Todos los ciclos vistos en la Sección 2.4 pueden expresarse en forma *exacta*, es decir, por medio de una ecuación. Ahora se propone el estudio de la influencia que tiene el tiempo relativo de adición de calor. En este caso, el suministro de calor está expresado como una función del ángulo del cigüeñal, obteniéndose una relación conocida como *ley de quemado*. Por ejemplo, para los motores de encendido por chispa, se ha encontrado que la siguiente relación, completamente empírica, funciona razonablemente bien

$$x = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[\frac{\pi(\theta - \theta_s)}{\theta_h} \right] \right\} \quad (2.6.1)$$

donde x es la fracción de calor liberado, θ es el ángulo del cigüeñal, θ_s es el ángulo donde inicia el suministro de calor y θ_h su duración. La ecuación (2.6.1) solamente se aplica durante el tiempo en que se suministra calor, es decir, $\theta_s < \theta < (\theta_s + \theta_h)$.

Otra función que se aplica en ocasiones es

$$x = 1 - e^{-\left[\frac{\theta - \theta_s}{\theta_h} \right]^n} \quad (2.6.2)$$

En este caso, θ_h es la escala temporal de suministro de calor y su duración es algún múltiplo de θ_h .

Para cualquiera de estas funciones, los parámetros θ_s y θ_h así como n , se emplean para ajustar curvas de datos experimentales; es decir, no se conocen *a priori*. Las funciones son útiles para extrapolar datos a partir de las condiciones sobre las que se ha experimentado, empleando el mismo motor (los parámetros son dependientes del motor).

En cualquier caso, supóngase que $x(\theta)$ es conocido. La ecuación de estado para un gas ideal, según la ecuación (2.1.16), es

$$PV = mRT$$

Tomando el logaritmo en ambos lados y derivando con respecto al ángulo del cigüeñal, se tiene

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{d\theta} + \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} = \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} \quad (2.6.3)$$

La primera ley de la termodinámica en su forma diferencial, para un gas ideal con capacidades térmicas específicas constantes, es

$$mc_v \frac{dT}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad (2.6.4)$$

Dividiendo el lado derecho entre mRT y el izquierdo entre PV , después de reacomodar los términos, queda

$$\frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} = (\gamma - 1) \left(\frac{1}{PV} \frac{dQ}{d\theta} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \right) \quad (2.6.5)$$

Combinando las ecuaciones (2.6.3) y (2.6.5) e introduciendo $dQ = Q_{ent} dx$, se obtiene

$$\frac{dP}{d\theta} = -\gamma \frac{P}{V} \frac{dV}{d\theta} + (\gamma - 1) \frac{Q_{ent}}{V} \frac{dx}{d\theta} \quad (2.6.6)$$

En la práctica, es conveniente normalizar la ecuación, escribiendo

$$\bar{P} = \frac{P}{P_1} \quad \bar{V} = \frac{V}{V_1} \quad \bar{Q} = \frac{Q_{ent}}{P_1 V_1} \quad (2.6.7)$$

en cuyo caso, se tiene

$$\frac{d\bar{P}}{d\theta} = -\gamma \frac{\bar{P}}{\bar{V}} \frac{d\bar{V}}{d\theta} + (\gamma - 1) \frac{\bar{Q}}{\bar{V}} \frac{dx}{d\theta} \quad (2.6.8)$$

El volumen V y su derivada $dV/d\theta$ son funciones conocidas de θ [ecuación (2.5.3)], así como $dx/d\theta$, en virtud de (2.6.1) o (2.6.2). Por consiguiente, dado el exponente adiabático γ y el calor total añadido al sistema \bar{Q} , la ecuación (2.6.8) es de la siguiente forma

$$\frac{d\bar{P}}{d\theta} = f(\theta, \bar{P}) \quad (2.6.9)$$

que es una ecuación diferencial lineal de primer orden, fácilmente resoluble por integración numérica. La solución da $\bar{P}(\theta)$, que una vez determinada permite calcular el trabajo hecho por el ciclo, la presión efectiva media indicada y la eficiencia indicada.

Pérdidas de calor

La ecuación (2.6.5) es válida tanto si dQ se interpreta como el calor añadido debido a la combustión o el calor perdido por los gases en el cilindro debido a la convección. Para admitir ambas posibilidades, se puede escribir

$$dQ = Q_{ent} dx - dQ_p \quad (2.6.10)$$

donde dQ_p es el calor perdido. De la definición del coeficiente de transferencia de calor por convección, el calor perdido es

$$\frac{dQ_p}{dt} = hA(T - T_p) \quad (2.6.11)$$

donde

h = coeficiente de transferencia de calor (no confundirlo con la entalpía específica)

A = área de la superficie en contacto con los gases

T_p = temperatura de la pared del cilindro

Si se introducen las siguientes variables adimensionales

$$\tilde{Q} = \frac{Q_{vm}}{P_1 V_1} \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_1} \quad \tilde{Q}_p = \frac{Q_p}{P_1 V_1} \quad \tilde{T}_p = \frac{T_p}{T_1} \quad (2.6.12)$$

Entonces se tiene que la pérdida de calor adimensional es

$$\frac{d\tilde{Q}_p}{dt} = hA(\tilde{T} - \tilde{T}_p) \quad (2.6.13)$$

y si se sustituye (2.6.13) en la ecuación (2.6.8), se obtiene

$$\frac{d\tilde{P}}{d\theta} = -\gamma \frac{\tilde{P}}{\tilde{V}} \frac{d\tilde{V}}{d\theta} + \frac{(\gamma-1)}{\tilde{V}} \left(\tilde{Q} \frac{dx}{d\theta} - hA(\tilde{T} - \tilde{T}_p) \right) \quad (2.6.14)$$

Nótese que la eficiencia de un motor adiabático depende de la razón de compresión, la longitud de la carrera, el calor adimensional añadido durante la combustión y los parámetros de la ley de quemado (n , θ_b y θ_c). Cuando se admiten las pérdidas de calor, se genera una dependencia adicional con la temperatura adimensional de pared, el coeficiente de transferencia de calor y el área superficial de la cámara de combustión.

Pérdidas de masa

Considérese un motor en el que cuando las válvulas permanecen cerradas, existe una transferencia de masa desde el cilindro hacia el cárter. Como la masa dentro del cilindro no es constante, la ecuación (2.6.3) no es válida. En su lugar, se escribe

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{d\theta} + \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} = \frac{1}{m} \frac{dm}{d\theta} + \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} \quad (2.6.15)$$

De forma similar, se empleará la primera ley de la termodinámica en su forma diferencial para un sistema abierto.

$$m c_v \frac{dT}{d\theta} + c_v T \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} - \frac{\dot{m}_p c_p T}{\omega} \quad (2.6.16)$$

Donde \dot{m}_p es la fuga instantánea, que se considera siempre hacia fuera del cilindro y que consiste en un gas caracterizado por la entalpía de la mezcla contenida en la cámara, esto es, $c_p T$.

Eliminando $dT/d\theta$ entre las ecuaciones (2.6.15) y (2.6.16) se obtiene

$$\frac{dP}{d\theta} = -\gamma \frac{P}{V} \frac{dV}{d\theta} + \frac{(\gamma-1)}{V} \frac{dQ}{d\theta} - \gamma \frac{\dot{m}_p P}{\omega m} \quad (2.6.17)$$

Debe notarse que para eliminar $dm/d\theta$ se hizo uso de la ecuación de continuidad para la conservación de la masa,

$$\frac{dm}{d\theta} = -\frac{\dot{m}_p}{\omega} \quad (2.6.18)$$

Introduciendo la nueva variable $C = \dot{m}_p/m$, haciendo un análisis similar al anterior y empleando la ecuación (2.6.10), finalmente se obtiene

$$\frac{d\tilde{P}}{d\theta} = -\gamma \frac{\tilde{P}}{\tilde{V}} \frac{d\tilde{V}}{d\theta} + \frac{(\gamma-1)}{\tilde{V}} \left(\tilde{Q} \frac{dx}{d\theta} - hA(\tilde{T} - \tilde{T}_p) \right) - \frac{\gamma C \tilde{P}}{\omega} \quad (2.6.19)$$

$$\frac{d\tilde{W}}{d\theta} = \tilde{P} \frac{d\tilde{V}}{d\theta} \quad (2.6.20)$$

$$\frac{d\tilde{Q}_p}{dt} = hA(\tilde{T} - \tilde{T}_p) \quad (2.6.21)$$

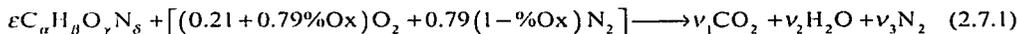
$$\frac{d\tilde{m}}{d\theta} = -\frac{C\tilde{m}}{\omega} \quad (2.6.22)$$

Estas ecuaciones, de la (2.6.19) a la (2.6.22), representan un conjunto de cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias que pueden resolverse simultáneamente siempre que se pueda especificar el parámetro C , lo cual se discutirá en la Sección 2.12.

2.7 Estequiometría y composición de los residuos de una mezcla aire-oxígeno-combustible [6, 9, 12, 21, 22, 29]

Las propiedades del aire varían geográficamente con la altitud y el tiempo. Se considerará que se compone de 21% de oxígeno y 79% de nitrógeno en volumen y el contenido de oxígeno adicional que será agregado, se expresará como función de estos porcentajes, por lo que se podrá agregar *cualquier* cantidad de oxígeno en la mezcla y ver los efectos que produce sobre la formación de las especies contaminantes, principalmente NOx.

Se representará la fórmula química de un combustible como $C_\alpha H_\beta O_\gamma N_\delta$. Una reacción estequiométrica es aquella en la que los únicos productos resultantes son el dióxido de carbono (CO_2) y el agua (H_2O). Además, como es de interés observar el efecto que tiene añadir oxígeno a la mezcla aire-combustible sobre los productos de la combustión, se agregará este término a la composición del aire, denominado %Ox, expresado en decimal, y que representa el porcentaje en moles agregado a la mezcla. Se puede escribir la reacción como



que se resuelve para ε , la relación molar combustible-mezcla (a diferencia de un análisis normal de combustión, no se hablará de relación aire-combustible o combustible-aire, sino de relación mezcla-combustible o combustible-mezcla, donde *mezcla* se refiere a la mezcla de aire y oxígeno), y los coeficientes v_i ($i=1,2,3$) que describen la composición de los productos. Se sabe que los átomos se conservan, entonces resulta

$$\begin{array}{lll} C & \varepsilon\alpha & = v_1 \\ H & \varepsilon\beta & = 2v_2 \\ O & \varepsilon\gamma + 2(0.21 + 0.79\%Ox) & = 2v_1 + v_2 \\ N & \varepsilon\delta + 2[0.79(1 - \%Ox)] & = 2v_3 \end{array}$$

La solución de estas ecuaciones da

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{(0.21 + 0.79\%Ox)\alpha}{\alpha + 0.25\beta - 0.5\gamma} \\ v_2 &= \frac{(0.105 + 0.395\%Ox)\beta}{\alpha + 0.25\beta - 0.5\gamma} \\ v_3 &= 0.79(1 - \%Ox) + \frac{(0.105 + 0.395\%Ox)\delta}{\alpha + 0.25\beta - 0.5\gamma} \\ \varepsilon &= \frac{0.21 + 0.79\%Ox}{\alpha + 0.25\beta - 0.5\gamma} \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

La relación másica estequiométrica combustible-mezcla es

$$F_s = \frac{\varepsilon(12.01\alpha + 1.008\beta + 16.00\gamma + 14.00\delta)}{28.84 + 3.16\%Ox} \quad (2.7.3)$$

En la Tabla 2.1 se observan algunos valores típicos para diversos porcentajes de oxígeno (0%, 5% y 10%).

La Tabla 2.1 también muestra la fracción molar y másica de combustible en una mezcla estequiométrica de mezcla-combustible

$$y_s = \frac{\epsilon}{1 + \epsilon} \quad x_s = \frac{F_s}{1 + F_s} \quad (2.7.4)$$

Tabla 2.1

Relaciones Aire-Mezcla Estequiométricas y Fracciones Molares y Másicas

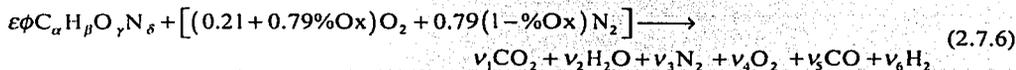
Combustible	ϵ			F_s			y_s			x_s		
	0%	5%	10%	0%	5%	10%	0%	5%	10%	0%	5%	10%
C ₂ N ₂	0.1050	0.1248	0.1445	0.1894	0.2238	0.2578	0.0950	0.1109	0.1263	0.1592	0.1829	0.2050
H ₂	0.4200	0.4990	0.5780	0.0294	0.0347	0.0400	0.2958	0.3329	0.3663	0.0285	0.0335	0.0384
NH ₃	0.2800	0.3327	0.3853	0.1653	0.1953	0.2250	0.2188	0.2496	0.2782	0.1418	0.1634	0.1837
CH ₄	0.1050	0.148	0.1445	0.0584	0.0690	0.0795	0.0950	0.1109	0.1263	0.0552	0.0646	0.0737
C ₃ H ₈	0.0420	0.0499	0.0578	0.0642	0.0759	0.0874	0.0403	0.0475	0.0546	0.0603	0.0705	0.0804
C ₈ H ₁₈	0.0168	0.0200	0.0231	0.0665	0.0786	0.0906	0.0165	0.0196	0.0226	0.0624	0.0729	0.0831
C ₁₅ H ₃₂	0.0091	0.0108	0.0126	0.0672	0.0795	0.0915	0.0090	0.0107	0.0124	0.0630	0.0736	0.0839
C ₂₀ H ₄₀	0.0070	0.0083	0.0096	0.0681	0.0805	0.0927	0.0070	0.0082	0.0095	0.0637	0.0745	0.0848
C ₂ H ₂	0.0840	0.0998	0.1156	0.0758	0.0896	0.1032	0.0775	0.0907	0.1036	0.0705	0.0822	0.0936
C ₁₀ H ₈	0.0175	0.0208	0.0241	0.0778	0.0919	0.1059	0.0172	0.0204	0.0235	0.0722	0.0842	0.0957
CH ₃ O	0.1400	0.1663	0.1927	0.1555	0.1838	0.2117	0.1228	0.1426	0.1615	0.1346	0.1553	0.1747
C ₂ H ₆ O	0.0700	0.0832	0.0963	0.1118	0.1321	0.1522	0.0654	0.0768	0.0879	0.1006	0.1167	0.1321
CH ₃ NO ₂	0.2800	0.3327	0.3853	0.5926	0.7002	0.8066	0.2188	0.2496	0.2782	0.3721	0.4118	0.4465

La razón de equivalencia combustible-mezcla se define como la razón entre la relación combustible-mezcla real y la estequiométrica

$$\phi = \frac{F}{F_s} \quad (2.7.5)$$

Si $\phi < 1$ la mezcla se llama pobre, si $\phi > 1$ la mezcla se conoce como rica y si $\phi = 1$ se trata de una mezcla estequiométrica.

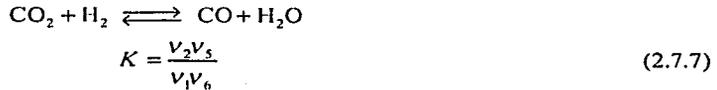
A bajas temperaturas (como en la expulsión de gases) y relaciones carbono-oxígeno menores a uno, se puede escribir la siguiente reacción de combustión



Algunas aproximaciones convenientes para mezclas pobres y ricas son

$$\begin{aligned} \phi < 1 & \quad v_5 = v_6 = 0 \\ \phi > 1 & \quad v_4 = 0 \end{aligned}$$

Para los casos de mezclas pobres o estequiométricas, las ecuaciones de balanceo atómico son suficientes para determinar los productos de la combustión (4 ecuaciones y 4 incógnitas). Sin embargo, para el caso de mezclas ricas, es necesario introducir una constante de equilibrio [ecuación (2.2.40)] para la siguiente reacción



Las soluciones para ambos casos, mezclas ricas y pobres, se dan en la Tabla 2.2.

Tabla 2.2

Productos de la Combustión a Bajas Temperaturas, v_i [moles / mol de mezcla]

i	Especies	$\phi < 1$	$\phi > 1$
1	CO ₂	$\alpha\phi\epsilon$	$\alpha\phi\epsilon - v_5$
2	H ₂ O	$\beta\phi\epsilon/2$	$2(0.21 + 0.79\%Ox) - \phi\epsilon(2\alpha - \gamma) + v_5$
3	N ₂	$0.79(1 - \%Ox) + \delta\phi\epsilon/2$	$0.79(1 - \%Ox) + \delta\phi\epsilon/2$
4	O ₂	$(0.21 + 0.79\%Ox)(1 - \phi)$	0
5	CO	0	v_5
6	H ₂	0	$2(0.21 + 0.79\%Ox)(\phi - 1) - v_5$

En el caso de mezclas ricas, el parámetro v_5 lo proporciona la solución de una ecuación cuadrática

$$v_5 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (2.7.8)$$

donde

$$a = 1 - K$$

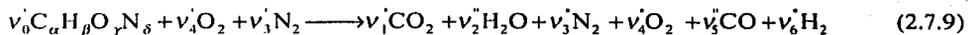
$$b = 2(0.21 + 0.79\%Ox) - \phi\epsilon(2\alpha - \gamma) + K[2(0.21 + 0.79\%Ox)(\phi - 1) + \alpha\phi\epsilon]$$

$$c = -2(0.21 + 0.79\%Ox)\alpha\phi\epsilon(\phi - 1)K$$

La constante de equilibrio, aproximada a una curva a partir de los datos de las tablas JANAF, está dada por $\ln K = 2.743 - 1.761/t - 1.611/t^2 + 0.2803/t^3$, donde $t = T/1000$ y T es la temperatura absoluta en grados Kelvin. Esta curva se puede aplicar en el rango de $400 \text{ K} < T < 3200 \text{ K}$.

Se ha visto cómo determinar la composición de mezclas aire-oxígeno-combustible y los productos de su combustión a bajas temperaturas (sin disociación). Sin embargo, se sabe que en máquinas de movimiento alternativo existen gases residuales mezclados con el combustible, el aire y el oxígeno. Es necesario determinar la composición de tales mezclas para el análisis de la carrera de compresión y de la mezcla no quemada localizada por delante de la flama al momento de la combustión.

La fracción másica residual f es un parámetro conveniente para representarlo. Es posible reescribir la ecuación de combustión como



donde

v_i' = coeficientes de los reactivos

v_i'' = coeficientes de los productos

Adoptando una notación similar para otros símbolos, resulta que para una mezcla de gases residuales y gases premezclados

$$x_i = (1-f)x_i' + fx_i'' \quad i = 0,6 \quad (2.7.10)$$

Las fracciones molares están dadas por

$$y_i = (1-y_r)y_i' + y_r y_i'' \quad (2.7.11)$$

donde el término y_r , la fracción molar residual, es

$$y_r = \left[1 + \frac{M''}{M'} \left(\frac{1}{f} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (2.7.12)$$

Cálculo de la Capacidad Térmica Específica de la Mezcla

La capacidad térmica específica a presión constante se define como

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (2.7.13)$$

Substituyendo la ecuación (2.7.13) en la ecuación (2.1.7), se obtiene

$$c_p = \sum_{i=1}^J \left(y_i c_{p,i} + h_i \frac{\partial y_i}{\partial T} \right) \quad (2.7.14)$$

La capacidad térmica específica así calculada se llama *capacidad térmica específica en el equilibrio*. Otra forma de obtener la capacidad térmica específica, llamada *capacidad térmica específica estable*, se calcula suponiendo la composición constante, de donde

$$c_{p,s} = \sum_{i=1}^J y_i c_{p,i} \quad (2.7.15)$$

Para calcular la capacidad térmica específica en el equilibrio de una mezcla de aire-oxígeno-combustible y gases residuales, se considera la ecuación (2.7.11) y se diferencia con respecto a T ,

$$\frac{\partial y_i}{\partial T} = y_r \frac{\partial y_i''}{\partial T} \quad (2.7.16)$$

En esta diferenciación, se reconoció el hecho que ni y_r ni y_i dependen de la temperatura. También es cierto que $\sum_{i=1}^6 v_i$ para cualquier caso, mezcla pobre o mezcla rica, en la Tabla 2.2 no depende de la temperatura. Se sigue que

$$\frac{\partial y_i}{\partial T} = y_r \frac{1}{\sum v_i} \frac{\partial v_i}{\partial T} \quad (2.7.17)$$

De acuerdo con la Tabla 2.2, ninguno de los v_i de la mezcla pobre dependen de T ; sin embargo, para la mezcla rica, v_5 depende de T , como puede verse en la resolución de la ecuación cuadrática (2.7.8). De tal forma, se puede escribir

$$\frac{\partial y_i}{\partial T} = 0 \quad (\text{mezcla pobre}) \quad (2.7.18)$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial T} = y_r \frac{1}{\sum v_i} \frac{\partial v_i}{\partial v_5} \frac{\partial v_5}{\partial K} \frac{\partial K}{\partial T} \quad (\text{mezcla rica}) \quad (2.7.19)$$

Así pues, $\partial v_i / \partial v_5$ con $i=1-6$, en ese orden, queda arreglado como el siguiente vector

$$\left. \frac{\partial v_i}{\partial v_5} \right|_{i=1,6} = [-1, 1, 0, 0, 1, -1] \quad (2.7.20)$$

y si se define

$$\text{DCDT} = \frac{\partial v_5}{\partial K} \frac{\partial K}{\partial T} \quad (2.7.21)$$

es posible demostrar para el caso de una mezcla rica, las siguientes relaciones

$$\frac{\partial v_5}{\partial K} = \frac{v_5^2 - v_5(2(0.21 + 0.79\%Ox)(\phi - 1) + \alpha\phi\epsilon) + 2(0.21 + 0.79\%Ox)\alpha\phi\epsilon(\phi - 1)}{2v_5a + b} \quad (2.7.22)$$

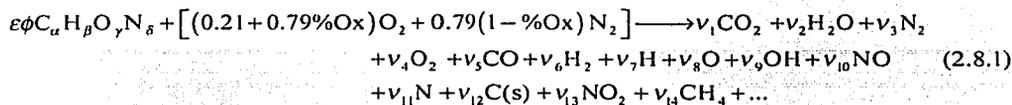
$$\frac{\partial K}{\partial T} = \frac{\partial K}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial T} = \left(\frac{1.761}{t^2} + \frac{3.222}{t^3} - \frac{0.8409}{t^4} \right) \frac{K}{1000} \quad (2.7.23)$$

donde a y b son las mismas constantes definidas para resolver la ecuación (2.7.8).

De esta forma, substituyendo (2.7.22) y (2.7.23) en (2.7.21), junto con (2.7.20) y (2.7.19) mediante el uso de (2.7.14), es posible conocer c_p .

2.8 Equilibrio de los productos de la combustión [6, 8, 9, 12, 13, 16, 21, 22, 29]

En general, se considerará un problema en el que tanto T como P son conocidas y



Para una mezcla de n especies, la energía libre de Gibbs es [ecuación (2.2.18)]

$$g = \sum_{j=1}^n \mu_j \nu_j \quad (2.8.2)$$

donde el potencial químico de la especie j está definido, según (2.2.14) como

$$\mu_j = \left(\frac{\partial g}{\partial \nu_j} \right)_{T, P, \nu_{i \neq j}} \quad (2.8.3)$$

El estado de equilibrio, según se ha visto en (2.2.17), se determina minimizando la energía libre de Gibbs sujeta a las restricciones que impone la conservación atómica, esto es,

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \nu_j = b_i^0 \quad i = 1, \dots, I \quad (2.8.4)$$

o

$$b_i - b_i^0 = 0 \quad i = 1, \dots, I \quad (2.8.5)$$

donde a_{ij} es el número de átomos del elemento i en la especie j , b_i^0 es el número de átomos del elemento i en los reactivos, y

$$b_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \nu_j \quad (2.8.6)$$

es el número de átomos del elemento i en los productos.

A continuación, se define un término G de la siguiente manera

$$G = g + \sum_{i=1}^I \lambda_i (b_i - b_i^0) \quad (2.8.7)$$

donde los coeficientes λ_i son multiplicadores de Lagrange.

La condición de equilibrio (2.2.17) se convierte en

$$0 = \delta G = \sum_{j=1}^n \left(\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i a_{ij} \right) \delta v_j + \sum_{i=1}^l (b_i - b_i^0) \delta \lambda_i \quad (2.8.8)$$

si se consideran las variaciones δv_j y $\delta \lambda_i$ como independientes, se tiene

$$\mu_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i a_{ij} = 0 \quad j = 1, \dots, n \quad (2.8.9)$$

Para gases ideales

$$\mu_j = \mu_j^0 + RT \ln \left(\frac{v_j}{v} \right) + RT \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) \quad (2.8.10)$$

entonces

$$\frac{\mu_j^0}{RT} + \ln \frac{v_j}{v} + \ln \frac{P}{P_0} + \sum_{i=1}^l \pi_i a_{ij} = 0 \quad j = 1, \dots, n \quad (2.8.11)$$

donde $\pi_i = \lambda_i / RT$.

Para una temperatura y presión dadas, esta ecuación se transforma en un conjunto de n ecuaciones para las n incógnitas v_j , l incógnitas π_i y v .

La ecuación (2.8.5) provee de una ecuación más l , y se cierra el conjunto con

$$v = \sum_{i=1}^n v_i \quad (2.8.12)$$

Y se tiene que resolver un conjunto de $n+l+1$ ecuaciones.

Un estado termodinámico puede ser especificado por cualesquiera dos propiedades independientes e intensivas. Por ejemplo, para una combustión a presión constante, se conoce la entalpia en vez de la temperatura. En este caso la temperatura es una incógnita y es necesario agregar una ecuación adicional a nuestro conjunto [vea (2.1.12)],

$$H = \sum_{j=1}^n v_j h_j \quad (2.8.13)$$

Para una compresión o expansión isentrópica o una expansión a una presión especificada, se da la entropía en lugar de la temperatura o la entalpia. En este caso se añade [vea (2.1.21)]

$$S = \sum_{j=1}^n v_j \left(s_j^0 - R \ln \frac{v_j}{v} + R \ln P \right) \quad (2.8.14)$$

Finalmente, si en algún caso se conoce el volumen específico, entonces se tiene que minimizar la energía libre de Helmholtz. Un análisis similar al ya hecho muestra que la ecuación (2.8.11) es reemplazada por

$$\frac{\mu_j^0}{RT} + \ln \frac{v_j}{v} + \ln \frac{RT}{v} + \sum_{i=1}^l \pi_i a_{ij} = 0 \quad j = 1, \dots, n \quad (2.8.15)$$

Para una combustión a volumen constante, se incluye

$$U = \sum_{j=1}^n v_j (h_j - RT) \tag{2.8.16}$$

Para una expansión o compresión isentrópica a un volumen específico, se incluye

$$S = \sum_{j=1}^n v_j \left(s_j^0 - R \ln \frac{v_j}{v} + R \ln \frac{RT}{v} \right) \tag{2.8.17}$$

A continuación se muestra un pequeño resumen del conjunto apropiado de ecuaciones que deben resolverse para las variables termodinámicas dadas.

Dadas las propiedades	se necesitan las ecuaciones
T, P	(2.8.5), (2.8.12), (2.8.11)
H, P	(2.8.5), (2.8.12), (2.8.11), (2.8.13)
S, P	(2.8.5), (2.8.12), (2.8.11), (2.8.14)
T, V	(2.8.5), (2.8.12), (2.8.15)
U, V	(2.8.5), (2.8.12), (2.8.15), (2.8.16)
S, V	(2.8.5), (2.8.12), (2.8.15), (2.8.17)

Empleando un programa de la NASA llamado TRANS72 [9] se han calculado algunas propiedades termodinámicas para mezclas de aire-combustible en las cuales $\beta/\alpha = 2.25$. En las siguientes gráficas se muestran los resultados obtenidos en la composición de los productos, dependiendo de la temperatura y tomando como casos especiales $\phi = 0.8, 1$ y 1.2 para una $P=50$ atm en la Fig. 2.9, y dependiendo de la razón de equivalencia en la Fig. 2.10.

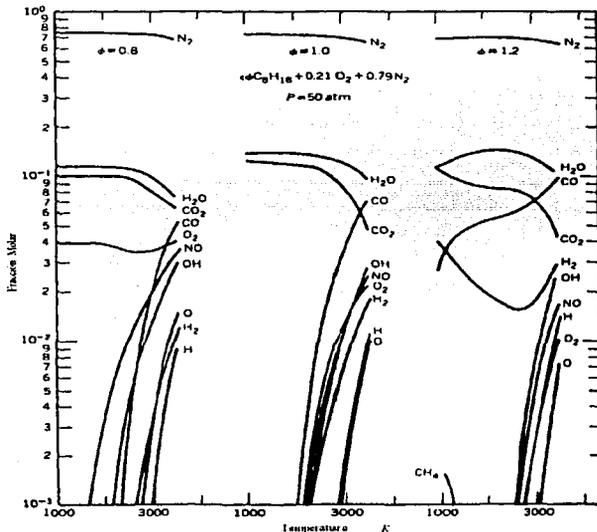


Figura 2.9 Composición en el equilibrio de una mezcla aire-octano para diferentes temperaturas y valores de ϕ [9].

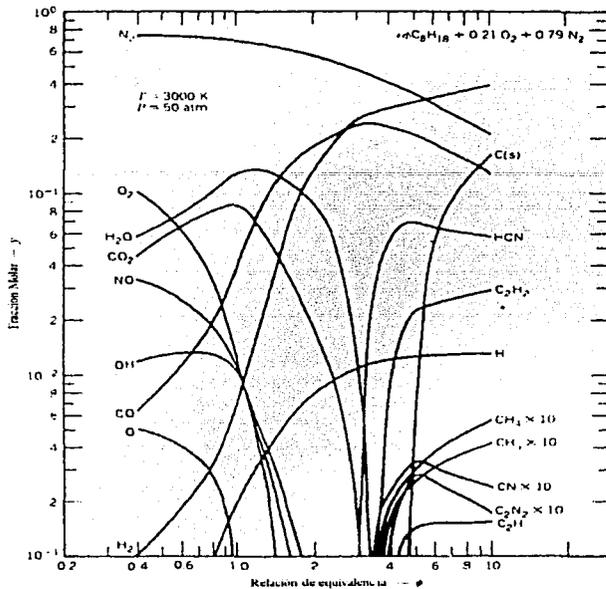


Figura 2.10 Composición en el equilibrio de una mezcla aire-octano a $T=3000 \text{ K}$ y $P=50 \text{ atm}$ [9].

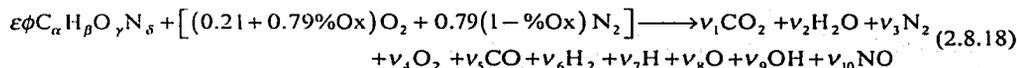
La Fig. 2.9 es una función exclusiva de la temperatura. A esa presión (50 atm), la composición predicha usando la Tabla 2.2 es una buena aproximación para temperaturas menores que 2000 K. A presiones más bajas, la disociación aumenta, por lo que a presión atmosférica la Tabla 2.2 es válida para temperaturas menores que 1500 K aproximadamente. Debe notarse que a elevadas temperaturas existe un aumento significativo de óxido nítrico (NO). Si algún gas, dentro de un cilindro de combustión, se calienta a esas temperaturas, ese gas tenderá hacia el equilibrio a una razón determinada por la cinética química. Debido a que la química de la mayoría de las especies que contribuyen a determinar las propiedades termodinámicas de interés es bastante rápida, en la mayoría de los casos se supondrá que existe un equilibrio local. Sin embargo, el óxido nítrico tiene gran relevancia ya que es un contaminante atmosférico y, al contrario que las demás especies termodinámicas de importancia, su comportamiento químico no es lo suficientemente rápido como para considerarlo en equilibrio.

La composición como función de la razón de equivalencia se ilustra en la Fig. 2.10. Los resultados muestran la tendencia general esperada de la Fig. 2.9 y la Tabla 2.2 pero enfatiza el hecho de que para una razón de equivalencia aproximadamente mayor a 4, se crean una serie más de especies tales como carbón sólido $\text{C}(s)$, ácido cianhídrico HCN , acetileno C_2H_2 y metano CH_4 .

Equilibrio en los productos de la combustión - Formulación

Si se revisan las Figs. 2.9 y 2.10, se encontrará que para $\phi < 3$, las únicas especies de importancia debido a la disociación son O, H, OH y NO. Entonces, las especies listadas en la ecuación (2.8.1) pueden terminarse para $i=10$; esto es, solo se necesitan considerar 10 especies. Es importante reconocer que esto no se sabe a priori, es conocimiento adquirido a lo largo de una gran cantidad de simulaciones hechas por computadora con enormes listas de especies y de examinar los resultados.

Se considera entonces el siguiente problema



El balance atómico proporciona las siguientes cuatro ecuaciones:

$$C \quad \varepsilon\phi\alpha = (y_1 + y_5)N \quad (2.8.19)$$

$$H \quad \varepsilon\phi\beta = (2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9)N \quad (2.8.20)$$

$$O \quad \varepsilon\phi\gamma + 2(0.21 + 0.79\%Ox) = (2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10})N \quad (2.8.21)$$

$$N \quad \varepsilon\phi\delta + 2[0.79(1 - \%Ox)] = (2y_3 + y_{10})N \quad (2.8.22)$$

donde $N = \sum_{i=1}^{10} v_i$ es el número total de moles. Por definición, se puede escribir

$$\sum_{i=1}^{10} y_i - 1 = 0 \quad (2.8.23)$$

Introduciendo seis constantes de equilibrio se obtienen 11 ecuaciones para las 10 fracciones molares desconocidas y_i y el número de moles N . Las reacciones que se consideran, con su respectiva constante de equilibrio [ecuación (2.2.38)], son las siguientes

$$\frac{1}{2} H_2 \rightleftharpoons H \quad K_1 = \frac{y_7 P^{1/2}}{y_6^{1/2}} \quad (2.8.24)$$

$$\frac{1}{2} O_2 \rightleftharpoons O \quad K_2 = \frac{y_8 P^{1/2}}{y_4^{1/2}} \quad (2.8.25)$$

$$\frac{1}{2} H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightleftharpoons OH \quad K_3 = \frac{y_9}{y_4^{1/2} y_6^{1/2}} \quad (2.8.26)$$

$$\frac{1}{2} O_2 + \frac{1}{2} N_2 \rightleftharpoons NO \quad K_4 = \frac{y_{10}}{y_4^{1/2} y_3^{1/2}} \quad (2.8.27)$$

$$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightleftharpoons H_2O \quad K_5 = \frac{y_2}{y_4^{1/2} y_6 P^{1/2}} \quad (2.8.28)$$

$$CO + \frac{1}{2} O_2 \rightleftharpoons CO_2 \quad K_6 = \frac{y_1}{y_5 y_4^{1/2} P^{1/2}} \quad (2.8.29)$$

El uso de las constantes de equilibrio es idéntico a maximizar la entropía del gas [vca la Sec. 2.3]. Este método es simple cuando se consideran sólo algunas especies como en el presente caso.

Cuando ya se conoce la composición, es posible calcular las propiedades termodinámicas de interés: entalpía, entropía, volumen específico y energía interna.

Equilibrio en los productos de la combustión - Solución

En esta sección se presenta un método desarrollado por Olikara y Borman (1975) para resolver la composición, la capacidad térmica específica en el equilibrio y otras derivadas parciales empleadas en el análisis termodinámico. [9]

La unidad de presión en las seis ecuaciones (2.8.24) a (2.8.29) es la atmósfera. Olikara y Borman (1975) han aproximado a una curva las constantes de equilibrio tabuladas en las tablas JANAF. Sus expresiones son de la forma

$$\log K_p = A \ln \frac{T}{1000} + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 \quad (2.8.30)$$

donde T está en Kelvin. Sus resultados se muestran en la Tabla 2.3 y son válidos en el rango de temperaturas de $600 \text{ K} < T < 4000 \text{ K}$.

Tabla 2.3
Coeficientes para el cálculo de las constantes de equilibrio (2.8.24) a (2.8.29)

	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>
K_1	0.432168	-0.112464×10^5	2.67269	-0.745744×10^{-4}	0.242484×10^{-8}
K_2	0.310805	-0.129540×10^5	3.21779	-0.738336×10^{-4}	0.344645×10^{-8}
K_3	-0.141784	-0.213308×10^4	0.853461	0.355015×10^{-4}	-0.310227×10^{-8}
K_4	0.150879×10^{-1}	-0.470959×10^4	0.646096	0.272805×10^{-5}	-0.154444×10^{-8}
K_5	-0.752364	0.124210×10^5	-2.60286	0.259556×10^{-3}	-0.162687×10^{-7}
K_6	-0.415302×10^{-2}	0.148627×10^5	-4.75746	0.124699×10^{-3}	-0.900227×10^{-8}

Las expresiones de las constantes de equilibrio puede ser reacomodadas para expresar las fracciones molares de todas las especies en términos de y_3, y_4, y_5 y y_6 , las fracciones molares del N_2, O_2, CO y H_2 respectivamente,

$$y_7 = c_1 y_6^{1/2} \quad \text{donde } c_1 = \frac{K_1}{P^{1/2}} \quad (2.8.31)$$

$$y_8 = c_2 y_4^{1/2} \quad \text{donde } c_2 = \frac{K_2}{P^{1/2}} \quad (2.8.32)$$

$$y_9 = c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} \quad \text{donde } c_3 = K_3 \quad (2.8.33)$$

$$y_{10} = c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} \quad \text{donde } c_4 = K_4 \quad (2.8.34)$$

$$y_2 = c_5 y_4^{1/2} y_6 \quad \text{donde } c_5 = K_5 P^{1/2} \quad (2.8.35)$$

$$y_1 = c_6 y_5 y_4^{1/2} \quad \text{donde } c_6 = K_6 P^{1/2} \quad (2.8.36)$$

El número de moles puede ser eliminado dividiendo la ecuación (2.8.20) entre la (2.8.19) y se obtiene

$$2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9 - \frac{\beta}{\alpha}(y_1 + y_5) = 0 \quad (2.8.37)$$

De igual forma, se pueden dividir las ecuaciones (2.8.21) y (2.8.22) para obtener

$$2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10} - \left[\left(\gamma + \frac{2(0.21 + 0.79\%Ox)}{\epsilon\phi} \right) \frac{1}{\alpha} (y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (2.8.38)$$

$$2y_3 + y_{10} - \left[\left(\delta + \frac{0.79(1 - \%Ox)}{\epsilon\phi} \right) \frac{1}{\alpha} (y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (2.8.39)$$

Definiendo los cocientes

$$d_1 = \frac{\beta}{\alpha} \quad d_2 = \frac{\gamma}{\alpha} + \frac{2(0.21 + 0.79\%Ox)}{\epsilon\phi\alpha} \quad d_3 = \frac{\delta}{\alpha} + \frac{0.79(1 - \%Ox)}{\epsilon\phi\alpha}$$

y substituyendo las ecuaciones (2.8.31) hasta la (2.8.36) en las ecuaciones (2.8.37) hasta la (2.8.39), incluyendo la (2.8.23), se obtienen 4 ecuaciones con 4 incógnitas: y_3 , y_4 , y_5 y y_6 . Estas ecuaciones no son lineales y la mejor forma de resolverlas es por métodos iterativos como el de Newton-Raphson.

Las cuatro ecuaciones, (2.8.23) y (2.8.37) a (2.8.39) pueden ser escritas como

$$f_j(y_3, y_4, y_5, y_6) = 0 \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (2.8.40)$$

Una solución aproximada puede obtenerse empleando la Tabla 2.2. Designando a este vector como la primera aproximación

$$[y_3^{(1)}, y_4^{(1)}, y_5^{(1)}, y_6^{(1)}] \quad (2.8.41)$$

el cual es razonablemente cercano al vector solución

$$(y_3^*, y_4^*, y_5^*, y_6^*) \quad (2.8.42)$$

La función del lado izquierdo de la ecuación (2.8.40) puede expandirse en serie de Taylor alrededor del vector conocido. Sea

$$\Delta y_i = y_i^* - y_i^{(1)} \quad (2.8.43)$$

Entonces, despreciando las derivadas de segundo orden y superiores, se obtienen cuatro ecuaciones que dan aproximaciones a Δy_i , $i=3, 4, 5, 6$.

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial y_3} \Delta y_3 + \frac{\partial f_j}{\partial y_4} \Delta y_4 + \frac{\partial f_j}{\partial y_5} \Delta y_5 + \frac{\partial f_j}{\partial y_6} \Delta y_6 = 0 \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (2.8.44)$$

Este conjunto de ecuaciones lineales puede ser resuelto para Δy_i , $i=3,4,5,6$ usando una subrutina de álgebra matricial empleando eliminación gaussiana. La segunda aproximación es, entonces

$$y_i^{(2)} = y_i^{(1)} + \Delta y_i \quad i = 3,4,5,6 \quad (2.8.45)$$

Usando esta segunda aproximación como una nueva primera aproximación, el procedimiento es repetido de nueva cuenta tantas veces hasta que los cambios en f_i sean pequeños

$$|\Delta y_i| \leq \xi \ll 1 \quad (2.8.46)$$

donde ξ es alguna tolerancia especificada de antemano. En este caso no se empleó un cambio relativo porque algunos de los y_i pueden ser mucho más pequeños que la incertidumbre debida al redondeo. Así, no se puede estar seguro que $|\Delta y_i| \ll y_i^{(2)}$ para todas las especies.

Por conveniencia, se definen las siguientes derivadas parciales

$$D_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial y_j} \quad i = 1,2,7,8,9,10 \\ j = 3,4,5,6$$

$$D_{jj} = \frac{\partial y_j}{\partial y_j} = 1$$

De las ecuaciones (2.8.31) a (2.8.36), empleando la definición anterior, se obtienen las siguientes derivadas distintas de cero

$$D_{76} = \frac{1}{2} \frac{c_1}{y_6^{1/2}} \quad D_{103} = \frac{1}{2} \frac{c_4 y_4^{1/2}}{y_3^{1/2}}$$

$$D_{84} = \frac{1}{2} \frac{c_1}{y_4^{1/2}} \quad D_{26} = c_5 y_4^{1/2}$$

$$D_{94} = \frac{1}{2} \frac{c_3 y_6^{1/2}}{y_4^{1/2}} \quad D_{24} = \frac{1}{2} \frac{c_5 y_6}{y_4^{1/2}}$$

$$D_{96} = \frac{1}{2} \frac{c_3 y_4^{1/2}}{y_6^{1/2}} \quad D_{14} = \frac{1}{2} \frac{c_6 y_5}{y_4^{1/2}}$$

$$D_{104} = \frac{1}{2} \frac{c_4 y_3^{1/2}}{y_4^{1/2}} \quad D_{15} = c_6 y_4^{1/2}$$

Escribiendo la ecuación (2.8.44) en notación matricial como $[A][Z]-[B]=0$, los elementos de la matriz son

$$[B] = [-f]$$

$$[Z] = [\Delta y]$$

y

$$\begin{aligned}
 A_{11} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_3} = 1 + D_{103} & A_{31} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_3} = D_{103} \\
 A_{12} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_4} = D_{14} + D_{24} + 1 + D_{84} + D_{104} + D_{94} & A_{32} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_4} = 2D_{14} + D_{24} + 2 + D_{84} + D_{94} + D_{104} - d_2 D_{14} \\
 A_{13} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_5} = D_{15} + 1 & A_{33} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_5} = 2D_{15} + 1 - d_2 D_{15} - d_2 \\
 A_{14} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_6} = D_{26} + 1 + D_{76} + D_{96} & A_{34} &= \frac{\partial f_1}{\partial y_6} = D_{26} + D_{96} \\
 A_{21} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_3} = 0 & A_{41} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_3} = 2 + D_{103} \\
 A_{22} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_4} = 2D_{24} + D_{94} - d_1 D_{14} & A_{42} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_4} = D_{104} - d_1 D_{14} \\
 A_{23} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_5} = -d_1 D_{15} - d_1 & A_{43} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_5} = -d_1 D_{15} - d_1 \\
 A_{24} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_6} = 2D_{26} + 2 + D_{76} + D_{96} & A_{44} &= \frac{\partial f_2}{\partial y_6} = 0
 \end{aligned}$$

La solución de la ecuación matricial $[A][\Delta y] + [f] = 0$ produce el Δy_i requerido en (2.8.45).

Para evaluar la capacidad térmica específica en el equilibrio se necesita el cambio en la fracción molar debido al cambio en la temperatura [ecuación (2.7.14)]. Examinando las ecuaciones (2.8.31) a (2.8.36) se observa que se requieren cuatro derivadas independientes, esto es,

$$\frac{\partial y_i}{\partial T} \quad i = 3, 4, 5, 6$$

dado que las derivadas restantes pueden ser expresadas en términos de este conjunto independiente

$$\frac{\partial y_7}{\partial T} = y_6^{1/2} \frac{\partial c_1}{\partial T} + D_{76} \frac{\partial y_6}{\partial T} \quad (2.8.47)$$

$$\frac{\partial y_8}{\partial T} = y_4^{1/2} \frac{\partial c_2}{\partial T} + D_{84} \frac{\partial y_4}{\partial T} \quad (2.8.48)$$

$$\frac{\partial y_9}{\partial T} = y_4^{1/2} y_6^{1/2} \frac{\partial c_3}{\partial T} + D_{94} \frac{\partial y_4}{\partial T} + D_{96} \frac{\partial y_6}{\partial T} \quad (2.8.49)$$

$$\frac{\partial y_{10}}{\partial T} = y_4^{1/2} y_3^{1/2} \frac{\partial c_4}{\partial T} \quad (2.8.50)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial T} = y_4^{1/2} y_6 \frac{\partial c_5}{\partial T} + D_{24} \frac{\partial y_4}{\partial T} + D_{26} \frac{\partial y_6}{\partial T} \quad (2.8.51)$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial T} = y_4^{1/2} y_5 \frac{\partial c_6}{\partial T} + D_{14} \frac{\partial y_4}{\partial T} + D_{15} \frac{\partial y_5}{\partial T} \quad (2.8.52)$$

El conjunto independiente de derivadas se obtiene como solución de la ecuación matricial que resulta diferenciando la ecuación (2.8.40) con respecto a T .

$$\frac{\partial f_j}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_3} \frac{\partial y_3}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_4} \frac{\partial y_4}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_5} \frac{\partial y_5}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial y_6} \frac{\partial y_6}{\partial T} = 0 \quad (2.8.53)$$

En forma matricial

$$[A] \left[\frac{\partial y}{\partial T} \right] + \left[\frac{\partial f}{\partial T} \right] = 0 \quad (2.8.54)$$

donde la matriz A es la misma usada anteriormente en el método de Newton-Raphson. Para evaluar $\partial f / \partial T$, se definen

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{y_i}{c_{i-6}} & \text{donde } i &= 7, \dots, 10 \\ x_1 &= \frac{y_1}{c_6} \\ x_2 &= \frac{y_2}{c_5} \end{aligned} \quad (2.8.55)$$

Si se examinan las ecuaciones (2.8.31) a (2.8.36), se observa que para $i=3,4,5,6$, las x_i son funciones de y_i , solamente.

Substituyendo las x_i en las ecuaciones (2.8.37) a (2.8.39) y la (2.8.23) y por diferenciación con respecto a T , se obtienen

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} = \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 + \frac{\partial c_5}{\partial T} x_2 + \frac{\partial c_1}{\partial T} x_7 + \frac{\partial c_2}{\partial T} x_8 + \frac{\partial c_3}{\partial T} x_9 + \frac{\partial c_4}{\partial T} x_{10} \quad (2.8.56)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial T} = 2 \frac{\partial c_5}{\partial T} x_2 + \frac{\partial c_1}{\partial T} x_7 + \frac{\partial c_3}{\partial T} x_9 - d_1 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 \quad (2.8.57)$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial T} = 2 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 + \frac{\partial c_5}{\partial T} x_2 + \frac{\partial c_2}{\partial T} x_8 + \frac{\partial c_3}{\partial T} x_9 + \frac{\partial c_4}{\partial T} x_{10} - d_2 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 \quad (2.8.58)$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial T} = \frac{\partial c_4}{\partial T} x_{10} - d_3 \frac{\partial c_6}{\partial T} x_1 \quad (2.8.59)$$

Donde, de las expresiones de c_i son

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial T} &= \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_1}{dT} & \frac{\partial c_4}{\partial T} &= \frac{dK_4}{dT} \\ \frac{\partial c_2}{\partial T} &= \frac{1}{P^{1/2}} \frac{dK_2}{dT} & \frac{\partial c_5}{\partial T} &= P^{1/2} \frac{dK_5}{dT} \\ \frac{\partial c_3}{\partial T} &= \frac{dK_3}{dT} & \frac{\partial c_6}{\partial T} &= P^{1/2} \frac{dK_6}{dT} \end{aligned}$$

Y de la ecuación (2.8.30), se sigue que

$$\frac{dK_i}{dT} = 2.302585K_i \left[\frac{A}{T} - \frac{B}{T^2} + D + 2ET \right] \quad (2.8.60)$$

Una mezcla reactiva de gases ideales tiene una entalpía que depende de la temperatura y la presión. Por esta razón, también se emplean las derivadas parciales con respecto a la presión. Su evaluación es tal y como en las ecuaciones (2.8.47) a (2.8.59), con $\partial/\partial P$ reemplazando a $\partial/\partial T$. Nótese que ni c_3 ni c_4 dependen de la presión, por lo que los términos que incluyen $\partial c_3/\partial P$ y $\partial c_4/\partial P$ se eliminan. Las demás derivadas requeridas son

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial P} &= -\frac{1}{2} \frac{c_1}{P} & \frac{\partial c_5}{\partial P} &= \frac{1}{2} \frac{c_5}{P} \\ \frac{\partial c_2}{\partial P} &= -\frac{1}{2} \frac{c_2}{P} & \frac{\partial c_6}{\partial P} &= \frac{1}{2} \frac{c_6}{P} \end{aligned}$$

donde P está en bares (o cualquier otra unidad preferida; no obstante, en las ecuaciones (2.8.31) a (2.8.36), P debe estar en atmósferas). La solución de todas estas ecuaciones, comenzando con la (2.8.52) proporciona $\partial y_i/\partial T$ y $\partial y_i/\partial P$ para $i=1, \dots, 10$.

Las derivadas termodinámicas buscadas son

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P = \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^{10} \left(y_i c_{p,i} + h_i \frac{\partial y_i}{\partial T} \right) - \frac{hM_T}{M} \right] \quad (2.8.61)$$

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_P = 1 - \frac{TM_T}{M} \quad (2.8.62)$$

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_T = -1 - \frac{PM_P}{M} \quad (2.8.63)$$

donde

$$M_T = \frac{\partial M}{\partial T} = \sum_{i=1}^{10} M_i \frac{\partial y_i}{\partial T} \quad (2.8.64)$$

$$M_P = \frac{\partial M}{\partial P} = \sum_{i=1}^{10} M_i \frac{\partial y_i}{\partial P} \quad (2.8.65)$$

Los datos de las capacidades térmicas específicas, de Gordon y McBride (1971), necesarios en las ecuaciones (2.1.2) a (2.1.24) para los cálculos requeridos, se dan en la Tabla 2 del Apéndice A.

2.9 Procesos Isentrópicos y de Combustión [6, 9, 12, 16, 19, 22, 24, 27, 29]

Se desea calcular el cambio de estado debido a una compresión isentrópica o una expansión a una presión o volumen específicos. Para una mezcla de gases ideales que reaccionan químicamente para generar un cambio, tal como el volumen o la presión, resulta imposible derivar relaciones simples que modelen el proceso; por ello se recurre a la computadora.

Las subrutinas `CombTempBajas` y `CombTempAltas` (ver el Capítulo 3: Simulación Numérica) calculan la entropía dadas la temperatura y la presión, es decir,

$$s = s(T, P) \quad (2.9.1)$$

Para un proceso isentrópico de P_1 a P_2 , se sigue que, por definición, $s_1 = s_2$. Para hallar la temperatura desconocida, se necesita una iteración. Un modo eficiente de hacer esto es por el método de Newton-Raphson. Para este propósito, se define

$$f = s_2 - s(T_2, P_2) \quad (2.9.2)$$

Designando a la correcta solución del problema como T_2^* , sea $T_2^{(1)}$ una primera aproximación a T_2^* . La función $f(T_2)$ puede expandirse como una serie de Taylor alrededor de T_2^* . Sea $\Delta T_2 = T_2^* - T_2^{(1)}$, entonces, despreciando los términos de orden superior, se obtiene

$$f + \frac{\partial f}{\partial T_2} \Delta T_2 = 0 \quad (2.9.3)$$

La derivada es evaluada en $T_2^{(1)}$ y puede ser expresada en términos de variables obtenidas en `CombTempBajas` y `CombTempAltas`. En efecto, cualquier derivada termodinámica puede ser expresada en términos de las tres derivadas *calculadas* por estas subrutinas. Los nombres de las variables obtenidas por la subrutina son:

$$CP = c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P \quad DLVLP = \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_T \quad DLVLT = \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_P$$

Por ejemplo, la razón de calores específicos esta dada por

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{c_p}{c_p + \frac{Pv}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_P^2 / \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_P} \quad (2.9.4)$$

La derivada que se necesita en la ecuación (2.9.3) es

$$\frac{\partial f}{\partial T_2} = - \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_P = - \frac{c_p}{T} \quad (2.9.5)$$

Estas relaciones, así como algunas otras de interés encontradas en Lewis y Randall (1961), se resumen en el Apéndice D.

Substituyendo la ecuación (2.9.5) en la (2.9.3), se tiene

$$\Delta T_2 = \frac{f T_2}{c_{p_2}} \quad (2.9.6)$$

Por lo tanto, una mejor estimación de la temperatura esta dada por

$$T_2^{(2)} = T_2^{(1)} + \frac{f T_2^{(1)}}{c_{p_2}} \quad (2.9.7)$$

Usando esta segunda aproximación como una nueva primera aproximación, el procedimiento se repite tantas veces hasta que ΔT_2 sea pequeña; esto es,

$$\frac{|\Delta T_2|}{T_2^{(2)}} \leq \epsilon \quad (2.9.8)$$

donde ϵ es alguna tolerancia especificada con anterioridad.

Para un proceso isentrópico de v_1 a v_2 , por definición se tiene que $s_2 = s_1$. Así, se pueden escribir dos ecuaciones con dos incógnitas para encontrar T_2 y P_2 . Estas son

$$s_2 - s(T_2, P_2) = 0 \quad (2.9.9)$$

$$v_2 - v(T_2, P_2) = 0 \quad (2.9.10)$$

En las que nuevamente se emplea el método de Newton-Raphson. Para ello, se define lo siguiente

$$f_1(x_1, x_2) = s_2 - s(x_1, x_2) \quad (2.9.11)$$

$$f_2(x_1, x_2) = v_2 - v(x_1, x_2) \quad (2.9.12)$$

Designando la solución correcta como $x_1^* = T_2$, $x_2^* = P_2$, sean $x_1^{(1)}$ y $x_2^{(1)}$ que representan una estimación de la solución. Las funciones f_1 y f_2 pueden expandirse en series de Taylor alrededor de x_1^* y x_2^* , respectivamente.

$$\Delta x_i = x_i^* - x_i^{(1)} \quad i = 1, 2 \quad (2.9.13)$$

Entonces, despreciando las derivadas de segundo orden y mayores, se obtiene

$$f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \Delta x_2 = 0 \quad (2.9.14)$$

$$f_2 + \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \Delta x_2 = 0 \quad (2.9.15)$$

donde

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_1} = -\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p, \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = -\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_r \quad (2.9.16)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial x_1} = -\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p, \quad \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = -\left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_r \quad (2.9.17)$$

Las derivadas son evaluadas en $x_1^{(1)}$ y $x_2^{(1)}$. Estas pueden ser expresadas en términos de las derivadas obtenidas en las subrutinas CombTempBajas y CombTempAltas:

$$CP = c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p, \quad DLVLP = \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_r, \quad DLVLT = \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p$$

Las relaciones que se necesitan son

$$-\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_r = \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p = \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p \quad (2.9.18)$$

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p = \frac{c_p}{T} \quad (2.9.19)$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_r = \frac{v}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_r \quad (2.9.20)$$

Las ecuaciones (2.9.14) y (2.9.15) contienen dos incógnitas, Δx_1 y Δx_2 . La solución es

$$\Delta x_1 = \frac{\frac{T}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_r f_1 + \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p f_2}{\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p^2} \quad (2.9.21)$$

$$\Delta x_2 = \frac{-\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p f_1 + \frac{c_p}{v} f_2}{\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p^2} \quad (2.9.22)$$

Y se sigue, de la ecuación (2.9.13), que una mejor aproximación es

$$x_i^{(2)} = x_i^{(1)} + \Delta x_i, \quad i = 1, 2 \quad (2.9.23)$$

Usando esta segunda aproximación como una nueva primera aproximación, el proceso se repite tantas veces hasta que los cambios relativos se hagan tan pequeños como una tolerancia especificada ξ , esto es,

$$\left| \frac{\Delta x_i}{x_i^{(2)}} \right| \leq \xi, \quad i = 1, 2 \quad (2.9.24)$$

Combustión

La termodinámica es capaz de predecir el estado de equilibrio que resulta de quemar una mezcla aire-oxígeno-combustible dadas solamente las condiciones iniciales. En esta sección se discutirá la combustión a presión constante y a volumen constante para ilustrar los principios. También se hablará del calor de combustión y la temperatura de flama adiabática.

Considérese primero el caso en que la combustión ocurra a presión constante. Supóngase que la mezcla y el combustible han sido mezclados hasta lograr un estado homogéneo. Aplicando la primera ley, como se vio en la Sección 2.2, se obtiene

$$\Delta h = q \quad (2.9.25)$$

Esto es, la entalpía de los productos es igual a la entalpía de los reactivos más algún calor transferido al sistema. En este caso, dado el calor transferido por unidad de masa, es posible resolver para la temperatura, el volumen específico, la energía interna y el tipo de productos por iteración. Para el caso especial de la combustión adiabática, la temperatura resultante es, como se mencionó en (2.2.7), la temperatura de flama adiabática.

La temperatura de flama adiabática de algunos combustibles quemados con aire a $T_1 = 298 \text{ K}$ y $P_1 = 1 \text{ atm}$ se muestra en la Fig. 2.11 como función de la razón de equivalencia. Existe muy poca dependencia del tipo de combustible entre los hidrocarburos. Otros cálculos muestran que la temperatura de flama adiabática disminuye con la fracción residual y disminuye ligeramente con la presión.

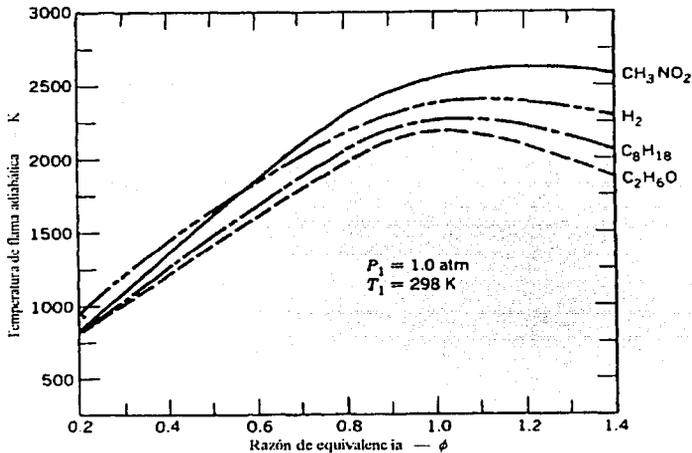


Figura 2.11 Temperatura de flama adiabática de algunos combustibles al reaccionar con aire a temperatura y presión atmosféricas [9].

El calor de combustión de un combustible se define como el calor transferido fuera del sistema por unidad molar o de masa del combustible en un proceso en el que los estados inicial y final están a la misma presión y temperatura. Más aún, se considera que el combustible se quema completamente en dióxido de carbono y agua. El análisis que se hace en la Tabla 2.2 para el caso estequiométrico puede usarse para calcular el calor de combustión. Restringiendo nuestra atención a $T = 298 \text{ K}$, puede demostrarse que

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$-q_{c,298} = \alpha h_{CO_2,298} + \frac{\beta}{2} [h_{H_2O,298} - (1-x)h_{H_2O,298}] - h_{C,H,H_2O,298} \quad (2.9.26)$$

Generalmente se admiten dos valores: El calor de combustión inferior se define como aquel en el que el agua en los productos es gaseosa (la calidad es $x = 1$) y el calor de combustión superior es aquél en el que el agua en los productos es líquida ($x = 0$).

El calor de combustión superior y la temperatura de flama adiabática estequiométrica de algunos combustibles se dan en la Tabla 2.4.

Tabla 2.4
Calores Superiores de Combustión y Temperaturas de Flama
Adiabática de algunos Combustibles
 $P = 1 \text{ atm}, T = 298 \text{ K}$

Combustible		$q_{c,298}$ (kJ/g)	$T_{F=1}$ (K)
C ₂ N ₂ (g)	Cianógeno	21.0	2596
H ₂ (g)	Hidrógeno	141.6	2383
NH ₃ (g)	Amoniaco	22.5	2076
CH ₄ (g)	Metano	55.5	2227
C ₃ H ₈ (g)	Propano	50.3	2268
C ₈ H ₁₈ (l)	Octano	47.9	2266
C ₁₅ H ₃₂ (l)	Pentadecano	47.3	2269
C ₂₀ H ₄₀ (g)	Eicosano	47.3	2291
C ₂ H ₂ (g)	Acetileno	49.9	2540
C ₁₀ H ₈ (g)	Naftaleno	40.3	2328
CH ₄ O (l)	Metanol	22.7	2151
C ₂ H ₆ O (l)	Etanol	29.7	2197
CH ₃ NO ₂ (l)	Nitrometano	11.6	2545

Una discusión análoga se hace para la combustión a volumen constante donde

$$\Delta u = q \quad (2.9.27)$$

Nuevamente, el estado de equilibrio es determinado usando iteraciones de Newton-Raphson. Las derivadas requeridas son:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_p = c_p - \frac{Pv}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p \quad (2.9.28)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial P}\right)_r = -v \left[\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p + \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_r \right] \quad (2.9.29)$$

2.10 Gases quemados [7, 24, 27, 28]

Se ha hecho un análisis de la mezcla sin quemar de aire-oxígeno-combustible (Sección 2.7) y de lo que sucede durante la combustión, es decir, en el frente de flama (Sección 2.8), pero falta analizar lo que le sucede a los gases que ya se han quemado y permanecen en la zona de la post-flama, esto es, la forma de determinar la estabilización química de las especies cuando se lleva cabo el proceso de expansión. Es lo que se analiza en esta sección.

La Fig. 2.12 muestra, esquemáticamente, lo que sucede durante el momento de la combustión y la expansión en el interior de la cámara de combustión.

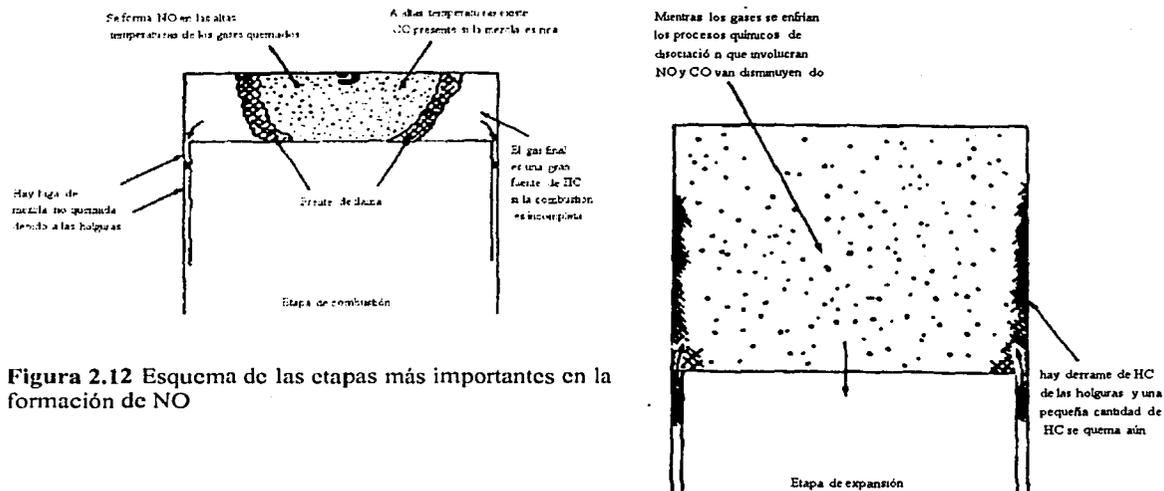


Figura 2.12 Esquema de las etapas más importantes en la formación de NO

Desde luego, los gases quemados, en virtud de la elevada temperatura que poseen, siguen sufriendo reacciones químicas entre ellos, haciendo que las concentraciones finales de las especies varíen según las condiciones de la mezcla original. En esta etapa, algunos mecanismos de formación de contaminantes (i.e. Zeldovich) se convierten en factores importantes para determinar las emisiones.

Óxidos de nitrógeno

A pesar de que el óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂) se agrupan como NO_x, el óxido nítrico es el óxido de nitrógeno predominante dentro de la cámara de combustión. La fuente principal de NO es la oxidación del nitrógeno atmosférico. Sin embargo, si el combustible contiene elevados contenidos de nitrógeno, se convierte en una fuente adicional. La gasolina contiene cantidades despreciables de nitrógeno.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

El mecanismo de formación de NO a partir del nitrógeno atmosférico ha sido estudiado extensamente. Se acepta de manera general que en combustiones de mezclas aire-combustible cerca de la estequiométrica las principales reacciones que gobiernan la formación de NO (y su destrucción) son,



Este conjunto de ecuaciones es conocido como el *mecanismo de Zeldovich*.

Las constantes de reacción hacia delante y hacia atrás (k_i^+ y k_i^- respectivamente) para estas reacciones han sido medidas en numerosos estudios experimentales. Los valores recomendados son los que a continuación se mencionan, expresados en $\text{cm}^3/\text{mol}\cdot\text{s}$,

$$k_1^+ = 1.81 \times 10^{14} e^{\frac{-38300}{T}} \quad (2.10.4)$$

$$k_1^- = 1.6 \times 10^{13} \quad (2.10.5)$$

$$k_2^+ = 9.03 \times 10^9 T e^{\frac{-3270}{T}} \quad (2.10.6)$$

$$k_2^- = 1.5 \times 10^9 T e^{\frac{-19500}{T}} \quad (2.10.7)$$

$$k_3^+ = 2.83 \times 10^{13} \quad (2.10.8)$$

$$k_3^- = 2 \times 10^{14} e^{\frac{-23650}{T}} \quad (2.10.9)$$

La constante de equilibrio de cada una de las ecuaciones (2.10.1) a (2.10.3) puede escribirse, en términos de las constantes de reacción particulares, de la forma $K_{c,i} = k_i^+/k_i^-$ [vea (2.3.16)]. La rapidez de formación de NO está dada, entonces, por [vea los ejemplos (2.3.13) a (2.3.17)],

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1^+ [\text{O}][\text{N}_2] + k_2^+ [\text{N}][\text{O}_2] + k_3^+ [\text{N}][\text{OH}] - k_1^- [\text{NO}][\text{N}] - k_2^- [\text{NO}][\text{O}] - k_3^- [\text{NO}][\text{H}] \quad (2.10.10)$$

donde [] denota la concentración de las especies en mol/cm^3 . la constante de reacción hacia adelante de (2.10.1) y la constante de reacción hacia atrás de (2.10.2) y (2.10.3) tienen grandes energías de activación [vea (2.3.12)], lo que representa una fuerte dependencia con la temperatura.

Es posible escribir una relación similar a (2.10.10) para $d[\text{N}]/dt$ de la siguiente forma

$$\frac{d[\text{N}]}{dt} = k_1^+ [\text{O}][\text{N}_2] - k_2^+ [\text{N}][\text{O}_2] - k_3^+ [\text{N}][\text{OH}] - k_1^- [\text{NO}][\text{N}] + k_2^- [\text{NO}][\text{O}] + k_3^- [\text{NO}][\text{H}] \quad (2.10.11)$$

Debido a que [N] es mucho menor que las concentraciones de otras especies de interés ($\sim 10^{-8}$ en fracción molar), la aproximación a estado permanente resulta apropiada: $d[\text{N}]/dt$ se toma como igual a cero y la ecuación (2.10.11) se emplea para eliminar [N], despejándola,

$$[N] = \frac{k_1^+ [O][N_2] + k_2^- [NO][O] + k_3^- [NO][H]}{k_1^- [NO] + k_2^+ [O_2] + k_3^+ [OH]} \quad (2.10.12)$$

El NO se forma en el frente de flama y en los gases de post-flama. Sin embargo, en los motores de combustión interna, la combustión ocurre a elevadas presiones por lo que la zona reactiva de flama es extremadamente delgada (≈ 0.1 mm) y el tiempo de residencia dentro de esta zona es muy corto. También aumenta la presión dentro del cilindro durante la mayor parte del proceso de combustión, así que los gases quemados producidos durante los primeros instantes son comprimidos más y calentados a temperaturas aún mayores que la que tenían inmediatamente después de quemarse. Por esta razón, la formación de NO en los gases de post-flama siempre se considera dominante sobre cualquier producción en el frente de flama. Es por ello que se considera conveniente suponer que la combustión y el proceso de formación de NO son independientes.

Monóxido de carbono

Los niveles de CO observados en los gases emitidos por motores de combustión interna encendidos por chispa son inferiores a los valores máximos medidos dentro de la cámara de combustión, sin embargo, son considerablemente mayores que los valores de equilibrio a las condiciones del escape. Entonces, el proceso que controla los niveles de CO en el escape está controlado cinéticamente. En flamas de las mezclas de aire-hidrocarburo, la concentración de CO se incrementa rápidamente en la zona de flama hasta un valor máximo, que es mayor que el valor en el equilibrio para una combustión adiabática de una mezcla aire-combustible.

El CO formado durante la combustión se oxida a CO₂ a baja velocidad. El mecanismo principal de oxidación de CO en flamas premezcladas es



donde la constante de equilibrio de esta reacción es, en cm³/mol·s,

$$k_4^+ = 6.32 \times 10^6 T^{1.5} e^{\frac{250}{T}} \quad (2.10.14)$$

Se considera, de manera general, que en los productos de combustión en la post-flama en un motor de combustión interna encendido por chispa, en condiciones cercanas a los valores máximos del ciclo en temperatura (2800 K) y presión (15 a 40 atm), el sistema carbono-oxígeno-hidrógeno está en equilibrio. Por ello, la concentración de CO en los gases quemados inmediatos a la post-flama se encuentra cerca del equilibrio. Sin embargo, como los gases se enfrían durante la expansión y expulsión, dependiendo de la temperatura y de la tasa de enfriamiento, el proceso de oxidación de CO [ecuación (2.10.13)] puede no permanecer en equilibrio local.

Otras reacciones

Otros mecanismos de disociación y recombinación de las 10 especies de interés, expuestas en la reacción (2.8.18), que se consideran de importancia, con sus respectivas constantes de reacción, son,



$$k_5^+ = 1.44 \times 10^{13} e^{-\frac{353}{T}} \quad (2.10.16)$$

$$k_5^- = 9.76 \times 10^{13} e^{-\frac{7470}{T}} \quad (2.10.17)$$



$$k_6^+ = 4.52 \times 10^8 T^{1.6} e^{-\frac{9270}{T}} \quad (2.10.19)$$

$$k_6^- = 1.02 \times 10^8 T^{1.6} e^{-\frac{1660}{T}} \quad (2.10.20)$$



$$k_7^+ = 1.51 \times 10^9 T^{1.14} e^{-\frac{50}{T}} \quad (2.10.22)$$



$$k_8^+ = 5.12 \times 10^4 T^{2.67} e^{-\frac{3160}{T}} \quad (2.10.24)$$

De tal forma, se tiene que las velocidades de formación o destrucción de cada una de las 10 especies son como se da a continuación,

$$\frac{d[\text{CO}_2]}{dt} = k_4^+ [\text{OH}][\text{CO}] \quad (2.10.25)$$

$$\frac{d[\text{H}_2\text{O}]}{dt} = k_7^+ [\text{OH}][\text{OH}] + k_6^- [\text{OH}][\text{H}_2] - k_6^+ [\text{H}][\text{H}_2\text{O}] \quad (2.10.26)$$

$$\frac{d[\text{N}_2]}{dt} = k_1^- [\text{NO}][\text{N}] - k_1^+ [\text{O}][\text{N}_2] \quad (2.10.27)$$

$$\frac{d[\text{O}_2]}{dt} = k_2^- [\text{NO}][\text{O}] + k_5^+ [\text{O}][\text{OH}] - k_5^- [\text{O}_2][\text{H}] - k_2^+ [\text{O}_2][\text{N}] \quad (2.10.28)$$

$$\frac{d[\text{CO}]}{dt} = -k_4^+ [\text{OH}][\text{CO}] \quad (2.10.29)$$

$$\frac{d[\text{H}_2]}{dt} = k_6^+ [\text{H}][\text{H}_2\text{O}] - k_6^- [\text{OH}][\text{H}_2] - k_8^+ [\text{O}][\text{H}_2] \quad (2.10.30)$$

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA

$$\frac{d[\text{H}]}{dt} = (k_3^+ [\text{N}] + k_3^- [\text{CO}] + k_5^+ [\text{O}] + k_6^- [\text{H}_2])[\text{OH}] - (k_3^- [\text{NO}] + k_5^- [\text{O}_2] + k_6^+ [\text{H}_2\text{O}])[\text{H}] + k_8^+ [\text{O}][\text{H}_2] \quad (2.10.31)$$

$$\frac{d[\text{O}]}{dt} = (k_1^- [\text{NO}] + k_2^+ [\text{O}_2])[\text{N}] - (k_1^+ [\text{N}_2] - k_2^- [\text{NO}] - k_5^+ [\text{OH}] - k_8^+ [\text{H}_2])[\text{O}] + k_5^- [\text{O}_2][\text{H}] + k_7^+ [\text{OH}][\text{OH}] \quad (2.10.32)$$

$$\frac{d[\text{OH}]}{dt} = (k_3^- [\text{NO}] + k_5^- [\text{O}_2] + k_6^+ [\text{H}_2\text{O}])[\text{H}] - (k_3^+ [\text{N}] + k_4^+ [\text{CO}] + k_5^+ [\text{O}] + k_6^- [\text{H}_2] + k_7^+ [\text{OH}])[\text{OH}] + k_8^+ [\text{H}_2][\text{O}] \quad (2.10.33)$$

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1^+ [\text{O}][\text{N}_2] - (k_2^- [\text{O}] + k_5^- [\text{H}])[\text{NO}] + (k_2^+ [\text{O}_2] + k_3^+ [\text{OH}] - k_1^- [\text{NO}])[\text{N}] \quad (2.10.34)$$

Debe notarse que en las ecuaciones (2.10.27), (2.10.28), (2.10.31), (2.10.32), (2.10.33) y (2.10.34) es necesario sustituir el valor de $[\text{N}]$ dado por (2.10.12).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

2.11 Modelo Matemático Modificado de un Motor de Combustión Interna [9, 13, 15, 17, 18, 23, 25]

En esta sección se resuelve la ecuación diferencial de conservación de energía aplicada a un sistema abierto. Para un volumen de control que represente el contenido del cilindro, la ecuación de la energía es

$$m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} - \frac{\dot{m}_p h_p}{\omega} \quad (2.11.1)$$

La ecuación (2.6.16) considerada antes, es un caso particular de la ecuación (2.11.1) donde las capacidades térmicas específicas del fluido se toman constantes, lo cual no se considerará más: mejor, se dirá que el fluido tendrá una energía interna y una entalpía dependientes de la presión y de la temperatura de acuerdo con las relaciones programadas en las subrutinas CombTempBajas y CombTempAltas [para todas las referencias a estas subrutinas durante esta sección, vea el Capítulo 3].

Se usará una relación empírica que expresa la fracción de calor añadido en cualquier instante en función del ángulo del cigüeñal, de la misma forma que (2.6.1) y (2.6.2), pero en esta ocasión x se definirá como la fracción en masa dentro del cilindro que se ha quemado. La energía interna del sistema está definida por

$$u = \frac{U}{m} = x u_q + (1-x) u_{nq} \quad (2.11.2)$$

donde u_q es la energía interna del gas quemado que se encuentra a temperatura T_q y u_{nq} es la energía interna del gas no quemado a temperatura T_{nq} . De la misma forma, el volumen específico del sistema estará dado por

$$v = \frac{V}{m} = x v_q + (1-x) v_{nq} \quad (2.11.3)$$

A continuación se deducirán un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias que describirán las razones de cambio de la presión, trabajo y pérdidas de calor con respecto al ángulo del cigüeñal [de forma similar pero mejorada a las ecuaciones (2.6.19) a (2.6.22)]. Después se integrarán simultáneamente estas ecuaciones a partir del inicio de la compresión y hasta el fin de la expansión, para obtener el diagrama presión-volumen, la eficiencia indicada y la presión efectiva media indicada.

Para este fin, se representa la relación funcional entre v_q , T_q y P como

$$v_q = v_q(T_q, P) \quad (2.11.4)$$

con la que, diferenciándola con respecto al ángulo del cigüeñal, se obtendrá

$$\frac{dv_q}{d\theta} = \frac{\partial v_q}{\partial T_q} \frac{dT_q}{d\theta} + \frac{\partial v_q}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.5)$$

de donde se observa que aparece una de las derivadas buscadas, $dP/d\theta$.

La subrutina CombTempAltas fue programada para calcular las derivadas parciales requeridas en forma logarítmica. Substituyendo las derivadas logarítmicas en la ecuación (2.11.5) se obtiene

$$\frac{dv_q}{d\theta} = \frac{v_q}{T_q} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \frac{dT_q}{d\theta} + \frac{v_q}{P} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln P} \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.6)$$

Análogamente

$$\frac{dv_{nq}}{d\theta} = \frac{v_{nq}}{T_{nq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \frac{dT_{nq}}{d\theta} + \frac{v_{nq}}{P} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln P} \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.7)$$

La relación entre u_q , T_q y P es

$$u_q = u_q(T_q, P) \quad (2.11.8)$$

y

$$\frac{du_q}{d\theta} = \frac{\partial u_q}{\partial T_q} \frac{dT_q}{d\theta} + \frac{\partial u_q}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.9)$$

Introduciendo las derivadas parciales calculadas por CombTempAltas [ecuaciones (2.9.28) y (2.9.29)], se tiene

$$\frac{du_q}{d\theta} = \left(c_{Pq} - \frac{Pv_q}{T_q} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \right) \frac{dT_q}{d\theta} - v_q \left(\frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} + \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln P} \right) \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.10)$$

De forma similar, para los gases no quemados

$$\frac{du_{nq}}{d\theta} = \left(c_{Pnq} - \frac{Pv_{nq}}{T_{nq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \right) \frac{dT_{nq}}{d\theta} - v_{nq} \left(\frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} + \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln P} \right) \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.11)$$

Es necesario aclarar que hasta el momento se ha supuesto tácitamente que la presión para los gases quemados y los no quemados es la misma, lo que representa una buena aproximación para nuestro caso.

Considérese la ecuación de la energía (2.11.1) término por término. Por (2.11.2), el primer término de la izquierda se desarrolla como sigue:

$$m \frac{du}{d\theta} = \left[x \frac{du_q}{d\theta} + (1-x) \frac{du_{nq}}{d\theta} + (u_q - u_{nq}) \frac{dx}{d\theta} \right] m \quad (2.11.12)$$

Substituyendo (2.11.10) y (2.11.11), resulta

$$\begin{aligned} m \frac{du}{d\theta} = & mx \left(c_{Pq} - \frac{Pv_q}{T_q} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \right) \frac{dT_q}{d\theta} + m(1-x) \left(c_{Pnq} - \frac{Pv_{nq}}{T_{nq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \right) \frac{dT_{nq}}{d\theta} \\ & - \left[mxv_q \left(\frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} + \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln P} \right) + m(1-x)v_{nq} \left(\frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} + \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln P} \right) \right] \frac{dP}{d\theta} \\ & + m(u_q - u_{nq}) \frac{dx}{d\theta} \end{aligned} \quad (2.11.13)$$

El segundo término del lado izquierdo de (2.11.1) requiere la introducción de la conservación de la masa y un algoritmo para calcular las pérdidas de masa. Se escribirá

$$\frac{dm}{d\theta} = \frac{-\dot{m}_q}{\omega} = \frac{-Cm}{\omega} \quad (2.11.14)$$

donde C es la constante de pérdida de masa que depende del diseño de los anillos (ver sección 2.12).

El calor que entra en el sistema, en el lado derecho de la ecuación (2.11.1), es posible expresarlo en términos de las pérdidas de calor de los gases quemados y no quemados, de la siguiente forma,

$$\frac{dQ}{d\theta} = \frac{-\dot{Q}_p}{\omega} = \frac{-\dot{Q}_q - \dot{Q}_{nq}}{\omega} \quad (2.11.15)$$

Para expresar las pérdidas de calor por convección en términos de temperaturas, se necesita introducir un coeficiente de transferencia de calor, h ,

$$\dot{Q}_q = h_q A_q (T_q - T_p) \quad (2.11.16)$$

$$\dot{Q}_{nq} = h_{nq} A_{nq} (T_{nq} - T_p) \quad (2.11.17)$$

donde A_q y A_{nq} son las áreas de los gases quemados y no quemados en contacto con las paredes del cilindro a temperatura T_p . El cálculo de estas áreas se encuentra en el Apéndice E.

El término de trabajo en (2.11.1) no necesita explicación adicional, no así la entalpía de la masa perdida debido a las fugas. Antes del proceso de combustión, existen fugas de gas no quemado a través de los anillos. Durante el proceso de combustión, hay una fuga adicional de gas quemado a través de los anillos. Con el propósito de ser conceptualmente correctos, se supondrá que,

$$h_p = (1-x^2)h_{nq} + x^2 h_q \quad (2.11.18)$$

ecuación que tiene límites correctos cuando $x \rightarrow 0$ y $x \rightarrow 1$, y reconociendo que una mayor porción de gas quemado se fugará respecto a la correspondiente fracción en masa de gas no quemado. Finalmente, para completar la ecuación (2.11.18), se deben incluir las ecuaciones de estado

$$h_{nq} = h_{nq}(T_{nq}, P) \quad (2.11.19)$$

$$h_q = h_q(T_q, P) \quad (2.11.20)$$

que se calculan por medio de las rutinas CombTempBajas y CombTempAltas, respectivamente.

Examinando todos los términos de (2.11.1), se encuentra que contiene las siguientes derivadas

$$\frac{dP}{d\theta}, \frac{dT_q}{d\theta}, \frac{dT_{nq}}{d\theta}, \frac{dV}{d\theta}, \frac{dx}{d\theta} \quad (2.11.21)$$

y las siguientes variables

$$P, T_q, T_{nq} \quad (2.11.22)$$

$$u_q, u_{nq}, v_q, v_{nq}, h_q, h_{nq} \quad (2.11.23)$$

$$\frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q}, \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}}, \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln P}, \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln P}, c_{Iq}, c_{Pnq} \quad (2.11.24)$$

$$m, V, x \quad (2.11.25)$$

$$C, \omega, h, b \quad (2.11.26)$$

Las variables en (2.11.26) son todas constantes que pueden especificarse de acuerdo con el motor y con las características de operación del mismo.

Las variables en (2.11.25) son todas funciones conocidas que dependen del ángulo del cigüeñal. La masa, por ejemplo, para cualquier ángulo, es

$$m = m_1 e^{\left[\frac{-c(\theta - \theta_1)}{\omega} \right]} \quad (2.11.27)$$

que se sigue de la integración directa de (2.11.14). La masa inicial m_1 en $\theta = \theta_1$ (inicio de la compresión) puede especificarse conociendo la eficiencia volumétrica y la fracción residual en masa. El volumen del cilindro depende de la razón de compresión r , el volumen en el *punto muerto superior* V_0 , y de $\epsilon = S/2l$ ($S =$ longitud de la carrera y $l =$ longitud de la biela) y se calcula por [vea (C.5)]

$$V = V_0 \left[1 + \frac{r-1}{2} \left\{ 1 - \cos \theta + \frac{1}{\epsilon} \left(1 - \sqrt{1 - \epsilon^2 \sec^2 \theta} \right) \right\} \right] \quad (2.11.28)$$

La fracción quemada en masa se calcula con una relación empírica de quemado, por ejemplo

$$x = \begin{cases} 0 & \theta < \theta_s \\ \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[\frac{\pi(\theta - \theta_s)}{\theta_h} \right] \right\} & \theta_s < \theta < (\theta_s + \theta_h) \\ 1 & \theta > (\theta_s + \theta_h) \end{cases} \quad (2.11.29)$$

Todas las variables enlistadas en (2.11.23) y (2.11.24) son propiedades termodinámicas y funciones conocidas (vía CombTempBajas y CombTempAltas) de P , T_q y T_{nq} .

Las derivadas $dV/d\theta$ y $dx/d\theta$ en la ecuación pueden deducirse diferenciando (2.11.28) y (2.11.29), respectivamente. La ecuación de la energía (2.11.1) es, entonces, una relación entre tres derivadas, sus integrales y algunos parámetros dependientes de las integrales. En otras palabras, se tiene una ecuación de la siguiente forma

$$f \left(\theta, \frac{dP}{d\theta}, \frac{dT_q}{d\theta}, \frac{dT_{nq}}{d\theta}, P, T_q, T_{nq} \right) = 0 \quad (2.11.30)$$

Si es posible encontrar otras dos ecuaciones, entonces se podrán reorganizar de forma que se puedan integrar numéricamente como un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{dP}{d\theta} = f_1(\theta, P, T_q, T_{nq}) \quad (2.11.31)$$

$$\frac{dT_q}{d\theta} = f_2(\theta, P, T_q, T_{nq}) \quad (2.11.32)$$

$$\frac{dT_{nq}}{d\theta} = f_3(\theta, P, T_q, T_{nq}) \quad (2.11.33)$$

Además, resulta conveniente integrar simultáneamente para el trabajo realizado, las pérdidas de calor y la entalpía de la masa perdida

$$\frac{dW}{d\theta} = f_4(\theta, P) \quad (2.11.34)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = f_5(\theta, P, T_q, T_{nq}) \quad (2.11.35)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = f_6(\theta, P, T_q, T_{nq}) \quad (2.11.36)$$

Una de las ecuaciones requeridas se puede deducir de (2.11.3) para el volumen específico del sistema. Diferenciándola e incorporándola a las ecuaciones (2.11.6) y (2.11.7), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \frac{dV}{d\theta} - \frac{V}{m^2} \frac{dm}{d\theta} &= x \frac{dv_q}{d\theta} + (1-x) \frac{dv_{nq}}{d\theta} + (v_q - v_{nq}) \frac{dx}{d\theta} \\ \frac{1}{m} \frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{m\omega} &= x \frac{v_q}{T_q} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \frac{dT_q}{d\theta} + (1-x) \frac{v_{nq}}{T_{nq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \frac{dT_{nq}}{d\theta} \\ &+ \left[x \frac{v_q}{P} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln P} + (1-x) \frac{v_{nq}}{P} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln P} \right] \frac{dP}{d\theta} + (v_q - v_{nq}) \frac{dx}{d\theta} \end{aligned} \quad (2.11.37)$$

La ecuación faltante surge si se introduce la entropía del gas no quemado en el análisis. Tratando al gas no quemado como un sistema abierto que pierde masa por medio de las fugas y la combustión, puede demostrarse que

$$-\dot{Q}_{nq} = \omega m (1-x) T_{nq} \frac{ds_{nq}}{d\theta} \quad (2.11.38)$$

Para utilizar esta última ecuación, es necesario introducir la ecuación de estado que relacione la entropía, la temperatura y la presión, de la siguiente forma

$$s_{nq} = s_{nq}(T_{nq}, P) \quad (2.11.39)$$

de la cual se sigue que

$$\frac{ds_{nq}}{d\theta} = \left(\frac{\partial s_{nq}}{\partial T_{nq}} \right) \frac{dT_{nq}}{d\theta} + \left(\frac{\partial s_{nq}}{\partial P} \right) \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.40)$$

$$\frac{ds_{nq}}{d\theta} = \left(\frac{c_{Pnq}}{T_{nq}} \right) \frac{dT_{nq}}{d\theta} - \frac{v_{nq}}{T_{nq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \frac{dP}{d\theta} \quad (2.11.41)$$

Eliminando $ds_{nq}/d\theta$ entre las ecuaciones (2.11.38) y (2.11.41), queda

$$c_{pnq} \frac{dT_{nq}}{d\theta} - v_{nq} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \frac{dP}{d\theta} = \frac{-h_{nq} A_{nq}}{\omega m (1-x)} (T_{nq} - T_w) \quad (2.11.42)$$

Las tres ecuaciones que fungirán como (2.11.31) a (2.11.33), son las ecuaciones (2.11.1), (2.11.37) y (2.11.42). por conveniencia, se definen las siguientes variables

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right) \quad (2.11.43)$$

$$B = \frac{1}{\omega m} \left[h_{nq} A_{nq} \frac{v_{nq}}{c_{pnq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \frac{T_{nq} - T_w}{T_{nq}} + h_q A_q \frac{v_q}{c_{pq}} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \frac{T_q - T_w}{T_q} \right] \quad (2.11.44)$$

$$C = -(v_q - v_{nq}) \frac{dx}{d\theta} - v_q \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \frac{h_{nq} - h_q}{c_{pq} T_q} \left[\frac{dx}{d\theta} - \frac{(x-x^2)C}{\omega} \right] \quad (2.11.45)$$

$$D = x \left[\frac{v_q^2}{c_{pq} T_q} \left(\frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \right)^2 + \frac{v_q}{P} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln P} \right] \quad (2.11.46)$$

$$E = (1-x) \left[\frac{v_{nq}^2}{c_{pnq} T_{nq}} \left(\frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \right)^2 + \frac{v_{nq}}{P} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln P} \right] \quad (2.11.47)$$

Finalmente, las seis ecuaciones que se deben integrar son

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{A+B+C}{D+E} \quad (2.11.48)$$

$$\frac{dT_q}{d\theta} = \frac{-h_q A_q (T_q - T_w)}{\omega m c_{pq} x} + \frac{v_q}{c_{pq}} \frac{\partial \ln v_q}{\partial \ln T_q} \left(\frac{A+B+C}{D+E} \right) + \frac{h_{nq} - h_q}{x c_{pq}} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x-x^2) \frac{C}{\omega} \right] \quad (2.11.49)$$

$$\frac{dT_{nq}}{d\theta} = \frac{-h_{nq} A_{nq} (T_{nq} - T_w)}{\omega m c_{pnq} (1-x)} + \frac{v_{nq}}{c_{pnq}} \frac{\partial \ln v_{nq}}{\partial \ln T_{nq}} \left(\frac{A+B+C}{D+E} \right) \quad (2.11.50)$$

$$\frac{dW}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} \quad (2.11.51)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = \frac{1}{\omega} [h_q A_q (T_q - T_w) + h_{nq} A_{nq} (T_{nq} - T_w)] \quad (2.11.52)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = \frac{Cm}{\omega} [(1-x^2)h_{nq} + x^2 h_q] \quad (2.11.53)$$

2.12 Pérdidas de calor y masa [9, 10, 11, 20]

Pérdidas de calor por convección

En esta sección se muestra un método para calcular los coeficientes de transferencia de calor, h_q y h_m , necesarios en las ecuaciones (2.11.16) y (2.11.17).

Para este fin se emplea una correlación adimensional que proporcione el coeficiente de transferencia de calor promedio como función del tiempo (ángulo del cigüeñal). Una de tales relaciones, ampliamente usada, se debe a Woschni (1967)

$$Nu = 0.035 Re^{0.8} \quad (2.12.1)$$

donde Nu es el número de Nusselt y Re es el número de Reynolds, que se calculan de la siguiente forma

$$Nu = \frac{hD}{\lambda} \quad Re = \frac{DU\rho}{\mu} \quad (2.12.2)$$

donde

- h = coeficiente de transferencia de calor
- D = longitud característica del fenómeno en estudio
- λ = conductividad térmica
- U = velocidad característica del fenómeno en estudio
- ρ = densidad
- μ = viscosidad

La longitud característica, D , en la que ambos números están basados se escogió arbitrariamente como el diámetro del cilindro. Woschni pudo haber escogido la altura de la válvula de admisión o la longitud de la carrera, que pueden variarse independientemente del diámetro del cilindro. El hecho de que haya longitudes que puedan variarse independientemente del diámetro del cilindro hace que la correlación sea imperfecta. Afortunadamente el coeficiente de transferencia de calor resultante no es tan fuertemente dependiente de esta longitud ($h \propto D^{-0.2}$), así que esta elección no es crítica.

Finalmente, para calcular el Re, se necesita una velocidad. Annand (1963) propone una correlación en la que la velocidad apropiada es proporcional a la velocidad media del pistón. La velocidad del gas inducido por combustión se considera proporcional a la elevación de presión debido a la combustión. Como consecuencia, se tiene

$$U \text{ (m/s)} = 2.28 \bar{U}_p + 0.00324 \frac{T_0 V}{V_0} \frac{\Delta P_c}{P_0} \quad (2.12.3)$$

donde

- $\bar{U}_p = \omega S / \pi$ = velocidad media del pistón
- T_0 = temperatura (K) al cerrar la válvula de admisión
- V_0 = volumen del cilindro al cerrar la válvula de admisión
- V = volumen del cilindro en cada instante
- ΔP_c = incremento instantáneo de la presión debido a la combustión
- P_0 = presión al cerrar la válvula de admisión

El incremento de presión debido a la combustión es igual a la presión dentro del cilindro durante la combustión menos la presión del cilindro en el mismo ángulo del cigüeñal en el ciclo de admisión-expulsión. Esta última puede calcularse de manera bastante aproximada usando la relación isentrópica $PV^\gamma = P_0V_0^\gamma = \text{constante}$.

De tal forma, el coeficiente de transferencia de calor puede calcularse de la siguiente manera

$$h = 0.035 \frac{\lambda}{D} \left(\frac{DU\rho}{\mu} \right)^{0.8} \quad (2.12.4)$$

en la que la dificultad radica en la determinación de λ y μ , que es lo que se verá a continuación.

Propiedades de transporte en una mezcla de gases

La teoría cinética de gases se ha desarrollado de manera suficiente como para que sea posible calcular la conductividad térmica y la viscosidad de los gases de manera bastante aproximada. Por ejemplo, la viscosidad de un componente puro esta dada por

$$\mu = 26.693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2 \Omega} \quad (2.12.5)$$

donde las unidades son de g/cms o poise, σ es el diámetro molecular en angstroms y Ω es una integral adimensional que depende de las fuerzas de interacción de las moléculas durante una colisión. Esta integral esta dada por

$$\Omega = 1.155(T^*)^{-0.1462} + 0.3945e^{-0.6672T^*} + 2.05e^{-2.168T^*} \quad (2.12.6)$$

donde T^* es una temperatura adimensional definida por

$$T^* = \frac{kT}{\epsilon}$$

k es la constante de Boltzmann y ϵ es la máxima energía de atracción durante la colisión. En la siguiente tabla se enlistan los valores de los parámetros de interacción para las especies que nos interesan.

Parámetros de colisión		
Especies	σ (1×10^{-10} m)	ϵ/k (K)
CO ₂	3.941	195.2
H ₂ O	2.641	809.1
N ₂	3.798	71.4
O ₂	3.467	106.7
CO	3.690	91.7
H ₂	2.827	59.7
H	2.708	37.0
O	3.050	106.7
OH	3.147	79.8
NO	3.492	116.7

La conductividad térmica en un gas se divide en dos para tomar en cuenta el transporte de energía trasnacional λ' y energía interna λ'' . Por definición

$$\lambda = \lambda' + \lambda'' \quad (2.12.7)$$

La contribución traslacional esta dada por

$$\lambda' = \frac{15}{4} \frac{R}{M} \mu \quad (2.12.8)$$

y la contribución de energía interna esta aproximadamente dada por

$$\lambda'' \approx 0.88 \left(\frac{2}{5} \frac{c_p}{R} - 1 \right) \lambda' \quad (2.12.9)$$

La viscosidad de una mezcla de las 10 especies de interés es, aproximadamente,

$$\mu_{mezcla} \approx \sum_{i=1}^{10} \frac{\mu_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{10} \Phi_{ij} \frac{y_j}{y_i}} \quad (2.12.10)$$

donde Φ_{ij} es un coeficiente dado por

$$\Phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{2\sqrt{2} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{1/2}} \quad (2.12.11)$$

y al igual que se ha venido considerando, y denota una fracción molar. La fórmula apropiada para la contribución traslacional de la conductividad térmica es

$$\lambda'_{mezcla} \approx \sum_{i=1}^{10} \frac{\lambda'_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{10} \Psi_{ij} \frac{y_j}{y_i}} \quad (2.12.12)$$

y el coeficiente es

$$\Psi_{ij} = \Phi_{ij} \left[1 + 2.41 \frac{(M_i - M_j)(M_i - 0.142M_j)}{(M_i + M_j)^2} \right] \quad (2.12.13)$$

Finalmente, la contribución por energía interna es, aproximadamente,

$$\lambda''_{mezcla} \approx \sum_{i=1}^{10} \frac{\lambda''_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{10} \Phi_{ij} \frac{y_j}{y_i}} \quad (2.12.14)$$

Las aproximaciones (2.12.9), (2.12.10), (2.12.12) y (2.12.14) se derivaron de manera rigurosa a partir de la teoría cinética de gases.

En el caso de mezclas reactivas, existe también una contribución a la conductividad térmica causada por la disociación y recombinación de moléculas. Para las aplicaciones prácticas, la siguiente aproximación es suficiente para tomar en cuenta este efecto,

$$\lambda_{mix} = (\lambda'_{mix} + \lambda''_{mix}) \frac{c_p}{c_{p,f}} \tag{2.12.15}$$

donde c_p es la capacidad térmica específica en el equilibrio y $c_{p,f}$ es la capacidad térmica específica de la misma mezcla a temperatura ambiente.

Pérdidas de masa

Existen tres razones primordiales para considerar las pérdidas de masa. Primero, la influencia de la presión del gas actuando en los anillos, que tiene incidencia en la fricción y las características de desgaste; segundo, el rendimiento indicado y tercero, las emisiones de hidrocarburos. En este trabajo, es de interés en tanto que es un factor que afecta al rendimiento del motor.

Típicamente el conjunto de anillos consiste en dos de compresión y uno de aceite. La caída de presión a través del anillo de aceite es, generalmente, despreciable. Tal conjunto de anillos está, esquemáticamente, representado en la Fig. 2.13, donde también se muestra una representación unidimensional de este conjunto. Todos los volúmenes son dependientes del tiempo: V_0 cambia por el movimiento del pistón, V_1 cambia por el movimiento de los anillos y V_2 cambia por el movimiento de los pistones (incluyendo los de los otros cilindros).

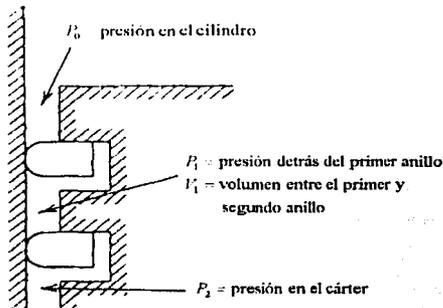


Figura 2.13 Conjunto de anillos y modelo de flujo unidimensional de pérdida de masa.

En la Fig. 2.14 se muestran los resultados de mediciones realizadas de las presiones dentro de los anillos en un motor a diesel de dos tiempos. Nótese que cerca de 70 grados después del punto muerto superior la presión dentro de los anillos es mayor que la presión en el cilindro, lo que significa que el

sentido del flujo de gas se invierte y este penetraría en la cámara de combustión. La figura también muestra las presiones calculadas considerando que el flujo es unidimensional, permanente e isentrópico.

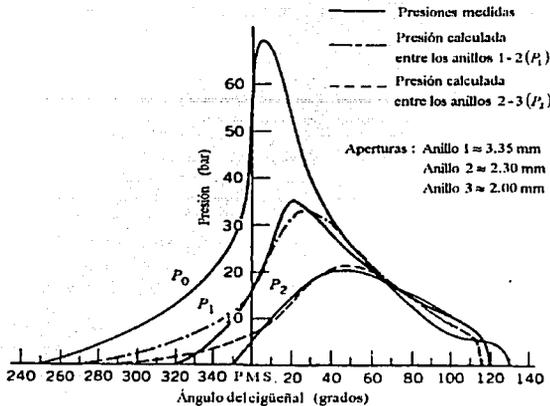


Figura 2.14 Presiones medidas y predichas entre los anillos

En las secciones 2.6 [ecuación (2.6.22)] y 2.11 [ecuación (2.11.14)] se investigó la influencia de estas pérdidas de masa. Se consideró que el flujo másico siempre era hacia fuera de la cámara y que la rapidez de transferencia siempre era proporcional al contenido de masa dentro del cilindro. Esta constante de proporcionalidad C comúnmente se selecciona de modo que *se fugue* un 2.5% de la carga total, lo cual es consistente con las observaciones realizadas. Para este trabajo, se expresará el valor de esta constante en función de la cantidad (en porcentaje) de la masa perdida durante el ciclo, como se muestra a continuación.

Integrando analíticamente la ecuación (2.6.22), se obtiene

$$\tilde{m} = e^{\left[\frac{-C(\theta + \pi)}{\omega} \right]} \quad (2.12.16)$$

así que si se perdió un %PorcMasaPerd de masa durante el ciclo (es decir, hasta que $\theta = \pi$), la expresión para el cálculo de C es,

$$C = -\frac{\omega}{2\pi} \ln(1 - \%PorcMasaPerd) \quad (2.12.17)$$

Estos cálculos son deliberadamente simples, sólo para propósitos ilustrativos. Se ignoran hechos consumados como el que existe un flujo reversible hacia el interior del cilindro como se explicó con la ayuda de la Fig. 2.14. También se subestimó el hecho de que existe una pequeña masa de gas no quemado que se introduce dentro del conjunto de anillos durante la compresión. Cuando este gas reemerge, la mayoría no alcanza la oxidación, por lo que se desperdicia combustible; algunos cálculos estiman que aproximadamente entre el 2 y el 7% de combustible se desperdicia de esta forma.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

BIBLIOGRAFÍA DEL CAPÍTULO 2

- [5] Avallone, Eugene E., Baumcister III, Theodore. *Marks, Manual del Ingeniero Mecánico*. McGraw-Hill Interamericana de México. 2 tomos, 1995.
- [6] Bartok, William, Sarofim, Adel F. *Fossil Fuel Combustion, a source book*. New York: John Wiley & Sons, 1991. 866 pp.
- [7] Baulch, D. L., Cobos, Cox, Frank, Just, Kerr, Pilling, Troc, Walker and Warratz. *Summary Table of Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling*. Combustion and Flame, vol. 98: pp 59-79. 1994.
- [8] Benson, Rowland S. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal-Combustion Engines*. Clarendon Press, Oxford, 1982, 2 Vols.
- [9] Ferguson, Colín R. *Internal Combustion Engines. Applied Thermosciences*. New York: John Wiley & Sons, 1986. 550 pp.
- [10] Garcell Puyans, Leonel, Díaz García, Armando. *Transferencia de cantidad de movimiento, calor y masa*. IPN, México, 1998. 348 pp.
- [11] García-Colín Scherer, Leopoldo. *Teoría cinética de los gases*. Colección CBI, UAM Iztapalapa, México, 1990. 93 pp.
- [12] Glassman, Irvin. *Combustion*. Academic Press Inc. 1987. 500 pp.
- [13] Heywood, John B. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill Book Co. 1989. 927 pp
- [14] Klotz, Irving M., Rosenberg, Robert M. *Termodinámica química, teoría y métodos básicos*. Editorial AC, Madrid, España. 1977. 485 pp.
- [15] Kodah, Z. H. et al. *Combustión in spark-ignition engine*. www.elsevier.com/locate/apenergy, Applied Energy 66 (2000), August 1999. 23 pp
- [16] Kuan-yun Kuo, Kenneth. *Principles of Combustion*. New York: John Wiley & Sons, 1990. 810 pp
- [17] Markatos, N. C. *Computer simulation for fluid flow, heat and mass transfer and combustion in reciprocating engines*. Hemisphere Publishing Co., 1989. 586 pp
- [18] Muñoz, M., Payri, F. *Motores de combustión interna alternativos*. Sección de Publicaciones de la E.T.S.I.I. Fundación general-UPM, Madrid, España, 1989. 725 pp
- [19] Levine, Ira N., *Fisicoquímica*. McGraw-Hill Interamericana de España. 2 tomos. 1996.
- [20] R. B. Bird, W. E. Stewart, E. N. Lightfoot. *Fenómenos de transporte*. México: Editorial Reverté, 1998.
- [21] Ramos, Juan Ignacio. *Internal combustion engine modeling*. New York: Hemisphere Publishing Co, 1989. 422 pp.

- [22] Salvi, Giuliano. *La combustión. Teoría y aplicaciones*. Editorial Dossat, Madrid. 481 pp.
- [23] Taylor, Charles Fayette. *The internal-combustion engine in theory and practice*. MIT, Cambridge, Mass. 1960.
- [24] Toong, Tau-Yi. *Combustion Dynamics. The dynamics of chemically reacting fluids*. McGraw-Hill Book Co. 1983. 323 pp.
- [25] Universidad Politécnica de Valencia. *Tópicos avanzados en motores de combustión interna alternativos*. Programa Unitwin, Cátedra UNESCO en Ingeniería Avanzada, Julio 1994.
- [26] Wark, Kenneth. *Termodinámica*. McGraw-Hill Interamericana de México. 1996. 923 pp.
- [27] Warnatz, J. *Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*. Springer, Berlin. 2001. 299 pp
- [28] Westbrook, Charles K., Dryer, Frederick L. *Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion*. Prog. Energy Combust. Sci., vol 10, pp 1-57. 1984.
- [29] Williams, Forman A. *Combustion theory. The fundamental theory of chemically reacting flow systems*. Addison-Wesley Publishing Company, 1993. 680 pp.

CAPÍTULO 3

Simulación Numérica

A continuación se explica la forma en la que se resuelven las ecuaciones involucradas en la simulación de los ciclos de compresión y potencia de un MCI expuestas en el Capítulo 2.

La simulación se realizó con el uso del sistema de programación Matlab V6.0, sabiendo que es factible ampliar y, por tanto, mejorar el esfuerzo realizado en la consecución del programa de simulación obtenido, es por lo que se ha optado por explicar de forma sucinta la forma en la que se fue estructurando y ejecutando el programa final. El objetivo buscado es que al final de este capítulo, el interesado sea capaz de comprender la estructura general de los distintos bloques (funciones) que se implementaron y, a su vez, pueda complementar este trabajo añadiéndole las siguientes etapas de un motor (expulsión y admisión) para que la simulación resulte más efectiva.

Matlab es un programa que, como muchos otros, funciona con base en bloques o funciones (subrutinas) interconectadas entre sí para llevar a cabo los cálculos requeridos. La simulación aquí presentada fue realizada empleando un total de 15 subrutinas (Apéndice G) que se explican en seguida.

Auxiliar

Esta subrutina calcula, para cada una de las etapas de la simulación, los siguientes parámetros:

- El volumen existente dentro de la cámara de combustión, es decir, evalúa la ecuación (2.5.3).
- La fracción de calor liberado por la combustión, x , ecuación (2.6.1); considerando que para valores de $\theta < \theta_c$ (antes de la combustión) se tiene $x = 0$, mientras que para valores de $\theta > \theta_c + \theta_b$ (después de la combustión), $x = 1$.
- La masa de gas dentro de la cámara, ecuación (2.12.16)

SolConcMolar

Esta subrutina proporciona la composición de los gases quemados especificando la concentración de cada una de las 10 especies de interés, ecuación (2.8.18), haciendo uso de cinética química, es decir, resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales (2.10.25) – (2.10.34) empleando para ello las constantes de equilibrio definidas en la Sección 2.10.

Estas concentraciones se expresan en moles/cm³; como para algunas especies se trabaja con ordenes de magnitud de $\sim 10^{-6}$ – 10^{-9} moles/cm³, no resultó útil en la práctica emplear alguna de las varias funciones que posee Matlab para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales lineales, ya que luego de varias pruebas se comprobó que con el uso de tales funciones se llegaba a resultados divergentes, ilógicos o imaginarios; así que se optó por implementar dentro de SolConcMolar un método de solución de sistemas de ecuaciones diferenciales de Runge-Kutta de orden 4 con valor inicial.

Como ejemplo, supóngase que se tienen dos ecuaciones diferenciales de la siguiente forma,

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x, y) \\ \frac{dy}{dt} &= g(t, x, y) \end{aligned} \quad \text{con} \quad \begin{cases} x(t_0) = x_0 \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Es posible encontrar una solución numérica del sistema (3.1) en un intervalo dado $a \leq t \leq b$ considerando los diferenciales

$$dx = f(t, x, y)dt \quad \text{y} \quad dy = g(t, x, y)dt \quad (3.2)$$

Sustituyendo en (3.2) los diferenciales por incrementos $dt = t_{k+1} - t_k$, $dx = x_{k+1} - x_k$ y $dy = y_{k+1} - y_k$ se obtiene

$$\begin{aligned} x_{k+1} - x_k &= f(t_k, x_k, y_k)(t_{k+1} - t_k), \\ y_{k+1} - y_k &= g(t_k, x_k, y_k)(t_{k+1} - t_k). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dividiendo el intervalo en M subintervalos de anchura $h = (b-a)/M$ y usando en (3.3) los puntos $t_{k+1} = t_k + h$ como nodos, se obtienen las siguientes fórmulas recursivas,

$$\begin{aligned} t_{k+1} &= t_k + h, \\ x_{k+1} &= x_k + hf(t_k, x_k, y_k), \\ y_{k+1} &= y_k + hg(t_k, x_k, y_k), \end{aligned} \quad \text{para } k = 0, 1, \dots, M-1. \quad (3.4)$$

Para obtener un grado de precisión razonable, es necesario utilizar un método de orden mayor. Por ejemplo, las fórmulas recursivas del método de Runge-Kutta de orden 4 son

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \frac{h}{6}(f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4) \\ y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6}(g_1 + 2g_2 + 2g_3 + g_4) \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde

$$\begin{aligned} f_1 &= f(t_k, x_k, y_k), & g_1 &= g(t_k, x_k, y_k), \\ f_2 &= f\left(t_k + \frac{h}{2}, x_k + \frac{h}{2}f_1, y_k + \frac{h}{2}g_1\right), & g_2 &= g\left(t_k + \frac{h}{2}, x_k + \frac{h}{2}f_1, y_k + \frac{h}{2}g_1\right), \\ f_3 &= f\left(t_k + \frac{h}{2}, x_k + \frac{h}{2}f_2, y_k + \frac{h}{2}g_2\right), & g_3 &= g\left(t_k + \frac{h}{2}, x_k + \frac{h}{2}f_2, y_k + \frac{h}{2}g_2\right), \\ f_4 &= f(t_k + h, x_k + hf_3, y_k + hg_3), & g_4 &= g(t_k + h, x_k + hf_3, y_k + hg_3). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Aquí, el intervalo requerido $a \leq t \leq b$ se refiere al *Paso Angular* que se especifica cuando se ejecuta el programa, se sabe que al incrementar el número de subintervalos M , se incrementa también la precisión de los resultados, pero de forma casi exponencial, se incrementa el tiempo de cómputo, así que se decidió trabajar con un valor de $M = 500$ que generó buenos resultados. Así, por poner un ejemplo exagerado, para un motor «lento» a 1000 rpm, tomando un paso angular «grande» de 30° (que resulta en

realidad enorme comparado con las simulaciones que se hicieron con pasos de $1-2^0$) y con la M establecida, se tiene que en una escala temporal, existe una anchura h de 1×10^{-5} segundos que se considera razonablemente buena.

Funciones

En esta subrutina se encuentran almacenadas, para su evaluación mediante Integral, las siguientes funciones

$$\sqrt{(a^2 - x^2)(r^2 - a^2 - k^2 + 2xk)} + [r^2 - (x - k)^2] \cdot \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r^2 - a^2 - k^2 + 2xk}} \quad (3.7)$$

$$[r^2 - (x - k)^2] \cdot \tan^{-1} \frac{\sqrt{r^2 - h^2 - (x - k)^2}}{h} - h \cdot \sqrt{r^2 - h^2 - (x - k)^2} \quad (3.8)$$

$$\sqrt{(a^2 - x^2)(r^2 - a^2 - k^2 + 2xk)} + [r^2 - (x - k)^2] \cdot \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r^2 - a^2 - k^2 + 2xk}} - 2h \cdot \sqrt{a^2 - x^2} \quad (3.9)$$

donde las variables representan, para este caso particular, lo siguiente

a , el radio del cilindro

r , el radio del frente de flama de la combustión

k , la separación de la bujía

h , la altura al pistón

x , es una variable de integración

Estas fórmulas, así como la correcta definición de las variables que involucran, se deducen en el Apéndice E, por lo que se remite la atención a tal apartado; lo que ahora interesa es el modo en que las utiliza la subrutina Integral que a continuación se explica.

Integral

Esta subrutina contiene un algoritmo basado en la Regla compuesta de Simpson para evaluar la integral de las funciones (3.7) - (3.9) para la variable x asignando, en cada caso, los límites correctos de integración (que se exponen en el Apéndice E); desde luego que las variables a , r , k y h que aparecen en tales funciones, se conocen al momento de evaluarlas, por lo que únicamente se tratan de funciones del tipo $f(x)$ que, como se aprecia, resultan muy difíciles de evaluar en forma analítica.

Supóngase que se desea evaluar la siguiente función

$$\int_a^b f(x) dx$$

Dividiendo $[a, b]$ en $2M$ subintervalos $[x_k, x_{k+1}]$ de la misma anchura $h = (b - a) / 2M$ mediante una partición de nodos equiespaciados $x_k = a + kh$, para $k = 0, 1, \dots, 2M$. La regla compuesta de Simpson con $2M$ subintervalos se puede expresar de la siguiente forma:

$$S(f, h) = \frac{h}{3}(f(a) + f(b)) + \frac{2h}{3} \sum_{k=1}^{M-1} f(x_{2k}) + \frac{4h}{3} \sum_{k=1}^M f(x_{2k-1}) \quad (3.10)$$

Este valor es una aproximación a la integral de $f(x)$ en $[a, b]$, lo que se escribe como

$$\int_a^b f(x) dx = S(f, h)$$

El error cometido al usar esta aproximación se puede expresarlo de la siguiente forma,

$$\int_a^b f(x) dx = S(f, h) + E_S(f, h)$$

de tal modo que, si además f es continua y derivable hasta su cuarta derivada, entonces existe un valor c con $a < c < b$ tal que el término de error $E_S(f, h)$ se puede escribir [30] como

$$E_S(f, h) = \frac{-(b-a)f^{(4)}(c)h^4}{180} = O(h^4)$$

Como se constata al analizar los diversos límites de las integrales de las funciones (3.7) – (3.9) en el Apéndice E, los mayores son aquellos donde el intervalo es $[-a, a]$, $a =$ radio del cilindro, por lo que se tendrá, en el caso extremo, $h = 2a/2M = a/M$. Para un caso típico, $a = 5$ cm; si se toma $M = 50$, se tiene $h = 1/10$, por lo que $E_S(f, h) = O(h^4) = O(0.0001)$, que se considera un error de un orden de magnitud adecuado para los fines de este trabajo.

PropagFlama

Esta subrutina, valiéndose de las condiciones iniciales adecuadas, calcula las áreas y volúmenes necesarios de gases quemados y no quemados que se muestran en el Apéndice E; para ello se vale de las subrutinas Integral y Funciones.

PropiedadesGQ

Esta subrutina calcula las propiedades termodinámicas de los Gases Quemados (gases de posflama y de cuando ha terminado el proceso de combustión) tales como la entalpía, energía interna y calor específico. Resulta útil porque estos datos son necesarios para la evaluación del ciclo termodinámico de trabajo del motor [ecuaciones (2.11.48) – (2.11.53)].

Para tal fin se utilizaron las ecuaciones (2.1.22) y (2.1.23), tomando los datos necesarios del Apéndice A.

PropiedadesTransporte y CoefTransfCalor

Estas dos subrutinas son las encargadas de evaluar los coeficientes de transferencia de calor h_f y h_{mq} necesarios en las ecuaciones (2.11.16) y (2.11.17); para ello utilizan las ecuaciones derivadas en la Sección 2.12.

Ecuadifer6

En esta subrutina se resuelve el conjunto de seis ecuaciones diferenciales (2.11.48) – (2.11.53).

CombTempBajas

Esta es una de las subrutinas principales, encargada de calcular las propiedades termodinámicas de lo que se llamarán *los gases no quemados*, es decir, la mezcla aire-oxígeno-combustible-residuos que se encuentra dentro de la cámara a lo largo del proceso de compresión y de los gases de la *pre-flama* durante la combustión. Su nombre, «Combustión a Temperaturas Bajas» hace referencia a que se emplea la Tabla 1 del Apéndice A, válida para $T < 1000$ K.

Dentro de esta subrutina se calcula la composición de la mezcla aire-oxígeno-combustible-residuos de acuerdo a la Tabla 2.2.

Se calculan las propiedades (c_p , h , u y s) de los componentes considerados (CO_2 , H_2O , N_2 , O_2 , CO y H_2) así como del combustible, considerando las ecuaciones (2.1.22) a (2.1.25), para, posteriormente, calcular las propiedades de la mezcla completa de gases de la siguiente forma:

- Entalpía, h , con la ecuación (2.1.13)
- Entropía, s , con la ecuación (2.1.21)
- Calor específico, c_p , con la ecuación (2.7.14)
- Constante específica del gas, R , con la ecuación (2.1.15)
- Energía interna, u , de la definición de entalpía, $u = h - RT$.

En la estructura interna de la subrutina también se calculan cantidades como las fracciones molares y máximas de los componentes, ecuación (2.7.4).

Cabe mencionar que dentro de esta subrutina se encuentran los datos necesarios para hacer las simulaciones de diversos combustibles, tales como: Metano CH_4 , Benceno C_6H_6 , Gasolina C_7H_{17} , Diesel $\text{C}_{14.4}\text{H}_{24.9}$, Nitrometano CH_3NO_2 , Alcohol metílico CH_3OH , Etano C_2H_6 , Propileno C_3H_6 , Propano C_3H_8 , Butileno C_4H_8 , y *n*-butano C_4H_{10} ; desde luego que para los fines buscados, simular un motor de combustión interna, se trabajará siempre con gasolina, C_7H_{17} , como combustible.

CombTempAltas

Esta es otra de las subrutinas principales, encargada de calcular la composición y propiedades termodinámicas de los gases producto de la combustión, es decir, el proceso que se está llevando a cabo a cada instante en el frente de flama. Para ello se utiliza la Tabla 2 del Apéndice A y el procedimiento descrito en la Sección 2.8: Equilibrio de los productos de la combustión.

Cuando se realiza la combustión se necesita una primera aproximación de la composición, ecuación (2.8.41), que se obtiene mediante el uso de CombTempBajas; se evalúan las constantes de equilibrio, ecuación (2.8.30); se calculan las constantes necesarias, ecuaciones (2.8.31) a (2.8.36) y se

procede al cálculo iterativo expuesto en las páginas 64 y 65. La tolerancia especificada, ξ , ecuación (2.8.46) se tomó como 3×10^{-6} .

Posteriormente se computan las derivadas parciales, ecuaciones (2.8.47) a (2.8.60), necesarias para el cálculo de c_p , $\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T}\right)_p$ y $\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P}\right)_T$, ecuaciones (2.8.61) a (2.8.63).

Las propiedades restantes, h , u , s y R , se calculan del mismo modo que en CombTempBajas.

CicloCompletoCombustion

Esta es la subrutina medular de la simulación, que coordina a las demás subrutinas para llegar a la simulación completa.

Dentro de esta subrutina se calcula el coeficiente de pérdida de masa, ecuación (2.12.17), y se realizan las operaciones necesarias para determinar la velocidad de flama [ver apéndice E], ecuaciones (E.2) a (E.6).

Posteriormente se ingresa en un ciclo que calcula la composición de los gases dentro de la cámara en cada instante, así como otro tipo de datos de interés tales como los que proporcionan las ecuaciones (2.11.48) a (2.11.53).

El ciclo varía de acuerdo al Paso Angular introducido por el usuario y se desarrolla de la siguiente forma:

- Mediante Auxiliar se obtiene el volumen, la fracción de masa quemada y la masa dentro de la cámara
- Se determina el momento en que inicia la combustión, es decir, la primera etapa de combustión, en la que se considera que se lleva a cabo un proceso adiabático e isentrópico, por lo que se hace uso de la discusión hecha en la Sección 2.9 y se calcula la Temperatura de Flama Adiabática de la mezcla en ese momento, tomando como temperatura aproximada de referencia $T = 2200$ K que, si se observa la Tabla 2.4, resulta un valor apropiado.
- Se utiliza PropagFlama para determinar V_q , V_{nq} , A_q y A_{nq} .
- Se utiliza CoefTransfCalor para determinar h_q y h_{nq} .
- Se utiliza Ecuadifer6 para resolver las seis ecuaciones diferenciales (2.11.48) a (2.11.53) en todo momento.
- Se determina la composición de los gases dentro de la cámara, para lo cual se distinguen tres etapas: $x = 0$ (no ha iniciado la combustión), $0 > x > 1$ (durante la combustión) y $x = 1$ (únicamente se tienen gases quemados), de la forma que a continuación se detalla.

Cuando $x = 0$ la composición será la calculada por CombTempBajas, mientras que cuando $x = 1$ será la calculada mediante SolConcMolar. Cuando $0 > x > 1$ se tiene una «mezcla» de ambas de la siguiente forma: se considera que la composición del frente de flama (dada por CombTempAltas) se puede sumar algebraicamente a la composición de los gases quemados (dada por SolConcMolar) de la etapa inmediata anterior, ponderando los volúmenes respectivos que ocupan unos y otros (ya que la concentración está dada en moles/cm³), suponiendo que la concentración del frente de flama se difunde rápidamente en los gases de *pos*-flama. Esta composición «sumada» se puede, a su vez, sumar algebraicamente con la composición de los gases de *pre*-flama (dada por CombTempBajas) haciendo una nueva ponderación en volúmenes de cada parte del gas.

La composición así obtenida está en moles/cm³, y como se conoce el volumen de la cámara, se puede expresar esta concentración en moles, que se llamará *concentración en moles totales*, ya que es la cantidad real de moles que hay dentro de la cámara. De aquí resulta fácil expresar la concentración en

otras unidades, por ejemplo, en fracción molar [ecuación (2.1.9)]; como se conoce la *Masa Molar* (g/grmol) de cada componente, se puede expresar la composición en gramos, que se llamará *concentración en masa total*; también es posible expresar la concentración en fracción másica [ecuación (2.1.2)] y, como última representación, en *partes por millón*, ppm, haciendo el cociente entre la concentración en masa total y la masa total y multiplicándolo por un millón.

- Finalmente se calcula la eficiencia del ciclo, de acuerdo a la ecuación (F.9) y la *presión efectiva media indicada*, imep, que no es más que el trabajo promedio hecho por los gases a lo largo de toda la carrera.

CombustMCI

Esta subrutina contiene la *GUI (Graphical User Interface)* creada mediante Matlab para hacer la interfaz del programa más accesible. Lleva asociado un archivo que contiene los datos de la figura de interfaz llamado CombustMCI.fig. Esta rutina utiliza CicloCompletoCombust y a otras dos subrutinas encargadas de la realización de las gráficas finales, GraficasSinIntervalos y GraficasConIntervalos.

GraficasSinIntervalos y GraficasConIntervalos

Son las subrutinas encargadas de la realización de los gráficos finales del ciclo.

TESIS CON
FALLA DE ORDEN

BIBLIOGRAFÍA DEL CAPÍTULO 3

- [30] John H. Mathews, Kurtis D. Finks. *Métodos Numéricos con MATLAB*. Prentice Hall, Madrid, 2000. 736 pp
- [31] Steven C. Chapra, Raymond P. Canale. *Métodos Numéricos para Ingenieros*. McGraw-Hill, México, 1988. 630 pp

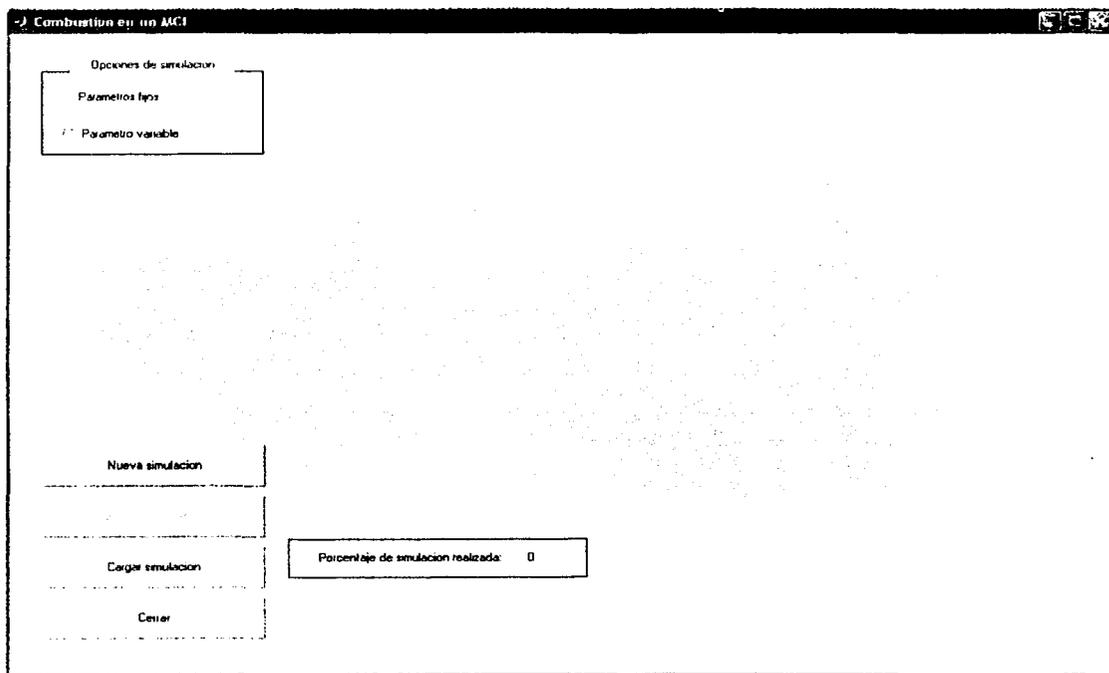
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

CAPÍTULO 4

En este capítulo se presentan los resultados de algunas simulaciones elaboradas durante el desarrollo de este trabajo, la forma de operar el programa obtenido y la forma en la que este presenta los datos de la simulación.

Resultados de la simulación

Para ejecutar la simulación, se debe escribir el nombre de la misma (combust.mci) en la ventana de comandos de Matlab, luego de lo cual aparece la siguiente ventana



Existen 2 opciones de simulación: *Parámetros fijos* y *Parámetro variable*, la primera de ellas es cuando se desea realizar una simulación con datos únicos, es decir, se conocen las condiciones exactas de operación del motor; la segunda es cuando se desea variar alguna de las condiciones de operación del motor.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

También se tienen algunas otras opciones, *Nueva simulación* cuando se desea comenzar una simulación (se han introducido datos erróneos); *Guardar simulación*, inicialmente desactivada, *Cargar simulación* y *Cerrar*, cuyas funciones se deducen de sus nombres.

Cuando se está llevando a cabo una simulación, el avance de la misma se observa en el recuadro de *Porcentaje de simulación realizada*.

A continuación se presenta la forma en la que se opera la simulación, así como los resultados que entrega, en ambas variantes: la simulación con parámetros fijos y la simulación con parámetro variable.

Simulación con parámetros fijos

Cuando se escoge la opción de simulación con parámetros fijos, inmediatamente se muestra el *cuadro de variables*, donde se solicita ingresar los parámetros de operación del motor, que son:

Datos de funcionamiento	
Razon de compresion	:
Diámetro del cilindro [cm]	:
Longitud de la carrera [cm]	:
Longitud de la biela [cm]	:
Velocidad del motor [RPM]	:
Razon de equivalencia [F]	:
Fraction residual en masa [0-100%]	:
Presion inicial [bar]	:
Temperatura inicial [K]	:
Temperatura de pared [K]	:
Angulo que dura la combustion	:
Ang. de inicio de combust. [-180,180]	:
Separacion de la buja [cm]	:
Porcentaje de masa perdida [0-100%]	:
Porc. añadido de oxígeno [0-100%]	:
Paso angula	:

Tomando como base la tesis experimental "*Carburación oxigenada: un método para reducir emisiones en un motor de combustión interna a gasolina*" presentada en 1998 por el Ing. Edgar Villaseñor Franco, se hará la simulación numérica del motor ahí experimentado. Los datos de operación que se necesitan de este motor, son presentados en el Capítulo 5 de dicho trabajo, donde se menciona textualmente lo siguiente,

Motor Marca Volkswagen

Año 1984

Cilindrada: 1600 cc, 4 cilindros opuestos, diámetro interno de 8.6 cm, carrera de 6.91 cm.

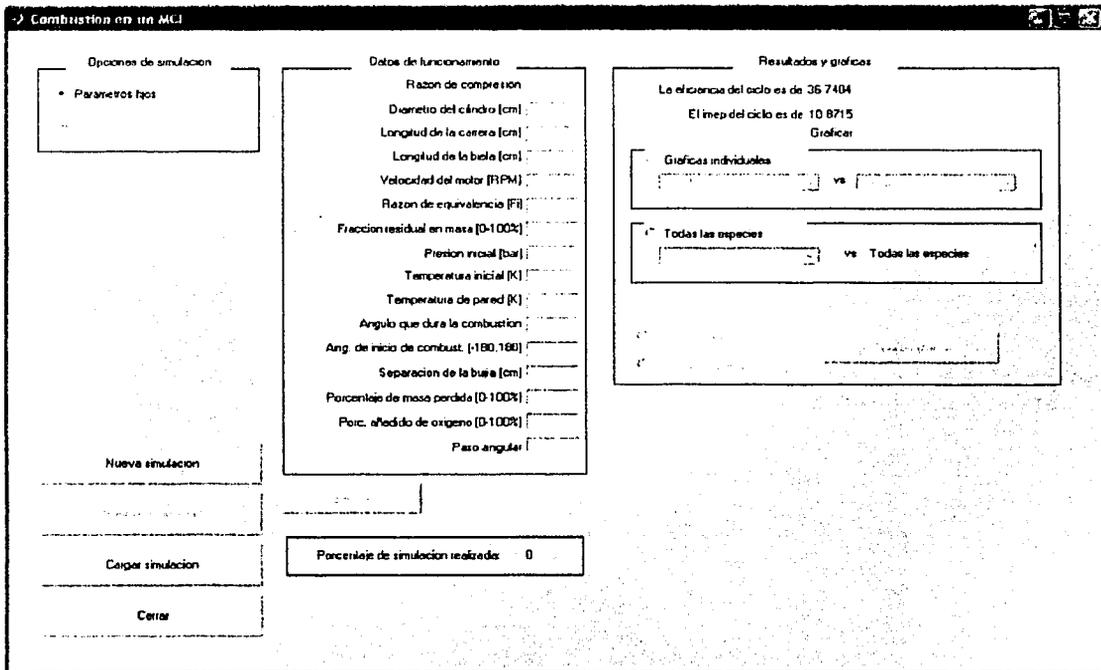
Los demás datos que se necesitan fueron fijados con base en la experiencia adquirida en el manejo de motores comerciales, de manera que se tienen los siguientes parámetros de funcionamiento:

- Razón de compresión: 9
- Diámetro del cilindro [cm]: 8.6
- Longitud de la carrera [cm]: 6.91
- Longitud de la biela [cm]: 9
- Velocidad del motor (rpm): 3000

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- Razón de equivalencia (ϕ): 0.8
- Fracción residual en masa [0-100%]: 8
- Presión inicial [bar]: 1
- Temperatura inicial [K]: 300
- Temperatura de pared [K]: 380
- Ángulo que dura la combustión: 50
- Ángulo de inicio de combustión [-180°,180°]: -5
- Separación de la bujía [cm]: 1.5
- Porcentaje de masa perdida [0-100%]: 2.5
- Porcentaje añadido de oxígeno [0-100%]: 0
- Paso angular: 1

Al terminar la simulación, se observa lo siguiente:

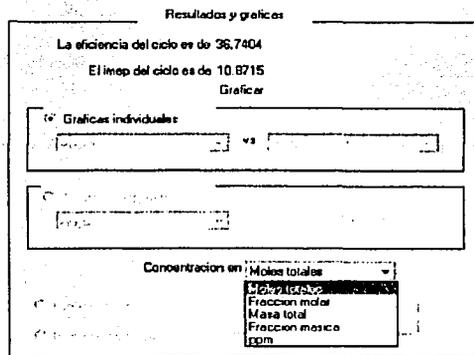
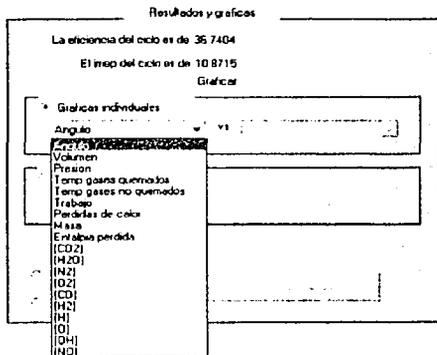


Se muestra, por ejemplo, que la eficiencia del ciclo operado es de 36.7404% y que la presión media efectiva (I_{mep}) es de 10.8715 bar.

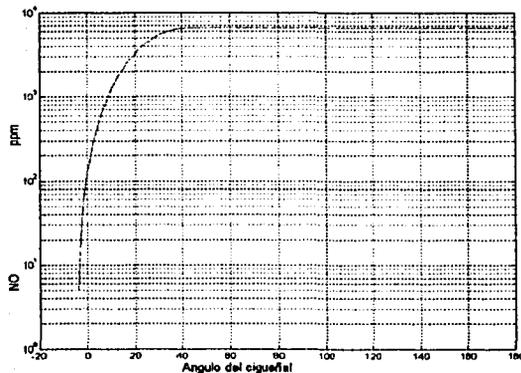
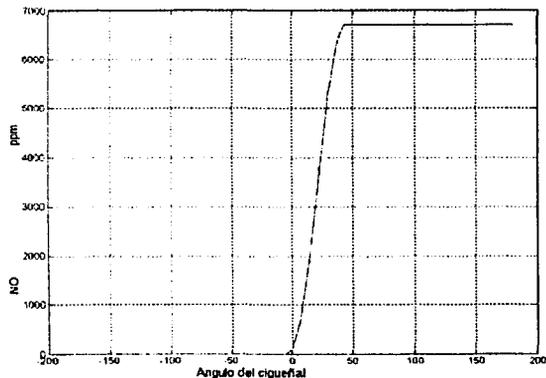
Aparecen dos opciones de graficación de resultados: *Gráficas Individuales* y *Todas las especies*.

Cuando se realiza una Gráfica Individual, se puede graficar cualquiera de las variables mostradas en la siguiente figura, con respecto a cualquiera de ellas mismas.

Si se selecciona graficar alguna de las especies químicas (10 en total), se tendrá que elegir el tipo de concentración que se desea graficar; se tiene, para elegir, los mostrados en la figura.



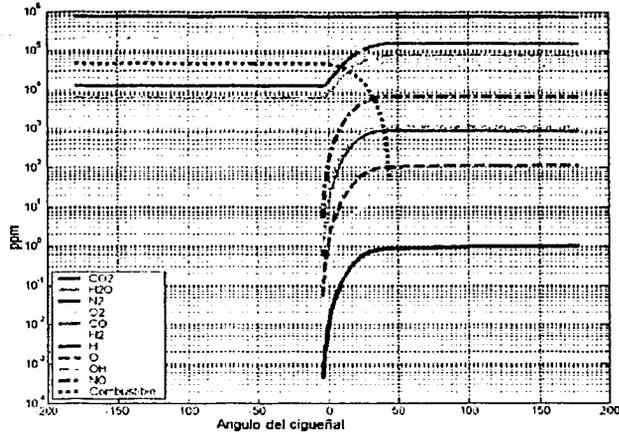
Como ejemplo se presentan las graficas *Normal* y *Logarítmica* del ángulo del cigüeñal vs la concentración en ppm de NO.



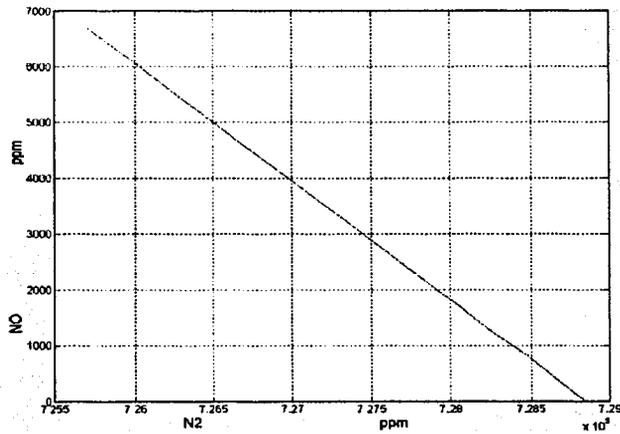
En estas gráficas se observa lo siguiente: la formación de NO comienza al inicio de la combustión (-5° del cigüeñal) y se puede visualizar el desarrollo de la formación a medida que se van consumiendo los reactivos (combustible-aire-oxígeno) hasta llegar a un límite superior de alrededor de 6700 ppm, estabilizándose en este valor durante la expansión de la mezcla en la cámara de combustión.

La utilidad de las gráficas logarítmicas se pone de manifiesto cuando se grafican *Todas las Especies*, donde se observa la proporción que hay entre la formación de las distintas especies químicas presentes, como se muestra a continuación.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

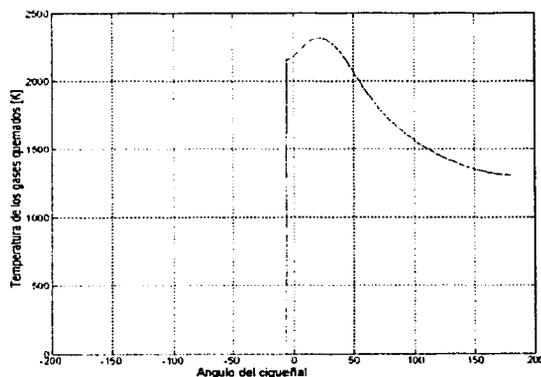
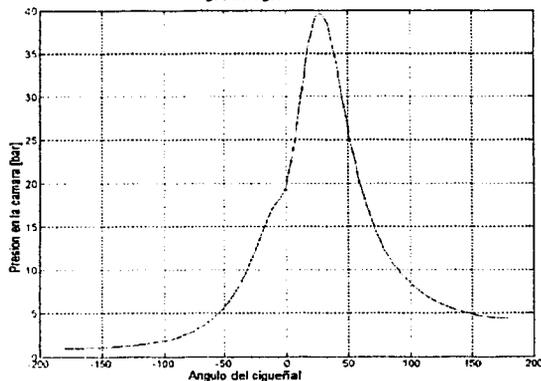
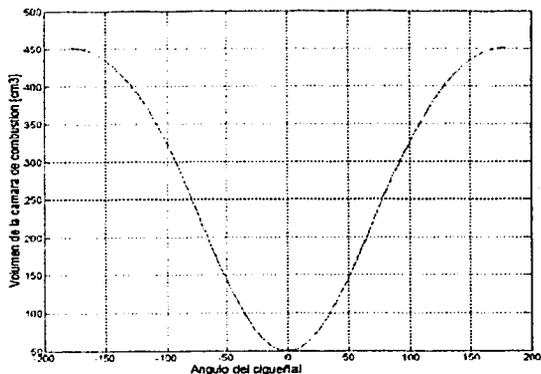


Esta gráfica no es muy clara en cuanto a la relación de formación-destrucción de ciertas especies, pero se pueden realizar gráficas individuales que lo clarifiquen, como la siguiente donde se observa como a medida que se «produce» N_2 , se «consume» NO y viceversa.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

A continuación se muestran algunas gráficas representativas del ciclo que se ha simulado.

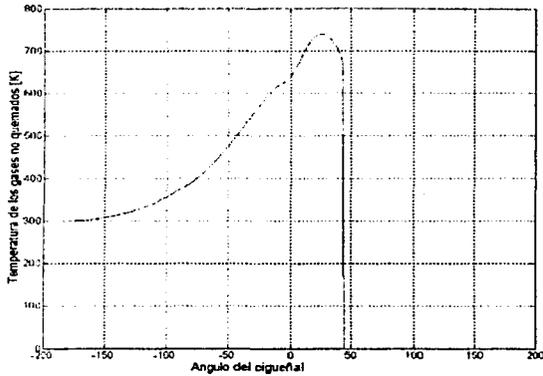


Se observa la simetría esperada en el volumen antes y después del Punto Muerto Superior (PMS). Adicionalmente se puede observar que el volumen de la cámara es de aproximadamente 450 cm³. Puesto que se tiene una cilindrada de 1600 cc distribuida en 4 cilindros, los 50 cm³ «restantes» son la *fracción residual en masa* de la cual se trató en la Sección 2.7, ecuación (2.7.9).

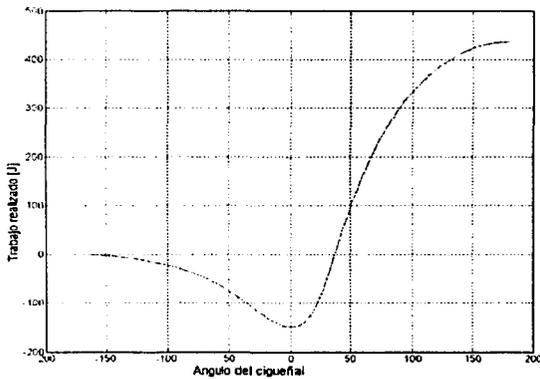
Se representa una gráfica típica de la presión que existe dentro de una cámara de combustión interna, que alcanza su máximo instantes después del PMS. La «forma general» de esta gráfica esta en plena concordancia con la gráfica experimental mostrada en la Fig. 2.14.

Como se expresó en el Capítulo 3, se supone que al inicio de la combustión, durante la primera etapa de la misma, se lleva a cabo un proceso adiabático e isentrópico. Como consecuencia de lo anterior se tiene una *temperatura de flama adiabática*, que como se puede observar en este gráfica, se encuentra alrededor de los 2200 K, valor que aumenta hasta cerca de los 2350 K. Posteriormente la temperatura empieza a disminuir y se tienen gases de escape a 1350 K aproximadamente.

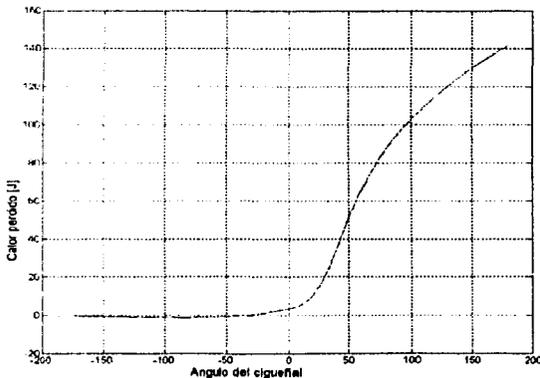
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Los gases no quemados (la mezcla aire-oxígeno-combustible-residuos) aumentan su temperatura debido al incremento de presión en la cámara, llegando a alcanzar un máximo de 730 K instantes antes de consumirse por completo.

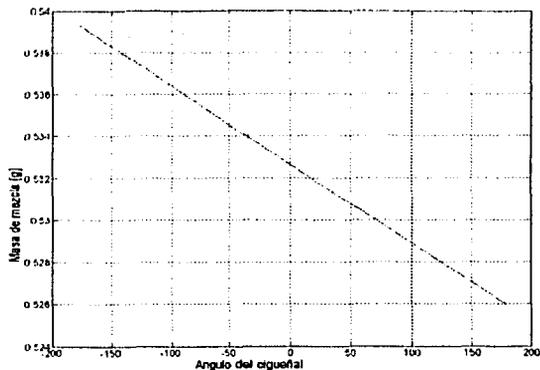


Inicialmente, como se observa en la gráfica, se le proporciona trabajo al motor (trabajo de compresión) en una cantidad de alrededor de 140 J, para que posteriormente, debido a la expansión de los gases quemados, éste nos proporcione el trabajo necesario (430 J) para accionar el motor. Claramente se tiene una ganancia neta de trabajo útil.

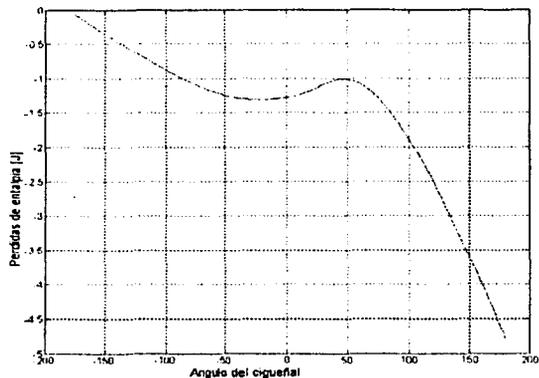


Las pérdidas de calor producto de la convección son apreciables en comparación con el trabajo obtenido (140 J vs 430 J, alrededor del 30%). Como se había mencionado, es recomendable disminuir lo mejor posible estas pérdidas y así aumentar la eficiencia del motor.

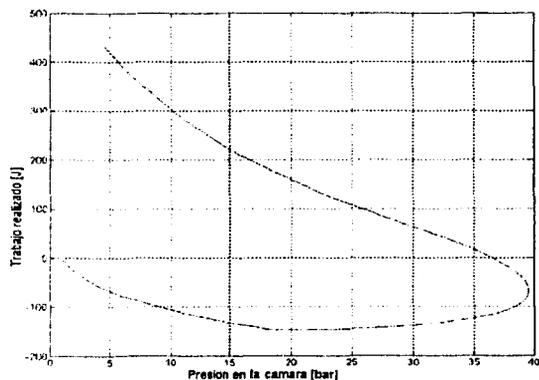
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Recordando la discusión hecha en la Sección 2.12, esta gráfica únicamente ilustra el hecho de que se fuga el 2.5% de la mezcla total, de manera lineal (en razón constante durante todo el ciclo). Como se mencionó en aquella sección, la razón de fuga de la mezcla (y por tanto la pendiente de esta gráfica) debería ser proporcional a la presión en la cámara.

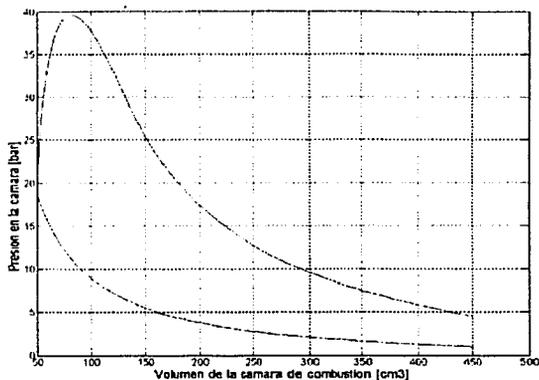


Esta es la representación gráfica de la ecuación (2.11.18), donde se considera que la entalpia perdida es proporcional a la fracción quemada del gas elevada al cuadrado y a las correspondientes entalpías de gases quemados y no quemados; conceptualmente, esta entalpia perdida es una medida de la entalpia que se desperdicia con el gas que se ha fugado. Es posible asumir que tiene que haber una relación funcional entre la ecuación (2.11.18) y las pérdidas de masa, pero este trabajo no alcanza a cubrir ese aspecto.

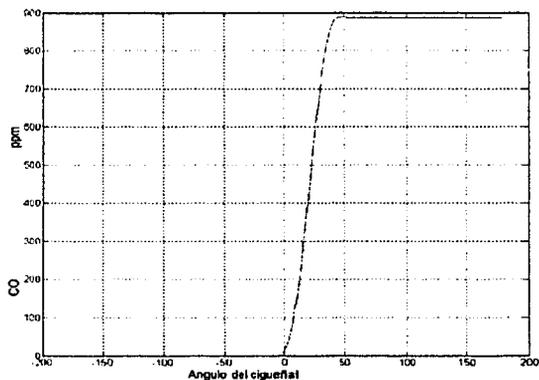


En esta interesante gráfica se observa la relación funcional que se va dando entre la presión existente dentro de la cámara y el trabajo que se va desarrollando.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Si se compara esta gráfica con la Fig. 2.5 de un ciclo Dual (que es de lo mejor que se tiene en cuanto a la solución analítica de un MCI), se verifica que, en lo medular, esta gráfica retrata de manera adecuada lo que sucede dentro de la cámara de combustión, faltando por graficar las etapas de expulsión y admisión de gases del ciclo.



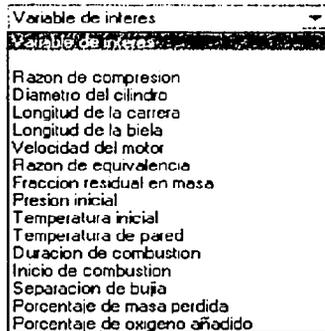
Se observa la producción de monóxido de carbono a medida que se va llevando a cabo la combustión; cuando ésta termina, se alcanza el equilibrio químico y se estabiliza su concentración en aproximadamente 880 ppm.

Buena parte de las gráficas mostradas tienen como uno de sus ejes el ángulo del cigüeñal; esto es únicamente como referencia para visualizar el «desarrollo» de la otra variable graficada a medida que se desplaza el pistón, pero no hay que perder de vista que éstas son gráficas representativas, ya que es posible realizar gráficas de cualquier variable en correspondencia con cualquier otra de ellas mismas.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Simulación con parámetro variable

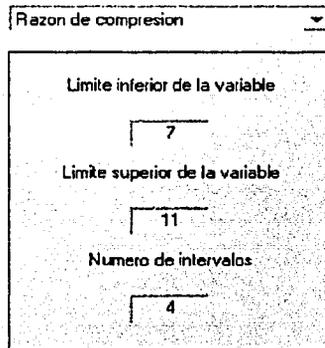
Cuando se elige la opción de simulación con parámetro variable, se muestra una persiana deslizable donde se debe seleccionar la variable que se desea ir variando durante la simulación; estas variables pueden ser alguna de las siguientes:



Variable de interés

- Variable de interés
- Razon de compresion
- Diametro del cilindro
- Longitud de la carrera
- Longitud de la biela
- Velocidad del motor
- Razon de equivalencia
- Fraccion residual en masa
- Presion inicial
- Temperatura inicial
- Temperatura de pared
- Duracion de combustion
- Inicio de combustion
- Separacion de bujia
- Porcentaje de masa perdida
- Porcentaje de oxigeno añadido

Posteriormente habrán de proporcionarse los *límites* entre los que se desea que varíe la variable seleccionada, así como el número de intervalos que se necesita evaluar entre tales límites. En el ejemplo mostrado, se seleccionó variar la Razón de Compresión entre los siguientes límites:



Razon de compresion

Límite inferior de la variable

7

Límite superior de la variable

11

Número de intervalos

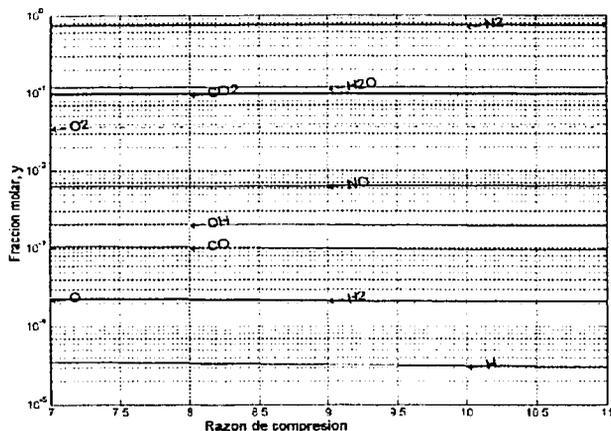
4

Una vez que se ha realizado la simulación, tomando como base los datos empleados en la simulación con parámetros fijos, se observa lo siguiente,

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Se observa algo que ya se discutía en la Sección 2.2: al aumentar la relación de compresión aumenta la eficiencia y la presión media efectiva.

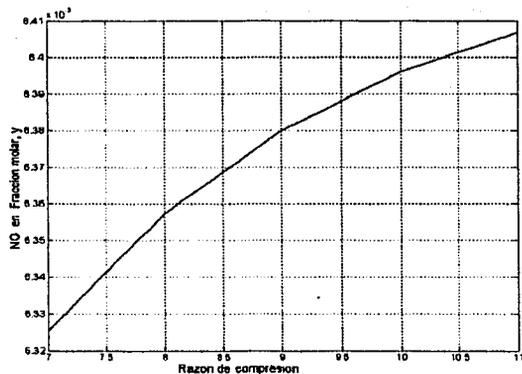
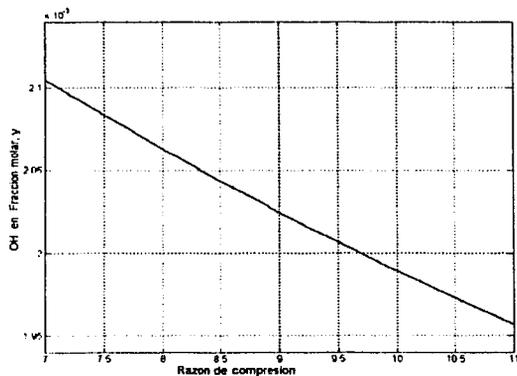
La opción de *Composición en el equilibrio* muestra la forma en que varía la composición de alguna o todas las especies en estudio cuando termina el proceso de expansión, es decir, en teoría, lo que se esperaría que se obtuviera como concentración a la salida del motor (expulsión de gases), respecto a la variable que se está modificando. Para este ejemplo, si se decide graficar *Todas* las especies se obtiene la siguiente gráfica:



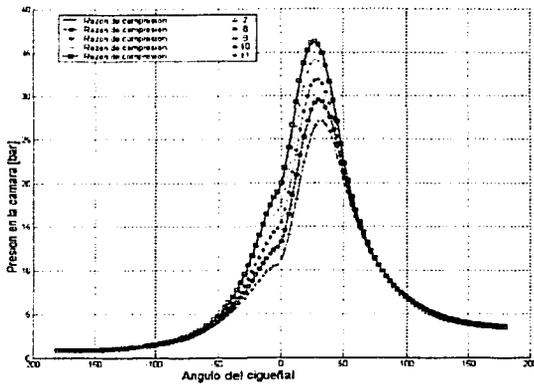
Aquí se muestra la variación, en fracción molar, de la concentración de las 10 especies de interés a medida que aumenta la razón de compresión.

Puede parecer que las especies no sufren variación alguna o, en su defecto, muy poca; esto es debido a que la gráfica es logarítmica y no se aprecian las variaciones absolutas de cada especie, por lo que es recomendable realizar las gráficas *en equilibrio* de cada especie por separado, donde sí se aprecian las variaciones absolutas en la concentración de cada especie.

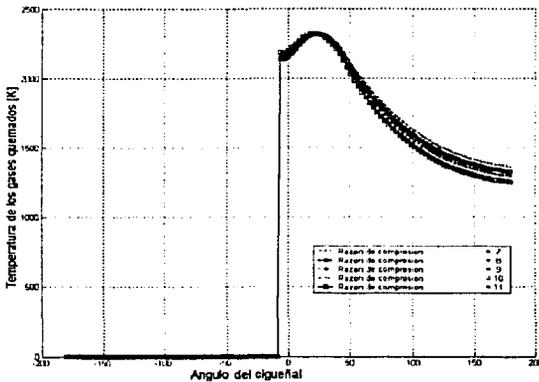
Para este mismo ejemplo, a continuación se muestran las gráficas *en el equilibrio* del OH y del NO por separado.



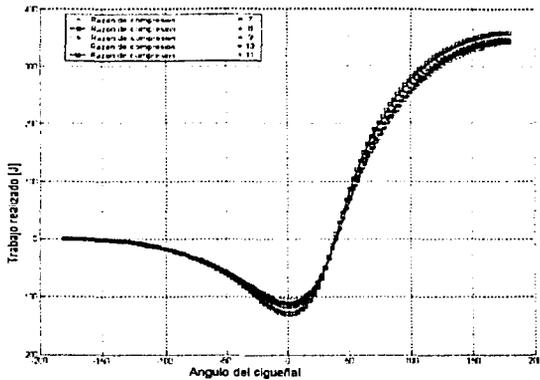
También es posible realizar gráficas del tipo de las que se hicieron en la *Simulación con parámetros fijos*; pero en esta ocasión reflejarán los cambios producto de la variable que se esté considerando. A manera de ejemplo para la simulación que se ha hecho, se tienen las siguientes gráficas.



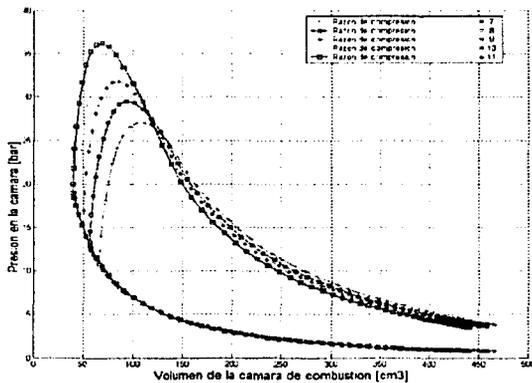
A medida que aumenta la razón de compresión, aumenta la presión dentro de la cámara.



Se observa que la temperatura de los gases quemados (gases de escape) es menor cuando es mayor la razón de compresión.



Se observa como aumenta el trabajo realizado a medida que aumenta la razón de compresión.



Esta gráfica complementa la anterior, ya que se sabe que el área bajo la curva P-V es el trabajo realizado y aquí se observa como esta área es menor cuando la razón de compresión es menor.

Estos son sólo algunos ejemplos de las gráficas que se puede obtener; concretamente, se ha ejemplificado sobre la base de una variación de la razón de compresión, sin embargo es posible variar cualquier otra variable y realizar las mismas gráficas, de esta forma se observa la dependencia sobre la variable de interés que tiene los distintos parámetros (y las emisiones) del motor simulado.

De tal forma, y luego de realizar distintas simulaciones variando cada uno de los parámetros de funcionamiento posibles, se realizó la siguiente tabla, que viene a ser un recuento de los resultados obtenidos con este trabajo.

Se lee de la siguiente forma: el símbolo \uparrow indica que, por ejemplo, al aumentar la duración de la combustión, aumentó también la temperatura de los gases quemados; mientras que \downarrow indica que, por ejemplo, al aumentar la temperatura inicial de los gases, disminuyó el trabajo realizado. Cuando se tiene el símbolo $=$, se indica que no existe (al menos en la simulación realizada) alguna dependencia entre las variables que relaciona.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La variable Al aumentar	Volumen	Presión	Temp. gases quemados	Temp. gases no quem.	Trabajo realizado	Calor perdido	Masa de la mezcla	Entalpía perdida	[CO ₂] ^a	[H ₂ O] ^a
Razón de compresión	↓	↑	↓	↑	↑	↓ ^b	↓	↓ ^b	↓ ^b	↓ ^b
Diámetro	↑	=	↓ ^b	↑	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↓	↑ ^c	↑ ^c
Longitud de carrera	↑	=	↓	=	↑ ^c	↑ ^c	↑	↓	↑	↑
Longitud de biela	=	=	=	=	=	↓ ^b	=	↑	↓ ^b	↑ ^b
Velocidad del motor	=	=	↑ ^b	↑	↑	↓	=	=	↓	↓
Relación de equivalencia	=	Máx $\phi \approx 1.1$	Máx $\phi \approx 1.1$	Máx $\phi \approx 1$	Máx $\phi \approx 1.1$	Máx $\phi \approx 1.1$	↑	=	Máx $\phi \approx 1$	Máx $\phi \approx 1.2$
Fración residual en masa	=	↓ ^b	↓ ^b	↓	↓	↓	↓ ^b	=	↑ ^b	↑
Presión inicial	=	↑ ^c	↑	=	↑ ^c	↓	↑	=	↑ ^c	↑
Temperatura inicial	=	↓	↑	↑	↓	↓	=	=	↓	↓
Temperatura de pared	=	=	↑	↑	=	↓	=	=	↓	↓
Duración de la combustión	=	↓ ^c	↑	↓	↓	↓	=	=	↑	↑
Inicio de la combustión	=	↓ ^c	↑	↓	↓	↓	=	=	↑	↑
Separación de la bujía	=	=	=	=	=	↑	=	=	Máx 2/3 radio	Máx 2/3 del radio
Masa perdida	=	=	=	=	↓ ^b	↓ ^b	↓	↓	↓ ^b	↓ ^b
Porcentaje de oxígeno	=	↑	↑	=	↑ ^b	↑ ^b	↑ ^b	=	↑ ^b	↑ ^b

^a Las concentraciones se dan en masa total

^b El aumento (o disminución) de la variable considerada es menor al 5% entre etapas

^c El aumento (o disminución) de la variable considerada es apreciable, mayor al 15% entre etapas

La variable	[N ₂] ^a	[O ₂] ^a	[CO] ^a	[H ₂] ^a	[H] ^a	[O] ^a	[OH] ^a	[NO] ^a	Eficiencia	Imcp
Al aumentar										
Razón de compresión	↓ ^b	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↑	↑
Diámetro	↑ ^c	↑	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑	↑
Longitud de carrera	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑ ^b	↑ ^b
Longitud de biela	↓	↓	↑	↑ ^b	↑ ^b	↑	↓	↑	↑ ^b	↑ ^b
Velocidad del motor	↓	↓	↑	↑	↓	↓	↑ ^b	↑	↑ ^b	↑ ^b
Relación de equivalencia	↓	↓	↑	↑ ^c	Máx $\phi = 1.1$	Máx $\phi = 1$	Máx $\phi = 1$	Máx $\phi = 1.1$	↓ ^c	Máx $\phi = 1.1$
Fracción residual en masa	↓	↓	↓ ^c	↓ ^c	↓ ^c	↓ ^c	↓ ^c	↓ ^c	↑	↓
Presión inicial	↑ ^c	↑	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑ ^c	↑	↑
Temperatura inicial	↓	↓	↓ ^b	↓ ^b	↑	↑	↑	↓ ^b	↓	↓
Temperatura de pared	↓ ^b	↑	↑ ^b	↑ ^b	↑	↑	↑ ^b	↑ ^b	↑ ^b	↑ ^b
Duración de la combustión	↑	↓	↓	↓	↓	↓ ^c	↓	↓	↓ ^c	↓
Inicio de la combustión	↑	↓	↓	↓	↓	↓ ^c	↓	↓	↓ ^c	↓ ^c
Separación de la bujía	Máx 2/3 del radio	Mín 2/3 del radio	Mín 2/3 del radio	Mín 2/3 del radio	Mín 2/3 del radio	↓	↓	Mín 2/3 del radio	↓	↓
Masa perdida	↓	↓	↓ ^b	↓ ^b	↓ ^b	↓ ^b	↓	↓ ^b	↓	↓
Porcentaje de oxígeno	↓ ^b	↑	↑	↑	↑ ^c	↑ ^c	↑	↑	↓ ^b	↓ ^b

^a Las concentraciones se dan en masa total

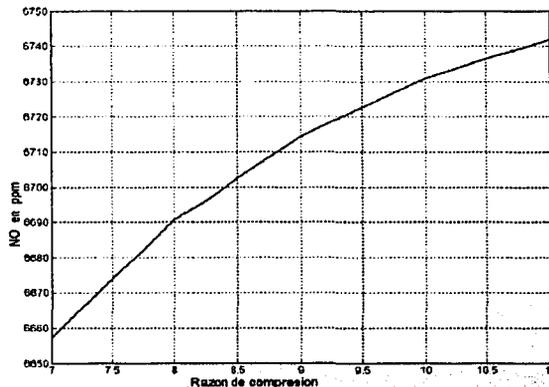
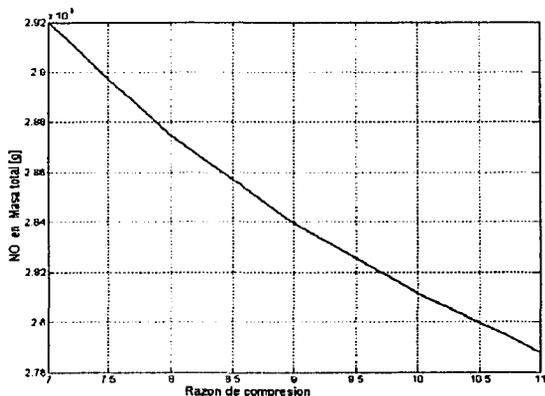
^b El aumento (o disminución) de la variable considerada es muy pequeño en valor absoluto, casi despreciable

^c El aumento (o disminución) de la variable considerada es apreciable en valor absoluto

Los órdenes entre los que se varió el parámetro en la tabla anterior fueron los siguientes:

- Razón de compresión 7 – 11.
- Diámetro de la cámara de combustión 3.5 – 5 cm
- Longitud de la carrera 6 – 11 cm
- Longitud de la biela 7 – 12 cm
- Velocidad del motor 2500 – 50 00 rpm
- Relación de compresión 0.7 – 1.5
- Fracción residual en masa 5 – 15 %
- Presión inicial 0.7 – 1 bar
- Temperatura inicial 300 – 350 K
- Temperatura de pared 350 – 450 K
- Duración de la combustión 40 – 70 °
- Inicio de la combustión -15 – 10°
- Separación de la bujía 0 – 4 cm
- Masa perdida 0 – 3 %
- Porcentaje de oxígeno 0 – 5 %

Se decidió exponer la concentración de los compuestos en *masa total* ya que es una medida de las emisiones «reales» que emanarán del motor, puesto que, por ejemplo, las ppm son una medida relativa de la concentración de la especie en cuestión y se constató que cuando se realizan simulaciones variando algunos parámetros y con un valor de masa pérdida distinto a cero, se obtienen casos como el siguiente



Aquí se observa como, mientras que en realidad se emiten menos gramos de NO del motor, la medida relativa de emisión con respecto a las demás especies (ppm) aumenta, lo que podría conducir a conclusiones erróneas.

Las conclusiones derivadas de la tabla anterior se dan en el Capítulo 6.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

CAPÍTULO 5

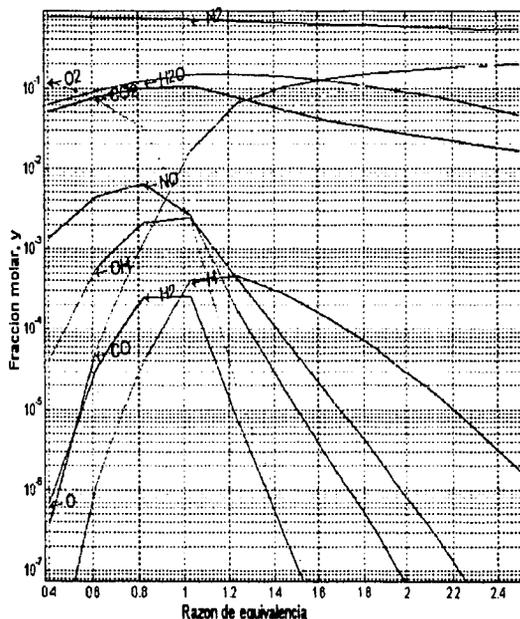
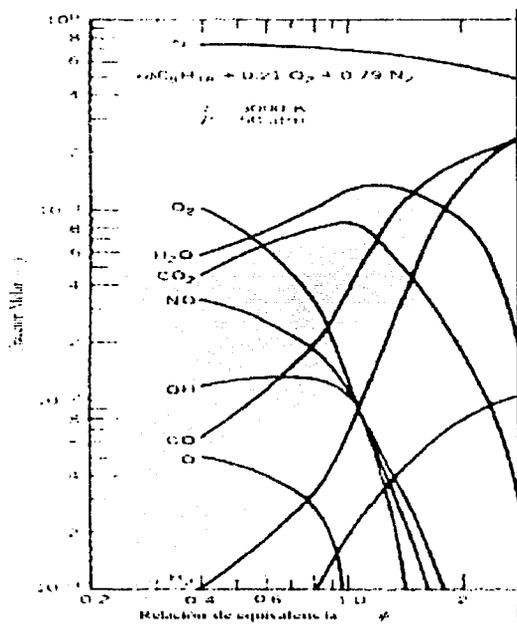
Validación de Resultados

No sería importante la realización (y los resultados obtenidos) de este trabajo si no se pudiera sustentar en otros trabajos que sobre el tema se hayan hecho.

Por ello es de enorme importancia poder validar los resultados obtenidos de las simulaciones, comparándolos con datos obtenidos por fuentes independientes (principalmente resultados experimentales) y esperar que la comparación, dentro de cierto rango de error, sea aceptable.

Primer ejemplo. Se comparan las gráficas obtenidas mediante la simulación del motor empleado en el Capítulo 4 con otra, realizada por Ferguson [9] que se mencionó en el Capítulo 2 (Fig. 2.10).

En la discusión hecha para la Fig. 2.10 se mencionó que para razones de equivalencia mayores a 4, comienzan a surgir una serie de especies que no se consideraron en este trabajo (carbón sólido C(s), cianuro HCN, acetileno C₂H₂ y metano CH₄). De hecho, la Fig. 2.10 fue la que dio la pauta para únicamente considerar 10 especies en la simulación. En la gráfica se observa que para $\phi \approx 3$ ya se comienza a tener trazas de HCN y C₂H₂, entre otros; de tal forma, simulando un motor con variación de la razón de equivalencia entre 0.4 - 2.5 se obtuvieron los siguientes resultados (comparativos).



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Es necesario hacer algunas precisiones. La simulación de Ferguson, hecha en un programa de la NASA llamado TRANS72, fue para la composición en el equilibrio de octano (C_8H_{18}) con aire a una temperatura de 3000 K y una presión de 50 atm. Nuestra simulación es para gasolina (que se consideró C_7H_{17}) y no a una temperatura y presión únicas, sino a aquellas que se dan al final del ciclo de combustión de un MCI; para este ejemplo, las temperaturas y presiones variaron desde 1050 K y 3 bar para $\phi = 0.4$, ascendiendo hasta 1500 K y 5.3 bar para $\phi = 1.1$ y luego descendiendo hasta 800 K y 3.8 bar para $\phi = 2.5$. Esto quiere decir que no era de esperarse que las gráficas resultaran iguales, pero, como se observa, las tendencias en cuanto a la concentración de cada especie son bastante aceptables. Se observa que para las siguientes especies: N_2 , O_2 , H_2O y CO_2 , el parecido en las gráficas (y las concentraciones) es aceptable; para CO y H_2 la tendencia de formación es similar y las divergencias aparecen para NO , OH , O y H . Estos datos, como primer resultado, son alentadores.

Para la validación experimental, se cuenta con los resultados obtenidos de dos tesis anteriores:

Carburación Oxigenada: un método para reducir emisiones en un motor de combustión interna a gasolina. Tesis de Licenciatura. UNAM, 1998, presentada por el Ing. Edgar Villaseñor Franco.

Estudio de la eficiencia en un motor de combustión interna con combustión oxigenada. Tesis de Licenciatura. UNAM, 2002, presentada por el Ing. Jesús Armando Aguillón Godínez.

Cabe resaltar lo siguiente: el objetivo de Villaseñor [32] es probar que con una carburación oxigenada se reducen las emisiones de NO_x del motor; resultado que obtiene después de realizar varias pruebas con un motor. Para Aguillón [33] el objetivo es el estudio de la eficiencia del motor con una combustión oxigenada, sin embargo, el autor realiza gráficas donde se observa que las emisiones de NO_x aumentan a medida que aumenta el contenido de oxígeno. Claramente se tienen dos trabajos donde los resultados son distintos. Luego de hacer varias simulaciones con el programa diseñado, se ha llegado a la conclusión de que está en concordancia con Aguillón

De las conclusiones de Villaseñor se rescata lo siguiente:

“ El análisis de los resultados indicó que al suministrar 21.789% de oxígeno en promedio para la carburación, es decir, 0.39 m^3/h de oxígeno inyectado, se obtienen reducciones de óxidos de nitrógeno en promedio de 37.65%, principalmente debido a la disminución de la relación nitrógeno/oxígeno, es decir, debido a dicho suministro de oxígeno”

El 37.65% de reducción es con relación a la combustión sin inyección de oxígeno.

Si se compara el 21.789% de oxígeno extra anterior con la ecuación (2.8.18) se tiene que

$$0.21 + 0.79\%O_x = 0.21789$$

de donde, resolviendo, se llega a $\%O_x = 1\%$. Es decir, lo que para Villaseñor representa 0.39 m^3/h de oxígeno inyectado al carburador, para nuestra simulación representa un 1% de oxígeno añadido a la mezcla.

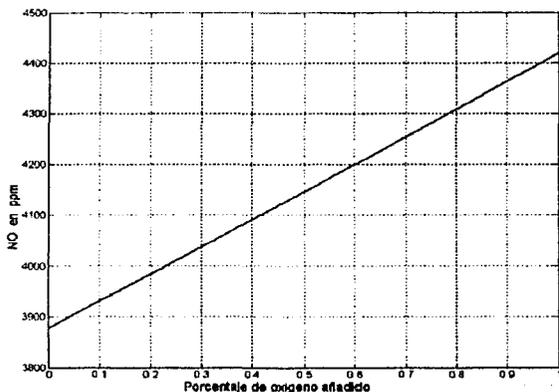
Los parámetros de funcionamiento del motor que se simuló, son los que se emplearon en el Capítulo 4, es decir, los siguientes:

- Razón de compresión: 9
- Diámetro del cilindro [cm]: 8.6

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- Longitud de la carrera [cm]: 6.91
- Longitud de la biela [cm]: 9
- Velocidad del motor (rpm): 3000
- Razón de equivalencia (ϕ): 1
- Fracción residual en masa [0-100%]: 8
- Presión inicial [bar]: 0.85
- Temperatura inicial [K]: 300
- Temperatura de pared [K]: 380
- Ángulo que dura la combustión: 50
- Ángulo de inicio de combustión [-180°,180°]: -5
- Separación de la bujía [cm]: 0
- Porcentaje de masa perdida [0-100%]: 0
- Paso angular: 2

Comparemos la conclusión dada por Villaseñor con nuestra simulación, en la siguiente gráfica



Para nuestra simulación, $0.39 \text{ m}^3/\text{h}$ de oxígeno inyectado representan un aumento de cerca del 14% en los NOx.

También de las conclusiones de Villaseñor se extrac el siguiente párrafo

“Con base en las pruebas realizadas y los resultados obtenidos de las mismas, se observó lo siguiente: suministrando al carburador de un motor de combustión interna, aire con porcentajes mayores al ambiental de 21%, se favorece la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno (...) Para lograr lo anterior se necesita que el motor trabaje en condiciones de deficiencia de aire, porque de lo contrario la temperatura del lubricante del motor alcanzará temperaturas por arriba de los 100°C (se pudo observar que la temperatura del aceite, al trabajar en condiciones de exceso de aire atmosférico e inyectando oxígeno al carburador, obtuvo dichos valores de temperatura), lo que afecta el funcionamiento del motor, poniéndolo en peligro y aumentando las emisiones de óxidos de nitrógeno en lugar de disminuirlas”

Efectivamente, el programa que se realizó no tiene modo de condicionar el acceso de aire al motor, por lo que las simulaciones son con exceso de aire, aumentando la concentración de NOx.

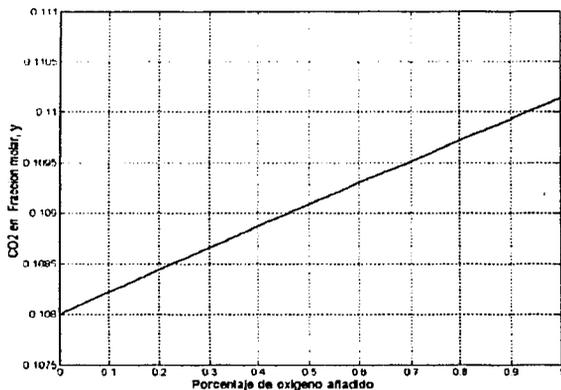
Para las demás especies, Villaseñor menciona lo siguiente

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

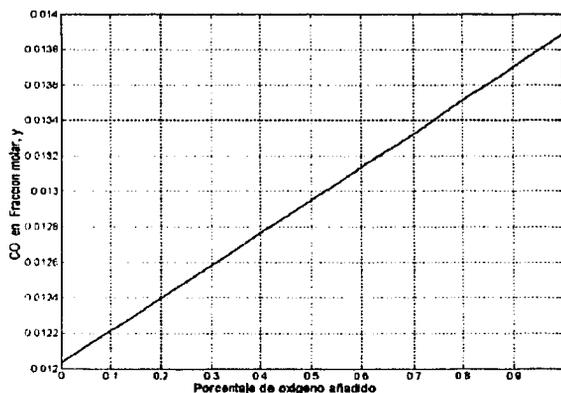
"(...) se aumentaron en 12.15% las emisiones de dióxido de carbono (al inyectar 0.39 m³/h de oxígeno al carburador hasta alcanzar 21.789% de oxígeno en el aire), principalmente por el aumento de oxígeno y la disminución de la temperatura del motor y el gasto de combustible. Las emisiones de monóxido de carbono se incrementaron en un 28.14%, con la misma cantidad de oxígeno en el aire, debido a que casi todo el oxígeno extra que existió sirvió para dar una combustión más completa, pero éste sólo quemó principalmente a los hidrocarburos y formó dióxido de carbono, pero no pudo quemar el monóxido de carbono"

"Las emisiones de oxígeno aumentaron también considerablemente de 9.2825% a 10.3263% (11.25% de incremento) para el caso de 21.789% de oxígeno en el aire. Si bien este resultado a simple vista no indica más que efectivamente hay un aumento de oxígeno en el aire, tiene mayores explicaciones. Si se desea utilizar un convertidor catalítico sin control por computadora, ésta es una buena opción ya que de esta forma se está asegurando un exceso de oxígeno a la entrada del convertidor, que garantiza su buen funcionamiento"

Al margen de las explicaciones adicionales dadas por Villaseñor, lo que ahora interesa son los valores numéricos obtenidos. En las simulaciones realizadas se obtiene lo siguiente

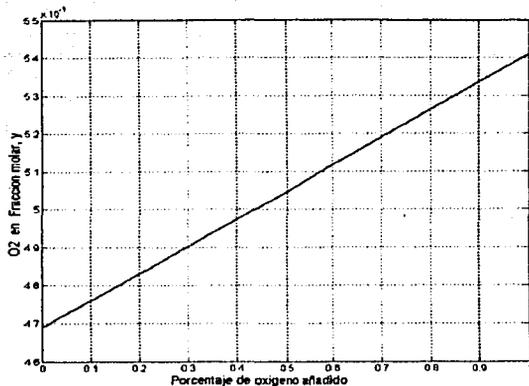


El aumento en las emisiones de CO₂, según nuestra simulación, es del 3%



El aumento en las emisiones de CO, según resultados de nuestra simulación, es del 17%

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



El aumento en las emisiones de O₂, según nuestra simulación, es de 16%.

Aunque los valores numéricos en cuanto al aumento en concentración de una u otra especie parecen ser muy distintos de los obtenidos experimentalmente, hay que tomar en cuenta que lo que reportó Villaseñor es únicamente un promedio de los resultados que arrojaron varias pruebas. Estas pruebas consistían en variar las características de operación del motor tales como: la velocidad de crucero, el par del motor, la carga del motor, etc., mientras que en la simulación se considera que se está en «régimen permanente». Así pues, lo interesante de estas gráficas es que reflejan fehacientemente las tendencias de funcionamiento que observó experimentalmente Villaseñor.

Para Aguillón [33], las gráficas presentadas se basan en la definición que se hace del siguiente número adimensional

$$\pi = \left(N \sqrt{\frac{G_C}{W_b}} \right)^3 V \frac{PC \cdot G_C}{W_b} = \left(N \sqrt{\frac{G_C}{W_b}} \right)^3 \frac{PC \cdot G_C}{Pme}$$

donde:

- N : el régimen de giro del cigüeñal (RPM)
- G_C : gasto de combustible
- W_b : potencia al freno
- V : cilindrada
- PC : poder calorífico del combustible
- Pme : presión media

No fue posible, con los datos que se necesitan para las simulaciones que se realizaron, poder relacionar todas estas variables; sin embargo, las que si se pueden relacionar son N la velocidad del motor, W_b se puede relacionar con el trabajo realizado (potencia = trabajo/tiempo) y Pme con la $Imep$. Por otra parte V se puede variar con el valor del diámetro.

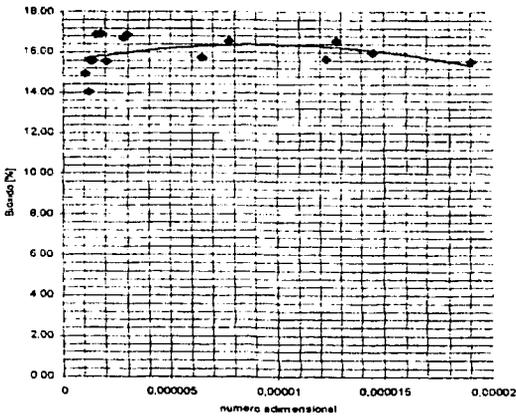
En esta ocasión, los parámetros de funcionamiento del motor son los siguientes

- Razón de compresión: 8
- Diámetro del cilindro [cm]: 6.46
- Longitud de la carrera [cm]: 4.43
- Longitud de la biela [cm]: 7

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- Velocidad del motor (rpm): 3600
- Razón de equivalencia (ϕ): 0.9
- Fracción residual en masa [0-100%]: 8
- Presión inicial [bar]: 1
- Temperatura inicial [K]: 320
- Temperatura de pared [K]: 360
- Ángulo que dura la combustión: 50
- Ángulo de inicio de combustión [-180°,180°]: -5
- Separación de la bujía [cm]: 0
- Porcentaje de masa perdida [0-100%]: 0
- Paso angular: 3

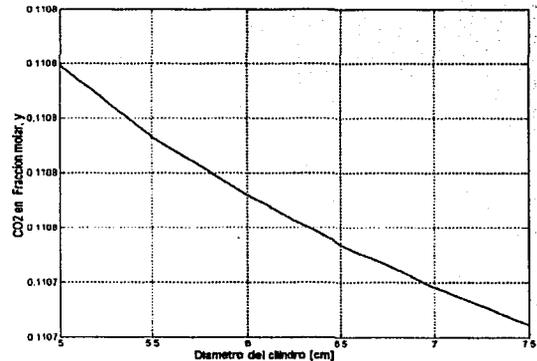
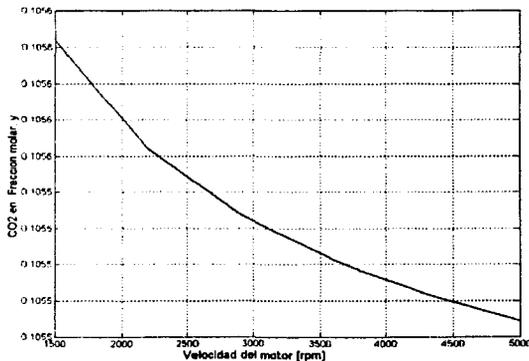
A continuación se analizan las gráficas obtenidas por Aguillón y se comparan con los resultados de las simulaciones realizadas (en algunos casos se cita el enunciado extraído de Aguillón).



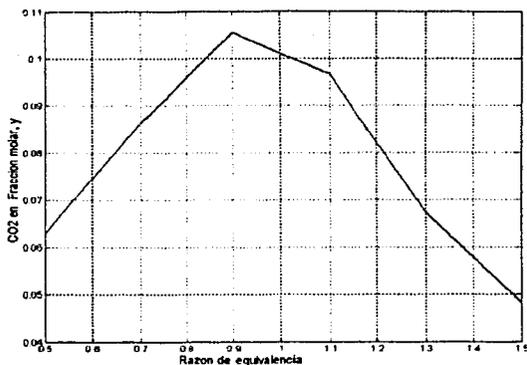
Gráfica Emisiones de CO₂ vs π

“En la gráfica se pueden observar emisiones de CO₂ bajas a un número adimensional bajo, lo cual se tiene a bajas revoluciones, en cilindradas pequeñas, bajo poder calorífico del combustible y mezclas pobres”

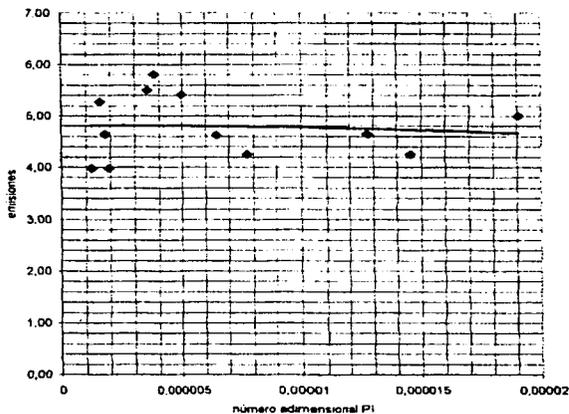
Las «bajas emisiones de CO₂» al parecer no lo son tanto, ya que la gráfica muestra que estas emisiones se mantienen alrededor del 16%, es decir, hablamos de que hay una «cantidad constante» de emisiones de CO₂, que es lo que las simulaciones realizadas muestran.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

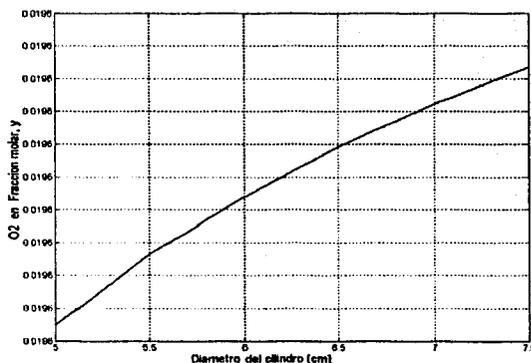
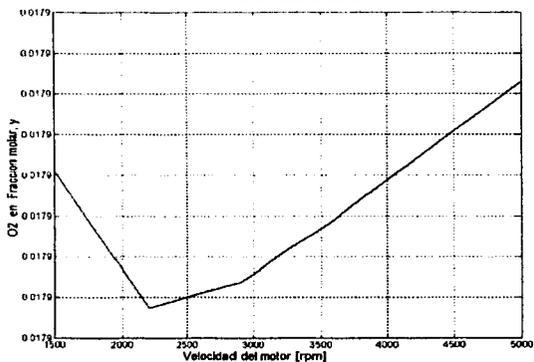


Como se puede observar, al aumentar la velocidad del motor y la cilindrada (el diámetro) «disminuye» la concentración de CO₂, pero lo hace de forma tan pequeña (véase los valores del «eje y» de las gráficas) que para fines prácticos es posible decir que se mantiene constante. Por otra parte, cuando se tienen mezclas pobres, en efecto, existen bajas emisiones de CO₂ pero con mezclas «muy ricas», con $\phi > 1.4$ se tiene concentraciones menores. En suma, se puede decir que los resultados de la simulación son bastante aproximados a los obtenidos experimentalmente.

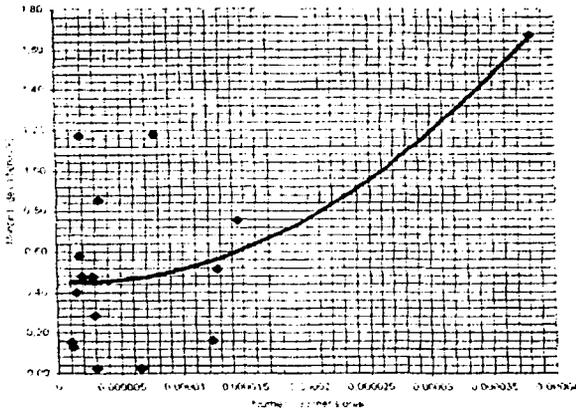


Gráfica Emisiones de O₂ vs π

Es de esperarse, como resultado de esta gráfica, que con los aumentos de RPM y del diámetro, aumenten las emisiones de O₂ (ya que $\pi \propto N^3$ y $\pi \propto V$) o, cuando menos, se mantengan «cuasi constantes», que es lo que se observa a continuación.

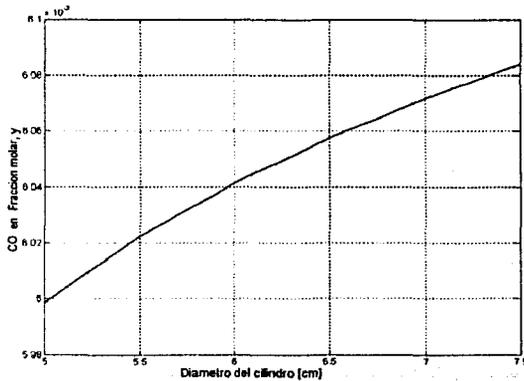
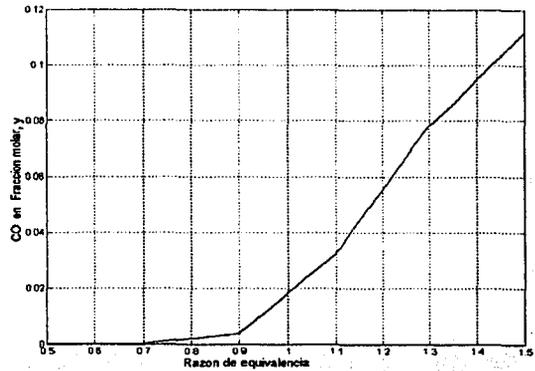
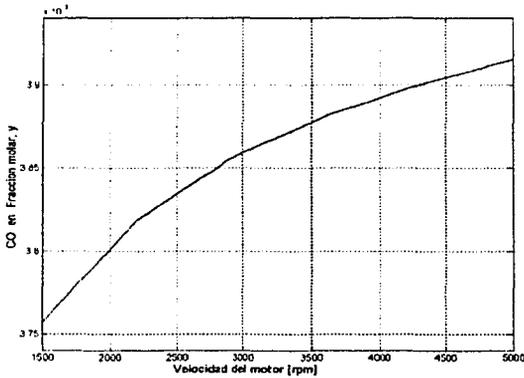


TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



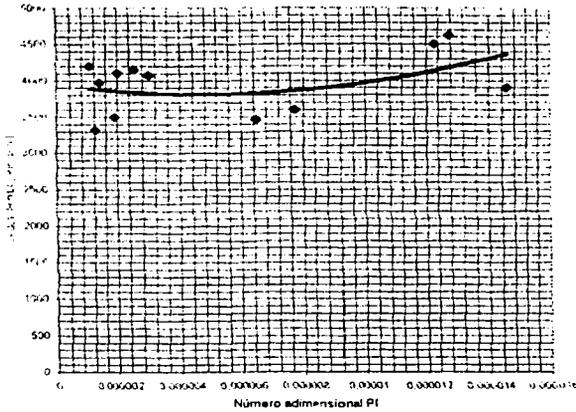
Gráfica Emisiones de CO vs π

“(…) de descarse, se lograrían bajas emisiones de monóxido de carbono a bajas revoluciones, mezcla pobre y cilindradas pequeñas”



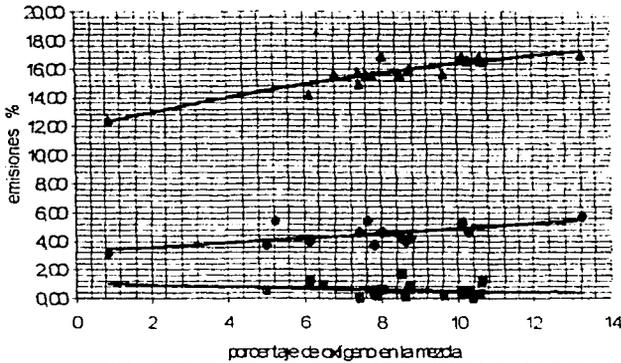
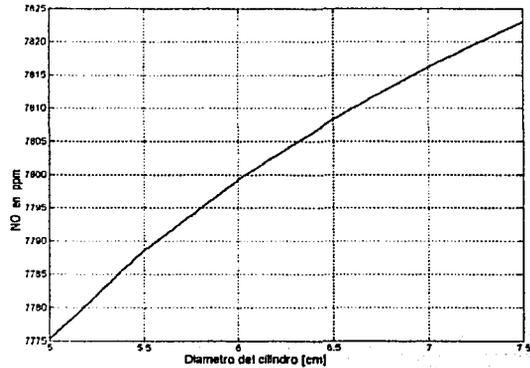
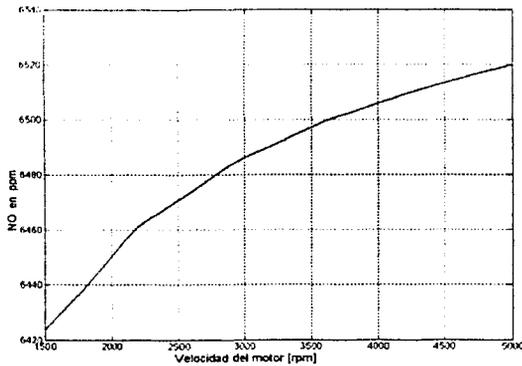
Se observa lo que menciona Aguillón, para bajas revoluciones, mezclas pobres y cilindradas (diámetros) pequeñas, se tienen bajas emisiones de CO con tendencia a incrementarse.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Gráfica Emisiones de NO vs π

Se esperaría que con los aumentos de RPM y del diámetro, aumenten las emisiones de NO, aunque no de manera tan drástica, que es lo que se observa a continuación.

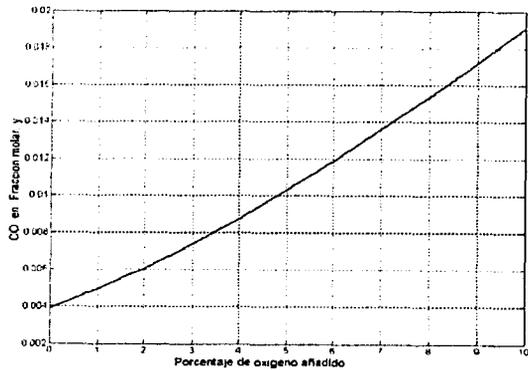
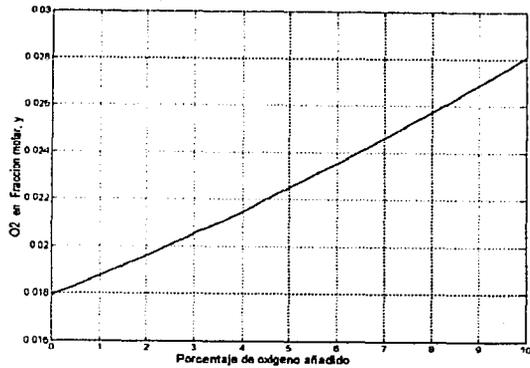
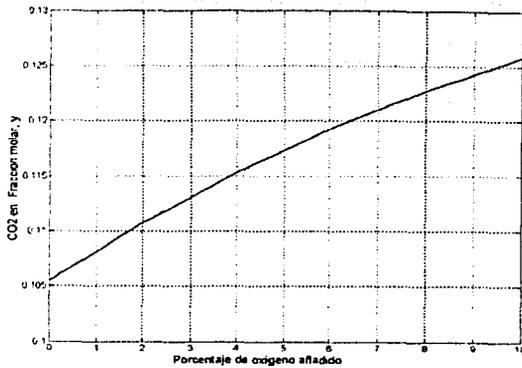


Gráfica Emisiones de O_2 , CO y CO_2 vs % Oxígeno en la mezcla

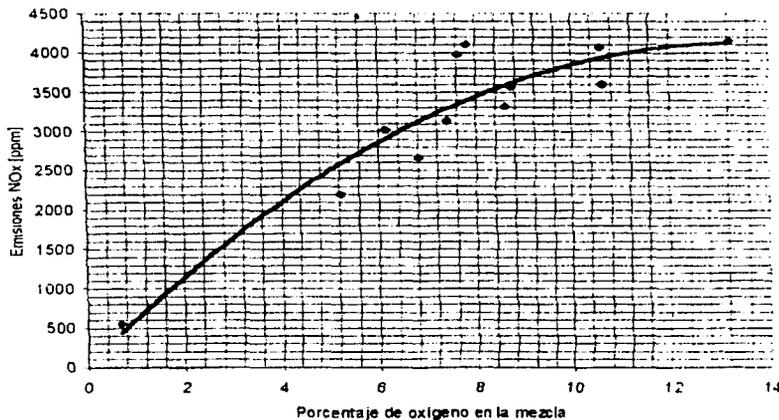
Esta gráfica si se puede comparar directamente con las gráficas que se obtienen de la simulación; los resultados se muestran a continuación.

● oxígeno (%) ■ monóxido (%) ▲ dióxido (%)
 — Polinómica (dióxido) (%) — Polinómica (oxígeno) (%) — Polinómica (monóxido) (%)

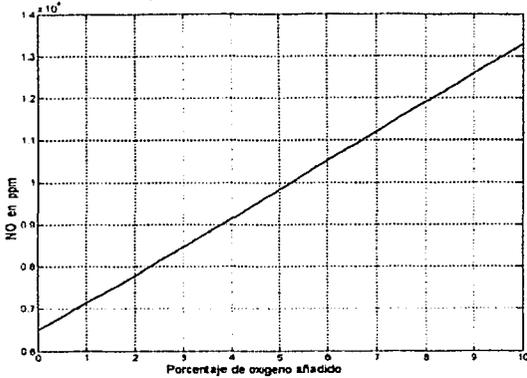
TESIS CON FALLA DE ORIGEN



La concordancia entre estas gráficas es bastante demostrativa. Así, se observa que la simulación predice $[CO_2] = (10.5 - 12.5)\%$, mientras que Aguillón obtiene, experimentalmente, $[CO_2] = (12 - 16)\%$. Para el O_2 se obtiene, con la simulación $[O_2] = (1.8 - 2.8)\%$ contra $(3.5 - 5)\%$ de [33]. Por último, para el CO, se tiene $[CO] = (0.4 - 1.9)\%$ contra $(1 - 0.3)\%$ de Aguillón.



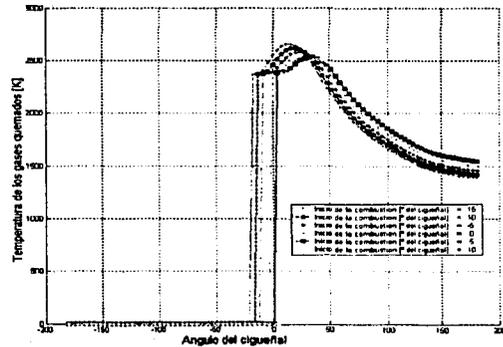
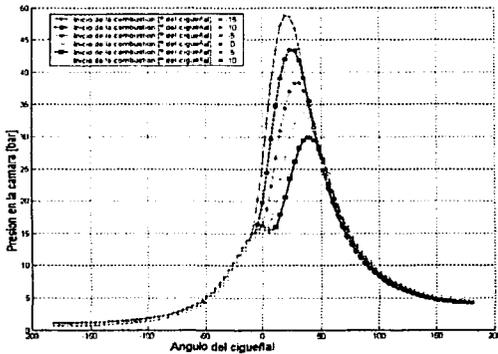
Gráfica Emisiones de NO vs % Oxígeno en la mezcla

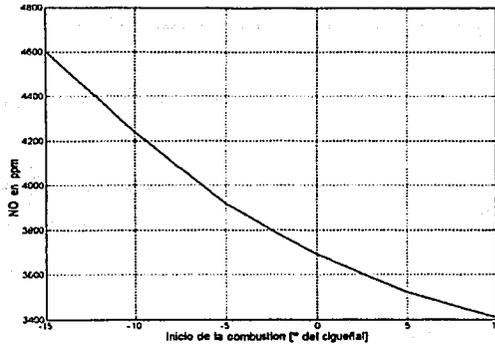


Nuevamente se observa gran concordancia entre las tendencias de formación de NO obtenidas por medio de la simulación y la obtenida por medios experimentales por Aguillón.

Finalmente, veamos si es posible obtener los resultados predichos en el Capítulo 1 (p 19, Modificando el avance). Se menciona que si se incrementa el tiempo de avance (inicio de la combustión, chispazo) se reducirán los picos de presión, de temperaturas de gases quemados y, como consecuencia, de NO.

Las gráficas obtenidas, empleando los datos de simulación derivados de Villaseñor [32], fueron las siguientes,





En efecto, si la combustión comienza antes del Punto Muerto Superior, PMS, el pico de presión es muy elevado, propiciando un pico de temperatura de gases quemados también elevado y el consecuente aumento de NO. También se observa que una combustión después del PMS reduce significativamente las emisiones de NO, pero se merma de manera considerable el pico de presión (y el trabajo realizado por el ciclo), lo que se traduce en una disminución de eficiencia. Por lo anterior, se deduce que es recomendable tener el «chispazo» cerca del PMS.

Después de hacer el análisis de las gráficas anteriores y haciendo una revisión de la tabla mostrada en el Capítulo 4, es posible obtener las conclusiones enunciadas en el siguiente capítulo.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

BIBLIOGRAFÍA DEL CAPÍTULO 5

- [9] Ferguson, Colín R. *Internal combustion engines, applied thermosciences*. New York: John Wiley & Sons, 1986. 550 pp.
- [32] Villaseñor Franco, Edgar. *Carburación Oxigenada: un método para reducir emisiones en un motor de combustión interna a gasolina*. Tesis de Licenciatura. UNAM, 1998.
- [33] Aguillón Godínez, Jesús Armando. *Estudio de la eficiencia en un motor de combustión interna con combustión oxigenada*. Tesis de Licenciatura. UNAM, 2002.

CAPÍTULO 6

Conclusiones y Trabajo Futuro

El objetivo fundamental de este trabajo fue simular numéricamente las etapas de compresión, combustión y expansión, de un Motor de Combustión Interna. Esta simulación, conseguida mediante un conjunto de subrutinas realizadas en Matlab V6 que, en conjunto, toman el nombre de CombustMCI, nos ha permitido, a partir de algunos datos operacionales del motor que nos interese, tener un conocimiento de los parámetros importantes de su funcionamiento tales como presión a lo largo del ciclo, trabajo realizado, eficiencia de las etapas, presión media efectiva, etc., además de la composición de la mezcla dentro de la cámara (y, presumiblemente, de los gases de escape) que incluye 10 especies químicas.

Por la naturaleza misma del programa realizado (CombustMCI) y debido a que algunos de los datos necesarios para su ejecución son características geométricas y mecánicas del motor (diámetro de la cámara, longitud de la carrera, longitud de la biela, razón de compresión y posición de la bujía), es posible afirmar que CombustMCI es aplicable a cualquier motor encendido por chispa y de movimiento alternativo que sea de interés.

El programa realizado, CombustMCI, funciona satisfactoriamente dentro de los rangos de operación en los que se desarrollo el trabajo teórico (recordemos la Fig. 2.10 que sirvió de base para determinar las 10 especies con que se trabajó; en ella se observa que para $\phi > 3$ tenemos presencia de ciertos compuestos que no se tomaron en cuenta, así que para simulaciones por encima de este valor los resultados serían erróneos) y los resultados que de él se obtienen están en plena concordancia con las observaciones experimentales realizadas. Así, es posible operarlo con el conocimiento de que obtendremos resultados precisos.

Un resumen de los resultados derivados de este trabajo es la tabla de las páginas 116 y 117. En ella se observan las tendencias de las diversas variables en estudio: desde las características mecánicas (presión, trabajo, etc.) y térmicas (temperaturas de gases quemados y no quemados, calor perdido, etc.), hasta las químicas (concentraciones en el equilibrio de las diversas especies) con respecto a la variación de los parámetros operativos del motor. Podría decirse que esta tabla condensa la consecución de los objetivos propuestos para la realización de este trabajo; por ello resulta tan importante.

Sin embargo, las tendencias mostradas en esta tabla están sujetas a demostración experimental, ya que los datos de los que me serví para hacer la validación de resultados no cubren todo el espectro de posibilidades que se resumen en ella. Así, por ejemplo, sería interesante ver si los resultados obtenidos para el calor perdido se corresponden con la realidad, para que de esta forma se pudieran emplear en la determinación de la transferencia de calor neta del motor al lubricante.

No obstante, y a pesar de lo anterior, si es posible enumerar varias conclusiones acertadas y verificadas que se derivan de dicha tabla, tales como las siguientes:

— Al aumentar la relación de compresión disminuyen las emisiones (en general), pero se registra un incremento relativo en las emisiones de NO y se incrementa la eficiencia del motor, sin embargo, se pueden presentar problemas de pre-ignición y cascabeleo. Los motores actuales funcionan con relaciones de compresión de 8:1 - 8.5:1.

— Al aumentar el diámetro de la cámara se incrementan las emisiones (en base másica), debido a que la masa total de mezcla aspirada es mayor; sin embargo, se observa un incremento de eficiencia

— La longitud de la carrera y de la biela tienen muy poca influencia en cuanto a emisiones y eficiencia, ya que aunque en algunas ocasiones aumentan o disminuyen los valores de éstos, no lo hacen en forma apreciable.

— La velocidad de motor es un parámetro de gran importancia; cuando aumenta, la eficiencia aumenta de manera considerable, pero también se registra un incremento en las emisiones de NO y CO.

— Otro parámetro muy importante es la relación de equivalencia, se observa que las emisiones de CO y H₂ aumentan conforme se aumenta la relación de equivalencia, mientras que para otras especies como CO₂, H₂O, H, O, OH y NO, se registran «picos» máximos alrededor del valor estequiométrico. También algunas propiedades registran estos máximos (presión, temperatura de gases quemados y no quemados, trabajo y calor perdido). La eficiencia disminuye al aumentar la relación de equivalencia. Se sugiere trabajar el motor cerca de la relación estequiométrica para lograr, de alguna forma, conciliar todas las ventajas y desventajas presentadas.

— La fracción residual en masa, esa pequeña cantidad de masa (gases quemados) que se conservan en la cámara aún después de la expulsión de gases es, de alguna forma, similar a que se recircularan gases de escape, ya que también esta fracción residual consiste de gases inertes que no interfieren con la combustión y se comprueban las predicciones hechas para este tipo de trabajo del motor, a saber, se reducen las emisiones de NOx (principal objetivo de esta práctica) pero también se registran los efectos negativos como lo es la reducción de potencia (trabajo útil e Imcp); sin embargo, hecho curioso, se observa un incremento en la eficiencia del motor.

— El aumento de presión inicial tiene un efecto similar al que se consigue con un motor turbocargado. Al ser mayor la presión al inicio de la carrera de compresión, se alcanzan picos de presión más elevados, con el consecuente aumento de la temperatura de gases quemados y la mayor producción de emisiones contaminantes, principalmente NOx. Desde luego, se tiene la ventaja de que aumenta de manera considerable la potencia del motor (el trabajo útil y la Imcp).

— El aumento de la temperatura al inicio de la carrera de compresión produce una apreciable disminución de la eficiencia sin que se registre un decremento apreciable en las emisiones contaminantes.

— La mayor contribución que aporta el aumentar la temperatura de pared consiste en disminuir las pérdidas de calor.

— La duración de la combustión es un término muy importante, ya que si aumenta se tiene una reducción importante en emisiones contaminantes ya que tienen más tiempo de disociarse y alcanzar condiciones de equilibrio más cercanas a la relación estequiométrica; pero, por otra parte, el aumento de esta duración propicia disminución en las propiedades mecánicas de relevancia, como la disminución del trabajo útil y de la eficiencia.

— Uno más de los factores importantes que afectan en las emisiones es el momento del inicio de la combustión, sin que por ello resulte afectada la eficiencia. Así, podemos decir que es recomendable comenzar la combustión (chispazo) instantes antes del PMS.

— La separación de la bujía observa patrones de comportamiento importantes. Así, resulta que cuando se coloca la bujía alrededor de los 2/3 del radio de la cámara, las emisiones se reducen de manera sustancial, resultando una pequeña disminución de la eficiencia del motor que no se considera tan importante.

— El porcentaje de oxígeno añadido, tema central de este trabajo, aumenta la temperatura de los gases (y por tanto el desgaste) y aumenta las emisiones de NO. Esto era de esperarse, ya que si bien es cierto que existe, en proporción, menor cantidad de N₂, existe a la par, mayor cantidad de O₂ con el cual el N₂ puede reaccionar, aunado con que la temperatura de los gases es mayor, provocando mayor disociación. Pudo observarse que también aumentan las emisiones (y por tanto el contenido en concentración) de O y O₂, lo que propicia en mayor grado la formación de NO.

A pesar de los logros alcanzados, estoy consciente que el programa está, en el mejor de los casos, incompleto, por lo que a continuación cito algunas recomendaciones que pueden servir para mejorarlo, con vistas a obtener un modelo matemático que sea mucho más preciso y cercano a la realidad.

Es posible complementarlo con las etapas del motor, agregándole los ciclos faltantes, el de expulsión y el de admisión de gases, y de esa forma podemos «sustituir» los bancos de trabajo de motores de combustión interna.

Por otra parte, a lo largo del trabajo realizado, se hicieron ciertas suposiciones que, como se observa con los datos que se validaron, fueron bastante acertadas pero que considero que se pueden sustituir con consideraciones de índole experimental, mucho más apegadas al proceso real de funcionamiento del motor, entre ellas, las siguientes:

— Las funciones que relacionan el suministro de calor al motor, la llamada ley de quemado, ecuaciones (2.6.1) y (2.6.2), son empíricas, por lo que sería interesante sustituirla con una correlación que introduzca en la simulación factores como el gasto de combustible al motor y el poder calorífico del mismo.

— Sería deseable ampliar el alcance de la ecuación (2.8.18) para poder introducir otras especies químicas de conocido interés, entre ellas, una de particular importancia: el azufre y sus compuestos.

— La solución de las ecuaciones matriciales que resultan de la ecuación (2.8.44) en ocasiones se complica y produce errores, ya que para determinados conjuntos de datos se vuelve singular y no es posible invertirla para realizar las iteraciones correspondientes, produciendo que Matlab nos muestre *warnings* que pueden llegar a detener la simulación.

— Para el análisis hecho en la Sección 2.10, no pude obtener reglas (sé que existen) que me permitieran discriminar las reacciones que utilicé, ya que es probable que no todas sean importantes o, inclusive, que falten algunas.

— La entalpía de la masa perdida se simuló con la relación empírica (2.11.18) cuyos límites son correctos, pero existe la incertidumbre de lo que sucede lejos de tales límites; por otra parte, al depender esta entalpía perdida de la masa perdida, la siguiente recomendación también se le puede aplicar.

— Es posible mejorar la estimación del factor de pérdida de masa, C , empleado en la ecuación (2.11.14), mejorando y ampliando el modelo propuesto en la sección 2.12, tomando en cuenta que las pérdidas de masa no se dan de manera lineal y constante, sino que tienen fuerte dependencia con la presión dentro de la cámara y, por tanto, sería interesante obtener una relación funcional entre ambas variables.

— La forma en que se calculó la velocidad de la flama (Apéndice E) para los fines de la transferencia de calor, fue un tanto artificial; emplea la ley de quemado que, como hemos visto, es posible mejorar, por lo que sería conveniente introducirse en los aspectos de Dinámica de Fluidos que gobiernan el comportamiento y la propagación de la flama en la mezcla.

La definición de eficiencia (Apéndice F) que he empleado en este trabajo difiere un poco de la definición que se estudia en los cursos convencionales de termodinámica. En estos cursos se observa que la eficiencia de un motor es la razón entre el trabajo útil y el calor suministrado por el combustible, es decir, la eficiencia térmica. En este trabajo, la eficiencia se considera la relación entre el trabajo útil y *el trabajo máximo posible* que se podría producir con esa misma cantidad de combustible, es decir, es una definición basada en términos exergéticos, por lo que podría decirse que estamos considerando una eficiencia exergética.

APÉNDICES

Apéndice A. Coeficientes de polinomios ajustados para calcular propiedades de algunas especies químicas según las ecuaciones (2.1.22) -- (2.1.24)

Tabla 1

Datos Termodinámicos (300 = T = 1000 K)								
i	Especies	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇
1	CO ₂	2.4007797	0.87350957×10 ⁻²	-0.66070878×10 ⁻⁵	0.20021861×10 ⁻⁸	0.63274039×10 ⁻¹⁵	-0.48377527×10 ⁵	9.6951457
2	H ₂ O	4.0701275	-0.11084499×10 ⁻²	0.41521180×10 ⁻⁵	-0.29637404×10 ⁻⁸	0.80702103×10 ⁻¹²	-0.30279722×10 ⁵	-0.32270046
3	N ₂	3.6748261	-0.12081500×10 ⁻²	0.23240102×10 ⁻⁵	-0.63217559×10 ⁻⁸	-0.22577253×10 ⁻¹²	-0.10611588×10 ⁴	2.3580424
4	O ₂	3.6255985	-0.18782184×10 ⁻²	0.70554544×10 ⁻⁵	-0.67635137×10 ⁻⁸	0.21555993×10 ⁻¹¹	-0.10475226×10 ⁴	4.3052778
5	CO	3.7100928	-0.16190964×10 ⁻²	0.36923594×10 ⁻⁵	-0.20319674×10 ⁻⁸	0.23953344×10 ⁻¹²	-0.14356310×10 ⁵	2.955535
6	H ₂	3.0574451	0.26765200×10 ⁻²	-0.58099162×10 ⁻⁵	0.55210391×10 ⁻⁸	-0.18122739×10 ⁻¹¹	-0.98890474×10 ³	-2.2997056
7	H	2.5000000	0	0	0	0	0.25471627×10 ⁵	-0.46011762
8	O	2.9464287	-0.16381665×10 ⁻²	0.24210316×10 ⁻⁵	-0.16028432×10 ⁻⁸	0.38906964×10 ⁻¹²	0.29147644×10 ⁵	2.9639949
9	OH	3.8375943	-0.10778858×10 ⁻²	0.96830378×10 ⁻⁶	0.18713972×10 ⁻⁹	-0.22571094×10 ⁻¹²	0.36412823×10 ⁴	0.49370009
10	NO	4.0459521	-0.34181783×10 ⁻²	0.79819190×10 ⁻⁵	-0.61139316×10 ⁻⁸	0.15919076×10 ⁻¹¹	0.97453934×10 ⁴	2.9974988

Tabla 2

Datos Termodinámicos (1000 = T = 4000 K)								
i	Especies	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇
1	CO ₂	4.4608041	0.30981719×10 ⁻²	-0.12392571×10 ⁻⁵	0.22741325×10 ⁻⁹	-0.15525954×10 ⁻¹³	-0.48961442×10 ⁵	-0.98635982
2	H ₂ O	2.7167633	0.29451374×10 ⁻²	-0.80224374×10 ⁻⁶	0.10226682×10 ⁻⁹	-0.48472145×10 ⁻¹⁴	-0.29905826×10 ⁵	6.6305671
3	N ₂	2.8693194	0.15154866×10 ⁻²	-0.57235277×10 ⁻⁶	0.99807393×10 ⁻¹⁰	-0.65223555×10 ⁻¹⁴	-0.90586184×10 ³	6.1615148
4	O ₂	3.6219535	0.73618264×10 ⁻³	-0.19652228×10 ⁻⁶	0.36201558×10 ⁻¹⁰	-0.28945627×10 ⁻¹⁴	-0.12019825×10 ⁴	3.6150960
5	CO	2.9840696	0.14891390×10 ⁻²	-0.57899684×10 ⁻⁶	0.10364577×10 ⁻⁹	-0.69353550×10 ⁻¹⁴	-0.14245228×10 ⁵	6.3479156
6	H ₂	3.1001901	0.51119464×10 ⁻³	0.52644210×10 ⁻⁷	-0.34909973×10 ⁻¹⁰	0.36945345×10 ⁻¹⁴	-0.87738042×10 ³	-1.9629421
7	H	2.5	0	0	0	0	0.25471627×10 ⁵	-0.46011763
8	O	2.5382	-2.1282×10 ⁵	-4.1531×10 ⁹	3.9687×10 ⁻¹²	-3.0014×10 ¹⁶	0.29230803×10 ⁵	4.9203080
9	OH	2.9106427	0.95931650×10 ⁻³	-0.19441702×10 ⁻⁶	0.13756646×10 ⁻¹⁰	0.14224542×10 ⁻¹⁵	0.39353815×10 ⁴	5.4423445
10	NO	3.189	0.13382281×10 ⁻²	-0.52899318×10 ⁻⁶	0.95919332×10 ⁻¹⁰	-0.64847932×10 ⁻¹⁴	0.98283290×10 ⁴	6.7458126

Apéndice B. Coeficientes de polinomios ajustados para calcular propiedades de combustibles según la ecuación (2.1.25)

Tabla 1

Según la ecuación (2.1.25)

Combustible	a_0	b_0	c_0	d_0	e_0
CH ₄	1.971324	7.871586×10^{-3}	-1.048592×10^{-6}	-9.930422×10^3	8.873728
C ₆ H ₆	-2.545087	4.79554×10^{-2}	-2.030765×10^{-5}	8.782234×10^3	33.48825
C ₇ H ₁₇ (Gasolina)	4.0652	6.0977×10^{-2}	-1.8801×10^{-5}	-3.5880×10^4	15.45
C _{14.4} H _{24.9} (Diesel)	7.9710	1.1954×10^{-1}	-3.6858×10^{-5}	-1.9385×10^4	-1.7879
CH ₃ NO ₂	1.412633	2.087101×10^{-2}	-8.142134×10^{-6}	-1.026351×10^4	19.17126
CH ₃ OH	1.779819	1.262503×10^{-2}	-3.624890×10^{-6}	-2.525420×10^4	15.0884

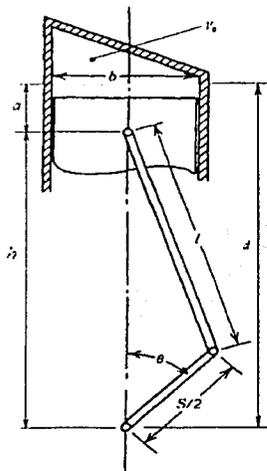
Tabla 2

Según las ecuaciones (2.1.22) – (2.1.24)

Combustible	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
C ₂ H ₆	4.83	1.38×10^{-2}	-4.56×10^{-6}	6.72×10^{-10}	-3.6×10^{-14}	-1.27×10^4	-5.24
C ₃ H ₆	6.73	1.49×10^{-2}	-4.95×10^{-6}	7.21×10^{-10}	-3.77×10^{-14}	-9.24×10^2	-13.1
C ₃ H ₈	7.53	1.89×10^{-2}	-6.28×10^{-6}	9.18×10^{-10}	-4.81×10^{-14}	-1.65×10^4	-17.8
C ₄ H ₈	2.05	3.44×10^{-2}	-1.59×10^{-5}	3.31×10^{-9}	-2.54×10^{-13}	-2.14×10^3	15.5
C ₄ H ₁₀	20	1.04×10^{-2}	-9.61×10^{-7}	-4.62×10^{-10}	8.2×10^{-14}	-2.63×10^4	-88.4

Apéndice C. Derivación de una fórmula para calcular el volumen instantáneo de la cámara de combustión

Basándose en la Fig 2.8 modificada y definiendo algunas nuevas variables, se tiene la siguiente figura



donde V_0 es el volumen libre.

Resulta claro que

$$\text{Si } \theta = 0^\circ, V = V_0, a = 0 \text{ y } h = l + \frac{S}{2}$$

$$\text{Si } \theta = 180^\circ, V = V_1, a = S \text{ y } h = l - \frac{S}{2}$$

$$d = a + h = l + \frac{S}{2}$$

En cualquier instante, el volumen dentro de la cámara es

$$V = V_0 + \frac{\pi b^2}{4} a = V_0 + \frac{\pi b^2}{4} (d - h) = V_0 + \frac{\pi b^2}{4} \left(l + \frac{S}{2} - h \right) \quad (\text{C.1})$$

cabe aclarar que la fórmula (C.1) no incluye la *cabeza* del pistón que se muestra en la figura, por arriba del punto de sujeción cuyo volumen, estrictamente, debería restársele, sin embargo, se considera que éste está siendo restado ya de V_0 , por lo que su no inclusión aquí no invalida la fórmula.

Por medio de la ley de cosenos, puede deducirse que

$$l^2 = h^2 + \frac{1}{4} S^2 - hS \cos \theta \quad (\text{C.2})$$

para cualquier instante, lo que representa una ecuación cuadrática en h cuya solución es

$$h = \frac{S \cos \theta \pm \sqrt{S^2 \cos^2 \theta - S^2 + 4l^2}}{2} = \frac{S \cos \theta \pm \sqrt{4l^2 - S^2 \sin^2 \theta}}{2} \quad (\text{C.3})$$

para todos los motores convencionales se cumple que $l > S$, por lo que, para evitar soluciones de h negativas, únicamente se tomará el signo positivo que precede al radical. Sustituyendo a (C.3) en (C.1) queda, para el volumen,

$$V = V_0 + \frac{\pi b^2}{4} \left(l + \frac{S}{2} - \frac{S \cos \theta}{2} - \frac{\sqrt{4l^2 - S^2 \sin^2 \theta}}{2} \right) \quad (\text{C.4})$$

Definiendo $\varepsilon = \frac{S}{2l}$ y haciendo algunas manipulaciones algebraicas, se obtiene, de (C.4),

$$\begin{aligned} V &= V_0 + \frac{\pi b^2}{4} \left(\frac{2lS}{2S} + \frac{S}{2} - \frac{S \cos \theta}{2} - \frac{2lS}{2S} \sqrt{\frac{4l^2 - S^2 \sin^2 \theta}{4l^2}} \right) \\ &= V_0 + \frac{\pi b^2 S}{8} \left(\frac{2l}{S} + 1 - \cos \theta - \frac{2l}{S} \sqrt{1 - \left(\frac{S}{2l}\right)^2 \sin^2 \theta} \right) \\ &= V_0 + \frac{\pi b^2 S}{8} \left(1 - \cos \theta + \frac{1}{\varepsilon} (1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2 \sin^2 \theta}) \right) \end{aligned}$$

De la ecuación (2.5.2) de volumen desplazado

$$\begin{aligned} V &= V_0 + \frac{V_1 - V_0}{2} \left(1 - \cos \theta + \frac{1}{\varepsilon} (1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2 \sin^2 \theta}) \right) \\ &= V_0 \left[1 + \frac{V_1 - V_0}{2V_0} \left(1 - \cos \theta + \frac{1}{\varepsilon} (1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2 \sin^2 \theta}) \right) \right] \end{aligned}$$

Por último introduciendo la ecuación (2.5.1) de la relación de compresión, se llega a la ecuación buscada,

$$V = V_0 \left[1 + \frac{r-1}{2} \left(1 - \cos \theta + \frac{1}{\varepsilon} (1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2 \sin^2 \theta}) \right) \right] \quad (\text{C.5})$$

Apéndice D. Derivadas Termodinámicas

Las subrutinas CombTempBajas y CombTempAltas, explicadas en el Capítulo 3, calculan tres derivadas parciales, llamadas c_p , $(\partial \ln v / \partial \ln P)_r$ y $(\partial \ln v / \partial \ln T)_p$. Cualquiera otra derivada que se necesite puede ser determinada en función de estas. Adoptando la notación

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z = \frac{(\partial y)_z}{(\partial x)_z}$$

la siguiente lista puede usarse para conocer cualquier derivada¹

$$(\partial T)_p = -(\partial P)_r = 1$$

$$(\partial v)_p = -(\partial P)_v = \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p$$

$$(\partial s)_p = -(\partial P)_s = \frac{c_p}{T}$$

$$(\partial u)_p = -(\partial P)_u = c_p - \frac{Pv}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p$$

$$(\partial h)_p = -(\partial P)_h = c_p$$

$$(\partial v)_r = -(\partial T)_v = -\frac{v}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r$$

$$(\partial s)_r = -(\partial T)_s = \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p$$

$$(\partial u)_r = -(\partial T)_u = v \left[\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p + \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r \right]$$

$$(\partial h)_r = -(\partial T)_h = -v \left[1 - \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p \right]$$

$$(\partial s)_v = -(\partial v)_s = \frac{v}{T} \left[\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p^2 \right]$$

$$(\partial u)_v = -(\partial v)_u = v \left[\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p^2 \right]$$

$$(\partial h)_v = -(\partial v)_h = v \left[\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p^2 - \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p \right]$$

$$(\partial u)_s = -(\partial s)_u = \frac{Pv}{T} \left[\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p^2 \right]$$

$$(\partial h)_s = -(\partial s)_h = -\frac{vc_p}{T}$$

$$(\partial h)_u = -(\partial u)_h = -v \left[c_p - \frac{Pv}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p \right] - Pv \left[\frac{c_p}{P} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln P} \right)_r + \frac{v}{T} \left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p^2 \right]$$

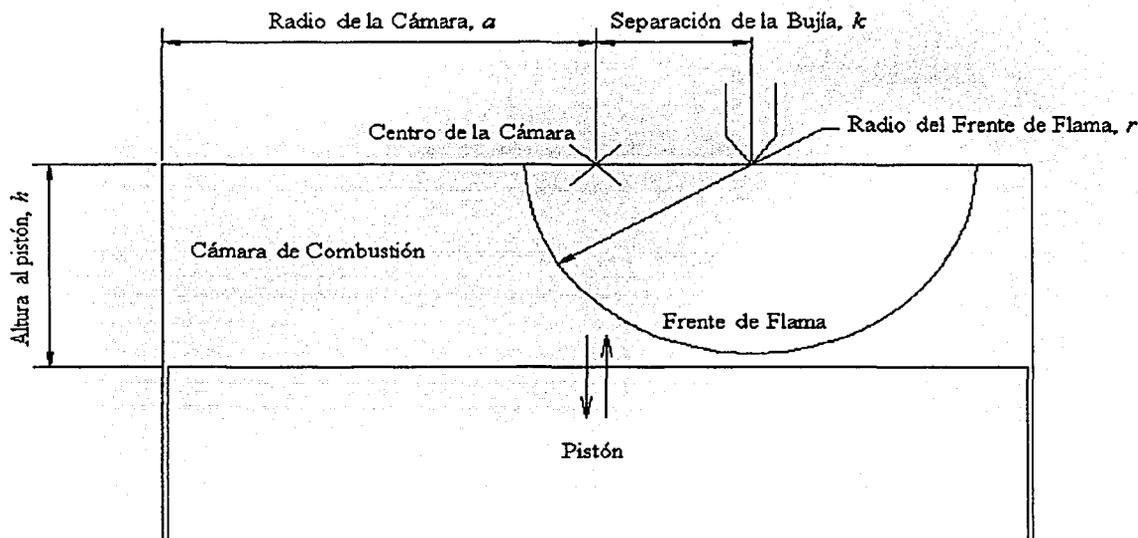
¹ G. N. Lewis y M. Randall, *Thermodynamics*, McGraw-Hill, New York, 1961, p. 667-668 (derivadas que involucran las energías libres de Gibbs o de Helmholtz).

Apéndice E. Fórmulas para el cálculo de áreas y volúmenes

El problema a resolver es la obtención de las pérdidas de calor de la cámara de combustión producto de la convección; éstas pérdidas se representan mediante las ecuaciones (2.11.16) y (2.11.17) que involucran la necesidad de conocer A_q y A_{nq} , el área de los gases quemados en contacto con la pared y el área de los gases no quemados en contacto con la pared, respectivamente. Por otra parte, como se mencionó en el Capítulo 3, la composición de los productos de la combustión se calcula en moles/cm³, lo que sugiere la necesidad de obtener una medida del volumen que ocupan los gases quemados (cm³) en cada instante, que se llamarán V_q y V_{nq} por similitud con las áreas. En este apéndice se deducirán las fórmulas necesarias para el cómputo de tales variables.

Supóngase que la cámara de combustión tiene forma cilíndrica con la tapa superior plana y que el frente de flama se propaga de manera esférica tomando como centro la localización de la bujía, que tendrá, en el caso general, cierta excentricidad respecto al cilindro (que en lo posterior se llamará *separación de la bujía*), por lo que se supondrá que una separación de cero significa que la bujía se sitúa en el centro de la cámara y como cota superior, esta separación no debe ser mayor al radio de la cámara.

El siguiente esquema, que representa un corte transversal del arreglo cilindro-pistón al momento de la combustión, ayudará a definir los conceptos,



No se pierde generalidad al suponer que la bujía se encuentra del «lado derecho» de la cámara. El pistón se encuentra haciendo su recorrido (subiendo o bajando) según sea el caso, aunque para ser precisos la combustión es preferible comenzarla instantes antes de alcanzar el punto muerto superior, por lo que la mayoría de las veces el pistón se encontrará descendiendo.

Para cualquier instante del ciclo, los parámetros que se necesitan se calculan de la siguiente forma,
 — Radio de la cámara, a , y separación de la bujía, k , los proporciona el usuario ya que son características físicas del motor en cuestión.
 — Altura al pistón, h , es un parámetro que se calcula fácilmente considerando que se conocen, en todo momento, el volumen dentro de la cámara [ecuación (2.5.3)], así como el área de la cabeza del cilindro, por lo que

$$h = \frac{V}{\pi a^2} \quad (E.1)$$

— Radio del frente de flama, r , que se calcula de forma un tanto artificiosa, determinando previamente la velocidad de la flama; sin embargo, los resultados obtenidos se muestran conformes con los valores de velocidad de flama reportados en la literatura. El usuario proporciona los datos necesarios de la ley de quemado, θ_s y θ_b , ecuación (2.6.1), y se consideran, a partir de ellos, las formulaciones geométricas siguientes:

• Volumen de la cámara al terminar la combustión

$$V_{FinComb} = V_0 \left[1 + \frac{r-1}{2} \left\{ 1 - \cos(\theta_s + \theta_b) + \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2 \sin^2(\theta_s + \theta_b)} \right) \right\} \right] \quad (E.2)$$

• Altura al pistón al término de la combustión

$$h_{FinComb} = \frac{V_{FinComb}}{\pi a^2} \quad (E.3)$$

• Distancia total recorrida por la flama (radio máximo)

$$D_{Flama} = \sqrt{(a+k)^2 + h_{FinComb}^2} \quad (E.4)$$

• Relación de escala temporal por cada grado de avance del cigüeñal

$$\frac{seg}{grado} = \frac{1}{60 \cdot rpm} \quad (E.5)$$

• Velocidad de la flama

$$v_{Flama} = \frac{D_{Flama}}{\frac{seg}{grado} \cdot \theta_b} \quad (E.6)$$

• Radio de la flama para cada instante

$$r = (\theta - \theta_s) \cdot \frac{seg}{grado} \cdot v_{Flama} \quad (E.7)$$

Para todos los casos se cumplen las siguientes relaciones,

$$A = 2\pi a^2 + 2\pi ah = A_q + A_{nq} \quad (\text{E.8})$$

$$V = V_q + V_{nq} \quad (\text{E.9})$$

por lo que únicamente será necesario calcular V_q y A_q . En los casos triviales donde no ha comenzado la combustión, tenemos que $V_q = 0$ y $A_q = 0$; mientras que cuando ha finalizado la combustión, $V_{nq} = 0$ y $A_{nq} = 0$, por lo que sólo es necesario calcular los casos que se presentan mientras se desarrolla la combustión, de los cuales se identificaron ocho, que se explican en seguida.

La mayoría de las siguientes ecuaciones fueron deducidas a partir de las fórmulas generales del cálculo integral para áreas y volúmenes, así como para longitudes de arco.² Para ello, es necesario representar las entidades físicas como entes geométricos. Tomando como centro de coordenadas el centro de la cámara de combustión, se obtiene para el cilindro,

$$x^2 + y^2 = a^2 \quad (\text{E.10})$$

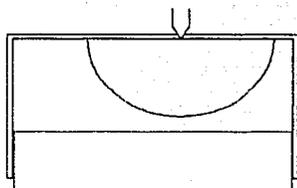
y para el frente de flama, considerándolo una esfera,

$$(x-k)^2 + y^2 + z^2 = r^2 \quad (\text{E.11})$$

Caso 1. Es el caso más sencillo, cuando la combustión está recién comenzando y se visualiza como media esfera, por lo que se tiene

$$A_q = \pi \cdot r^2 \quad (\text{E.12})$$

$$V_q = \frac{2}{3} \pi \cdot r^3 \quad (\text{E.13})$$



Caso 2. El frente de flama ha llegado, por uno de sus extremos, a la pared lateral del cilindro. En las fórmulas siguientes se hace necesario definir la siguiente constante, ya que se usará constantemente

$$C1 = \frac{k^2 - r^2 + a^2}{2k} \quad (\text{E.14})$$

y se tiene

$$V_q = V_1 + V_2 \quad (\text{E.15})$$

$$V_1 = \frac{\pi}{2} \int_{k-r}^{C1} [r^2 - (x-k)^2] dx \quad (\text{E.16})$$

² William Anthony Granville. *Cálculo Diferencial e Integral*. Editorial Limusa, México, 1992. 685 pp

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$V_2 = \int_{C1}^a \int_{-\sqrt{a^2-x^2}}^{\sqrt{a^2-x^2}} \sqrt{r^2 - (x-k)^2 - y^2} dy dx =$$

$$\int_{C1}^a \left(\sqrt{(a^2 - x^2)(r^2 - a^2 - k^2 + 2xk)} + [r^2 - (x-k)^2] \cdot \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r^2 - a^2 - k^2 + 2xk}} \right) dx \quad (E.17)$$

se puede observar que lo que se encuentra en la segunda integral no es mas que la ecuación (3.7); esta integral se repite constantemente, sólo que se integra entre distintos límites.

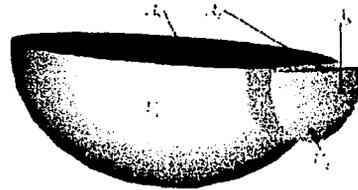
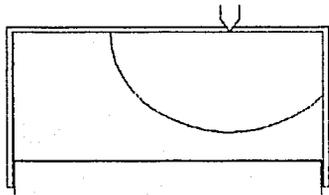
Para las áreas se tiene

$$A_q = 2(A_1 + A_2 + A_3) \quad (E.18)$$

$$A_1 = \int_{k-r}^{C1} \sqrt{r^2 - (x-k)^2} dx \quad (E.19)$$

$$A_2 = \int_{C1}^a \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (E.20)$$

$$A_3 = \int_{C1}^a \sqrt{2kx + r^2 - a^2 - k^2} \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} dx \quad (E.21)$$



Caso 3. El frente de flama ha superado la «tapa superior» del cilindro.

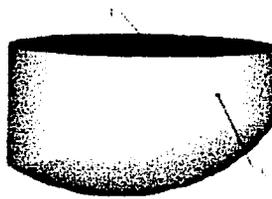
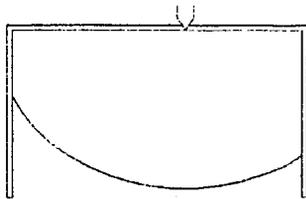
$$V_q = \int_{-a}^a Ec(3.7) dx \quad (E.22)$$

$$A_q = A_1 + A_2 \quad (E.23)$$

$$A_1 = \pi \cdot a^2 \quad (E.24)$$

$$A_2 = 2\pi \int_{-a}^a \sqrt{2kx + r^2 - a^2 - k^2} dx \quad (E.25)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Para todos los siguientes casos el radio del frente de flama, r , es mayor que la altura al pistón, h ; la explicación del caso particular queda restringida a la figura mostrada.

Caso 4.

$$V_q = V_1 - V_2 \tag{E.26}$$

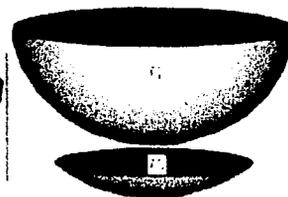
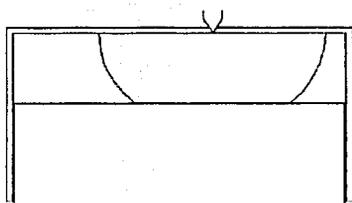
$$V_1 = \frac{2}{3} \pi \cdot r^3 \tag{E.27}$$

$$V_2 = \frac{\pi}{3} (r-h)^2 (2r+h) \tag{E.28}$$

$$A_q = A_1 + A_2 \tag{E.29}$$

$$A_1 = \pi \cdot r^2 \tag{E.30}$$

$$A_2 = \pi(r^2 - h^2) \tag{E.31}$$



Caso 5.

$$V_q = V_1 + V_2 - V_3 \tag{E.32}$$

$$V_1 = \frac{\pi}{2} \int_{k-r}^{c1} [r^2 - (x-k)^2] dx \tag{E.33}$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$V_2 = \int_{c1}^u Ec(3.7) dx \tag{E.34}$$

$$V_3 = \frac{\pi}{3} (r-h)^2 (2r+h) \tag{E.35}$$

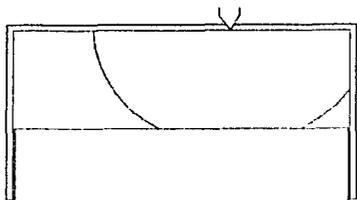
$$A_q = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 \tag{E.36}$$

$$A_1 = 2 \int_{k-r}^{c1} \sqrt{r^2 - (x-k)^2} dx \tag{E.37}$$

$$A_2 = 2 \int_{c1}^u \sqrt{a^2 - x^2} dx \tag{E.38}$$

$$A_3 = 2 \int_{c1}^u \sqrt{2kx + r^2 - a^2 - k^2} \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} dx \tag{E.39}$$

$$A_4 = \pi(r^2 - h^2) \tag{E.40}$$



Caso 6.

$$V_q = V_1 - V_2 \tag{E.41}$$

$$V_1 = \int_{-a}^u Ec(3.7) dx \tag{E.42}$$

$$V_2 = \frac{\pi}{3} (r-h)^2 (2r+h) \tag{E.43}$$

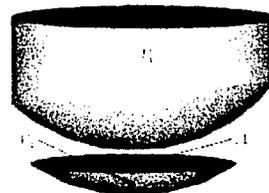
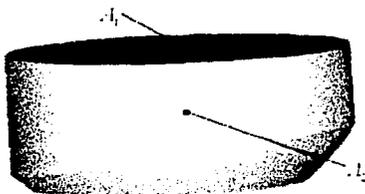
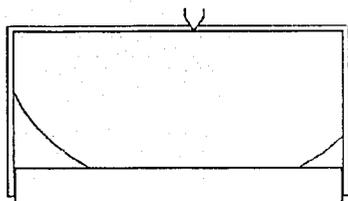
$$A_q = A_1 + A_2 + A_3 \tag{E.44}$$

$$A_1 = \pi \cdot a^2 \tag{E.45}$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$A_2 = 2 \int_{-a}^a \sqrt{2kx + r^2 - a^2 - k^2} \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} dx \quad (E.46)$$

$$A_3 = \pi(r^2 - h^2) \quad (E.47)$$



Caso 7.

Definiendo la siguiente variable

$$C_2 = \frac{k^2 - r^2 + a^2 + h^2}{2k} \quad (E.48)$$

$$V_q = V_1 - V_2 - V_3 + V_4 \quad (E.49)$$

$$V_1 = \int_{C_1}^a Ec(3.7) dx \quad (E.50)$$

$$V_2 = \int_{k-\sqrt{r^2-h^2}}^{C_2} \int_{-\sqrt{r^2-h^2-(x-k)^2}}^{\sqrt{r^2-h^2-(x-k)^2}} (\sqrt{r^2-(x-k)^2} - y^2 - h) dy dx = \int_{k-\sqrt{r^2-h^2}}^{C_2} \left[r^2 - (x-k)^2 \right] \cdot \tan^{-1} \frac{\sqrt{r^2-h^2-(x-k)^2}}{h} - h \cdot \sqrt{r^2-h^2-(x-k)^2} dx \quad (E.51)$$

donde se observa que se está integrando la ecuación (3.8).

$$V_3 = \int_{C_2}^a \int_{-\sqrt{a^2-x^2}}^{\sqrt{a^2-x^2}} (\sqrt{r^2-(x-k)^2} - y^2 - h) dy dx = \int_{C_2}^a \left(\sqrt{(a^2-x^2)(r^2-a^2-k^2+2xk)} + [r^2-(x-k)^2] \cdot \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2-x^2}{r^2-a^2-k^2+2xk}} - 2h \cdot \sqrt{a^2-x^2} \right) dx \quad (E.52)$$

que es la integral de la ecuación (3.9).

$$V_4 = \frac{\pi}{2} \int_{k-r}^{C_1} [r^2 - (x-k)^2] dx \quad (E.53)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$A_y = 2(A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 + A_6) \quad (E.54)$$

$$A_1 = \int_{k-r}^{c_1} \sqrt{r^2 - (x-k)^2} dx \quad (E.55)$$

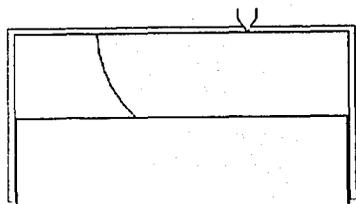
$$A_2 = \int_{c_1}^u \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (E.56)$$

$$A_3 = \int_{c_1}^{c_2} \sqrt{2kx + r^2 - a^2 - k^2} dx \quad (E.57)$$

$$A_4 = h \cdot \int_{c_2}^u \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} dx \quad (E.58)$$

$$A_5 = \int_{k-\sqrt{r^2-h^2}}^{c_2} \sqrt{r^2 - h^2 - (x-k)^2} dx \quad (E.59)$$

$$A_6 = \int_{c_2}^u \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (E.60)$$



Caso 8.



$$V_q = V_1 - V_2 - V_3 \quad (E.61)$$

$$V_1 = \int_{-a}^u Ec(3.7) dx \quad (E.62)$$

$$V_2 = \int_{k-\sqrt{r^2-h^2}}^{c_2} Ec(3.8) dx \quad (E.63)$$

$$V_3 = \int_{c_2}^u Ec(3.9) dx \quad (E.64)$$

$$A_y = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 \quad (E.65)$$

$$A_1 = \pi \cdot a^2 \quad (E.66)$$

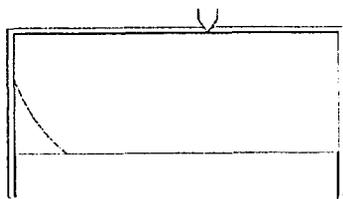
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$A_2 = 2 \int_{-u}^{c^2} \sqrt{2kx + r^2 - a^2 - k^2} dx \quad (\text{E.67})$$

$$A_3 = 2h \cdot \int_{c^2}^u \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} dx \quad (\text{E.68})$$

$$A_4 = 2 \int_{k-\sqrt{r^2-h^2}}^{c^2} \sqrt{r^2 - h^2 - (x-k)^2} dx \quad (\text{E.69})$$

$$A_6 = 2 \int_{c^2}^u \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (\text{E.70})$$



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice F. Eficiencia en los ciclos Aire-Oxígeno-Combustible

Cuando un combustible es quemado al mismo tiempo que el calor está siendo cedido para producir trabajo, usualmente se considera que la eficiencia es el cociente entre el trabajo neto hecho por unidad de masa de combustible inducido y el calor de combustión del combustible. Conforme a los principios termodinámicos, esta definición no es necesariamente correcta, si se prefiere que

$$\eta = \frac{W_{VC}}{(W_{VC})_{\text{máximo posible}}} \quad (F.1)$$

Considérese la primera ley de la termodinámica aplicada al volumen de control mostrado en la Fig. F.1.

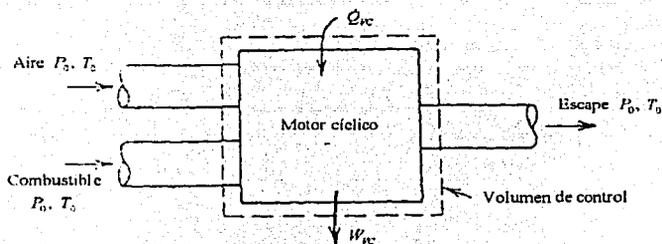


Figura F.1 Volumen de control para el análisis del trabajo máximo que un motor cíclico puede producir quemando combustible

$$\left(\frac{dE}{dT}\right)_{VC} = \dot{Q}_{VC} - \dot{W}_{VC} + \sum_{entra} \dot{m}h - \sum_{sale} \dot{m}h \quad (F.2)$$

Integrando para un ciclo del motor, se obtiene,

$$0 = \dot{Q}_{VC} - \dot{W}_{VC} + \sum_{entra} \dot{m}h - \sum_{sale} \dot{m}h \quad (F.3)$$

El trabajo máximo se obtiene sólo cuando el proceso es reversible, en cuyo caso,

$$\dot{Q}_{VC} = T_0 \left(\sum_{sale} \dot{m}s - \sum_{entra} \dot{m}s \right) \quad (F.4)$$

por lo tanto,

$$(W_{VC})_{\text{máximo posible}} = m_f q_c T_0 P_0 + T_0 \left(\sum_{sale} \dot{m}s - \sum_{entra} \dot{m}s \right) \quad (F.5)$$

Introduciendo la *energía disponible de combustión*, definida como

$$a_c = q_c + \frac{T_0}{m_f} \left(\sum_{sale} \dot{m}s - \sum_{entra} \dot{m}s \right) \quad (F.6)$$

la eficiencia es

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\eta = \frac{W_{VC}}{m_f a_c} \tag{F.7}$$

En la Fig. F.2 se comparan la energía disponible de combustión con el calor de combustión a $T_0 = 298 \text{ K}$ y $P_0 = 1 \text{ atm}$. El trabajo máximo se alcanza sólo si los gases expulsados se encuentran en equilibrio en el estado T_0 y P_0 ; entonces la calidad del vapor de agua expulsado se evalúa fijando la presión parcial del vapor igual a la presión de saturación del vapor a $T = T_0$.

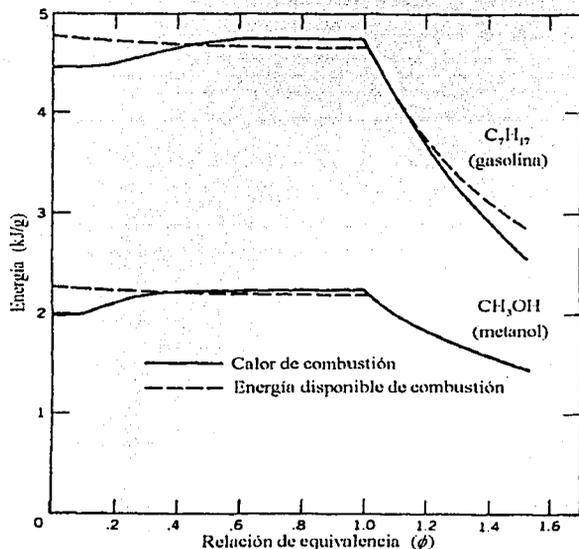


Figura F.2 Energía disponible y calor de combustión para gasolina líquida y metanol. Aire y combustible no están mezclados, $P_0 = 1 \text{ atm}$, $T_0 = 298 \text{ K}$.

Resulta evidente a partir de la Fig. F.2 que existe más energía disponible por unidad de masa de combustible si se queman muestras pobres que ricas. La ecuación (F.7) es apropiada únicamente cuando los gases de escape del motor son empleados como combustible de algún otro dispositivo. En el caso común, se necesita de una definición que refleje las pérdidas de energía propiciadas al quemar mezclas ricas. Por esta razón, la eficiencia se basará en la energía disponible de combustión máxima que tiene lugar para relaciones de equivalencia muy pobres. Entonces, fijando

$$a_0 = a_{c, \phi=0.01} \tag{F.8}$$

la eficiencia queda definida como

$$\eta = \frac{W_{VC}}{m_f a_0} = \frac{w_{VC}(1 + \phi F_s)}{\phi F_s(1 - f)a_0} \tag{F.9}$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

donde w_{rc} es el trabajo por unidad de masa hecho por el sistema, F_x es la relación (2.7.3) y f es la fracción másica residual.

Para ciertos fines, esta definición de eficiencia resulta equivocada. Parece poco práctica al tomar en cuenta la pequeña cantidad de trabajo que puede realizarse, en principio, debido a que la composición de los gases expulsados es diferente de la composición atmosférica. Este argumento puede extenderse para reconocer que existe más energía disponible en un día frío que en uno cálido. Entonces, en lugar de tomar $T_0 = 298$ K, se puede evaluar a_0 a una temperatura igual a la temperatura más baja registrada algún día en la Antártica, dado que en principio se podría operar cualquier motor a hasta esta temperatura el día más frío. Este concepto es fácilmente descartado si se reconocen las restricciones prácticas.

Hablando de restricciones prácticas, la única forma en la que puede ocurrir la transferencia reversible de calor de la ecuación (F.4) entre un motor y sus alrededores es por intervención de una máquina de Carnot. Se puede entonces tomar por caso la definición de eficiencia en términos del calor de combustión bajo la premisa de que nunca podrá usarse algún dispositivo de ningún tipo, incluida la máquina de Carnot, para reducir las irreversibilidades asociadas con la transferencia de calor. Inspeccionando la Fig. F.2, se podría usar el calor de combustión estequiométrico, que resulta ser el máximo.

La elección de $\phi = 0.01$ en la ecuación (F.8) también resulta equivocada. La Fig. F.1 sugiere que debe tomarse el límite cuando $\phi \rightarrow 0$ para evaluar a_0 . Siendo estrictos, este límite no existe, ya que implicaría que los estados termodinámicos existen sin fronteras volumétricas. Por ello se tomó $\phi = 0.01$ como suficientemente cercano a cero para fines prácticos; aunque resulta muy improbable que algún motor pueda ser operado con una mezcla siquiera cercana a esta.

Para la gasolina, tomando la composición como C_7H_{17} , en estado líquido, se ha obtenido un valor de energía máxima disponible de combustión de $a_0 = 47.87$ kJ/g. [9]

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice G. Subrutinas necesarias para realizar la simulación

Auxiliar

```
function [V,X,EM]=Auxiliar(VTDC,R,Rad,eps,Theta,ThetaS,ThetaB,Cm,omega)
```

```
V=VTDC*(1+(R-1)/2*(1-cos(Rad)+(1/eps)*(1-sqrt(1-(eps*sin(Rad))^2)))));
if Theta<ThetaS
    X=0;
elseif Theta>=ThetaS & Theta<=(ThetaS+ThetaB)
    X=0.5*(1-cos(pi*(Theta-ThetaS)/ThetaB));
elseif Theta>(ThetaB+ThetaS)
    X=1;
end
EM=exp(-Cm*(Theta*pi/180+pi)/omega);
```

SolConcMolar

```
function [ConcMolCm3Fin]=SolConcMolar(ConcMolPorCm3,tini,tfin,Tb)
```

```
lnicial=tini; tfinal=tfin;
ConcMolCm3=ConcMolPorCm3;
CO2=ConcMolCm3(1);
H2O=ConcMolCm3(2);
N2=ConcMolCm3(3);
O2=ConcMolCm3(4);
CO=ConcMolCm3(5);
H2=ConcMolCm3(6);
H=ConcMolCm3(7);
O=ConcMolCm3(8);
OH=ConcMolCm3(9);
NO=ConcMolCm3(10);
```

```
Temp=Tb;
```

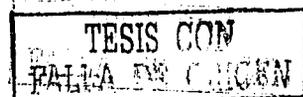
```
k1a=1.81e14*exp(-38300/Temp);
k1r=1.6e13;
k2a=9.03e9*Temp*exp(-3270/Temp);
k2r=1.5e9*Temp*exp(-19500/Temp);
k3a=2.83e13;
k3r=2e14*exp(-23650/Temp);
k4a=5.12e4*Temp*2.67*exp(-3160/Temp);
k5a=1.44e13*exp(-353/Temp);
k5r=9.76e13*exp(-7470/Temp);
k6a=4.52e8*Temp*1.6*exp(-9270/Temp);
k6r=1.02e8*Temp*1.6*exp(-1660/Temp);
k7a=1.51e9*Temp*1.14*exp(-50/Temp);
k8a=6.32e6*Temp*1.5*exp(250/Temp);
```

```
Pasos=500;
```

```
LongPaso=(tfinal-lnicial)/Pasos;
```

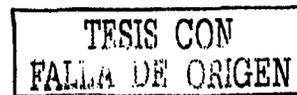
```
for ii=1:Pasos
```

```
    N=(k1a*O*N2+k2r*NO*O+k3r*NO*H)/(k1r*NO+k2a*O2+k3a*OH);
    f11=k8a*OH*CO;
    f12=k7a*OH*OH+k6r*OH*H2-k6a*H*H2O;
    f13=k1r*NO*N-k1a*O*N2;
    f14=k2r*NO*O-k2a*N*O2+k5a*O*OH-k5r*O2*H;
    f15=k8a*OH*CO;
    f16=k4a*O*H2+k6a*H*H2O-k6r*OH*H2;
    f17=k3a*N*OH-k3r*NO*H+k4a*O*H2+k5a*O*OH-k5r*O2*H-k6a*H*H2O+k6r*OH*H2+k8a*OH*CO;
    f18=k1a*O*N2+k1r*NO*N+k2a*N*O2-k2r*NO*O-k4a*O*H2-k5a*O*OH+k5r*O2*H+k7a*OH*OH;
    f19=k3a*N*OH+k3r*NO*H+k4a*O*H2-k5a*O*OH+k5r*O2*H+k6a*H*H2O-k6r*OH*H2-k7a*OH*OH-k8a*OH*CO;
    f110=k1a*O*N2-k1r*NO*N+k2a*N*O2-k2r*NO*O+k3a*N*OH-k3r*NO*H;
    f21=k8a*(OH+LongPaso/2*f19)*(CO+LongPaso/2*f15);
    f22=k7a*(OH+LongPaso/2*f19)^2+k6r*(OH+LongPaso/2*f19)*(H2+LongPaso/2*f16)-k6a*(H+LongPaso/2*f17)*(H2O+LongPaso/2*f12);
    f23=k1r*(NO+LongPaso/2*f110)*N-k1a*(O+LongPaso/2*f18)*(N2+LongPaso/2*f13);
    f24=k2r*(NO+LongPaso/2*f110)*(O+LongPaso/2*f18)-k2a*N*(O2+LongPaso/2*f14)+k5a*(O+LongPaso/2*f18)*(OH+LongPaso/2*f19)-
    k5r*(O2+LongPaso/2*f14)*(H+LongPaso/2*f17);
    f25=k8a*(OH+LongPaso/2*f19)*(CO+LongPaso/2*f15);
```



f26=k4a*(O+LongPaso/2*f18)*(H2+LongPaso/2*f16)+k6a*(H+LongPaso/2*f17)*(H2O+LongPaso/2*f12)-
k6r*(OH+LongPaso/2*f19)*(H2+LongPaso/2*f16);
f27=k3a*N*(OH+LongPaso/2*f19)-
k3r*(NO+LongPaso/2*f110)*(H+LongPaso/2*f17)+k4a*(O+LongPaso/2*f18)*(H2+LongPaso/2*f16)+k5a*(O+LongPaso/2*f18)*(OH+LongPaso/2*f19)-
k5r*(O2+LongPaso/2*f14)*(H+LongPaso/2*f17);
k6a*(H+LongPaso/2*f17)*(H2O+LongPaso/2*f12)+k6r*(OH+LongPaso/2*f19)*(H2+LongPaso/2*f16)+k8a*(OH+LongPaso/2*f19)*(CO+LongPaso/2*f15);
f28=k1a*(O+LongPaso/2*f18)*(N2+LongPaso/2*f13)+k1r*(NO+LongPaso/2*f110)*N+k2a*N*(O2+LongPaso/2*f14)-
k2r*(NO+LongPaso/2*f110)*(O+LongPaso/2*f18)-k4a*(O+LongPaso/2*f18)*(H2+LongPaso/2*f16)-
k5a*(O+LongPaso/2*f18)*(OH+LongPaso/2*f19)+k5r*(O2+LongPaso/2*f14)*(H+LongPaso/2*f17)+k7a*(OH+LongPaso/2*f19)^2;
f29=k3a*N*(OH+LongPaso/2*f19)+k3r*(NO+LongPaso/2*f110)*(H+LongPaso/2*f17)+k4a*(O+LongPaso/2*f18)*(H2+LongPaso/2*f16)+
k5a*(O+LongPaso/2*f18)*(OH+LongPaso/2*f19)+k5r*(O2+LongPaso/2*f14)*(H+LongPaso/2*f17)-k6a*(H+LongPaso/2*f17)*(H2O+LongPaso/2*f12)-
k6r*(OH+LongPaso/2*f19)*(H2+LongPaso/2*f16)-k7a*(OH+LongPaso/2*f19)^2-k8a*(OH+LongPaso/2*f19)*(CO+LongPaso/2*f15);
f210=k1a*(O+LongPaso/2*f18)*(N2+LongPaso/2*f13)+k1r*(NO+LongPaso/2*f110)*N+k2a*N*(O2+LongPaso/2*f14)-
k2r*(NO+LongPaso/2*f110)*(O+LongPaso/2*f18)+k3a*N*(OH+LongPaso/2*f19)+k3r*(NO+LongPaso/2*f110)*(H+LongPaso/2*f17);
f31=k8a*(OH+LongPaso/2*f29)*(CO+LongPaso/2*f25);
f32=k7a*(OH+LongPaso/2*f29)^2+k6r*(OH+LongPaso/2*f29)*(H2+LongPaso/2*f26)-k6a*(H+LongPaso/2*f27)*(H2O+LongPaso/2*f22);
f33=k1r*(NO+LongPaso/2*f210)*N+k1a*(O+LongPaso/2*f28)*(N2+LongPaso/2*f28);
f34=k2r*(NO+LongPaso/2*f210)*(O+LongPaso/2*f28)-k2a*N*(O2+LongPaso/2*f24)+k5a*(O+LongPaso/2*f28)*(OH+LongPaso/2*f29)-
k5r*(O2+LongPaso/2*f24)*(H+LongPaso/2*f27);
f35=k8a*(OH+LongPaso/2*f29)*(CO+LongPaso/2*f25);
f36=k4a*(O+LongPaso/2*f28)*(H2+LongPaso/2*f26)+k6a*(H+LongPaso/2*f27)*(H2O+LongPaso/2*f22)-
k6r*(OH+LongPaso/2*f29)*(H2+LongPaso/2*f26);
f37=k3a*N*(OH+LongPaso/2*f29)-
k3r*(NO+LongPaso/2*f210)*(H+LongPaso/2*f27)+k4a*(O+LongPaso/2*f28)*(H2+LongPaso/2*f26)+k5a*(O+LongPaso/2*f28)*(OH+LongPaso/2*f29)-
k5r*(O2+LongPaso/2*f24)*(H+LongPaso/2*f27);
k6a*(H+LongPaso/2*f27)*(H2O+LongPaso/2*f22)+k6r*(OH+LongPaso/2*f29)*(H2+LongPaso/2*f26)+k8a*(OH+LongPaso/2*f29)*(CO+LongPaso/2*f25);
f38=k1a*(O+LongPaso/2*f28)*(N2+LongPaso/2*f23)+k1r*(NO+LongPaso/2*f210)*N+k2a*N*(O2+LongPaso/2*f24)-
k2r*(NO+LongPaso/2*f210)*(O+LongPaso/2*f28)-k4a*(O+LongPaso/2*f28)*(H2+LongPaso/2*f26)-
k5a*(O+LongPaso/2*f28)*(OH+LongPaso/2*f29)+k5r*(O2+LongPaso/2*f24)*(H+LongPaso/2*f27)+k7a*(OH+LongPaso/2*f29)^2;
f39=k3a*N*(OH+LongPaso/2*f29)+k3r*(NO+LongPaso/2*f210)*(H+LongPaso/2*f27)+k4a*(O+LongPaso/2*f28)*(H2+LongPaso/2*f26)-
k5a*(O+LongPaso/2*f28)*(OH+LongPaso/2*f29)+k5r*(O2+LongPaso/2*f24)*(H+LongPaso/2*f27)+k6a*(H+LongPaso/2*f27)*(H2O+LongPaso/2*f12)-
k6r*(OH+LongPaso/2*f29)*(H2+LongPaso/2*f26)-k7a*(OH+LongPaso/2*f29)^2-k8a*(OH+LongPaso/2*f29)*(CO+LongPaso/2*f25);
f310=k1a*(O+LongPaso/2*f28)*(N2+LongPaso/2*f23)+k1r*(NO+LongPaso/2*f210)*N+k2a*N*(O2+LongPaso/2*f24)-
k2r*(NO+LongPaso/2*f210)*(O+LongPaso/2*f28)+k3a*N*(OH+LongPaso/2*f29)+k3r*(NO+LongPaso/2*f210)*(H+LongPaso/2*f27);
f41=k8a*(OH+LongPaso*f39)*(CO+LongPaso*f35);
f42=k7a*(OH+LongPaso*f39)^2+k6r*(OH+LongPaso*f39)*(H2+LongPaso*f36)-k6a*(H+LongPaso*f37)*(H2O+LongPaso*f32);
f43=k1r*(NO+LongPaso*f310)*N+k1a*(O+LongPaso*f38)*(N2+LongPaso*f33);
f44=k2r*(NO+LongPaso*f310)*(O+LongPaso*f38)-k2a*N*(O2+LongPaso*f34)+k5a*(O+LongPaso*f38)*(OH+LongPaso*f39)-
k5r*(O2+LongPaso*f34)*(H+LongPaso*f37);
f45=k8a*(OH+LongPaso*f39)*(CO+LongPaso*f35);
f46=k4a*(O+LongPaso*f38)*(H2+LongPaso*f36)+k6a*(H+LongPaso*f37)*(H2O+LongPaso*f32)-
k6r*(OH+LongPaso*f39)*(H2+LongPaso*f36);
f47=k3a*N*(OH+LongPaso*f39)-
k3r*(NO+LongPaso*f310)*(H+LongPaso*f37)+k4a*(O+LongPaso*f38)*(H2+LongPaso*f36)+k5a*(O+LongPaso*f38)*(OH+LongPaso*f39)-
k5r*(O2+LongPaso*f34)*(H+LongPaso*f37);
k6a*(H+LongPaso*f37)*(H2O+LongPaso*f32)+k6r*(OH+LongPaso*f39)*(H2+LongPaso*f36)+k8a*(OH+LongPaso*f39)*(CO+LongPaso*f35);
f48=k1a*(O+LongPaso*f38)*(N2+LongPaso*f33)+k1r*(NO+LongPaso*f310)*N+k2a*N*(O2+LongPaso*f34)-
k2r*(NO+LongPaso*f310)*(O+LongPaso*f38)-k4a*(O+LongPaso*f38)*(H2+LongPaso*f36)-
k5a*(O+LongPaso*f38)*(OH+LongPaso*f39)+k5r*(O2+LongPaso*f34)*(H+LongPaso*f37)+k7a*(OH+LongPaso*f39)^2;
f49=k3a*N*(OH+LongPaso*f39)+k3r*(NO+LongPaso*f310)*(H+LongPaso*f37)+k4a*(O+LongPaso*f38)*(H2+LongPaso*f36)+
k5a*(O+LongPaso*f38)*(OH+LongPaso*f39)+k5r*(O2+LongPaso*f34)*(H+LongPaso*f37)+k6a*(H+LongPaso*f37)*(H2O+LongPaso*f32)-
k6r*(OH+LongPaso*f39)*(H2+LongPaso*f36)-k7a*(OH+LongPaso*f39)^2-k8a*(OH+LongPaso*f39)*(CO+LongPaso*f35);
f410=k1a*(O+LongPaso*f38)*(N2+LongPaso*f33)+k1r*(NO+LongPaso*f310)*N+k2a*N*(O2+LongPaso*f34)-
k2r*(NO+LongPaso*f310)*(O+LongPaso*f38)+k3a*N*(OH+LongPaso*f39)+k3r*(NO+LongPaso*f310)*(H+LongPaso*f37);
end

ConcMolCm3Fin(1)=ConcMolCm3(1)+LongPaso/6*(f11+2*f21+2*f31+f41);
ConcMolCm3Fin(2)=ConcMolCm3(2)+LongPaso/6*(f12+2*f22+2*f32+f42);
ConcMolCm3Fin(3)=ConcMolCm3(3)+LongPaso/6*(f13+2*f23+2*f33+f43);
ConcMolCm3Fin(4)=ConcMolCm3(4)+LongPaso/6*(f14+2*f24+2*f34+f44);
ConcMolCm3Fin(5)=ConcMolCm3(5)+LongPaso/6*(f15+2*f25+2*f35+f45);
ConcMolCm3Fin(6)=ConcMolCm3(6)+LongPaso/6*(f16+2*f26+2*f36+f46);
ConcMolCm3Fin(7)=ConcMolCm3(7)+LongPaso/6*(f17+2*f27+2*f37+f47);
ConcMolCm3Fin(8)=ConcMolCm3(8)+LongPaso/6*(f18+2*f28+2*f38+f48);
ConcMolCm3Fin(9)=ConcMolCm3(9)+LongPaso/6*(f19+2*f29+2*f39+f49);
ConcMolCm3Fin(10)=ConcMolCm3(10)+LongPaso/6*(f110+2*f210+2*f310+f410);



Funciones

```
function w=Funciones(x)
load DatosFlama
r=radio;
h=altura;
if VarEq==1
w=sqrt((a^2-x^2)^(r^2-a^2-k^2+2*x*k))+atan(sqrt((a^2-x^2)/(r^2-a^2-k^2+2*x*k))^(r^2-(x-k)^2));
elseif VarEq==2
%int(sqrt(r^2-y^2-(x-k)^2)-h,y,-sqrt(r^2-h^2-(x-k)^2),sqrt(r^2-h^2-(x-k)^2))
w=sqrt(r^2-h^2-(x-k)^2)*h+atan(sqrt(r^2-h^2-(x-k)^2)/h)^(r^2-(x-k)^2);
elseif VarEq==3
% int(sqrt(r^2-y^2-(x-k)^2)-h,y,-sqrt(a^2-x^2),sqrt(a^2-x^2))
w=sqrt((a^2-x^2)^(r^2-a^2-k^2+2*x*k))+atan(sqrt((a^2-x^2)/(r^2-a^2-k^2+2*x*k))^(r^2-(x-k)^2))-2*h*sqrt(a^2-x^2);
end
```

Integral

```
function [s]=Integral(liminf,limsup)
M=50;
h2=(limsup-liminf)/(2*M);
s1=0;s2=0;
for n=1:M
x=liminf+h2*(2*n-1);
s1=s1+feval('Funciones',x);
end
for n=1:(M-1)
x=liminf+h2*(2*n);
s2=s2+feval('Funciones',x);
end
s=h2*(feval('Funciones',liminf+1e-15)+feval('Funciones',limsup)+4*s1+2*s2)/3;
```

PropagFlama

```
function [Vgq,Vgnq,Agq,Agnq]=PropagFlama(k,a,Anglni,Thetab,Angulo,Volumen,VelFlam,SegPorGrad)
syms varx
V=Volumen;
h=V/(pi*a^2);
A=2*pi*a^2+2*pi*a*h;
if Angulo<=Anglni
Vgq=0;
Vgnq=V;
Agq=0;
Agnq=2*pi*a^2+2*pi*a*h;
r=0;
elseif Angulo>Anglni & Angulo<Anglni+Thetab
r=(Angulo-Anglni)*SegPorGrad*VelFlam;
if r<=sqrt((a+k)^2+h^2)
if r<=h
VarEq=1;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
if r+k<=a
Vgq=2*pi*r^3/3;
Agq=pi*r^2;
elseif r+k>a & k-r>=-a
C1=(a^2-r^2+k^2)/(2*k);
vol1=double(int((pi/2)*int(r^2-(varx-k)^2,k-r,C1));
[vol2]=Integral(C1,a);
Vgq=vol1+vol2;
A1=double(int(sqrt(r^2-(varx-k)^2),k-r,C1));
A2=double(int(sqrt(a^2-varx^2),C1,a));
A3=real(double(int(sqrt(2*varx*k+r^2-a^2-k^2)*sqrt(a^2/(a^2-varx^2)),C1,a)));
Agq=2*(A1+A2+A3);
elseif k-r<-a
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

[Vgq]=integral(-a,a);
A1=pi*a^2;
A2=2*pi*double(int(sqrt(2*varx*k+r^2-a^2-k^2),varx,-a,a));
Agq=A1+A2;
end
elseif r>h
if r^2<=(a-k)^2+h^2 & r+k<=a
vol1=2*pi*r^3/3;
vol2=(pi/3)*(r-h)^2*(2*r+h);
Vgq=vol1-vol2;
A1=pi*r^2;
A2=pi*(r^2-h^2);
Agq=real(A1+A2);
elseif r^2<=(a-k)^2+h^2 & r+k>a & k-r>=a
C1=(a^2-r^2+k^2)/(2*k);
VarEq=1;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
vol1=double((pi/2)*int(r^2-(varx-k)^2,k-r,C1));
[vol2]=integral(C1,a);
vol3=(pi/3)*(r-h)^2*(2*r+h);
Vgq=vol1+vol2-vol3;
A1=2*double(int(sqrt(r^2-(varx-k)^2),k-r,C1));
A2=2*double(int(sqrt(a^2-varx^2),C1,a));
A3=2*double(int(sqrt(2*varx*k+r^2-a^2-k^2)*sqrt(a^2/(a^2-varx^2)),C1,a));
A4=pi*(r^2-h^2);
Agq=real(A1+A2+A3+A4);
elseif r^2<=(a-k)^2+h^2 & k-r<-a
VarEq=1;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
[vol1]=integral(-a,a);
vol2=(pi/3)*(r-h)^2*(2*r+h);
Vgq=vol1-vol2;
A1=pi*a^2;
A2=2*double(int(sqrt(2*varx*k+r^2-a^2-k^2)*sqrt(a^2/(a^2-varx^2)),-a,a));
A3=pi*(r^2-h^2);
Agq=real(A1+A2+A3);
elseif r^2>(a-k)^2+h^2 & r^2<=(a+k)^2+h^2 & k-r>a
C1=(a^2-r^2+k^2)/(2*k);
C2=(a^2-r^2+h^2+k^2)/(2*k);
C3=k*sqrt(r^2-h^2);
VarEq=1;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
vol4=double((pi/2)*int(r^2-(varx-k)^2,k-r,C1));
[vol1]=integral(C1,a);
VarEq=2;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
[vol2]=integral(C3,C2);
VarEq=3;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
[vol3]=integral(C2,a);
Vgq=vol1-vol2-vol3+vol4;
A1=2*double(int(sqrt(r^2-(varx-k)^2),k-r,C1));
A2=2*double(int(sqrt(a^2-varx^2),C1,a));
A3=2*double(int(sqrt(2*varx*k+r^2-a^2-k^2),varx,C1,C2));
A4=2*h*double(int(sqrt(a^2/(a^2-varx^2)),varx,C2,a));
A5=2*double(int(sqrt(r^2-h^2-(varx-k)^2),C3,C2));
A6=2*double(int(sqrt(a^2-varx^2),C2,a));
Agq=real(A1+A2+A3+A4+A5+A6);
else
C2=(a^2-r^2+h^2+k^2)/(2*k);
C3=k*sqrt(r^2-h^2);
VarEq=1;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
[vol1]=integral(-a,a);
VarEq=2;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
[vol2]=integral(C3,C2);
VarEq=3;
radio=r;altura=h;save DatosFlama k a radio altura VarEq
[vol3]=integral(C2,a);
Vgq=vol1-vol2-vol3;
A1=pi*a^2;
A2=2*double(int(sqrt(2*varx*k+r^2-a^2-k^2),varx,-a,C2));

```

```

A3=2*h*double(inl(sqrt(a^2*(a^2-varx^2)),varx,C2,a));
A4=2*double(inl(sqrt(r^2-h^2*(varx-k)^2),C3,C2));
A5=2*double(inl(sqrt(a^2-varx^2),C2,a));
Agq=real(A1+A2+A3+A4+A5);
end
end
Vgnq=V-Vgq;
Agng=A-Agq;
end
else
r=0;
Vgq=V;
Agq=2*pi*a^2+2*pi*a*h;
Vgnq=0;
Agng=0;
end
end

```

PropiedadesGQ

```
function [H,V,U,CP]=PropiedadesGQ(T,Pre,Y)
```

```
PAtm = 0.9869233*Pre;
```

```
DatCalEspec = [0.44608041*10^1 0.30981719*10^-2 -0.12392571*10^-5 0.22741325*10^-9 -0.15525954*10^-13 -0.48961442*10^-5 -0.98635982;...
```

```

0.27167633*10^1 0.29451374*10^-2 -0.80224374*10^-6 0.10226682*10^-9 -0.48472145*10^-14 -0.29905826*10^5 0.66305671*10^1;...
0.28963194*10^1 0.15154866*10^-2 -0.57235277*10^-6 0.99807393*10^-10 -0.65223555*10^-14 -0.90586184*10^3 0.61615148*10^1;...
0.36219535*10^1 0.73618264*10^-3 -0.19652228*10^-6 0.36201558*10^-10 -0.28945627*10^-14 -0.12019825*10^4 0.36150960*10^1;...
0.29840696*10^1 0.14891390*10^-2 -0.57899684*10^-6 0.10364577*10^-9 -0.69353550*10^-14 -0.14245228*10^5 0.63479156*10^1;...
0.31001901*10^1 0.51119464*10^-3 0.52644210*10^-7 -0.34909973*10^-10 0.36945345*10^-14 -0.87738042*10^3 -0.19629421*10^1;...
0.25*10^1 0 0 0 0.25471627*10^5 -0.46011763*10^0;...
2.5382 -2.1282E-05 -4.1531E-09 3.9687E-12 -3.0014E-16 0.29230803*10^5 0.49203080*10^1;...
0.29106427*10^1 0.95931650*10^-3 -0.19441702*10^-6 0.13756646*10^-10 0.14224542*10^-15 0.39353815*10^4 0.54423445*10^1;...
0.3189*10^1 0.13382281*10^-2 -0.52899318*10^-6 0.95919332*10^-10 -0.64847932*10^-14 0.98283290*10^4 0.67458126*10^1];

```

```
MasMolComp = [44.01,18.02,28.008,32.28,01,2.018,1,0.009,16,17,0.009,30,004];
```

```
Ru = 8.31434;
```

```
for ki=1:10
```

```
CP0(ki)=DatCalEspec(ki,1)+DatCalEspec(ki,2)*T+DatCalEspec(ki,3)*T^2+DatCalEspec(ki,4)*T^3+DatCalEspec(ki,5)*T^4;
```

```
H0(ki)=DatCalEspec(ki,1)+DatCalEspec(ki,2)*T/2+DatCalEspec(ki,3)*T^2/3+DatCalEspec(ki,4)*T^3/4+DatCalEspec(ki,5)*T^4+DatCalEspec(ki,6)/T;
end
```

```
H=0;MW=0;CP=0;
```

```
for ki=1:10
```

```
H=H+H0(ki)*Y(ki);
```

```
MW=MW+MasMolComp(ki)*Y(ki);
```

```
CP=CP+Y(ki)*CP0(ki);
```

```
end
```

```
R=Ru/MW;
```

```
V=10*R*T/Pre;
```

```
CP=R*CP;
```

```
H=H*R*T;
```

```
U=H-R*T;
```

PropiedadesTransporte

```
function [R,CP,Mu,Lambda]=PropiedadesTransporte(k,Pre,T,Fi,F,TipoCombust,ParcOx,kini)
```

```
if T<1000
```

```
[H,U,V,S,Y,CP,DLVLT,DLVLP,CLC]=CombTempBajas(T,Pre,Fi,F,TipoCombust,ParcOx);
```

```
DatTermComp = [0.24007797*10^1,0.87350957*10^-5,-0.66070878*10^-5,0.20021861*10^-8,0.63274039*10^-15,-0.48377527*10^5,0.96951457*10^1;...
```

```

0.40701275*10^1,-0.11084499*10^-2,0.41521180*10^5,-0.29637404*10^-8,0.80702103*10^-12,-0.30279722*10^5,-0.32270046*10^0;...
0.36748261*10^1,-0.12081500*10^-2,0.23240102*10^5,-0.63217559*10^-9,-0.22577253*10^-12,-0.10611588*10^4,0.23580424*10^1;...
0.36255985*10^1,-0.18782184*10^-2,0.70554544*10^5,-0.67635137*10^-8,0.21555993*10^-11,-0.10475226*10^4,0.43052778*10^1;...
0.37100928*10^1,-0.16190964*10^-2,0.36923594*10^5,-0.20319674*10^-8,0.23953344*10^-12,-0.14356310*10^5,0.2955535*10^1;...

```

```

0.30574451*10^1,0.26765200*10^-2,-0.58099162*10^-5,0.55210391*10^-8,-0.18122739*10^-11,-0.98890474*10^3,-0.22997056];
for k=1:6
    CP0(k)=DatTermComp(k,1)+DatTermComp(k,2)*T+DatTermComp(k,3)*T^2+DatTermComp(k,4)*T^3+DatTermComp(k,5)*T^4;
end
N=6;
else
if k==floor(kini+1)
    [H,U,V,S,Y,CP,DLVLT,DLVLP]=CombTempAllas(T,Pre,Fi,F,TypoCombust,PorcOx);
else
    load Datos yMolGQ
    [H,V,U,CP]=PropiedadesGQ(T,Pre,yMolGQ(k-1,:));
    Y=yMolGQ(k-1,:);
end
DatCalEspec = [0.44608041*10^1 0.30981719*10^-2 -0.12392571*10^-5 0.22741325*10^-9,-0.15525954*10^-13 -0.48961442*10^5 -
0.98635982,...
0.27167633*10^1 0.29451374*10^-2 -0.80224374*10^-6 0.10226682*10^-9,-0.48472145*10^-14 -0.29905826*10^5 0.66305671*10^1;...
0.28963194*10^1 0.15154866*10^-2 -0.57235277*10^-6 0.99807393*10^-10,-0.65223555*10^-14 -0.90586184*10^3 0.61615148*10^1;...
0.36219535*10^1 0.73618264*10^-3 -0.19652228*10^-6 0.36201558*10^-10,-0.28945627*10^-14 -0.12019825*10^4 0.36150960*10^1;...
0.29840696*10^1 0.14891390*10^-2 -0.57899684*10^-6 0.10364577*10^-9,-0.69353550*10^-14 -0.14245228*10^5 0.63479156*10^1;...
0.31001901*10^1 0.51119464*10^-3 0.52644210*10^-7 -0.34909973*10^-10,0.36945345*10^-14 -0.87738042*10^3 -0.19629421*10^1;...
0.25*10^1 0 0 0 0 0.25471627*10^5 -0.46011763*10^0;...
0.55420596*10^1 -0.27550619*10^-4 -0.31028033*10^-8 0.45510674*10^-11,-0.43680515*10^-15 0.29230803*10^5 0.49203080*10^1;...
0.29106427*10^1 0.95931650*10^-3 -0.19441702*10^-6 0.13756646*10^-10,0.14224542*10^-15 0.39353815*10^4 0.54423445*10^1;...
0.3189*10^1 0.13382281*10^-2 -0.52899318*10^-6 0.95919332*10^-10,-0.64847932*10^-14 0.98283290*10^4 0.67458126*10^1];
for k=1:10
    CP0(k)=DatCalEspec(k,1)+DatCalEspec(k,2)*T+DatCalEspec(k,3)*T^2+DatCalEspec(k,4)*T^3+DatCalEspec(k,5)*T^4;
end
N=10;
end
Sigma=[3.941,2.641,3.798,3.467,3.690,2.827,2.708,3.050,3.147,3.492];
Epsilon=[195.2,809.1,71.4,106.7,91.7,59.7,37.106,7.79,8.116,7];

MasMolComp = [44.01,18.02,28.008,32.28,01,2.018,1.009,16,17,009,30,004];
Ru = 8.31434;
MasaMezcla = Y(1:N)*MasMolComp(1:N);
R = Ru/MasaMezcla;

for j=1:N
    TAsT=T/Epsilon(j);
    Omega=1.155*TAsT^(-0.1462+0.3945*exp(-0.6672*TAsT)+2.05*exp(-2.168*TAsT));
    Mu1(j)=26.693e-6*sqrt(MasMolComp(j)*T)*(Sigma(j)^2*Omega);
    Lambda1(j)=3.75*Ru*Mu1(j)/MasMolComp(j);
    Lambda2(j)=0.88*(0.4*CP0(j)-1)*Lambda1(j);
end

CPFroz=0;
MW=0;
Mu=0;
LMMIX1=0;
LMMIX2=0;
for j=1:N
    if Y(j)==0, break, end
    Den1=1;
    Den2=1;
    for k=1:N
        if j==k, break, end
        Dummy=(1+(Mu1(i)/Mu1(j))^0.5*(MasMolComp(j)/MasMolComp(i))^0.25)^2/(2*sqrt(2*(1+MasMolComp(i)/MasMolComp(j))));
        Den1=Den1+Dummy*Y(j)/Y(i);
        Den2=Den2+Dummy*(1+2.41*(MasMolComp(i)-MasMolComp(j))*(MasMolComp(i)-
0.142*MasMolComp(j))/(MasMolComp(i)+MasMolComp(j))^2)*Y(j)/Y(i);
    end
    CPFroz=CPFroz+CP0(j)*Y(i);
    MW=MW+Y(i)*MasMolComp(i);
    Mu=Mu+Mu1(i)/Den1;
    LMMIX1=LMMIX1+Lambda1(i)/Den2;
    LMMIX2=LMMIX2+Lambda2(i)/Den1;
end
Lambda=LMMIX1+LMMIX2;
CPFroz=CPFroz*Ru/MW;
CP=max(CP,CPFroz);
Lambda=Lambda*CP/CPFroz;

```

CoefTransfCalor

```
function [hNQ,hQ]=CoefTransfCalor(k,D,S,omega,T0,V0,V,VolGQ,P0,Pre,TNQ,TQ,Fi,F,TipoCombust,PorcOx,X,kini)
```

```
Up=omega*S/(100*pi); %velocidad media del piston [m/s]
```

```
if X<1
```

```
[R,CP,Mu,Lambda]=PropiedadesTransporte(k,Pre,TNQ,Fi,F,TipoCombust,PorcOx,kini);
```

```
gamma=CP/(CP-R);
```

```
Presion=P0*(V0/V)^gamma;
```

```
U=(2.28*Up+0.00324*(T0*(V-VolGQ)/V0)*((Pre-Presion)/P0))*100;
```

```
ro=Pre/(10*R*TNQ); %[g/cm3]
```

```
Re=D*U*ro/Mu;
```

```
hNQ=0.035*Lambda/D*Re^0.8*10000;
```

```
if X==0
```

```
hQ=0;
```

```
else
```

```
[R,CP,Mu,Lambda]=PropiedadesTransporte(k,Pre,TQ,Fi,F,TipoCombust,PorcOx,kini);
```

```
gamma=CP/(CP-R);
```

```
Presion=P0*(V0/V)^gamma;
```

```
U=(2.28*Up+0.00324*(T0*VolGQ/V0)*((Pre-Presion)/P0))*100;
```

```
ro=Pre/(10*R*TQ);
```

```
Re=D*U*ro/Mu;
```

```
hQ=0.035*Lambda/D*Re^0.8*10000;
```

```
end
```

```
elseif X==1
```

```
hNQ=0;
```

```
[R,CP,Mu,Lambda]=PropiedadesTransporte(k,Pre,TQ,Fi,F,TipoCombust,PorcOx,kini);
```

```
gamma=CP/(CP-R);
```

```
Presion=P0*(V0/V)^gamma;
```

```
U=(2.28*Up+0.00324*(T0*V/V0)*((Pre-Presion)/P0))*100;
```

```
ro=Pre/(10*R*TQ);
```

```
Re=D*U*ro/Mu;
```

```
hQ=0.035*Lambda/D*Re^0.8*10000;
```

```
end
```

Ecuadifer6

```
function dz = Ecuadifer6(Theta,z)
```

```
load Datos
```

```
dz = zeros(6,1);
```

```
Variable=sqrt(1-(eps*sin(Rad))^2);
```

```
dV=pi/8*Bc^2*Sc*sin(Rad)*(1+eps*cos(Rad)/Variable);
```

```
A=(dV+V*Cm/omega)/M(k);
```

```
if X<=0.0001
```

```
% Compresion
```

```
[HL,U,Vu,S,Y1,CP,DLVLT,DLVLP,CLC]=CombTempBajas(z(3),z(1),Fi,F,3,PorcOx);
```

```
B=hNQ(k)*Agnq(k)/(omega*M(k)*10000)*Vu/CP*DLVLT*(1-TW/z(3));
```

```
C=0;
```

```
D=0;
```

```
E=Vu^2/(CP*z(3))*DLVLT^2+10*Vu/z(1)*DLVLP;
```

```
dz(1)=-((A+B+C)/(D+E)*10)*pi/180;
```

```
dz(2)=0;
```

```
dz(3)=-((hNQ(k)*Agnq(k)/(omega*M(k)*CP*10000)*(z(3)-TW)+Vu/CP*DLVLT*(A+B+C)/(D+E))*pi/180;
```

```
elseif X>0.0001 & X<0.9999
```

```
% Combustion
```

```
[Hu,U,Vu,S,Y1,CPu,DLVLTu,DLVLPu,CLC]=CombTempBajas(z(3),z(1),Fi,F,3,PorcOx);
```

```
if k==floor(kini+1)
```

```
[Hb,U,Vb,S,Y2,CPb,DLVLTb,DLVLPb]=CombTempAltas(z(2),z(1),Fi,F,3,PorcOx);
```

```
else
```

```
[Hmal,Umal,Vmal,S,Y2,CPmal,DLVLTb,DLVLPb]=CombTempAltas(z(2),z(1),Fi,F,3,PorcOx);
```

```
[Hb,Vb,U,CPb]=PropiedadesGQ(z(2),z(1),yMolGQ(k-1,:));
```

```
end
```

```
B=hNQ(k)*Agnq(k)/(omega*M(k)*10000)*Vu/CPu*DLVLTu*(1-TW/z(3))+hQ(k)*Agq(k)/(omega*M(k)*10000)*Vb/CPb*DLVLTb*(1-TW/z(2));
```

```
C=-((Vb-Vu)*dX-Vb*DLVLTb*(Hu-Hb)/(CPb*z(2)))*(dX-(X-X^2)*Cm/omega);
```

```
D=X*(Vb^2/(CPb*z(2))*DLVLTb^2+10*Vb/z(1)*DLVLPb);
```

```
E=(1-X)*(Vu^2/(CPu*z(3))*DLVLTu^2+10*Vu/z(1)*DLVLPu);
```

```

HL=(1-X^2)*Hu+X^2*Hb;
dz(1)=(A+B+C)/(D+E)*10*pi/180;
dz(2)=(-hQ(k)*Agq(k)/(omega*M(k)*CPb*X*10000)*(z(2)-TW)+Vb/CPb*DLVLTb*(A+B+C)/(D+E)+(Hu-Hb)/CPb*(dX/X-(1-X)*Cm/omega))*pi/180;
dz(3)=(-hNQ(k)*Agnq(k)/(omega*M(k)*CPu*(1-X)*10000)*(z(3)-TW)+Vu/CPu*DLVLTu*(A+B+C)/(D+E))*pi/180;
elseif X>=0.9999
% Expansion
DLVLT=1;
DLVLP=-1;
[HL,Vb,U,CP]=PropiedadesGQ(z(2),z(1),yMolGQ(k-1,:));
B=hQ(k)*Agq(k)/(omega*M(k)*10000)*Vb/CP*DLVLT*(1-TW/z(2));
C=0;
D=Vb^2/(CP*z(2))*DLVLT^2+10*Vb/z(1)*DLVLP;
E=0;
dz(1)=(A+B+C)/(D+E)*10*pi/180;
dz(2)=(-hQ(k)*Agq(k)/(omega*M(k)*CP*10000)*(z(2)-TW)+Vb/CP*DLVLT*(A+B+C)/(D+E))*pi/180;
dz(3)=0;
end
dz(4)=(z(1)^dV/10)*pi/180;
if X<=0.001
dz(5)=(hNQ(k)*Agnq(k)*(z(3)-TW)/(omega*10000))*pi/180;
elseif X>0.001 & X<0.999
dz(5)=(hNQ(k)*Agnq(k)*(z(3)-TW)+hQ(k)*Agq(k)*(z(2)-TW))/(omega*10000))*pi/180;
elseif X>=0.999
dz(5)=(hQ(k)*Agq(k)*(z(2)-TW)/(omega*10000))*pi/180;
end
dz(6)=(Cm*M(k)/omega*HL)*pi/180;

```

CombTempBajas

funcion [H,U,V,S,Y,CP,DLVLT,DLVLP,CLC]=CombTempBajas(T,P,Fi,F,TipoCombust,PorcOx)

% Datos termodinamicos del combustible (1=CH4, 2=C6H6, 3=C7H17 Gasolina, 4=C14.4H24.9 Diesel, 5=CH3NO2, 6=CH3OH)
% 7=C2H6, 8=C3H6, 9=C3H8, 10=C4H8, 11=C4H10)

DalCombust = [1.971324 7.871586*10^-3 -1.048592*10^-6 -9.930422*10^3 8.873728 0 0;...

```

-2.545087 4.79554*10^-2 -2.030765*10^-5 8.782234*10^3 3.348825*10^1 0 0;...
4.0652 6.0977*10^-2 -1.8801*10^-5 -3.5880*10^4 1.545*10^1 0 0;...
7.9710 1.1954*10^-1 -3.6858*10^-5 -1.9385*10^4 -1.7879 0 0;...
1.412633 2.087101*10^-2 -8.142134*10^-6 -1.026351*10^4 1.917126*10^1 0 0;...
1.779819 1.262503*10^-2 -3.624890*10^-6 -2.525420*10^4 1.50884*10^1 0 0;...
4.83 1.38e-2 -4.56e-6 6.72e-10 -3.6e-14 -1.27e4 -5.24;...
6.73 1.49e-2 -4.95e-6 7.21e-10 -3.77e-14 -9.24e2 -1.33e1;...
7.53 1.89e-2 -6.28e-6 9.18e-10 -4.81e-14 -1.65e4 -1.78e1;...
2.05 3.44e-2 -1.59e-5 3.31e-9 -2.54e-13 -2.14e3 1.55e1;...
2e1 1.04e-2 -9.61e-7 -4.62e-10 8.2e-14 -2.63e4 -8.84e1;

```

% Composicion del combustible (C H O N)

ComposCombust = [1 4 0 0;...

```

6 6 0 0;...
7 17 0 0;...
14 4 24.9 0 0;...
1 3 2 1;...
1 4 1 0;...
2 6 0 0;...
3 6 0 0;...
3 8 0 0;...
4 8 0 0;...
4 10 0 0];

```

% Datos termodinamicos de los compuestos (1=CO2, 2=H2O, 3=N2, 4=O2, 5=CO, 6=H2)

DalTermComp = [0.24007797*10^1, 0.87350957*10^-2, -0.66070878*10^5, 0.20021861*10^-8, 0.63274039*10^-15, -0.48377527*10^5, 0.96951457*10^1;...

```

0.40701275*10^1, -0.11084499*10^-2, 0.41521180*10^5, -0.29637404*10^-8, 0.80702103*10^-12, -0.30279722*10^5, -0.32270046*10^0;...
0.36748261*10^1, -0.12081500*10^-2, 0.23240102*10^5, -0.63217559*10^-9, -0.22577253*10^12, -0.10611588*10^4, 0.23580424*10^1;...
0.36255985*10^1, -0.18782184*10^-2, 0.70554544*10^5, -0.67635137*10^-8, 0.21555993*10^-11, -0.10475226*10^4, 0.43052778*10^1;...
0.371100928*10^1, -0.16190964*10^-2, 0.36923594*10^5, -0.20319674*10^-8, 0.23953344*10^-12, -0.14356310*10^5, 0.29555535*10^1;...
0.30574451*10^1, 0.26765200*10^-2, -0.58099162*10^5, 0.55210391*10^-8, -0.18122739*10^-11, -0.98890474*10^3, -0.22997056*10^1];

```

Ru = 8.313434;

MasMolComp = [44.01,18.02,28.008,32.28,0.1,2.018];

CompTermComb=DalCombust(TipoCombust,:);

CLC=ComposCombust(TipoCombust.);

epsilon=(0.210+0.79*PorcOx)/(CLC(1)+0.25*CLC(2)-0.5*CLC(3));

DLVLT=1;

DLVLP=-1;

if Fik<=1

Nu(1) = CLC(1)*Fi*epsilon;

Nu(2) = CLC(2)*Fi*epsilon/2;

Nu(3) = 0.79*(1-PorcOx)+CLC(4)*Fi*epsilon/2;

Nu(4) = (0.21+0.79*PorcOx)*(1-Fi);

Nu(5) = 0;

Nu(6) = 0;

DCDT=0;

elseif Fi>1

Z = 1000/T;

K = exp(2.743+Z*(-1.761+Z*(-1.611+Z*0.2803)));

DKDT=K*(-1.761+Z*(-3.222+Z*0.8409))/1000;

A = 1-K;

B = 2*(0.21+0.79*PorcOx)-Fi*epsilon*(2*CLC(1)-CLC(3))+K*(2*(0.21+0.79*PorcOx)*(Fi-1)+CLC(1)*Fi*epsilon);

C = -2*(0.21+0.79*PorcOx)*CLC(1)*Fi*epsilon*(Fi-1)*K;

Nu(5) = ((B+sqrt(B*B-4*A*C))/(2*A));

DCDT=DKDT*(Nu(5)^2-Nu(5))*(2*(0.21+0.79*PorcOx)*(Fi-1)+CLC(1)*Fi*epsilon)+2*(0.21+0.79*PorcOx)*CLC(1)*Fi*epsilon*(Fi-1))/(2*Nu(5)*A+B);

Nu(1) = CLC(1)*Fi*epsilon-Nu(5);

Nu(2) = 2*(0.21+0.79*PorcOx)-Fi*epsilon*(2*CLC(1)-CLC(3))+Nu(5);

Nu(3) = 0.79*(1-PorcOx)+CLC(4)*Fi*epsilon/2;

Nu(4) = 0;

Nu(6) = 2*(0.21+0.79*PorcOx)*(Fi-1)-Nu(5);

end

% Fracción masica y Peso Molecular de los residuos

MolesTotRes = sum(Nu);

MolFracRes = Nu/MolesTotRes;

PesoMolecRes = MasMolComp*MolFracRes;

for j=1:6

FracMasa(j) = MasMolComp(j)*MolFracRes(j)/PesoMolecRes;

end

% Fracción molar y peso molecular de la mezcla aire-oxigeno-combustible

MasaCombust=12.01*CLC(1,1)+1.008*CLC(1,2)+16*CLC(1,3)+14.01*CLC(1,4);

Combust = epsilon*Fi/(1+epsilon*Fi);

O2 = (0.21+0.79*PorcOx)/(1+epsilon*Fi);

N2 = 0.79*(1-PorcOx)/(1+epsilon*Fi);

MasAirComb = Combust*MasaCombust+MasMolComp(4)*O2+MasMolComp(3)*N2;

% Fracción molar de la mezcla aire-oxigeno-combustible mas los gases residuales

YRes = F/(F+(PesoMolecRes/MasAirComb)*(1-F));

YResGases = MolFracRes*YRes;

YCombust = Combust*(1-YRes);

YResGases(3) = YResGases(3)+N2*(1-YRes);

YResGases(4) = YResGases(4)+O2*(1-YRes);

YResGases(1:1) = YCombust;

% Propiedades de los Componentes (1=CO2, 2=H2O, 3=N2, 4=O2, 5=CO, 6=H2)

for k=1:6

CP0(k)=DatTermComp(k,1)+DatTermComp(k,2)*T+DatTermComp(k,3)*T^2+DatTermComp(k,4)*T^3+DatTermComp(k,5)*T^4;

H0(k)=DatTermComp(k,1)+DatTermComp(k,2)*T/2+DatTermComp(k,3)*T^2/3+DatTermComp(k,4)/4*T^3+DatTermComp(k,5)/5*T^4+DatTermComp(k,6)/T;

S0(k)=DatTermComp(k,1)*log(T)+DatTermComp(k,2)*T+DatTermComp(k,3)*T^2/2+DatTermComp(k,4)/3*T^3+DatTermComp(k,5)/4*T^4+DatTermComp(k,7);

end

% Propiedades del combustible

if TipoCombust<=6

CPCombust = CompTermComb(1)+CompTermComb(2)*T+CompTermComb(3)*T^2;

HCombust = CompTermComb(1)+CompTermComb(2)/2*T+CompTermComb(3)/3*T^2+CompTermComb(4)/T;

S0Combust = CompTermComb(1)*log(T)+CompTermComb(2)*T+CompTermComb(3)/2*T^2+CompTermComb(5);

else

CPCombust = CompTermComb(1)+CompTermComb(2)*T+CompTermComb(3)*T^2++CompTermComb(4)*T^3+CompTermComb(5)*T^4;

```

HCombust =
CompTermComb(1)+CompTermComb(2)/2*T+CompTermComb(3)/3*T^2+CompTermComb(4)/4*T^3+CompTermComb(5)/5*T^4+CompTermCo
mb(6)/T;
SOCombust =
CompTermComb(1)*log(T)+CompTermComb(2)*T+CompTermComb(3)/2*T^2+CompTermComb(4)/3*T^3+CompTermComb(5)/4*T^4+CompTe
rmComb(7);
end

%Propiedades de la mezcla
Valor=[-1 1 0 0 1 -1];
H=HCombust*YCombust;
if YCombust==0
    S=0;
else
    S=(SOCombust-log(YCombust))*YCombust;
end
CP=CPCombust*YCombust;
MasaMezc=MasaCombust*YCombust;
for j=1:6
    H=H+H0(j)*YResGases(j);
    if YResGases(j)>0
        S=S+YResGases(j)*(SO(j)-log(YResGases(j)));
    else
        S=S;
    end
    CP=CP+CP0(j)*YResGases(j)+H0(j)*T*Valor(j)*DCDT*YRes/MolesTotRes;
    MasaMezc=MasaMezc+YResGases(j)*MasMolComp(j);
end

R=Ru/MasaMezc;
H=R*T*H;
U=H-R*T;
V=10*R*T/P;
S=R*(-log(0.9869*P)+S);
CP=R*CP;
Y=YResGases;
    
```

CombTempAltas

```

function [H,U,V,S,Y,CP,DLVLT,DLVLP]=CombTempAltas(T,P,Fi,F,TipoCombust,PorcOx)
PALm = 0.9869233*P;
MaxIter=500;
Razon=15;
Tot=3e-8;
    
```

```

% Datos de calores especificos de Gordon y McBride (1971)
DatCalEspec = [0.44608041*10^1 0.30981719*10^-2 -0.12392571*10^-5 0.22741325*10^-9 -0.15525954*10^-13 -0.48961442*10^-5 -
0.98635982;...
0.27167833*10^1 0.29451374*10^-2 -0.80224374*10^-6 0.10226682*10^-9 -0.48472145*10^-14 -0.29905826*10^-5 0.66305671*10^1;...
0.28963194*10^1 0.15154868*10^-2 -0.57235277*10^-6 0.99807393*10^-10 -0.65223555*10^-14 -0.90586184*10^3 0.61615148*10^1;...
0.36219535*10^1 0.73618264*10^-3 -0.19652228*10^-6 0.36201558*10^-10 -0.28945627*10^-14 -0.12019825*10^4 0.35150960*10^1;...
0.29840696*10^1 0.14891390*10^-2 -0.57899684*10^-6 0.10364577*10^-9 -0.69353550*10^-14 -0.14245228*10^-5 0.63479156*10^1;...
0.31001901*10^1 0.51119464*10^-3 0.52644210*10^-7 -0.34909973*10^-10 0.36945345*10^-14 -0.87738042*10^-3 -0.19629421*10^1;...
0.25*10^1 0 0 0 0.25471627*10^5 -0.46011763*10^0;...
2.5382 -2.1282E-05 -4.1531E-09 3.9687E-12 -3.0014E-16 0.29230803*10^5 0.49203080*10^1;...
0.29106427*10^1 0.95931650*10^-3 -0.19441702*10^-6 0.13756646*10^-10 0.14224542*10^-15 0.39353815*10^4 0.54423445*10^1;...
0.3189*10^1 0.13382281*10^-2 -0.52899318*10^-6 0.95919332*10^-10 -0.64847932*10^-14 0.98283290*10^4 0.67458126*10^1];
    
```

```

% Datos de las constantes de equilibrio de Olikara y Borman (1975)
DalKp = [0.432168, -0.112464*10^5, 0.267269*10^1, -0.745744*10^4, 0.242484*10^8;...
0.310805, -0.129540*10^5, 0.321779*10^1, -0.738336*10^4, 0.344645*10^8;...
-0.141784, -0.213308*10^4, 0.853461, 0.355015*10^4, -0.310227*10^8;...
0.150879*10^-1, -0.470959*10^4, 0.646096, 0.272805*10^5, -0.154444*10^8;...
-0.752364, 0.124210*10^5, -0.260286*10^1, 0.259556*10^3, -0.162687*10^-7;...
-0.415302*10^-2, 0.148627*10^5, -0.475746*10^1, 0.124699*10^-3, -0.900227*10^8];
    
```

```

MasMolComp = [44.01,18.02,28.008,32.28,01.2,018,1,009,16,17,009,30,004];
Ru = 8.31434;
    
```

```

[HF,UF,VF,SF,YF,CPF,DLVLTf,DLVLPf,CLC]=CombTempBajas(T,P,Fi,1,TipoCombust,PorcOx);
Y=YF;
    
```

```

for i=1:6
    Kp(i)=10*(DatKp(i,1)*log(T/1000)+DatKp(i,2)/T+DatKp(i,3)+DatKp(i,4)*T+DatKp(i,5)*T^2);
end
epsilon=(0.210+0.79*PorcOx)/(CLC(1)+0.25*CLC(2)-0.5*CLC(3));

C(1) = Kp(1)/sqrt(PAIm);
C(2) = Kp(2)/sqrt(PAIm);
C(3) = Kp(3);
C(4) = Kp(4);
C(5) = Kp(5)*sqrt(PAIm);
C(6) = Kp(6)*sqrt(PAIm);
D(1) = CLC(2)/CLC(1);
D(2) = (CLC(3)+2*0.210+0.79*PorcOx)/(epsilon*Fi)/CLC(1);
D(3) = (CLC(4)+2*0.79*(1-PorcOx)/(epsilon*Fi))/CLC(1);

if Fi<=1
    Y(5)=(2*Y(3)+C(4)*sqrt(Y(4)*Y(3)))/(D(3)*(1+C(6)*sqrt(Y(4))));
    Y(6)=(C(6)*Y(5)*sqrt(Y(4))*(1+D(1))+Y(3)+Y(4)+Y(5)*(1+D(1))+C(2)*sqrt(Y(4))+C(4)*sqrt(Y(4)*Y(3))-1)/(C(5)*sqrt(Y(4))+1);
    Y(7)=C(1)*sqrt(Y(6));
    Y(8)=C(2)*sqrt(Y(4));
    Y(9)=C(3)*sqrt(Y(4)*Y(6));
    Y(10)=C(4)*sqrt(Y(4)*Y(3));
    var1=C(6)*Y(5)+C(5)*Y(6)+C(2)+C(3)*sqrt(Y(6))+C(4)*sqrt(Y(3));
    var2=2*Y(6)+C(1)*sqrt(Y(6))+Y(5)*(D(2)-D(1)-1);
    var3=C(6)*Y(5)*(2+D(1)-D(2))-C(5)*Y(6)+C(2)+C(4)*sqrt(Y(3));
    Y(4)=(var2-(var3/var1)*(1-Y(3)-Y(5)-Y(6)-C(1)*sqrt(Y(6))))/(2-var3/var1);
elseif Fi>1
    var1=C(6)*Y(5)+C(5)*Y(6)+C(2)+C(3)*sqrt(Y(6))+C(4)*sqrt(Y(3));
    var2=2*Y(6)+C(1)*sqrt(Y(6))+Y(5)*(D(2)-D(1)-1);
    var3=C(6)*Y(5)*(2+D(1)-D(2))-C(5)*Y(6)+C(2)+C(4)*sqrt(Y(3));
    Y(4)=(var2-(var3/var1)*(1-Y(3)-Y(5)-Y(6)-C(1)*sqrt(Y(6))))/(2-var3/var1);
    if Y(4)<0, Y(4)=1e-25; end
    Y(7)=C(1)*sqrt(Y(6));
    Y(8)=C(2)*sqrt(Y(4));
    Y(9)=C(3)*sqrt(Y(4)*Y(6));
    Y(10)=C(4)*sqrt(Y(4)*Y(3));
end

n=1;
error=1;
while (error>Tol & n<=MaxIter)
    D76=0.5*C(1)/sqrt(Y(6));
    D84=0.5*C(1)/sqrt(Y(4));
    D94=0.5*C(3)*sqrt(Y(6)/Y(4));
    D96=0.5*C(3)*sqrt(Y(4)/Y(6));
    D104=0.5*C(4)*sqrt(Y(3)/Y(4));
    D103=0.5*C(4)*sqrt(Y(4)/Y(3));
    D26=C(5)*sqrt(Y(4));
    D24=0.5*C(5)*Y(6)/sqrt(Y(4));
    D14=0.5*C(6)*Y(5)/sqrt(Y(4));
    D15=C(6)*sqrt(Y(4));
    A(1,1)=1+D103;
    A(1,2)=D14+D24+1+D84+D104+D94;
    A(1,3)=D15+1;
    A(1,4)=D26+1+D76+D96;
    A(2,1)=0;
    A(2,2)=2*D24+D94-D(1)*D14;
    A(2,3)=D(1)*D15-D(1);
    A(2,4)=2*D26+2+D76+D96;
    A(3,1)=D103;
    A(3,2)=2*D14+D24+2+D84+D94+D104-D(2)*D14;
    A(3,3)=2*D15+1-D(2)*D15-D(2);
    A(3,4)=D26+D96;
    A(4,1)=2+D103;
    A(4,2)=D104-D(3)*D14;
    A(4,3)=D(3)*D15-D(3);
    A(4,4)=0;

    Func(1,1)=Y(1)+Y(2)+Y(3)+Y(4)+Y(5)+Y(6)+Y(7)+Y(8)+Y(9)+Y(10)-1;
    Func(2,1)=2*Y(2)+2*Y(6)+Y(7)+Y(9)-D(1)*(Y(1)+Y(5));
    Func(3,1)=2*Y(1)+Y(2)+2*Y(4)+Y(5)+Y(8)+Y(9)+Y(10)-D(2)*(Y(1)+Y(5));
    Func(4,1)=2*Y(3)+Y(10)-D(3)*(Y(1)+Y(5));
    DeltaY=A-I*Func;

```

```

error=max(abs(DeltaYi));
Y(3)=Y(3)+DeltaYi(1)/Razon;
Y(4)=Y(4)+DeltaYi(2)/Razon;
Y(5)=Y(5)+DeltaYi(3)/Razon;
Y(6)=Y(6)+DeltaYi(4)/Razon;
for i=3:6
    Y(i)=min(1,max(Y(i),1e-25));
end
Y(1)=C(6)*Y(5)*sqrt(Y(4));
Y(2)=C(5)*sqrt(Y(4))*Y(6);
Y(7)=C(1)*sqrt(Y(6));
Y(8)=C(2)*sqrt(Y(4));
Y(9)=C(3)*sqrt(Y(4))*Y(6);
Y(10)=C(4)*sqrt(Y(4))*Y(3);
n=n+1;
end

for i=1:6
    DKDT(i)=log(10)*Kp(i)*(DatKp(i,1)/T-DalKp(i,2)/T^2+DatKp(i,4)+2*DalKp(i,5)*T);
end
DCDT(1)=DKDT(1)/sqrt(PAIm);
DCDT(2)=DKDT(2)/sqrt(PAIm);
DCDT(3)=DKDT(3);
DCDT(4)=DKDT(4);
DCDT(5)=DKDT(5)*sqrt(PAIm);
DCDT(6)=DKDT(6)*sqrt(PAIm);
DCDP(1)=-0.5*C(1)/P;
DCDP(2)=-0.5*C(2)/P;
DCDP(5)=0.5*C(5)/P;
DCDP(6)=0.5*C(6)/P;
X1=Y(1)/C(6);
X2=Y(2)/C(5);
X7=Y(7)/C(1);
X8=Y(8)/C(2);
X9=Y(9)/C(3);
X10=Y(10)/C(4);
DFDT(1)=DCDT(6)*X1+DCDT(5)*X2+DCDT(1)*X7+DCDT(2)*X8+DCDT(3)*X9+DCDT(4)*X10;
DFDT(2)=2*DCDT(5)*X2+DCDT(1)*X7+DCDT(3)*X9-D(1)*DCDT(6)*X1;
DFDT(3)=2*DCDT(6)*X1+DCDT(5)*X2+DCDT(2)*X8+DCDT(3)*X9+DCDT(4)*X10-D(2)*DCDT(6)*X1;
DFDT(4)=DCDT(4)*X10-D(3)*DCDT(6)*X1;
DFDP(1)=DCDP(6)*X1+DCDP(5)*X2+DCDP(1)*X7+DCDP(2)*X8;
DFDP(2)=2*DCDP(5)*X2+DCDP(1)*X7-D(1)*DCDP(6)*X1;
DFDP(3)=2*DCDP(6)*X1+DCDP(5)*X2+DCDP(2)*X8-D(2)*DCDP(6)*X1;
DFDP(4)=-D(3)*DCDP(6)*X1;

DYDT0=A\(-DFDT);
DYDT(3)=DYDT0(1,1);
DYDT(4)=DYDT0(2,1);
DYDT(5)=DYDT0(3,1);
DYDT(6)=DYDT0(4,1);
DYDT(1)=sqrt(Y(4))*Y(5)*DCDT(6)+D14*DYDT(4)+D15*DYDT(5);
DYDT(2)=sqrt(Y(4))*Y(6)*DCDT(5)+D24*DYDT(4)+D26*DYDT(6);
DYDT(7)=sqrt(Y(6))*DCDT(1)+D76*DYDT(6);
DYDT(8)=sqrt(Y(4))*DCDT(2)+D84*DYDT(4);
DYDT(9)=sqrt(Y(4))*Y(6)*DCDT(3)+D94*DYDT(4)+D96*DYDT(6);
DYDT(10)=sqrt(Y(4))*Y(3)*DCDT(4)+D104*DYDT(4)+D103*DYDT(3);

DYDP0=A\(-DFDP);
DYDP(3)=DYDP0(1,1);
DYDP(4)=DYDP0(2,1);
DYDP(5)=DYDP0(3,1);
DYDP(6)=DYDP0(4,1);
DYDP(1)=sqrt(Y(4))*Y(5)*DCDP(6)+D14*DYDP(4)+D15*DYDP(5);
DYDP(2)=sqrt(Y(4))*Y(6)*DCDP(5)+D24*DYDP(4)+D26*DYDP(6);
DYDP(7)=sqrt(Y(6))*DCDP(1)+D76*DYDP(6);
DYDP(8)=sqrt(Y(4))*DCDP(2)+D84*DYDP(4);
DYDP(9)=D94*DYDP(4)+D96*DYDP(6);
DYDP(10)=D104*DYDP(4)+D103*DYDP(3);

for k=1:10
    CP0(k)=DalCalEspec(k,1)+DalCalEspec(k,2)*T+DalCalEspec(k,3)*T^2+DalCalEspec(k,4)*T^3+DalCalEspec(k,5)*T^4;

```

```
H0(k)=DalCalEspec(k,1)+DalCalEspec(k,2)*T/2+DalCalEspec(k,3)*T^2/3+DalCalEspec(k,4)*T^3+DalCalEspec(k,5)/5*T^4+DalCalEspec(k,6)/T;
```

```
S0(k)=DalCalEspec(k,1)*log(T)+DalCalEspec(k,2)*T+DalCalEspec(k,3)*T^2/2+DalCalEspec(k,4)/3*T^3+DalCalEspec(k,5)/4*T^4+DalCalEspec(k,7);
end
```

```
Y(1)=(2*Y(3)+Y(10))/D(3)-Y(5);
Y(2)=(D(1)/D(3)*(2*Y(3)+Y(10))-2*Y(6)-Y(7)-Y(9))/2;
```

```
H=0;MW=0;MT=0;MP=0;CP=0;S=0;
```

```
for k=1:10
```

```
  H=H+H0(k)*Y(k);
```

```
  MW=MW+MasMolComp(k)*Y(k);
```

```
  MT=MT+MasMolComp(k)*DYDT(k);
```

```
  MP=MP+MasMolComp(k)*DYDP(k);
```

```
  CP=CP+Y(k)*CP0(k)+H0(k)*T*DYDT(k);
```

```
  S=S+Y(k)*(S0(k)-log(Y(k)));
```

```
end
```

```
R=Rw/MW;
```

```
V=10*R*T/P;
```

```
CP=R*(CP-H*T*MT/MW);
```

```
DLVLT=1+max(0,-T*MT/MW);
```

```
DLVLP=-1-max(0,P*MP/MW);
```

```
H=H*R*T;
```

```
U=H*R*T;
```

```
S=R*(-log(Patm)+S);
```

CicloCompletoCombustion

```
Theta = -180;
```

```
omega = RPM*pi/30;
```

```
epsi=Sc/(2*L);
```

```
Rad=Theta*pi/180;
```

```
VTDC=pi/4*Bc^2*Sc/(R-1);
```

```
Cm=log(1-PorcMasPerd/100)*omega/(-2*pi);
```

```
[V,X,EM]=Auxiliar(VTDC,R,Rad,epsi,Theta,ThetaS,ThetaB,Cm,omega);
```

```
[HU,U,VU,SU,Y1,CP,DLVLT,DLVLP,CLC]=CombTempBajas(T1,P1,Fi,F,3,PorcOx);
```

```
MNot=V/VU;
```

```
UNot=MNot*U;
```

```
k=1;
```

```
P(k)=P1; Tb(k)=0; Tu(k)=T1; W(k)=0; Ql(k)=0; Hl(k)=0;
```

```
ThetaIni=-180;
```

```
ThetaFin=180;
```

```
VFinIgn=VTDC*(1+(R-1)/2*(1-cos((ThetaS+ThetaB)*pi/180)+(1/epsi)*(1-sqrt(1-epsi^2*(sin((ThetaS+ThetaB)*pi/180))^2)));
```

```
hFinIgn=VFinIgn/(p*Bc^2/4);
```

```
dReconFlama=sqrt((Bc/2+Sb)^2+hFinIgn^2);
```

```
SegPorGrad=(RPM/60*360)^-1;
```

```
VelFlama=dReconFlama/(SegPorGrad*ThetaB);
```

```
MasMolComp = [44.01,18.02,28.008,32,28.01,2.018,1.009,16,17.009,30.004];
```

```
MasaCombust=12.01*CLC(1,1)+1.008*CLC(1,2)+16*CLC(1,3)+14.01*CLC(1,4);
```

```
ConcMolGQ((ThetaFin+180)/PasoAngular+1,10)=0;
```

```
ConcMolTot((ThetaFin+180)/PasoAngular+1,10)=0;
```

```
kini=(ThetaS-ThetaIni)/PasoAngular+1;
```

```
for k=1:(ThetaFin-ThetaIni)/PasoAngular+1
```

```
  Angulo(k)=ThetaIni+PasoAngular*(k-1);
```

```
  Rad=Angulo(k)*pi/180;
```

```
  [V,X,EM]=Auxiliar(VTDC,R,Rad,epsi,Angulo(k),ThetaS,ThetaB,Cm,omega);
```

```
  Volumen(k)=V;
```

```
  FracQuem(k)=X;
```

```
  M(k)=EM*MNot;
```

```
  dX=0.5*sin(pi*(Angulo(k)-ThetaS)/ThetaB)*180/ThetaB;
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

if Angulo(k)<=ThetaS & ThetaS<Angulo(k)+PasoAngular
  Tbxprox=2200;
  [Huprob,Uprob,Vprob,Sprob,Y1prob,CPuprob,DLVLTuprob,DLVLPuprob,CLC]=CombTempBajas(Tu(k),P(k),Fi,F,3,PorcOx);
  for variable=1:10
    [Hbprob,Uprob,Vbprob,Sprob,Y2prob,CPbprob,DLVLTbprob,DLVLPbprob]=CombTempAltas(Tbxprox,P(k),Fi,F,3,PorcOx);
    Della=(Huprob-Hbprob)/CPbprob;
    Tbxprox=Tbxprox+Della;
    Tb(k)=Tbxprox;
  end
end

[Vgq(k),Vgnq(k),Agq(k),Agnq(k)]=PropagFlama(Sb,Bc/2,ThetaS,ThetaB,Angulo(k),Volumen(k),VelFlama,SegPorGrad);

save Datos
[hNQ(k),hQ(k)]=CoefTransfCalor(k,Bc,Sc,omega,Tu(1),Volumen(1),V,Vgq(k),P(1),P(k),Tu(k),Tb(k),Fi,F,3,PorcOx,X,kini);

save Datos
[Ang,Var]=ode113(@Ecuadifer6,[Angulo(k) Angulo(k)+PasoAngular],[P(k) Tb(k) Tu(k) W(k) Ql(k) Hl(k)]);

if X<=0.0001
  [EntalpNQ,EnergIntNQ,VolumNQ,EntropNQ,YNQ,CPNQ,DLVLTNQ,DLVLPNQ,CLC]=CombTempBajas(Tu(k),P(k),Fi,F,3,PorcOx);
  ComposicionNQ(k,:)=YNQ;
elseif X>0.0001 & X<0.9999
  [EntalpNQ,EnergIntNQ,VolumNQ,EntropNQ,YNQ,CPNQ,DLVLTNQ,DLVLPNQ,CLC]=CombTempBajas(Tu(k),P(k),Fi,F,3,PorcOx);
  ComposicionNQ(k,:)=YNQ;
  [EntalpQ,EnergIntQ,VolumQ,EntropQ,YQ,CPQ,DLVLTQ,DLVLPQ]=CombTempAltas(Tb(k),P(k),Fi,F,3,PorcOx);
  ComposicionQ(k,:)=YQ;
  if isreal(YQ)==0, break, end
end

if X<=0
  MolesTotReact=(2*ComposicionNQ(k,1)+ComposicionNQ(k,2)+2*ComposicionNQ(k,4)+ComposicionNQ(k,5))/(2*(0.210+0.79*PorcOx));
  NuReactivos=ComposicionNQ(k,:)/MolesTotReact;
  MasaReactivos=NuReactivos(1:10)*MasMolComp+NuReactivos(11)*MasaCombust;
  ConcMolTot(k,1:10)=NuReactivos(1:10)*M(k)/MasaReactivos;
  ConcMolTot(k,11)=NuReactivos(11)*M(k)/MasaReactivos;
  Masa(k)=ConcMolTot(k,1:10)*MasMolComp+ConcMolTot(k,11)*MasaCombust;
elseif X>0 & X<1
  MolesTotReact=(2*ComposicionNQ(k,1)+ComposicionNQ(k,2)+2*ComposicionNQ(k,4)+ComposicionNQ(k,5))/(2*(0.210+0.79*PorcOx));
  NuReactivos=ComposicionNQ(k,:)/MolesTotReact;
  MasaReactivos=NuReactivos(1:10)*MasMolComp+NuReactivos(11)*MasaCombust;
  MolesTotProd=(NuReactivos(11)*CLC(1)+NuReactivos(1)+NuReactivos(5))/(ComposicionQ(k,1)+ComposicionQ(k,5));
  NuProductos=ComposicionQ(k,:)/MolesTotProd;
  MasaMezclaFFlama=NuProductos(1:10)*MasMolComp;
  if k=floor(kini+1)
    ConcMolPorCm3FFlama=(NuProductos*FracQuem(k)*M(k))/(1000*MasaMezclaFFlama)/Vgq(k);
    ConcMolPorCm3=ConcMolPorCm3FFlama*FracQuem(k);
    MasaMezcla=MasaMezclaFFlama;
  else
    MasaMezcla=ConcMolGQ(k-1,:)*MasMolComp/FracQuem(k-1);
    ConcMolPorCm3=ConcMolGQ(k-1,:)*(FracQuem(k-1)*M(k-1)/(1000*MasaMezcla))/Vgq(k-1);
  end
  tini=(k-kini)*PasoAngular*SegPorGrad; tfin=(k-kini+1)*PasoAngular*SegPorGrad;
  [ConcMezclaGQ]=SolConcMolar(ConcMolPorCm3,tini,tfin,Tb(k));
  if k=floor(kini+1)
    ConcMolGQ(k,:)=ConcMezclaGQ*Vgq(k)*1000*MasaMezcla/(FracQuem(k)*M(k));
  else
    ConcMolGQ(k,:)=ConcMezclaGQ*Vgq(k-1)*1000*MasaMezcla/(FracQuem(k-1)*M(k-1))+NuProductos(1:10)*(FracQuem(k)-FracQuem(k-1));
  end
  yMolGQ(k,:)=ConcMolGQ(k,:)/sum(ConcMolGQ(k,:));
  ConcMolTotGNQ(k,1:11)=NuReactivos(1:11)*(1-FracQuem(k))*M(k)/MasaReactivos;
  ConcMolTotGQ(k,1:10)=ConcMolGQ(k,1:10)*FracQuem(k)*M(k)/(ConcMolGQ(k,:)*MasMolComp);
  ConcMolTotGQ(k,11)=0;
  ConcMolTot(k,:)=ConcMolTotGNQ(k,:)+ConcMolTotGQ(k,:);
  Masa(k)=ConcMolTot(k,1:10)*MasMolComp+ConcMolTot(k,11)*MasaCombust;
elseif X=1
  MasaMezcla=ConcMolGQ(k-1,:)*MasMolComp;
  ConcMolPorCm3=ConcMolGQ(k-1,:)*M(k-1)/(1000*MasaMezcla)/Vgq(k-1);
  tini=(k-kini)*PasoAngular*SegPorGrad; tfin=(k-kini+1)*PasoAngular*SegPorGrad;
  [ConcMezclaGQ]=SolConcMolar(ConcMolPorCm3,tini,tfin,Tb(k));
  ConcMolGQ(k,:)=ConcMezclaGQ*Vgq(k)*1000*MasaMezcla/M(k);
  yMolGQ(k,:)=ConcMolGQ(k,:)/sum(ConcMolGQ(k,:));

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

ConcMolTot(k,1:10)=ConcMolGQ(k,:)*M(k)/(ConcMolGQ(k,:)*MasMolComp);
Masa(k)=ConcMolTot(k,1:10)*MasMolComp;
end

yMolar(k,:)=ConcMolTot(k,:)/sum(ConcMolTot(k,:));
for ind=1:10
    ConcMasaTot(k,ind)=ConcMolTot(k,ind)*MasMolComp(ind);
end
ConcMasaTot(k,11)=ConcMolTot(k,11)*MasaCombust;
xMasa(k,:)=ConcMasaTot(k,:)/sum(ConcMasaTot(k,:));
for ind=1:11
    Concppm(k,ind)=ConcMasaTot(k,ind)/M(k)*1000000;
end

k=k+1;
Tam1=size(Ang);
P(k)=real(Var(Tam1(1),1));
Tb(k)=real(Var(Tam1(1),2));
if X>0.999
    Tu(k)=0;
else
    Tu(k)=real(Var(Tam1(1),3));
end
W(k)=real(Var(Tam1(1),4));
Ql(k)=real(Var(Tam1(1),5));
Hl(k)=real(Var(Tam1(1),6));

load DatosIniciales
PasosTotales=(360/PasoAngular)*(Intervalos+1);
if Intervalos==0
    PorcentajeRealizado=(k-2)/PasosTotales*100;
else
    PorcentajeRealizado=round(k+360/PasoAngular*(ii-1)-2)/PasosTotales*100;
end
PorcSimul=num2str(PorcentajeRealizado,'%2.1f');set(handles.PorcSimulacion,'String',PorcSimul);

end

Fs=101.206*(0.21+0.79*PorcOx)/(11.25*(28.84+3.16*PorcOx));
Ela=W(k-1)/MNoI*(1+Fi*Fs*(1-F))/(Fi*Fs*(1-F)*47870)*100;
lmp=W(k-1)/(pi/4*Bc^2*Sc)*10;

```

save Datos

CombustMCI

```
function varargout = CombustMCI(varargin)
```

```
if nargin == 0
```

```

    fig = openfig(mfilename,'reuse');
    handles = guihandles(fig);
    guidata(fig, handles);
    if nargin > 0
        varargout{1} = fig;
    end

```

```
elseif ischar(varargin{1})
```

```

    try
        {varargout{1:nargout}} = feval(varargin{:});
    catch
        disp(lasterr);
    end

```

```
end
```

```
% -----
function varargout = NoIntervalos_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
```

```

Opcion=0; Intervalos=0; VarInteres=0; save DatosIniciales Opcion Intervalos VarInteres
set(handles.Intervalos,'Enable','off');
set(handles.NoIntervalos,'Enable','inactive');
set(handles.frame2,'Visible','on');set(handles.text21,'Visible','on');
set(handles.text1,'Visible','on');set(handles.RazComp,'Visible','on');
set(handles.text2,'Visible','on');set(handles.Diam,'Visible','on');
set(handles.text3,'Visible','on');set(handles.LongCarr,'Visible','on');

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

set(handles.text4,'Visible','on');set(handles.LongBiel,'Visible','on');
set(handles.text5,'Visible','on');set(handles.VelMot,'Visible','on');
set(handles.text6,'Visible','on');set(handles.RazEq,'Visible','on');
set(handles.text7,'Visible','on');set(handles.FracRes,'Visible','on');
set(handles.text8,'Visible','on');set(handles.PresIni,'Visible','on');
set(handles.text9,'Visible','on');set(handles.Templni,'Visible','on');
set(handles.text10,'Visible','on');set(handles.TempPar,'Visible','on');
set(handles.text11,'Visible','on');set(handles.AngDura,'Visible','on');
set(handles.text12,'Visible','on');set(handles.AngIni,'Visible','on');
set(handles.text13,'Visible','on');set(handles.SepBuj,'Visible','on');
set(handles.text14,'Visible','on');set(handles.PorcPerdMas,'Visible','on');
set(handles.text15,'Visible','on');set(handles.PorcOxig,'Visible','on');
set(handles.text16,'Visible','on');set(handles.PasoAng,'Visible','on');
set(handles.Simular1,'Visible','on');
    
```

```

% -----
function varargout = RazComp_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==4 set(handles.Diam,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.LongCarr,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = Diam_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==5 set(handles.LongCarr,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.LongBiel,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = LongCarr_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==6 set(handles.LongBiel,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.VelMot,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = LongBiel_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==7 set(handles.VelMot,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.RazEq,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

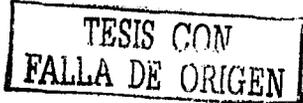
% -----
function varargout = VelMot_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==8 set(handles.RazEq,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.FracRes,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = RazEq_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==9 set(handles.FracRes,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.PresIni,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = FracRes_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==10 set(handles.PresIni,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.Templni,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = PresIni_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==11 set(handles.Templni,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else set(handles.TempPar,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = Templni_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
    
```



```

load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==12    set(handles.TempPar,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else    set(handles.AngDura,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = TempPar_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==13    set(handles.AngDura,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else    set(handles.AngIni,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = AngDura_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==14    set(handles.AngIni,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else    set(handles.SepBuj,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = AngIni_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==15    set(handles.SepBuj,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else    set(handles.PorcPerdMas,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = SepBuj_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==16    set(handles.PorcPerdMas,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else    set(handles.PorcOxig,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = PorcPerdMas_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0 | VarInteres==17    set(handles.PorcOxig,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
else    set(handles.PasoAng,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
end

% -----
function varargout = PorcOxig_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
set(handles.PasoAng,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])

% -----
function varargout = PasoAng_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Intervalos==0    set(handles.Similar1,'enable','on')
else    set(handles.Similar2,'enable','on')
end

% -----
function varargout = Similar1_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
Opcion=0; Intervalos=0; VarInteres=0;
save DatosIniciales Opcion Intervalos VarInteres
set(handles.GrafsIndivid,'Enable','off');set(handles.GrafsTodas,'Enable','off');
set(handles.text28,'String',' ');set(handles.text29,'String',' ');
RazC=get(handles.RazComp,'String'); R=str2num(RazC);
DiamCil=get(handles.Diam,'String'); Bc=str2num(DiamCil);
LongC=get(handles.LongCarr,'String'); Sc=str2num(LongC);
LongB=get(handles.LongBiel,'String'); L=str2num(LongB);
Vel=get(handles.VelMol,'String'); RPM=str2num(Vel);
RazE=get(handles.RazEq,'String'); Fi=str2num(RazE);
FracR=get(handles.FracRes,'String'); Fp=str2num(FracR);
Presl=get(handles.PresIni,'String'); P1=str2num(Presl);
TempI=get(handles.TempIni,'String'); T1=str2num(TempI);
TempP=get(handles.TempPar,'String'); TW=str2num(TempP);
AngD=get(handles.AngDura,'String'); ThetaB=str2num(AngD);
AngI=get(handles.AngIni,'String'); ThetaS=str2num(AngI);
SepB=get(handles.SepBuj,'String'); Sb=str2num(SepB);
PorcP=get(handles.PorcPerdMas,'String'); PorcMasPerd=str2num(PorcP);
PorcO=get(handles.PorcOxig,'String'); PorcOxp=str2num(PorcO);
PasoA=get(handles.PasoAng,'String'); PasoAngular=str2num(PasoA);

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

F=Fp/100; PorcOx=PorcOxp/100;
if Sb>Bc/2
    errordlg('La separacion de la bujia debe ser menor o igual al radio del cilindro','Datos incorrectos');
    break
end
CicloCompletoCombustion
Variables(1,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,Hi,ConcMolTot,y,Molar,ConcMasaTot,x,Masa,Concppm,Eta,lmpex};
save GraficasUnaEtapa; save DatosParaGraficos
set(handles.frame7,'Visible','on');set(handles.text25,'Visible','on');
set(handles.text26,'Visible','on');set(handles.text27,'Visible','on');
Efic=num2str(Eta);set(handles.text28,'Visible','on','String',Efic);
lmpexVal=num2str(lmpex);set(handles.text29,'Visible','on','String',lmpexVal);
set(handles.text30,'Visible','on');set(handles.text31,'Visible','on');
set(handles.VarGrafica1,'Visible','on');set(handles.VarGrafica2,'Visible','on');
set(handles.frame8,'Visible','on');set(handles.frame9,'Visible','on');
set(handles.GrafIndivid,'Visible','on','Value',0,'Enable','on');
set(handles.GrafTodas,'Visible','on','Value',0,'Enable','on');
set(handles.Graficas1Etapa,'Visible','on');set(handles.text33,'Visible','on');
set(handles.GrafNormal,'Visible','on');set(handles.GrafLogar,'Visible','on');
set(handles.VarGraficaTodas1,'Visible','on');set(handles.GuardarSimulacion,'Enable','on');

% -----
function varargout = GrafIndivid_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
FormaGrafica=0;
save DatosParaGraficos
handles = guidata(gcbo);
set(handles.GrafTodas,'Enable','off');
set(handles.GrafIndivid,'Enable','inactive');
set(handles.VarGraficaTodas1,'Enable','off');
set(handles.text33,'Enable','off');
set(handles.VarGrafica1,'Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);

% -----
function varargout = VarGrafica1_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarGraf1=get(handles.VarGrafica1,'Value');
save DatosParaGraficos
set(handles.VarGrafica1,'Enable','off');
set(handles.VarGrafica2,'Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);

% -----
function varargout = VarGrafica2_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarGraf2=get(handles.VarGrafica2,'Value');
save DatosParaGraficos
if VarGraf2>=10 | VarGraf1>=10
    set(handles.text32,'Visible','on');
    set(handles.VarConcen,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);
    set(handles.VarGrafica2,'Enable','off');
else
    set(handles.text32,'Visible','off');set(handles.VarConcen,'Visible','off','BackgroundColor',[1,1,1]);
    set(handles.VarGrafica2,'Enable','off');
    set(handles.GrafNormal,'Visible','on','Enable','on','Value',0);
end

% -----
function varargout = GrafTodas_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
FormaGrafica=1;
save DatosParaGraficos
set(handles.GrafIndivid,'Enable','off');
set(handles.GrafTodas,'Enable','inactive');
set(handles.VarGrafica1,'Enable','off');set(handles.VarGrafica2,'Enable','off');
set(handles.VarGraficaTodas1,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.text32,'Visible','on');set(handles.GrafNormal,'Visible','on');set(handles.GrafLogar,'Visible','on');
set(handles.VarConcen,'Visible','on','Enable','off','BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);

% -----
function varargout = VarGraficaTodas1_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarGrafTodas1=get(handles.VarGraficaTodas1,'Value');
save DatosParaGraficos

```

```

set(handles.text132,'Visible','on');
set(handles.VarConcen,'Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.VarGraficaTodas1,'Enable','off');

% -----
function varargout = VarConcen_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarConc=get(handles.VarConcen,'Value');
save DatosParaGraficos
set(handles.VarConcen,'Enable','off');
set(handles.GrafNormal,'Visible','on','Enable','on','Value',0);
if FormaGrafica==0
    if VarGraf1>=0 | VarGraf2>=10
        set(handles.GrafLogar,'Visible','on','Enable','on','Value',0);
    end
else if FormaGrafica==1
    set(handles.GrafLogar,'Visible','on','Enable','on','Value',0);
end

% -----
function varargout = GrafNormal_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
TipoGrafica=1;
save DatosParaGraficos
set(handles.GrafLogar,'Enable','off','Value',0);
set(handles.GrafNormal,'Enable','inactive');
set(handles.Graficas1Etapa,'Enable','on');

% -----
function varargout = GrafLogar_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
TipoGrafica=2;
save DatosParaGraficos
set(handles.GrafNormal,'Enable','off','Value',0);
set(handles.GrafLogar,'Enable','inactive');
set(handles.Graficas1Etapa,'Enable','on');

% -----
function varargout = Graficas1Etapa_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
GraficasSinIntervalos
handles = guidata(gcbo);
set(handles.Graficas1Etapa,'Enable','off');
set(handles.GrafNormal,'Enable','off','Value',0);set(handles.GrafLogar,'Enable','off','Value',0);
set(handles.GrafIndivid,'Enable','on','Value',0);set(handles.GrafTodas,'Enable','on','Value',0);
set(handles.VarGrafica1,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);set(handles.VarGrafica2,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);
set(handles.VarGraficaTodas1,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);set(handles.VarConcen,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);

% -----
function varargout = Intervalos_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
set(handles.NoIntervalos,'Enable','off');
set(handles.Intervalos,'Enable','inactive');
set(handles.VariableInteres,'Visible','on')

% -----
function varargout = VariableInteres_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
VarInteres=get(handles.VariableInteres,'Value');
if VarInteres<3
    return
else
    set(handles.VariableInteres,'enable','inactive');
    set(handles.frame5,'Visible','on');
    set(handles.text18,'Visible','on');set(handles.RangoInferior,'Visible','on');
    set(handles.text19,'Visible','on');set(handles.RangoSuperior,'Visible','on');
    set(handles.text20,'Visible','on');set(handles.NumIntervalos,'Visible','on');
end

% -----
function varargout = RangoInferior_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
set(handles.RangoSuperior,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])

% -----
function varargout = RangoSuperior_Callback(h, eventdata, handles, varargin)

```

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

```

set(handles.NumIntervalos,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])

% -----
function varargout = NumIntervalos_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
    VarInteres=get(handles.VariableInteres,'Value');
    RInf=get(handles.RangoInferior,'String'); LimInf=str2num(RInf);
    RSup=get(handles.RangoSuperior,'String'); LimSup=str2num(RSup);
    NoInt=get(handles.NumIntervalos,'String'); Intervalos=str2num(NoInt);
    Opcion=1;
    if Intervalos==0
        errordlg('Cuando menos debe haber un intervalo, de lo contrario emplee la opcion de "una sola etapa"', 'Datos incorrectos');
        break
    end
    Deltaint=(LimSup-LimInf)/Intervalos;
    for ii=1:Intervalos+1
        Vars(ii)=LimInf+Deltaint*(ii-1);
    end
    save DatosIniciales Opcion Intervalos VarInteres
    set(handles.frame2,'Visible','on');
    set(handles.text1,'Visible','on');set(handles.RazComp,'Visible','on');
    set(handles.text2,'Visible','on');set(handles.Diam,'Visible','on');
    set(handles.text3,'Visible','on');set(handles.LongCarr,'Visible','on');
    set(handles.text4,'Visible','on');set(handles.LongBiel,'Visible','on');
    set(handles.text5,'Visible','on');set(handles.VelMot,'Visible','on');
    set(handles.text6,'Visible','on');set(handles.RazEq,'Visible','on');
    set(handles.text7,'Visible','on');set(handles.FracRes,'Visible','on');
    set(handles.text8,'Visible','on');set(handles.Presini,'Visible','on');
    set(handles.text9,'Visible','on');set(handles.Templni,'Visible','on');
    set(handles.text10,'Visible','on');set(handles.TempPar,'Visible','on');
    set(handles.text11,'Visible','on');set(handles.AngDura,'Visible','on');
    set(handles.text12,'Visible','on');set(handles.AngIni,'Visible','on');
    set(handles.text13,'Visible','on');set(handles.SepBuj,'Visible','on');
    set(handles.text14,'Visible','on');set(handles.PorcPerdMas,'Visible','on');
    set(handles.text15,'Visible','on');set(handles.PorcOxig,'Visible','on');
    set(handles.text16,'Visible','on');set(handles.PasoAng,'Visible','on');
    set(handles.Simular2,'Visible','on');
    if VarInteres -2==1
        set(handles.text1,'Visible','off');set(handles.RazComp,'Visible','off');
        set(handles.Diam,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
    elseif VarInteres -2==2
        set(handles.text2,'Visible','off');set(handles.Diam,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==3
        set(handles.text3,'Visible','off');set(handles.LongCarr,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==4
        set(handles.text4,'Visible','off');set(handles.LongBiel,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==5
        set(handles.text5,'Visible','off');set(handles.VelMot,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==6
        set(handles.text6,'Visible','off');set(handles.RazEq,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==7
        set(handles.text7,'Visible','off');set(handles.FracRes,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==8
        set(handles.text8,'Visible','off');set(handles.Presini,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==9
        set(handles.text9,'Visible','off');set(handles.Templni,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==10
        set(handles.text10,'Visible','off');set(handles.TempPar,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==11
        set(handles.text11,'Visible','off');set(handles.AngDura,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==12
        set(handles.text12,'Visible','off');set(handles.AngIni,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==13
        set(handles.text13,'Visible','off');set(handles.SepBuj,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==14
        set(handles.text14,'Visible','off');set(handles.PorcPerdMas,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==15
        set(handles.text15,'Visible','off');set(handles.PorcOxig,'Visible','off');
    elseif VarInteres -2==16
        set(handles.text16,'Visible','off');set(handles.PasoAng,'Visible','off');
    end
    save GraficasVarEtapas

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

function varargout = Simular2_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
    VarInteres=get(handles.VariableInteres,'Value');
    NoInt=get(handles.NumIntervalos,'String'); Intervalos=str2num(NoInt);
    Opcion=1;
    save DatosIniciales Opcion Intervalos VarInteres
    load GraficasVarEtapas
    handles = guidata(gcbo);
    set(handles.VarGraficalInt1,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84],'Enable','off');
    set(handles.GraficarImep,'Enable','off');set(handles.GraficarEfic,'Enable','off');
    RazC=get(handles.RazComp,'String'); R=str2num(RazC);
    DiamCil=get(handles.Diam,'String'); Bc=str2num(DiamCil);
    LongC=get(handles.LongCarr,'String'); Sc=str2num(LongC);
    LongB=get(handles.LongBiel,'String'); L=str2num(LongB);
    Vel=get(handles.VelMol,'String'); RPM=str2num(Vel);
    RazE=get(handles.RazEq,'String'); Fi=str2num(RazE);
    FracR=get(handles.FracRes,'String'); Fp=str2num(FracR);
    Presi=get(handles.Presini,'String'); P1=str2num(Presi);
    Temp1=get(handles.Tempini,'String'); T1=str2num(Temp1);
    TempP=get(handles.TempPar,'String'); TW=str2num(TempP);
    AngD=get(handles.AngDura,'String'); ThetaB=str2num(AngD);
    AngI=get(handles.Angini,'String'); ThetaS=str2num(AngI);
    SepB=get(handles.SepBuj,'String'); Sb=str2num(SepB);
    PorcP=get(handles.PorcPerdMas,'String'); PorcMasPerd=str2num(PorcP);
    PorcO=get(handles.PorcOxig,'String'); PorcOxp=str2num(PorcO);
    PasoA=get(handles.PasoAng,'String'); PasoAngular=str2num(PasoA);
    F=Fp/100; PorcOx=PorcOxp/100;
    switch VarInteres
        case 3
            for ii=1:Intervalos+1
                R=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 4
            for ii=1:Intervalos+1
                Bc=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 5
            for ii=1:Intervalos+1
                Sc=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 6
            for ii=1:Intervalos+1
                L=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 7
            for ii=1:Intervalos+1
                RPM=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 8
            for ii=1:Intervalos+1
                Fi=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 9
            for ii=1:Intervalos+1
                F=Vars(ii)/100;
                CicloCompletoCombustion
                Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,QI,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,Imep);
            end
        case 10
            for ii=1:Intervalos+1
                P1=Vars(ii);
                CicloCompletoCombustion
    
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 11
for ii=1:Intervalos+1
T1=Vars(ii);
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 12
for ii=1:Intervalos+1
TW=Vars(ii);
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 13
for ii=1:Intervalos+1
ThetaB=Vars(ii);
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 14
for ii=1:Intervalos+1
ThetaS=Vars(ii);
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 15
for ii=1:Intervalos+1
Sb=Vars(ii);
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 16
for ii=1:Intervalos+1
PorcMasPerd=Vars(ii);
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
case 17
for ii=1:Intervalos+1
PorcOx=Vars(ii)/100;
CicloCompletoCombustion
Variables(ii,1:16)={Angulo,Volumen,P,Tb,Tu,W,Ql,M,HI,ConcMolTot,yMolar,ConcMasaTot,xMasa,Concppm,Eta,lmp};
end
otherwise
errorlg('Seleccione alguna de las variables listadas','Datos incorrectos');
end
ValGrafImp=0;ValGrafEfic=0;
save GraficasVarEtapas; save DatosParaGraficos
set(handles.text34,'Visible','on');set(handles.text35,'Visible','on');
set(handles.frame10,'Visible','on');set(handles.frame12,'Visible','on');
set(handles.GraficarImp,'Visible','on','Enable','on');set(handles.GraficarEfic,'Visible','on','Enable','on');
set(handles.ComposEquilibrio,'Visible','on','Enable','on');
set(handles.Opcion2D,'Visible','on');set(handles.Opcion3D,'Visible','on');
set(handles.VarGraficalnt1,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.VarGraficalnt2,'Visible','on');set(handles.GraficasInterv,'Visible','on');
set(handles.GuardarSimulacion,'Enable','on');

% -----
function varargout = GraficarImp_Callback(h,eventdata,handles,varargin)
set(handles.GraficasInterv,'Enable','on');

% -----
function varargout = GraficarEfic_Callback(h,eventdata,handles,varargin)
set(handles.GraficasInterv,'Enable','on');

% -----
function varargout = ComposEquilibrio_Callback(h,eventdata,handles,varargin)
set(handles.ConcCompEq,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);

% -----
function varargout = ConcCompEq_Callback(h,eventdata,handles,varargin)
load DatosParaGraficos

```

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

```

ValorConcCompEq=get(handles.ConcCompEq,'Value');
save DatosParaGraficos
set(handles.ConcCompEq,'Enable','off');
set(handles.EspecieConcEquil,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);

% -----
function varargout = EspecieConcEquil_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
EspecieConcCompEq=get(handles.EspecieConcEquil,'Value');
save DatosParaGraficos
set(handles.EspecieConcEquil,'Enable','off');
set(handles.GraficasInterv,'Enable','on');

% -----
function varargout = VarGraficaInt1_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarGrafInt1=get(handles.VarGraficaInt1,'Value');
save DatosParaGraficos
set(handles.VarGraficaInt1,'Enable','off');
set(handles.VarGraficaInt2,'Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);

% -----
function varargout = VarGraficaInt2_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarGrafInt2=get(handles.VarGraficaInt2,'Value');
save DatosParaGraficos
if VarGrafInt2>=10 | VarGrafInt1>=10
set(handles.text136,'Visible','on');
set(handles.VarConcentInt,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.VarGraficaInt2,'Enable','off');
else
set(handles.text136,'Visible','off');set(handles.VarConcentInt,'Visible','off');
set(handles.VarGraficaInt2,'Enable','off');
set(handles.Opcion2D,'Enable','on');set(handles.Opcion3D,'Enable','on');
end

% -----
function varargout = VarConcentInt_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
VarConcentInt=get(handles.VarConcentInt,'Value');
save DatosParaGraficos
set(handles.VarConcentInt,'Enable','off');
set(handles.Opcion2D,'Enable','on');set(handles.Opcion3D,'Enable','on');

% -----
function varargout = Opcion2D_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
Dimension=2;
save DatosParaGraficos
set(handles.Opcion3D,'Enable','off');
set(handles.Opcion2D,'Enable','inactive');
set(handles.GraficasInterv,'Enable','on');

% -----
function varargout = Opcion3D_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
Dimension=3;
save DatosParaGraficos
set(handles.Opcion2D,'Enable','off');
set(handles.Opcion3D,'Enable','inactive');
set(handles.GraficasInterv,'Enable','on');

% -----
function varargout = GraficasInterv_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosParaGraficos
handles = guidata(gcbo);
if (get(handles.GraficarImep,'Value') == get(handles.GraficarImep,'Max'))
ValGrafImep=1;
else
ValGrafImep=0;
end
if (get(handles.GraficarEfic,'Value') == get(handles.GraficarEfic,'Max'))
ValGrafEfic=1;

```

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

```

else
    ValGrafEfic=0;
end
if (get(handles.ComposEquilibrio,'Value')==get(handles.ComposEquilibrio,'Max'))
    ValGrafCompEquil=1;
else
    ValGrafCompEquil=0;
end
save DatosParaGraficos
GraficasConIntervalos
set(handles.GraficarImep,'Value',0);set(handles.GraficarEfic,'Value',0);
set(handles.ComposEquilibrio,'Value',0);set(handles.ConcCompEq,'Visible','off');
set(handles.EspecieConcEquil,'Visible','off');
set(handles.VarGraficaln2,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);set(handles.VarConcentn1,'BackgroundColor',[0.92,0.91,0.84]);
set(handles.VarGraficaln1,'Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);set(handles.GraficasInterv,'Enable','off');
set(handles.Opcion2D,'Enable','off','Value',0);set(handles.Opcion3D,'Enable','off','Value',0);
    
```

```

% -----
%
function varargout = NuevaSimulacion_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
delete(handles.figure1)
CombustIMC
    
```

```

% -----
function varargout = GuardarSimulacion_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
load DatosIniciales
if Opcion == 0
    load GraficasUnaEtapa
    ArchivoValido=1;
elseif Opcion == 1
    load GraficasVarEtapas
    ArchivoValido=1;
end
[filename, pathname] = uiputfile({'*.mat';'*.*'},'Guardar como');
if isequal([filename,pathname],[0,0])
    return
else
    File = fullfile(pathname,filename);
    guidata(h,handles)
    save(File)
end
    
```

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

```

% -----
function varargout = CargarSimulacion_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
[filename, pathname] = uigetfile({'*.mat','All MAT-Files (*.mat)';'*.*','All Files (*.*)'}, ...
'Cargar Simulacion');
if isequal(filename,pathname,[0,0])
    return
else
    File = fullfile(pathname,filename);
    if Check_And_Load(File,handles)
        load(filename)
        handles = guidata(gcbo);
        if Opcion == 0
            set(handles.Intervalos,'Enable','off','Value',0);set(handles.NoIntervalos,'Enable','inactive','Value',1);
            set(handles.VariableInteres,'Visible','off');set(handles.RangoInferior,'Visible','off');
            set(handles.RangoSuperior,'Visible','off');set(handles.NumIntervalos,'Visible','off');
            set(handles.frame5,'Visible','off');set(handles.text13,'Visible','off');
            set(handles.text19,'Visible','off');set(handles.text20,'Visible','off');
            set(handles.frame2,'Visible','on');set(handles.text21,'Visible','on');
            set(handles.text1,'Visible','on');set(handles.RazComp,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',R);
            set(handles.text2,'Visible','on');set(handles.Diam,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Bc);
            set(handles.text3,'Visible','on');set(handles.LongCarr,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Sc);
            set(handles.text4,'Visible','on');set(handles.LongBiel,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',L);
            set(handles.text5,'Visible','on');set(handles.VelMot,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',RPM);
            set(handles.text6,'Visible','on');set(handles.RazEq,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Fi);
            set(handles.text7,'Visible','on');set(handles.FracRes,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',F*100);
            set(handles.text8,'Visible','on');set(handles.PresIni,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',P1);
            set(handles.text9,'Visible','on');set(handles.TempIni,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',T1);
            set(handles.text10,'Visible','on');set(handles.TempPar,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',TW);
            set(handles.text11,'Visible','on');set(handles.AngDura,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',ThetaB);
            set(handles.text12,'Visible','on');set(handles.AngIni,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',ThetaS);
        end
    end
end
    
```

```

set(handles.txt13,'Visible','on');set(handles.SepBuj,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Sb);
set(handles.txt14,'Visible','on');set(handles.PorcPerdMas,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',PorcMasPerd);
set(handles.txt15,'Visible','on');set(handles.PorcOxig,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',PorcOx);
set(handles.txt16,'Visible','on');set(handles.PasoAng,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',PasoAngular);
set(handles.txt34,'Visible','off');set(handles.txt35,'Visible','off');
set(handles.txt36,'Visible','off');set(handles.VarConcentInt,'Visible','off');
set(handles.frame10,'Visible','off');set(handles.frame12,'Visible','off');
set(handles.GraficarImep,'Visible','off');set(handles.GraficarEfic,'Visible','off');set(handles.ComposEquilibrio,'Visible','off');
set(handles.Opcion2D,'Visible','off');set(handles.Opcion3D,'Visible','off');
set(handles.VarGraficalnt1,'Visible','off');set(handles.VarGraficalnt2,'Visible','off');
set(handles.GraficasInterv,'Visible','off');set(handles.Simular2,'Visible','off');
set(handles.Simular1,'Visible','on','Enable','off');
set(handles.frame7,'Visible','on');set(handles.txt25,'Visible','on');
set(handles.txt26,'Visible','on');set(handles.txt27,'Visible','on');
Efic=num2str(Eta);set(handles.txt28,'Visible','on','String',Efic);
ImepVal=num2str(Imep);set(handles.txt29,'Visible','on','String',ImepVal);
set(handles.txt30,'Visible','on');set(handles.txt31,'Visible','on');
set(handles.VarGrafica1,'Visible','on');set(handles.VarGrafica2,'Visible','on');
set(handles.frame8,'Visible','on');set(handles.frame9,'Visible','on');
set(handles.GrafsIndivid,'Visible','on','Value',0,'Enable','on');
set(handles.GrafsTodas,'Visible','on','Value',0,'Enable','on');
set(handles.Graficas1Eta,'Visible','on');set(handles.txt33,'Visible','on');
set(handles.GrafNormal,'Visible','on');set(handles.GrafLogar,'Visible','on');
set(handles.VarGraficaTodas1,'Visible','on');set(handles.GuardarSimulacion,'Enable','off');
save DatosParaGraficos
elseif Opcion == 0
set(handles.NoIntervalos,'Enable','off','Value',0);set(handles.Intervalos,'Enable','inactive','Value',1);
set(handles.VariableInteres,'Visible','on','Enable','off','Value',VarInteres,'BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.RangoInferior,'Visible','on','String',LimInf,'Enable','off','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.RangoSuperior,'Visible','on','String',LimSup,'Enable','off','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.NumIntervalos,'Visible','on','String',Intervalos,'Enable','off','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.frame5,'Visible','on');set(handles.txt18,'Visible','on');
set(handles.txt19,'Visible','on');set(handles.txt20,'Visible','on');
set(handles.frame2,'Visible','on');
set(handles.txt1,'Visible','on');set(handles.RazComp,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',R);
set(handles.txt2,'Visible','on');set(handles.Diam,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Bc);
set(handles.txt3,'Visible','on');set(handles.LongCarr,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Sc);
set(handles.txt4,'Visible','on');set(handles.LongBiel,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',L);
set(handles.txt5,'Visible','on');set(handles.VelMot,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',RPM);
set(handles.txt6,'Visible','on');set(handles.RazEq,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',F);
set(handles.txt7,'Visible','on');set(handles.FracRes,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',F100);
set(handles.txt8,'Visible','on');set(handles.PresIni,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',P);
set(handles.txt9,'Visible','on');set(handles.Templni,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',T);
set(handles.txt10,'Visible','on');set(handles.TempPar,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',TW);
set(handles.txt11,'Visible','on');set(handles.AngDura,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',ThetaB);
set(handles.txt12,'Visible','on');set(handles.AngIni,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',ThetaS);
set(handles.txt13,'Visible','on');set(handles.SepBuj,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',Sb);
set(handles.txt14,'Visible','on');set(handles.PorcPerdMas,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',PorcMasPerd);
set(handles.txt15,'Visible','on');set(handles.PorcOxig,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',PorcOx);
set(handles.txt16,'Visible','on');set(handles.PasoAng,'Visible','on','enable','off','BackgroundColor',[1,1,1],'String',PasoAngular);
set(handles.Simular2,'Visible','on','Enable','off');
if VarInteres-2==1
    set(handles.txt1,'Visible','off');set(handles.RazComp,'Visible','off');
    set(handles.Diam,'enable','on','BackgroundColor',[1,1,1])
elseif VarInteres-2==2
    set(handles.txt2,'Visible','off');set(handles.Diam,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==3
    set(handles.txt3,'Visible','off');set(handles.LongCarr,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==4
    set(handles.txt4,'Visible','off');set(handles.LongBiel,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==5
    set(handles.txt5,'Visible','off');set(handles.VelMot,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==6
    set(handles.txt6,'Visible','off');set(handles.RazEq,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==7
    set(handles.txt7,'Visible','off');set(handles.FracRes,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==8
    set(handles.txt8,'Visible','off');set(handles.PresIni,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==9
    set(handles.txt9,'Visible','off');set(handles.Templni,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==10
    set(handles.txt10,'Visible','off');set(handles.TempPar,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==11

```

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

```

    set(handles.text11,'Visible','off');set(handles.AngDura,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==12
    set(handles.text12,'Visible','off');set(handles.AngIn,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==13
    set(handles.text13,'Visible','off');set(handles.SepBuj,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==14
    set(handles.text14,'Visible','off');set(handles.PorcPerdMas,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==15
    set(handles.text15,'Visible','off');set(handles.PorcOxig,'Visible','off');
elseif VarInteres-2==16
    set(handles.text16,'Visible','off');set(handles.PasoAng,'Visible','off');
end
set(handles.Simular1,'Visible','off');set(handles.frame7,'Visible','off');set(handles.text25,'Visible','off');
set(handles.text26,'Visible','off');set(handles.text27,'Visible','off');set(handles.text28,'Visible','off');
set(handles.text29,'Visible','off');set(handles.text30,'Visible','off');set(handles.text31,'Visible','off');
set(handles.text32,'Visible','off');set(handles.VarConcen,'Visible','off');
set(handles.VarGrafica1,'Visible','off');set(handles.VarGrafica2,'Visible','off');set(handles.frame8,'Visible','off');
set(handles.frame9,'Visible','off');set(handles.GrafsIndivid,'Visible','off');set(handles.GrafsTodas,'Visible','off');
set(handles.Graficas1Etapa,'Visible','off');set(handles.text33,'Visible','off');set(handles.GrafNormal,'Visible','off');
set(handles.GrafLogar,'Visible','off');set(handles.VarGraficaTodas1,'Visible','off');
set(handles.text34,'Visible','on');set(handles.text35,'Visible','on');
set(handles.frame10,'Visible','on');set(handles.frame12,'Visible','on');
set(handles.GraficarImep,'Visible','on','Enable','on');set(handles.GraficarEfic,'Visible','on','Enable','on');
set(handles.ComposEquilibrio,'Visible','on','Enable','on');
set(handles.Opcion2D,'Visible','on');set(handles.Opcion3D,'Visible','on');
set(handles.VarGraficaInt1,'Visible','on','Enable','on','BackgroundColor',[1,1,1]);
set(handles.VarGraficaInt2,'Visible','on');set(handles.GraficasInterv,'Visible','on');
set(handles.GuardarSimulacion,'Enable','off');
save DatosParaGraficos; save GraficasVarEtapas
end
end
end
% -----
function pass = Check_And_Load(file,handles)
    pass = 0;
    if exist(file) == 2
        data = load(file);
        flds = fieldnames(data);
        LongDatos=length(flds);
        for j=1:LongDatos
            CadCompar(j)=strcmp(flds(j),'ArchivoValido');
        end
        if sum(CadCompar)==1
            pass = 1;
        end
    end
    if pass == 0
        errordlg('No es un archivo de simulacion valido','Archivo incorrecto')
    end
% -----
function varargout = Cerrar_Callback(h, eventdata, handles, varargin)
    delete(handles.figure1)

```

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

GraficasSinIntervalos

```

load DatosParaGraficos

TamPant=get(0,'ScreenSize');

VAngulo=Variables{1,1};
TamEjex=size(VAngulo);
TamEjey=TamEjex(2);
NombreVar=char('Angulo del cigueñal','Volumen de la camara de combustion [cm3]','Presion en la camara [bar]','...
    'Temperatura de los gases quemados [K]','Temperatura de los gases no quemados [K]','Trabajo realizado [J]','...
    'Calor perdido [J]','Masa de mezcla [g]','Perdidas de entalpia [J]','CO2','H2O','N2','O2','CO','H2','H','O','OH','NO');
NombreConc=char('Moles totales','Fraccion molar, y','Masa total [g]','Fraccion en masa, x','ppm');

if FormaGrafica==0
    if VarGraf1<10
        Ejex=Variables{1,VarGraf1}(1:TamEjey);

```

```

elseif VarGraf1>=10
    Especie=VarGraf1-9;
    AuxEjex=Variables(1,VarConc+9);
    Ejex=AuxEjex(:,Especie);
end
if VarGraf2<10
    Ejex=Variables(1,VarGraf2)(1:TamEjex);
elseif VarGraf2>=10
    Especie=VarGraf2-9;
    AuxEjex=Variables(1,VarConc+9);
    Ejex=AuxEjex(:,Especie);
end
figure
set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas del
Ciclo de Trabajo de un MCI');
if (max(Ejex)-min(Ejex))~=0
    if (max(Ejex)-min(Ejex))~=0
        set(gca,'FontSize',12,'XTick',[min(Ejex):(max(Ejex)-min(Ejex))/10:max(Ejex)],[min(Ejex):(max(Ejex)-min(Ejex))/10:max(Ejex)]);
    else
        set(gca,'FontSize',12,'XTick',[min(Ejex):(max(Ejex)-min(Ejex))/10:max(Ejex)]);
    end
end
if TipoGrafica==1
    plot(Ejex,Ejex);grid on;
elseif TipoGrafica==2
    if VarGraf1>=10 & VarGraf2>=10
        loglog(Ejex,Ejex);grid on;
    elseif VarGraf1>=10
        semilogx(Ejex,Ejex);grid on;
    elseif VarGraf2>=10
        semilogy(Ejex,Ejex);grid on;
    end
end
if VarGraf1<10
    xlabel(NombreVar(VarGraf1,:), 'FontSize',15);
else
    xlabel([NombreVar(VarGraf1,) ' ' NombreConc(VarConc,)], 'FontSize',15);
end
if VarGraf2<10
    ylabel(NombreVar(VarGraf2,:), 'FontSize',15);
else
    ylabel([NombreVar(VarGraf2,) ' ' NombreConc(VarConc,)], 'FontSize',15);
end
elseif FormaGrafica==1
    figure
    set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas del
Ciclo de Trabajo de un MCI');
    Ejex=Variables(1,VarGrafTodas1)(1:TamEjex);
    if (max(Ejex)-min(Ejex))~=0
        set(gca,'FontSize',12,'XTick',[min(Ejex):(max(Ejex)-min(Ejex))/10:max(Ejex)]);
    end
    if TipoGrafica==1
        plot(Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),r',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),g',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),b',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),c'....
        Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),m',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),y',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),k',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),r'....
        Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),g',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),b',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),k','LineWidth',4);grid
on;
    elseif TipoGrafica==2
        semilogx(Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),r',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),g',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),b',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),c'....
        Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),m',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),y',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),k',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),r'....
        Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),g',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),b',Ejex,Variables(1,9+VarConc)(:,:),k','LineWidth',4);grid
on;
    end
    legend('CO2','H2O','N2','O2','CO','H2','H','O','OH','NO','Combustible',3);
    xlabel(NombreVar(VarGrafTodas1,:), 'FontSize',15);
    ylabel([NombreConc(VarConc,)], 'FontSize',15);

```



end

GraficasConIntervalos

load DatosParaGraficos

TamPant=get(0,'ScreenSize');

VAngulo=Variables(1,1);

TamEjex=size(VAngulo);

TamEjex2=TamEjex(2);

NomVarInt=char('Razon de compresion','Diametro del cilindro [cm]','Longitud de la carrera [cm]','Longitud de la biela [cm]',...

'Velocidad del motor [rpm]','Razon de equivalencia','Fraccion residual en masa','Presion inicial [bar]','Temperatura inicial [K]',...

'Temperatura de pared [K]','Duracion de la combustion [° del cigueñal]','Inicio de la combustion [° del cigueñal]','Separacion de la bujia [cm]',...

'Porcentaje de masa perdida','Porcentaje de oxigeno añadido');

NombreVar=char('Angulo del cigueñal','Volumen de la camara de combustion [cm3]','Presion en la camara [bar]',...

'Temperatura de los gases quemados [K]','Temperatura de los gases no quemados [K]','Trabajo realizado [J]',...

'Calor perdido [J]','Masa de mezcla [g]','Perdidas de entalpia [J]','CO2','H2O','N2','O2','CO','H2','H','O','OH','NO');

NombreConc=char('Moles totales','Fraccion molar, y','Masa total [g]','Fraccion en masa, x','ppm');

if ValGrafImep==1

Ejex2=Vars;

for jj=1:ii

Ejex2(jj)=Variables(jj,16);

end

figure

set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas del

Ciclo de Trabajo de un MCI');

set(gca,'FontSize',12,'XTick',[min(Ejex2):(max(Ejex2)-min(Ejex2))/10:max(Ejex2)],'YTick',[min(Ejex2):(max(Ejex2)-

min(Ejex2))/10:max(Ejex2)]);

plot(Ejex2,Ejex2,'LineWidth',2);grid on;

ylabel('Imep','FontSize',15);

xlabel([NomVarInt(VarInteres-2:)],'FontSize',15);

end

if ValGrafEfic==1

Ejex2=Vars;

for jj=1:ii

Ejex2(jj)=Variables(jj,15);

end

figure

set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas del

Ciclo de Trabajo de un MCI');

set(gca,'FontSize',12,'XTick',[min(Ejex2):(max(Ejex2)-min(Ejex2))/10:max(Ejex2)],'YTick',[min(Ejex2):(max(Ejex2)-

min(Ejex2))/10:max(Ejex2)]);

plot(Ejex2,Ejex2,'LineWidth',2);grid on;

ylabel('Eficiencia indicada','FontSize',15);

xlabel([NomVarInt(VarInteres-2:)],'FontSize',15);

end

if ValGrafCompEquil==1

Ejex2=Vars;

ValLegend=num2str(Vars);

for jj=1:ii

AuxEjex=Variables(jj,9+ValorConcCompEq);

for ind=1:10

Ejex2(jj,ind)=AuxEjex(TamEjex,ind);

end

figure

set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas

del Ciclo de Trabajo de un MCI');

set(gca,'FontSize',12,'XTick',[min(Ejex2):(max(Ejex2)-min(Ejex2))/10:max(Ejex2)]);

if EspecieConcCompEq==1

semilogy(Ejex2,Ejex2,'LineWidth',2);grid on;

for val=1:10

text(Vars(mod(val,4)+1),Ejex2(mod(val,4)+1,Val),'<leftarrow ' NombreVar(9+val,:),'FontSize',15,'Rotation',10);

end

xlabel([NomVarInt(VarInteres-2:)],'FontSize',15);

ylabel([NombreConc(ValorConcCompEq:)],'FontSize',15);

else

plot(Ejex2,Ejex2(:,EspecieConcCompEq-1),'LineWidth',2);grid on;

xlabel([NomVarInt(VarInteres-2:)],'FontSize',15);

```

ylabel([NombreVar(8+EspecieConcCompEq,1:3) ' en ' NombreConc(ValorConcCompEq,:)],'FontSize',15);
end
end
VarExist = exist('VarGrafInt1');
if VarExist==1
    if VarGrafInt1<=9
        for jj=1:ii
            Ejex(jj,:)=Variables(jj,VarGrafInt1)(1:TamEjex);
        end
    elseif VarGrafInt1>9
        for jj=1:ii
            AuxEjex=Variables(jj,9+VarConcInt);
            Ejex(jj,:)=AuxEjex(:,VarGrafInt1-9);
        end
    end
end
if VarGrafInt2<=9
    for jj=1:ii
        Ejey(jj,:)=Variables(jj,VarGrafInt2)(1:TamEjey);
    end
elseif VarGrafInt2>9
    for jj=1:ii
        AuxEjey=Variables(jj,9+VarConcInt);
        Ejey(jj,:)=AuxEjey(:,VarGrafInt2-9);
    end
end
end
if Dimension==2
    figure; hold on;
    set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas
del Ciclo de Trabajo de un MCI');
    ColorGraf=char('-m+','-ko','r','-gx','-bs','-yd',':cv','-m',':k>','-r<','-g+');
    ValLegend=num2str(Vars);
    for ii=1:Intervalos+1
        leyenda(ii,:)=['NomVarInt(VarInteres-2,:) ' = ' ValLegend(ii,:);
        plot(Ejex(ii,:),Ejey(ii,:),ColorGraf(ii,:),'MarkerSize',5,'LineWidth',2);grid on;
        legend(leyenda,0);
    end
    if VarGrafInt1<10 & VarGrafInt2<10
        xlabel([NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel([NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    elseif VarGrafInt1>=10 & VarGrafInt2<10
        xlabel(['Concentracion en ' NombreConc(VarConcInt,:) ' de '
NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel([NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    elseif VarGrafInt2>=10 & VarGrafInt1<10
        xlabel([NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel(['Concentracion en ' NombreConc(VarConcInt,:) ' de '
NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    elseif VarGrafInt2>=10 & VarGrafInt1>=10
        xlabel([NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel([NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    end
    hold off;
end
if Dimension==3
    Ejex=Vars;
    figure;
    set(gcf,'color',[0.92,0.91,0.84],'Position',[TamPant(3)/8,TamPant(4)/8,3*TamPant(3)/4,3*TamPant(4)/4],'NumberTitle','off','Name','Graficas
del Ciclo de Trabajo de un MCI');
    mesh(Ejex,Ejey,Ejey);colorbar;grid on;
    ylabel([NomVarInt(VarInteres-2,:)],'FontSize',15,'Rotation',-30);
    if VarGrafInt1<10 & VarGrafInt2<10
        xlabel([NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15,'Rotation',20);ylabel([NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    elseif VarGrafInt1>=10 & VarGrafInt2<10
        xlabel(['Concentracion en ' NombreConc(VarConcInt,:) ' de '
NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel([NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    elseif VarGrafInt2>=10 & VarGrafInt1<10
        xlabel([NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel(['Concentracion en ' NombreConc(VarConcInt,:) ' de '
NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    elseif VarGrafInt2>=10 & VarGrafInt1>=10
        xlabel([NombreVar(VarGrafInt1,:)],'FontSize',15);ylabel([NombreVar(VarGrafInt2,:)],'FontSize',15);
    end
end
end
end
end

```