



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Modelado termodinámico de un
motor de encendido por
compresión

TESIS

Que para obtener el título de
Ingeniero Mecánico

P R E S E N T A

Isaac Sánchez Escobar

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Eduardo Medina Hernández



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

ÍNDICE	página
Resumen.....	1
Nomenclatura.....	2
CAPÍTULO1: CONCEPTOS BÁSICOS	
1.1 Motor de combustión interna.....	3
1.2 Ciclo Diésel.....	3
1.3 Motor de encendido por compresión: Diésel.....	5
1.3.1 Sistema de inyección directa.....	6
1.3.2 Sistema de inyección indirecta.....	7
1.3.3 Desarrollo del spray y formación de la mezcla.....	8
1.3.4 Auto encendido y secuencia de la combustión.....	9
CAPÍTULO 2: REVISION BIBLIOGRAFICA DEL MODELADO DE LA COMBUSTIÓN EN MOTORES DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN	
2.1 Modelos Multidimensionales.....	12
2.2 Modelos Cero-dimensionales.....	12
2. 3 Modelos Cuasi-dimensionales o Fenomenológicos.....	13
CAPÍTULO 3: PLANTEAMIENTO DEL MODELO TERMODINÁMICO	
3.1 Modelo de primera zona.....	15
3.1.1 Perdidas de calor a través de las paredes del cilindro.....	17
3.1.2 Calor de entrada o Heat Release.....	20
3.1.3 Retardo de autoencendido.....	21
3.1.4 Volumen del cilindro.....	22
3.1.5 Trabajo.....	23
3.2 Modelo empírico de dos zonas.....	24
3.3 Modelo de formación de especies en equilibrio.....	26
3.4 Modelo de formación de partículas de hollín.....	28
3.5 Formación térmica de NO _x	29

CAPÍTULO 4: VALIDACIÓN

4.1 Verificación experimental.....	31
------------------------------------	----

CAPÍTULO 5: ANÁLISIS DE RESULTADOS

5.1 Resultados del modelo de primera zona.....	36
5.2 Resultados del modelo de 2 zonas.....	40
5.3 Resultados de la concentración en equilibrio.....	41
5.4 NO.....	43
5.5 Hollín.....	43
5.6 Análisis paramétrico.....	44
5.6.1 Variación del inicio de inyección.....	44
5.6.2 Variación del retardo de autoencendido.....	47
5.6.3 Variación de la duración en la mezcla y difusión.....	48
5.6.4 Variación del porcentaje de calor liberado en cada fase de la combustión..	50

CAPÍTULO 6: CONCLUSIONES

6.1 Conclusiones.....	53
-----------------------	----

Referencias	55
--------------------------	----

APÉNDICE A

Programa general en Fortran.....	59
----------------------------------	----

APÉNDICE B

Subrutina para la solución de las ecuaciones diferenciales.....	65
---	----

APÉNDICE C

Subrutina para la solución del sistema de ecuaciones no lineales.....	67
---	----

RESUMEN

Los motores Diésel, son ampliamente utilizados como fuerza motriz en distintas aplicaciones industriales como: transporte, agricultura y generación de energía, lo que los hace indispensables para la sociedad actual. Debido a las emisiones contaminantes que generan, actualmente hay grandes exigencias con respecto al desarrollo de motores Diésel para hacerlos cada vez más eficientes y menos contaminantes. Por esta razón los estudios computacionales sobre el desempeño de los motores de encendido por compresión cobran gran importancia en nuestros días, ya que permiten realizar, mejoras significativas en el desempeño de los nuevos motores.

Este trabajo presenta el modelo termodinámico de un motor de encendido por compresión: Diésel. Su importancia radica en el hecho de poder observar el comportamiento de los principales variables y factores que intervienen en la combustión y desempeño del motor.

El modelo termodinámico o cero dimensional desarrollado consistió básicamente en tres partes, en la primera parte del modelo se hizo uso de la ecuación de conservación de la energía y de la ley de gas ideal para obtener la expresión de la presión dentro del cilindro. Tomando como base esta ecuación se emplearon submodelos y ecuaciones empíricas para describir el comportamiento del volumen, calor liberado dentro de la cámara de combustión y la transferencia de calor a través de las paredes del cilindro.

En la segunda parte del modelo, se desarrolló un modelo empírico de dos zonas o modelo principal de temperatura de dos zonas, que se construyó sobre la base del modelo cero dimensional, con el fin de obtener las temperaturas de los gases quemados y no quemados.

La última parte del modelo fue ligado a la temperatura de la zona quemada, obtenida con el modelo de dos zonas, para estimar la concentración en equilibrio de 10 especies, la emisión de partículas de NO y de hollín.

Para la solución del modelo se desarrolló un algoritmo en fortran 90. Los resultados concuerdan adecuadamente con el comportamiento de un motor de este tipo. Se compararon favorablemente con algunos resultados experimentales de la literatura consultada.

NOMENCLATURA

Símbolo	Significado	Unidades
B	Diámetro del pistón	m
l	Longitud de la biela	m
Lr	Carrera	m
K	Índice poli trópico	-
Cv	Calor específico a volumen constante.	J / kg K
R	Contante de los gases	kJ / Kmol K
U	Energía Interna	J
w	Revoluciones por minuto	RPM
θ	Ángulo	$^{\circ}$
T	Temperatura	K
Ten	Temperatura de entrada	K
Tw	Temperatura de la pared	K
Pe	Presión de entrada	Bar
V	Volumen	m ³
Vc	Espacio Muerto	m ³
Vd	Volumen desplazado	m ³
W	Trabajo	J
Φ	Relación combustible aire	-
τ_{ID}	Retardo de Autoencendido	$^{\circ}$
P	Presión	Bar
RHR	Taza de liberación de calor	J/ $^{\circ}$
IHR	Calor Integrado liberado en el cilindro	J
Qsal	Calor de salida	J
Vu	Volumen de la zona no quemada	m ³
Vb	Volumen de la zona quemada	m ³
Tu	Temperatura de la zona no quemada	K
Tb	Temperatura de la zona quemada	K
Mu	Masa de la zona no quemada	kg
Mb	Masa de la zona quemada	kg
Nu	Número de Nusselt	-
Pr	Número de Prandtl	-
Re	Número de Reynolds	-
H	Coefficiente de convección	J / Km ²
Cm	Velocidad del pistón	rev / seg
Ww	Velocidad del gas	m/s
Θ_p	Inicio de la fase de pre mezcla	$^{\circ}$
Θ_d	Inicio de la fase de Difusión	$^{\circ}$
$\Delta\Theta_d$	Duración de la fase de pre mezcla	$^{\circ}$
$\Delta\Theta_d$	Duración de la fase de difusión	$^{\circ}$
md y mp	Factores de forma del RHR	-
a	Eficiencia de la combustión	-
A(Θ)	Área de transferencia	m ²
Pmot	Presión del Motor	bar

CAPÍTULO 1

CONCEPTOS BÁSICOS

1.1 Motor de combustión interna

Un motor de combustión interna (CI) es aquella máquina capaz de producir energía mecánica a partir de energía química contenida en un combustible, esta energía es liberada por la oxidación del combustible que ocurre directamente entre el fluido de trabajo y los componentes de la máquina. [1]

Dos de los principales tipos de motores de combustión interna son los motores de gasolina y de Diésel.

En los motores de gasolina o de ciclo Otto, durante la etapa de admisión la válvula se abre para dejar entrar una mezcla de aire y gasolina debidamente mezclada en el cilindro, la mezcla se comprime y la combustión se inicia por medio de una chispa, el aire-combustible se quema transformando su energía en calor de modo que se dilata con tal fuerza que obliga al embolo a desplazarse violentamente a lo largo del cilindro hasta llegar al punto muerto inferior (PMI) produciéndose de este modo la carrera de trabajo.

En un motor Diésel o de encendido por compresión, durante la admisión el cilindro se llena solamente de aire tomado del medio, se comprime hasta una cierta presión y temperatura, el combustible es introduce en esta densa atmósfera por medio de un inyector donde el aire, que está altamente comprimido y a una elevada temperatura, cuando aire y combustible entran en contacto, inmediatamente inicia la combustión, momento en el cual el embolo resulta impelido hacia su punto muerto inferior desarrollando el tiempo de trabajo. [2]

1.2 Ciclo Diésel

Admisión: En el motor Diésel, tal como lo muestra la figura 1.1., la entrada de aire se produce directamente de la atmosfera si, como ocurre en los motores de gasolina, por lo que el cilindro se llena exclusivamente de aire.

Compresión: Al final del tiempo de admisión, cuando el embolo llega al punto muerto inferior, se cierra la válvula de admisión, la válvula de escape continúa cerrada, atrapando todo el aire. En esta etapa el aire se comprime.

Combustión: Cerca del final del tiempo de compresión, se inyecta en la cámara de combustión una cantidad determinada y precisa de combustible pulverizado. Esta inyección dura, a plena carga, de 20 a 35° grados del giro del cigüeñal. Casi inmediatamente después de empezar la inyección se produce el encendido

espontaneo del combustible. Con esta combustión y el aumento de presiones indicadas el embolo es empujado hacia el PMI.

Escape: Al iniciar el ascenso del embolo la válvula de escape se abre y permite la evacuación de los gases quemados. Teóricamente, cuando el embolo ha llegado a su PMS, los gases quemados han salido del recinto y se abre la válvula de admisión de nuevo mientras se cierra la de escape, para proceder a formalizarse de nuevo el tiempo de admisión, con lo que el ciclo recomienza. La figura ilustra los pasos anteriormente descritos.

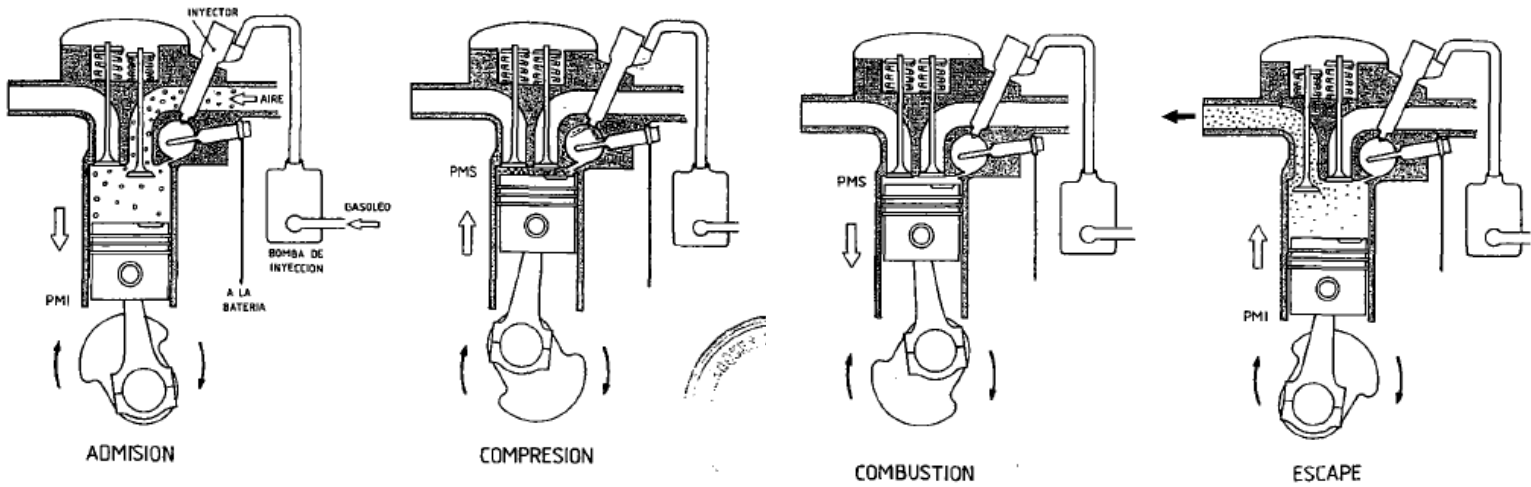


Fig. 1.1 Etapas del ciclo de un motor de encendido por compresión.

Desde el punto de vista termodinámico el ciclo Diésel consiste en 4 procesos ilustrados en la figura 1.2, el proceso 1-2 es una compresión isentrópica, el 2-3 es un proceso de adición de calor a presión constante, el 3-4 una expansión isentrópica y el 4-1 un rechazo de calor a volumen constante.

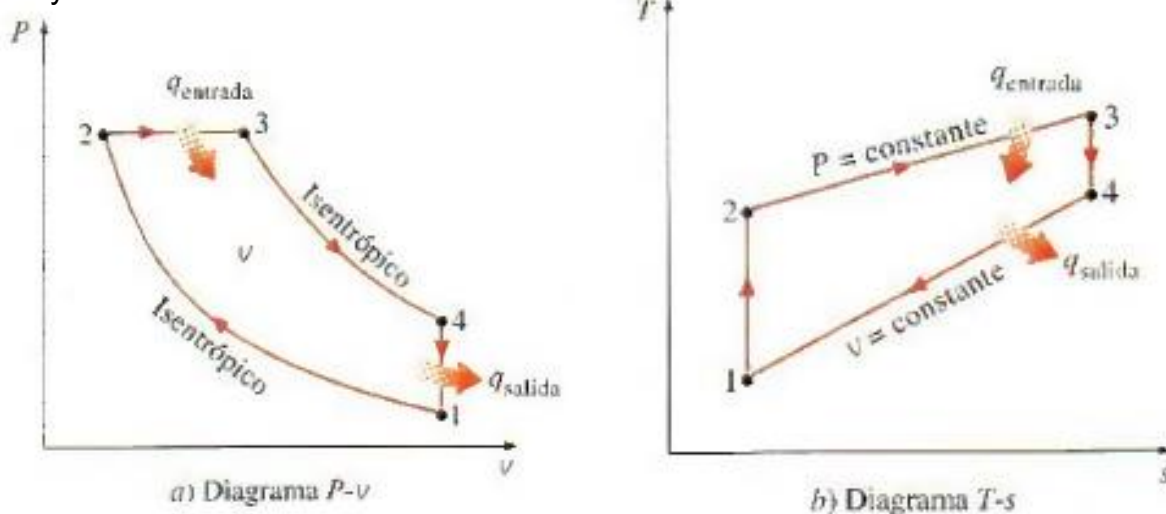


Fig.1.2. Diagramas a) P-v y b) T-s para el ciclo diésel ideal.

1.3 Motor de Encendido por Compresión: Diésel

En un motor de encendido por compresión convencional el proceso de combustión está caracterizado por la formación de una mezcla heterogénea. El combustible es inyectado directamente en la cámara de combustión bajo condiciones de alta presión. Este combustible es atomizado en pequeñas gotas, vaporizado y después mezclado con aire, resultando en una mezcla aire combustible. La combustión inicia por un proceso de auto ignición debido a los elevados niveles de presión y temperatura que han alcanzado los gases dentro del cilindro después del proceso de compresión.

En motores Diésel usualmente el periodo de tiempo en el que se da la formación de la mezcla o pre mezcla es muy reducido. Por lo tanto una rápida inyección y una buena atomización son prerequisites para una rápida e intensiva mezcla de aire combustible.

En este tipo de motores la carga es controlada variando la cantidad de combustible inyectado y el inicio de la combustión por el inicio de la inyección. La relación global aire combustible es usualmente pobre sin embargo la inyección del combustible en ciertas áreas provoca que existan diferentes relaciones de equivalencia. La figura 1.3 ilustra los subprocesos involucrados en un motor diésel.

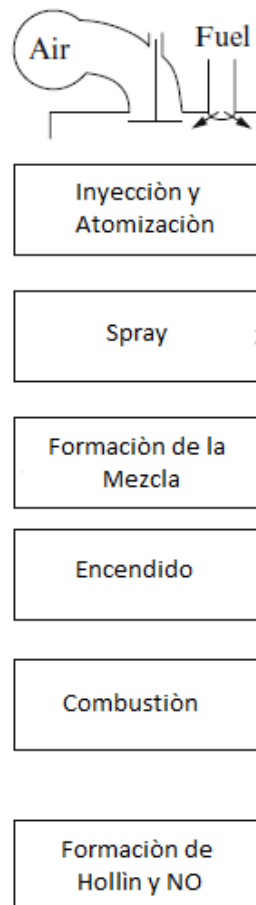


Fig. 1.3 subprocesos involucrados en un motor diésel

1.3.1 Sistema de inyección directa

En motores de tamaño grande – intermedio donde la tasa de mezclado es determinante, se utilizan los sistemas de inyección directa. El momento y la energía de los chorros de combustible inyectado son suficientes para alcanzar una adecuada distribución y mezcla del combustible con el aire. La cámara de combustión tiene una forma de tazón en la corona del pistón. Conforme el tamaño del motor se incrementa, es necesario ocasionar que el aire gire dentro de la cámara de combustión para alcanzar rápidamente la tasa de mezclado. El giro del aire o “air swirl” se genera por un diseño adecuado en los puertos de entrada.

El combustible inyectado no debe colisionar con el pistón que está relativamente frío porque de esta manera la evaporación y la formación de mezcla se retrasarían favoreciendo la formación de partículas de HC.

Los sistemas de inyección directa tienen un consumo específico menor de combustible que los sistemas de inyección indirecta, sin embargo por los altos gradientes de presión que se dan en el inicio de la combustión generan mayor ruido.

La figura 1.4 muestra los tipos de sistemas de inyección directa usados comúnmente.

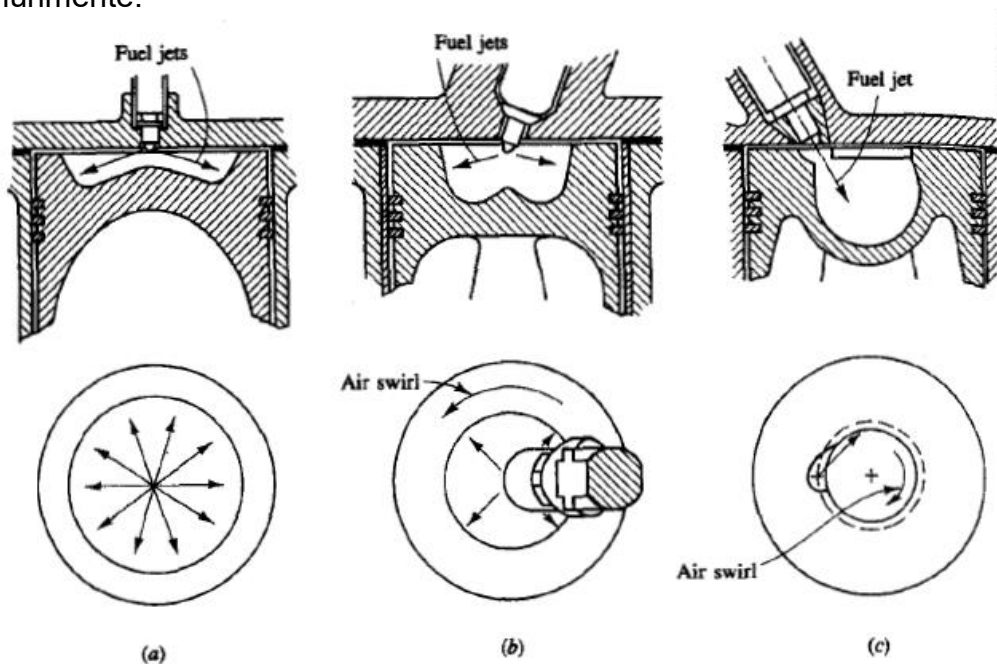


Fig. 1.4 Tipos de sistemas de inyección en motores de encendido por compresión.:
a) Cámara con sistema multi orificios; b) cámara con sistema multi orificios y aire swirl; c) Cámara con aire swirl y sistema de un solo orificio.

1.3.2 Sistema de inyección indirecta

El giro generado de aire de entrada, a pesar de la amplificación en la copa del pistón, no mejora suficientemente la tasa de mezclado en los motores pequeños Diésel de alta velocidad. Los sistemas de inyección indirecta o también llamados sistemas de cámara dividida han sido usados donde la carga de movimiento requerido durante la inyección es generada en la carrera de compresión. Dos clases de sistemas de inyección indirecta puede ser definidos como:

1. Sistema de cámara de giro.
2. Sistema de cámara turbulenta.

En el segundo sistema, durante la compresión, el aire es forzado desde la cámara principal a una cámara auxiliar a través de los orificios de la boquilla del inyector. Así, al final de la compresión, un flujo intenso se genera en la cámara auxiliar; En sistema de cámara de giro el pasaje de conexión y la cámara están configurados para que el flujo entre en la cámara auxiliar y rote rápidamente.

El combustible es usualmente inyectado dentro de la cámara auxiliar a una presión más baja que los sistemas de inyección directa. La combustión inicia en esta cámara. El incremento de presión asociado a la combustión obliga al fluido a dirigirse a la cámara principal donde el chorro emitido de la boquilla del inyector entra y se mezcla con el aire la cámara principal. La figura 1.5 ilustra estos dos tipos de sistema.

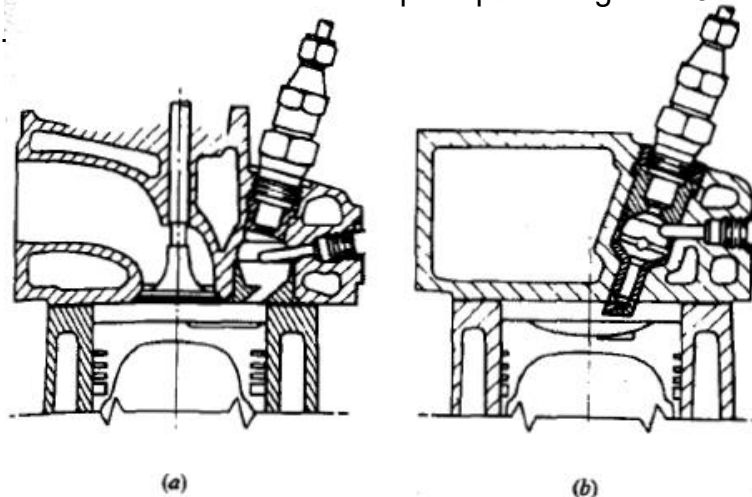


Fig. 1.5 Tipos de sistemas de inyección indirecta: a) cámara de giro; b) Pre cámara de turbulencia.

1.3.3 Desarrollo del Spray y Formación de la Mezcla

La boquilla del inyector es el enlace entre el sistema de inyección y la cámara de combustión. El combustible deja la boquilla del inyector a alta velocidad a través de los orificios con diámetro del orden de 0.12 mm a 1.5 mm. La figura 1.6 muestra una representación del spray atomizado.

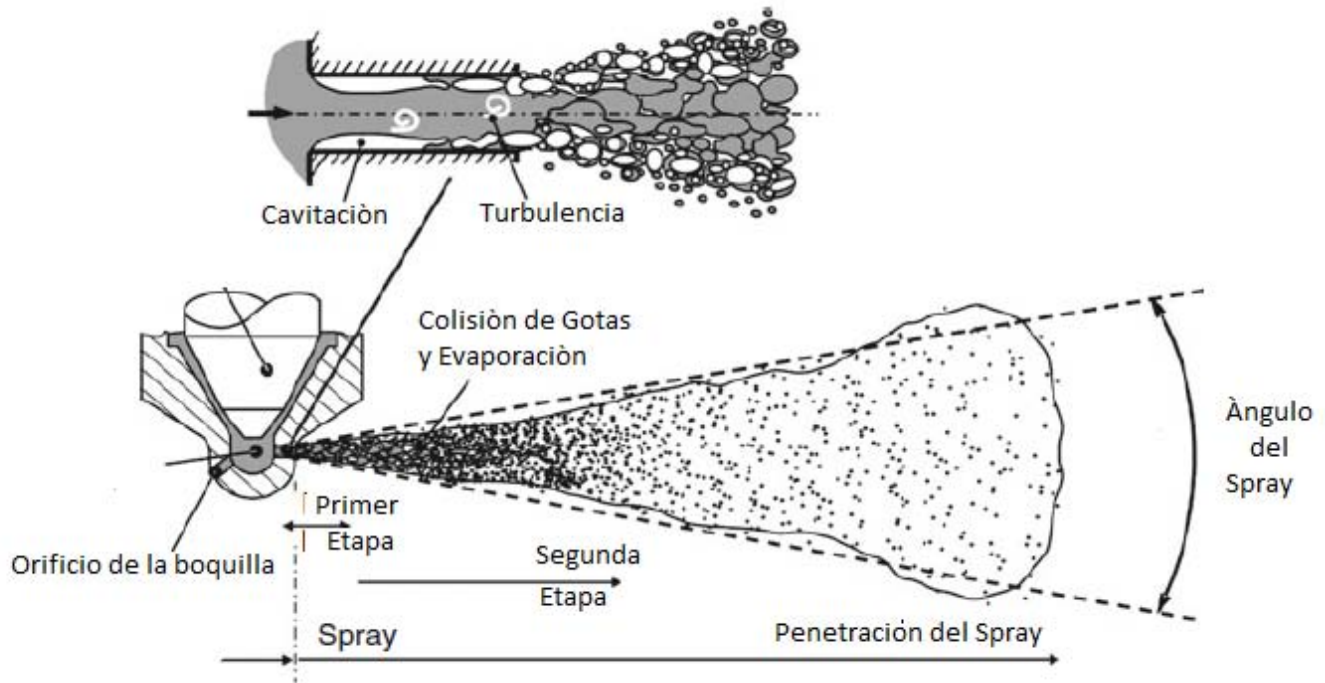


Fig. 1.6. Representación esquemática del flujo interno de la boquilla del inyector y propagación del spray.

El spray generado durante la inyección puede ser dividido en dos regiones. La primera región está formada por gotas, la cavitación y turbulencia son los mecanismos más importantes de esta región. La descomposición de las gotas en pequeñas gotas debido a las fuerzas aerodinámicas causadas por la velocidad entre las gotas y el medio se da en la segunda región donde también pueden colisionar e unirse con otras gotas.

El momento del spray provoca que el aire de los alrededores de la cámara de combustión entre en el spray. Las gotas son calentadas como resultado de la transferencia de calor por convección y finalmente el combustible se evapora.

Solo una pequeña cantidad de combustible inyectado logra mezclarse homogéneamente con el aire durante el retraso de ignición o autoencendido. Después de la ignición esta cantidad se quema casi instantáneamente. Después la formación de la mezcla y la combustión proceden simultáneamente.

1.3.4 Auto encendido y secuencia de la combustión

Retraso de autoencendido. Esta primera fase ocurre entre los instantes en que se inicia la inyección (SOI) y comienza la combustión (SOC). Una vez que comienza la inyección, el combustible en estado líquido se mezcla con el aire caliente del cilindro pasando por los tres procesos descritos anteriormente: atomización, evaporización y englobamiento de aire. Además, aunque apenas se pueda ver liberación de energía en la figura anterior, una serie de pre-reacciones químicas generadas por la existencia de una atmósfera reactiva en el interior de la cámara de combustión culminan con el encendido generalizado de la mezcla. Este encendido generalizado es identificado gracias al repentino incremento en la tasa de liberación de calor que produce.

Combustión premezclada. Justo en el instante posterior al comienzo del proceso de combustión se produce la oxidación del combustible que se ha mezclado en el periodo de retraso, pero que no se ha autoencendido debido a que no ha alcanzado las condiciones químicas necesarias. En esta fase, la tasa de liberación de calor alcanza un máximo para luego descender hasta un mínimo relativo que se establece como el punto que indica el final de la etapa.

Combustión por difusión rápida. Esta fase inicia cuando la mezcla aire-combustible formada durante la primera etapa del proceso de combustión es consumida. En esta tercera fase, como se puede observar en la figura 1.7, conviven los procesos de inyección y de combustión, por lo tanto se siguen desarrollando los diferentes procesos de atomización, evaporación, formación de la mezcla, englobamiento del aire, etc. Sin embargo, es la mezcla aire combustible la que se encarga del control de la tasa de liberación de calor y la relación oxígeno-combustible se encuentra muy próxima a la estequiometría. Si la inyección dura lo suficiente, la estructura de la llama se estabiliza llegando a condiciones cuasi estacionarias, manteniéndose hasta que la inyección finaliza (EOI).

Combustión por difusión lenta. Cuando finaliza el proceso de inyección, la introducción de cantidad de movimiento en la cámara de combustión cesa y la consecuencia principal es que el proceso de formación de la mezcla se deteriora dando lugar a una disminución progresiva de la tasa de liberación de calor hasta que termina el proceso de combustión. La llama pierde su carácter cuasi estacionario y toma configuraciones mucho más aleatorias.

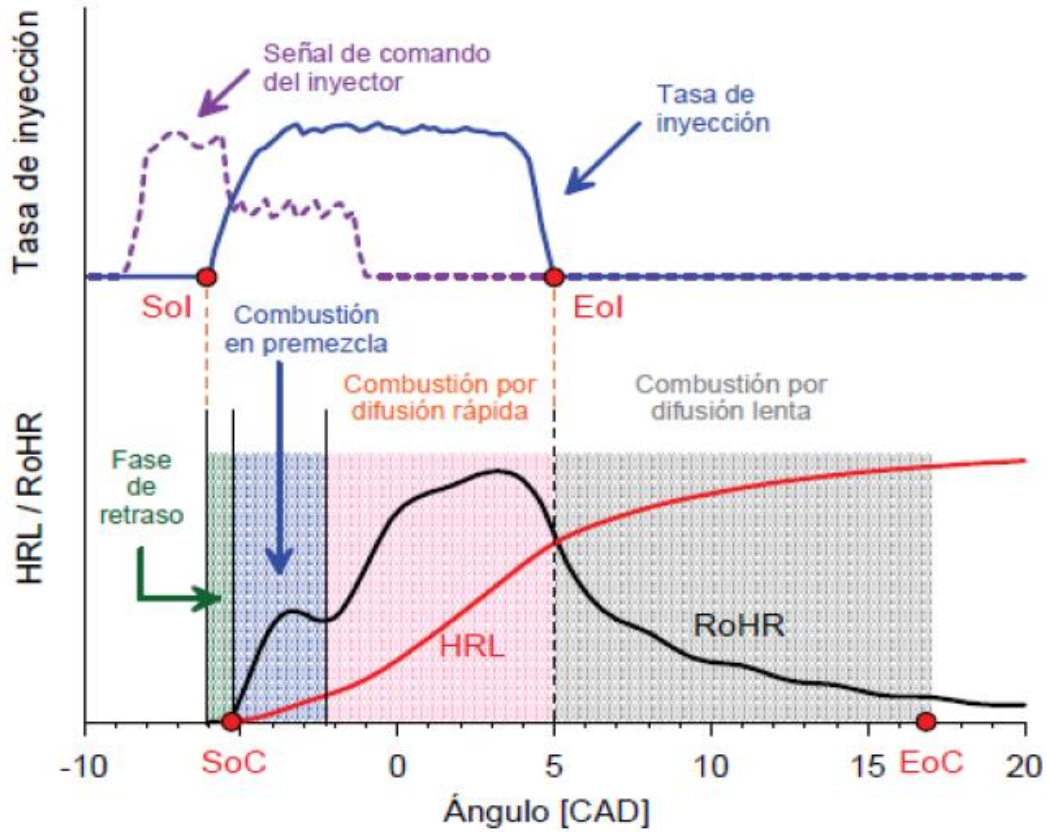


Fig. 1.7. Fases del proceso de combustión Diésel definidas a partir de la tasa de inyección y la tasa de liberación de calor.

CAPÍTULO 2

REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA DEL MODELADO DE LA COMBUSTIÓN EN MOTORES DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN

El proceso de combustión es el aspecto más importante de un motor de combustión interna, por lo que su modelado es de gran relevancia al simular el comportamiento global de un motor Diésel. Los modelos de la combustión se suelen clasificar de acuerdo a la representación espacial del proceso. Según Heywood [2], existen dos tipos de modelos para motores Diésel, los modelos fluido-dinámicos y los modelos termodinámicos, a su vez estos últimos pueden clasificarse como cero-dimensionales, fenomenológicos o cuasi-dimensionales, ver figura 2.1

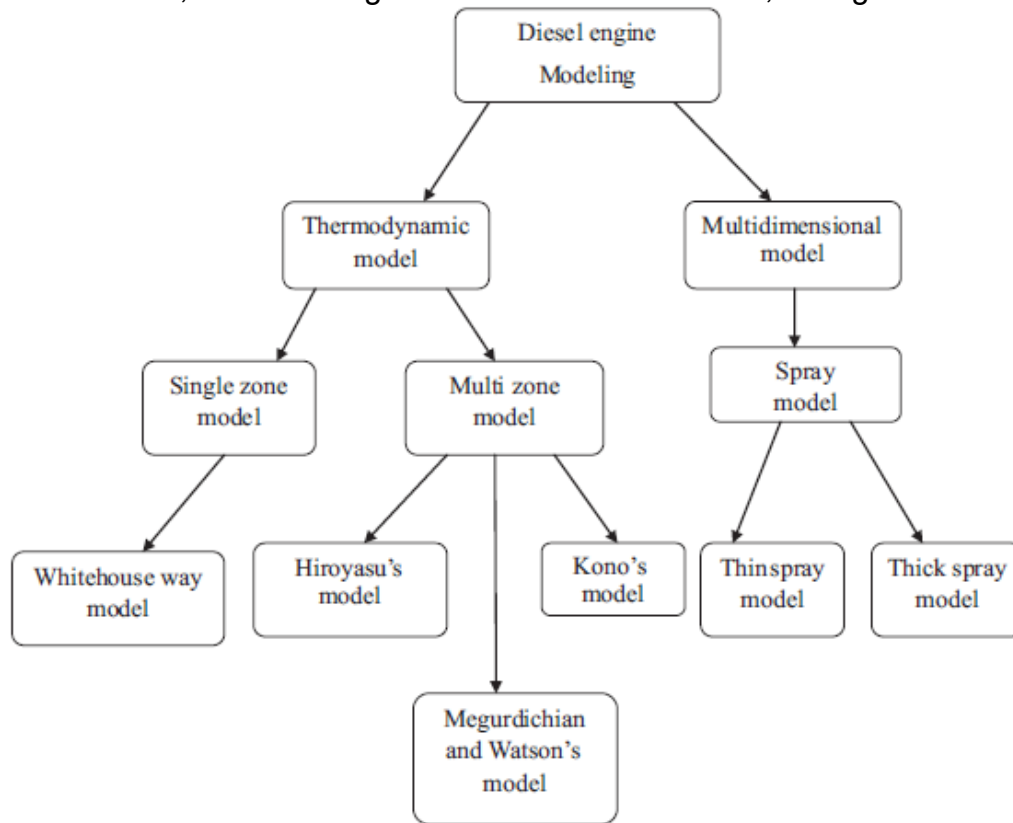


Fig. 2.1. Clasificación de modelos para motores Diésel

2.1 Modelos multidimensionales

Los modelos multidimensionales o CFD (Computational fluid dynamics) son modelos que tienen el potencial de describir individualmente cada uno de los fenómenos físicos y químicos que tienen lugar dentro del proceso inyección-combustión. Estos se basan en la resolución numérica de las ecuaciones diferenciales que gobiernan los procesos que ocurren dentro de la cámara de combustión. A partir de la metodología de cálculo multidimensional han nacido varios códigos CFD comerciales ampliamente utilizados, como SPEED, FLUENT y KIVA, siendo este último el más usado a nivel mundial; y recientemente, se ha desarrollado el software de código abierto OpenFOAM.

Los modelos multidimensionales han sido utilizados principalmente para estudiar los efectos de la inyección y del flujo de combustible en el desempeño y generación de emisiones del motor. Se pueden citar los trabajos de Zheng et al. [5] en 2005, quienes utilizaron un código CFD para estudiar los efectos del ángulo de inyección, la temperatura inicial y la composición del combustible en el ángulo de ignición, la presión en cámara y las emisiones de NO_x; Jayashankara y Ganesan [6], quienes en 2010 presentaron un modelo para el estudio de los efectos de la presión de entrada y el ángulo de inyección sobre el desempeño del motor y sus emisiones de NO_x y material particulado; y Shi y Reitz [7] que en el mismo año utilizaron un modelo para estudiar las estrategias de inyección óptimas en un motor de encendido por compresión, alimentado con Diésel, gasolina y mezcla E10, y operando a condiciones de mediana y alta carga.

Este tipo de modelos presenta como ventaja su capacidad de describir cada uno de los fenómenos que tienen lugar en el proceso inyección-combustión Diésel, teniendo en cuenta tanto la geometría instantánea del cilindro como la variación espacial del campo de flujo. No obstante, tienen la desventaja de un mayor consumo de tiempo computacional en comparación con los modelos termodinámicos y su sensibilidad a los submodelos utilizados en los cálculos, algunos de los cuales aún no están bien definidos.

2.2 Modelos cero-dimensionales

Estos son modelos basados principalmente en la ley de conservación de la energía, en los que se asume homogeneidad espacial de las variables implicadas en el proceso. Muchos modelos cero-dimensionales se basan en la descripción matemática de la forma de la ley de liberación de calor sin relación directa con la física que controla el proceso de inyección-combustión. El más conocido de estos métodos es la función de Vibe. Para el caso de motores Diésel de inyección directa,

en donde se presenta una fuerte liberación de calor en la combustión premezclada, necesario utilizar una combinación de dos funciones de Wiebe. En motores Diésel modernos, en los que se han incorporado nuevas tecnologías y avanzados sistemas de combustión para disminuir las emisiones y el consumo de combustible, una o dos ecuaciones de Wiebe ya no resultan apropiadas para simular el calor liberado en la combustión, por lo que se han aplicado tres, cuatro o inclusive más como se puede observar en diferentes trabajos.

Otros modelos del tipo cero-dimensional describen el problema teniendo en cuenta la físico-química de los fenómenos ocurridos durante la combustión de forma simplificada. Entre los modelos de este último tipo se encuentran los trabajos realizados por: Way [8], en el que se presentan dos métodos para el cálculo de la composición y propiedades termodinámicas del gas dentro de la cámara durante la combustión; Hardenberg y Hase [9], en el cual se obtuvo una ecuación empírica para calcular el tiempo de retardo en la ignición, permitiendo evaluar los efectos del combustible, los parámetros del motor y las condiciones del motor sobre dicho tiempo de retardo; Gardner y Henein [10], en el que se desarrolló un modelo matemático con el que se analizaron los efectos de la relación de compresión en los parámetros de desempeño del motor; Harris y Pearce [11], donde se realizó un modelo que expresa el par, la potencia y el consumo de combustible como función de la velocidad del motor a cero par y la disminución de la velocidad del motor por debajo de la velocidad a cero par; y más recientemente el trabajo de Arrègle et al. [12], el cual identifica y cuantifica la influencia de los parámetros de inyección y las condiciones de operación en la combustión Diésel, para esto se define un nuevo parámetro denominado Tiempo Aparente de Combustión (ACT, de sus siglas en inglés), que permite relacionar la ley de liberación de calor con la ley de inyección en el proceso de inyección-combustión Diésel; y el trabajo de Chmela et al. [13], el cual presenta una estrategia genérica para el desarrollo de modelos de combustión cero-dimensionales usando las ecuaciones básicas para la tasa de reacción de Arrhenius y Magnussen.

2.3 Modelos cuasi-dimensionales o fenomenológicos

Los modelos cuasi-dimensionales son modelos que presentan un planteamiento cero-dimensional básico, pero incluyen algún aspecto geométrico característico del proceso (como la geometría del chorro) o detalles espaciales adicionales para alguno de los fenómenos involucrados en la combustión (atomización, evaporación, mezcla de combustibles, etc.) [14]. Ellos suelen dividir la cámara de combustión en varias zonas, haciendo necesaria la resolución de las ecuaciones de conservación de masa y energía para cada una de éstas.

Los modelos cuasi-dimensionales permiten calcular la formación/destrucción de emisiones y tienen un bajo tiempo de cálculo computacional frente a los modelos multidimensionales. Como inconveniente presentan la necesidad de ajustar algunos de sus coeficientes con resultados experimentales, debido al gran número de simplificaciones que requieren.

Uno de los primeros trabajos bajo esta metodología fue el realizado por Probert [15], quien examinó la evaporación del chorro de combustible usando una función de distribución de gotas; este trabajo fue posteriormente ampliado por Tanaswa [16], quien relacionó explícitamente los procesos de evaporación y combustión por medio de un coeficiente de combustión. Otros de los trabajos pioneros de modelos fenomenológicos son los de Austen y Lyn [17] y Lyn [18] quienes plantearon un modelo que relaciona cuantitativamente la tasa de inyección de combustible con la tasa de calor liberado; Cook [19,20] Nagao et al. [21] y Shipinsky et al. [22,23] que describieron el proceso de combustión de manera similar a Austen y Lyn pero dividiendo la tasa de inyección en zonas que se pueden evaporar, auto encender y quemar de forma independiente.

Estos primeros trabajos están basados en la hipótesis de que la evaporación es el fenómeno que controla la combustión, posteriormente aparecieron los trabajos de Whitehouse y Way [24,25], en los cuales se desarrolló un método para el cálculo de la tasa de liberación de calor que utiliza ecuaciones simples basadas en un modelo de una zona y que tiene en cuenta los efectos de la tasa de mezcla entre el aire y el combustible; Whitehouse y Sareen [26] en el que se presentó un modelo de dos zonas basado en el trabajo de Whitehouse y Way; Grigg y Syed [27] en donde se consideraron los efectos, sobre la liberación de calor, de la tasa de incorporación del aire en el chorro de combustible, la tasa de mezclado turbulento de aire y combustible dentro del chorro, y la cinética química de la combustión;

A partir de los 90 la mayoría de los modelos del tipo cuasi-dimensional han sido modelos multi-zona basados en el tratamiento mixto del chorro inyectado.

Algunos de los modelos multi-zona desarrollados en los últimos años son los de Rakopoulos et al. [28] en 2007, cuyo fin es el de estudiar el desempeño de un motor Diésel de inyección directa (ID) y en 2008, el cual es utilizado para examinar los mecanismos de formación de las emisiones en la combustión al usar mezcla etanol-Diésel. CCI. En los últimos años también se han desarrollado varios modelos de dos zonas, la mayoría de ellos con el fin de predecir el desempeño de motores Diésel alimentados con biocombustibles.

CAPÍTULO 3

PLANTEAMIENTO DEL MODELO TERMODINÁMICO

3.1 Modelo de primera zona

La primera ley de la termodinámica para un sistema cerrado es:

$$Q - W = U \quad (1)$$

Usando la definición del trabajo, la primera ley se puede escribir como:

$$dQ_{in} - dQ_{sal} - (pdV) = dU \quad (2)$$

Para un gas ideal la ecuación de estado es:

$$pV = mRT \quad (3)$$

Si derivamos la ecuación 3, obtenemos

$$pdV + Vdp = mR dT \quad (4)$$

Y la energía cinética para un gas ideal se puede expresar como:

$$dU = d(m C_v T) \quad (5)$$

Aplicando la regla de la cadena a la ecuación (5)

$$dU = m dC_v T + m C_v dT$$

Y Multiplicando la ecuación por R, acomodando

$$R dU = R (m dC_v T + m C_v dT)$$

$$R \frac{dU}{C_v} = R m dC_v \frac{T}{C_v} + m R dT$$

$$\frac{R}{C_v} (dU - m dC_v T) = m R dT \quad (6)$$

Sustituyendo ecuación (6) en (4) y despejando el cambio de energía interna, se tiene:

$$pdV + Vdp = \frac{R}{C_v} (dU - m dC_v T)$$

$$(pdV + Vdp) \frac{C_v}{R} + m dC_v T = dU \quad (7)$$

Igualando ecuación (7) en (2) y despejando

$$dQ_{in} - dQ_{sal} - (pdV) = (pdV + Vdp) \frac{C_v}{R} + m dC_v T \quad (8)$$

Dividiendo expresión anterior entre $d\theta$

$$\frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta} - \left(\frac{pdV}{d\theta}\right) = \left(\frac{pdV}{d\theta} + \frac{Vdp}{d\theta}\right) \frac{C_v}{R} + m \frac{dC_v}{d\theta} T \quad (9)$$

Expresando el cambio del calor específico como:

$$\frac{dC_v}{d\theta} = \frac{dC_v}{dk} \frac{dk}{d\theta} \quad (10)$$

Conociendo que:

$$\frac{R}{C_v} = k - 1$$

Derivando expresión anterior:

$$0 = dC_v(k - 1) + C_v dk$$

$$-dC_v(k - 1) = C_v dk$$

$$\frac{dC_v}{dk} = -\frac{C_v}{(k - 1)}$$

$$\frac{dC_v}{dk} = -\frac{1}{(k - 1)} \left(\frac{R}{(k - 1)}\right)$$

$$\frac{dC_v}{dk} = -\frac{R}{(k - 1)^2} \quad (11)$$

Sustituyendo 11) en 10)

$$\frac{dC_v}{d\theta} = -\frac{R}{(k - 1)^2} \frac{dk}{d\theta} \quad (12)$$

Sustituyendo 12) en 9)

$$\frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta} - \left(\frac{pdV}{d\theta}\right) = \left(\frac{pdV}{d\theta} + \frac{Vdp}{d\theta}\right) \frac{C_v}{R} - \frac{mRT}{(k - 1)^2} \frac{dk}{d\theta} \quad (13)$$

Como $PV=mRT$ obtenemos

$$\frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta} - \left(\frac{pdV}{d\theta}\right) = \left(\frac{pdV}{d\theta} + \frac{Vdp}{d\theta}\right) \frac{C_v}{R} - \frac{PV}{(k - 1)^2} \frac{dk}{d\theta}$$

$$\begin{aligned} \frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta} - \left(\frac{pdV}{d\theta}\right) \left(1 + \frac{1}{(k-1)}\right) + \frac{PV}{(k-1)^2} \frac{dk}{d\theta} &= \left(\frac{Vdp}{d\theta}\right) \\ \frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta} - \left(\frac{pdV}{d\theta}\right) \left(\frac{k}{(k-1)}\right) + \frac{PV}{(k-1)^2} \frac{dk}{d\theta} &= \left(\frac{Vdp}{d\theta}\right) \\ (k-1) \left(\frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta}\right) - \left(\frac{pdV}{d\theta}\right) k + \frac{PV}{(k-1)} \frac{dk}{d\theta} &= \left(\frac{Vdp}{d\theta}\right) \\ \frac{dp}{d\theta} &= \frac{(k-1)}{V} \left(\frac{dQ_{in}}{d\theta} - \frac{dQ_{sal}}{d\theta}\right) - k \frac{p}{V} \frac{dV}{d\theta} + \frac{P}{(k-1)} \frac{dk}{d\theta} \end{aligned} \quad (14)$$

3.1.1 Pérdidas de calor a través de las paredes del cilindro (Qsal)

La transferencia de calor en el cilindro consiste en un componente debido a la convección y otro a la radiación:

$$\frac{dQ_{sal}}{d\theta} = \frac{dQ_{conv}}{d\theta} + \frac{dQ_{rad}}{d\theta}$$

Considerando los efectos por la radiación incluidos en el coeficiente de convección, podemos reescribir la expresión anterior como:

$$\frac{dQ_{sal}}{d\theta} = h A(\theta) (T_g - T_w) \left(\frac{1}{\omega}\right) \quad (15)$$

3.1.1.1 Modelo de transferencia de calor de Woschni

Este modelo asume un flujo completamente turbulento. El coeficiente de convección se obtiene a partir de la ecuación semi empírica que relaciona el número adimensional de Nusselt, Reynolds y Prandtl [4]:

$$Nu = C Re^{0.8} Pr^{0.4} \quad (16)$$

De la definición del número de Nusselt, Reynolds y Prandtl

$$Nu = \frac{hD}{\lambda} \quad Re = \frac{\rho w D}{\eta} \quad Pr = \frac{\eta}{\rho \alpha}$$

Considerando al gas dentro de la cámara de combustión como ideal, la ecuación de estado es:

$$\rho = \frac{P}{RT}$$

Sustituyendo la ecuación de estado, el número Nu y el Re en expresión (16) se tiene:

$$\frac{hD}{\lambda} = C \left(\frac{P}{RT} \frac{wD}{\eta} \right)^{0.8} Pr^{0.4} \quad (17)$$

Al despejar el coeficiente de convección (h) y simplificar la ecuación (17) se obtiene:

$$h = C D^{-0.2} P^{0.8} W^{0.8} Pr^{0.4} \frac{\lambda}{(RT \eta)^{0.8}} \quad (18)$$

Aplicando a la expresión 18) las siguientes propiedades físicas:

$$Pr = 0.74 \quad \frac{K}{k_0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^x \quad \frac{\mu}{\mu_0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^y$$

Y considerando que la velocidad del flujo (w) es igual a la velocidad del pistón (cm)

$$h = C D^{-0.2} P^{0.8} T_g^{-r} cm^{0.8} \quad (19)$$

Donde

$$r = 0.8(1 + y) - x$$

Datos experimentales muestran que r y c pueden tomar los siguientes valores:

$$r = 0.53$$

$$C = 127.93 \frac{W}{m^2 K}$$

Debido a que en el proceso de combustión los niveles de turbulencia aumentan y así el coeficiente h. La expresión 19) se debe corregir sustituyendo cm por un término de velocidad ww, que toma en cuenta la velocidad del pistón como la turbulencia inducida.

Finalmente el coeficiente de convección es:

$$h = 127.93 D^{-0.2} P^{0.8} T_g^{-0.53} ww^{0.8} \quad (20)$$

Donde

$$ww(\theta) = C1 \, cm + C2 \frac{V_d T_0}{P_0 V_0} (p(\theta) - P_{mot}) \quad (21)$$

De acuerdo a Merker [4], las constantes C1 y C2 pueden tomar los siguientes valores:

$$C_1 = \begin{cases} 6.18 + 0.417 \frac{C_u}{C_m} : \text{gas exchange} \\ 2.28 + 0.308 \frac{C_u}{C_m} : \text{compression/expansion} \end{cases}$$

$$C_2 = \begin{cases} 6.22 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m}{s K} \right] : \text{pre-chamber-engine} \\ 3.24 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m}{s K} \right] : \text{direct injection-engine} \end{cases}$$

La presión del motor (P_{mot}) puede ser determinada con una relación poli trópica:

$$P_{mot} = Pr \left(\frac{V_1}{V(\theta)} \right)^k \quad (22)$$

Donde:

Pr = Presión de entrada o de referencia (Pa)

V_1 = Volumen inicial (m^3)

$V(\theta)$ = Volumen del cilindro (m^3)

K = Índice poli trópico

La velocidad del pistón se puede calcular como:

$$cm = \frac{2NS}{60} \quad (23)$$

Donde N es el número de revoluciones y S la carrera.

3.1.2 Calor de entrada o heat release (Qin)

El modelo de calor de entrada o heat release describe el curso temporal del calor liberado dentro de la cámara de combustión. Vibe [30] proporciona la siguiente relación para el calor total liberado en la cámara de combustión.

$$\frac{dQ_{in}}{d\theta} = Q_{in, total} a (m + 1) \left(\frac{\theta - \theta_p}{\Delta\theta_p} \right)^m \exp \left(-a \left(\frac{\theta - \theta_p}{\Delta\theta_p} \right)^{m+1} \right)$$

En motores que tienen una clara y marcada fase de pre mezcla en la combustión, la reproducción del comportamiento de la tasa de calor de entrada con una sola función de Vibe es muy imprecisa. Para disminuir esta imprecisión es necesario usar dos funciones de Vibe:

$$\begin{aligned} \frac{dQ_{in}}{d\theta} = & Q_p a \frac{(mp + 1)}{\Delta\theta_p} \left(\frac{\theta - \theta_p}{\Delta\theta_p} \right)^{mp} \exp \left(-a \left(\frac{\theta - \theta_p}{\Delta\theta_p} \right)^{mp+1} \right) \\ & + Q_d a \frac{(md + 1)}{\Delta\theta_d} \left(\frac{\theta - \theta_d}{\Delta\theta_d} \right)^{md} \exp \left(-a \left(\frac{\theta - \theta_d}{\Delta\theta_d} \right)^{md+1} \right) \end{aligned} \quad (24)$$

Donde θ_p y θ_d se refieren al inicio de las fases de pre mezcla y difusión en la combustión respectivamente. Los parámetros $\Delta\theta_p$ y $\Delta\theta_d$ representan la duración de las fases de pre mezcla y difusión respectivamente. Las variables Q_p y Q_d representan la energía liberada en las fases mencionadas. Las constantes a , mp y md son seleccionadas para relacionar los datos experimentales.

El factor a indica la eficiencia de la combustión, para una eficiencia de 99.9 % el factor a es:

$$\begin{aligned} a &= -\ln(1 - \eta_{conv}) \\ a &= -\ln(1 - 0.999) \\ a &= \mathbf{6.908} \end{aligned}$$

Para los factores de forma mp y md Miyamoto [31] menciona que mp , md y θ_p son esencialmente independientes de la velocidad, carga y duración de la inyección de cada motor, así estos valores se pueden considerar constantes:

$$\begin{aligned} mp &= 4 \\ md &= \mathbf{1.9 \text{ para inyección directa}} \\ \theta_p &= \mathbf{7 \text{ grados}} \end{aligned}$$

Para determinar el calor liberado en cada fase, se toma en cuenta el calor total que se espera sea liberado dentro de la cámara de combustión, es decir:

$$(Q_{in})_{total} = mf LHV$$

Así

$$Q_p = fp(Q_{in})_{total} = fp mf LHV$$

$$Q_d = fd (Q_{in})_{total} = fd mf LHV$$

Donde:

fp y fd = fracción de calor liberado en la premezcla y difusión

mf = Masa de combustible (kg)

$$LHV = \text{Poder calorífico inferior del Diesel} = 43 \frac{MJ}{kg}$$

3.1.3 Retardo de Autoencendido

Existen diversas expresiones para calcular el retardo de autoencendido, la siguiente expresión ha sido desarrollada especialmente para los motores de encendido por compresión [2].

$$\tau_{id}(\circ) = (0.36 + 0.22Sp) \exp \left[EA \left(\frac{1}{RT} - \frac{1}{17190} \right) \left(\frac{21.2}{P - 12.4} \right)^{0.63} \right] \quad (25)$$

Donde:

P es la presión al final de la carrera d compresión [Bars]

T es la temperatura al inicio de la combustión [K]

Sp es la velocidad del pistón [m/s]

3.1.4 Volumen del Cilindro

Del mecanismo biela-manivela, el cambio de volumen del cilindro es solamente una función del diámetro del cilindro y del cambio en la posición vertical dz . Ver figura 3.1.

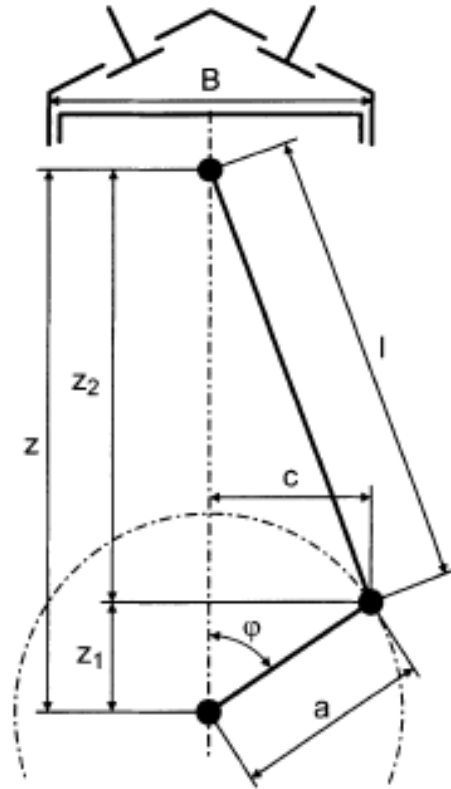


Fig. 3.1. Geometría del mecanismo biela – manivela

El volumen del cilindro V en cualquier posición de la manivela θ está dado por:

$$V = V_c + \frac{\pi B^2}{4} (l + a - z)$$

Donde z es la distancia entre el eje de la manivela y el perno del eje del pistón y está dado por:

$$z = a \cos \theta + (l^2 - a^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}$$

Sustituyendo la expresión anterior en la ecuación del volumen

$$V = V_c + \frac{\pi B^2}{4} (l + a - a \cos \theta - (l^2 - a^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}})$$

$$V = V_c + \frac{\pi B^2}{4} \left[a(1 - \cos\theta) + \left(l - \sqrt{l^2 - a^2 \sin^2\theta} \right) \right] \quad (26)$$

Derivando la ecuación del volumen respecto del ángulo

$$\frac{dV}{d\theta} = \frac{\pi B^2}{4} \left[a \sin(\theta) + \left(\frac{a^2 \sin(\theta) \cos(\theta)}{\sqrt{l^2 - a^2 \sin^2\theta}} \right) \right] \quad (27)$$

Dónde:

V_c = Volumen muerto (m^3).

B = Diámetro del pistón (m).

θ = Ángulo de la manivela (deg).

l = Longitud de la biela (m).

a =Longitud de la manivela. (Carrera /2)

3.1.5 Trabajo

El único tipo de trabajo en la cámara de combustión es el trabajo de compresión expansión que es debido al cambio de volumen ocasionado por la rotación de la manivela $d\theta$:

$$\frac{dW}{d\theta} = -P_{cyl} \frac{dV}{d\theta} \quad (28)$$

El ángulo θ está relacionado con el tiempo por la velocidad de rotación del motor:

$$d\theta = \omega dt = 2\pi n dt \quad (29)$$

3.2 Modelo empírico de dos zonas

Con el modelo de primera zona generalmente no es posible estimar la formación de NO_x debido a la baja temperatura que se obtiene del modelo. Heider [32] presento un modelo simple que toma como base el modelo de primera zona o cero dimensional en el cual asume que los gases del cilindro están divididos en dos zonas, tal como se ilustra en la figura 3.2.

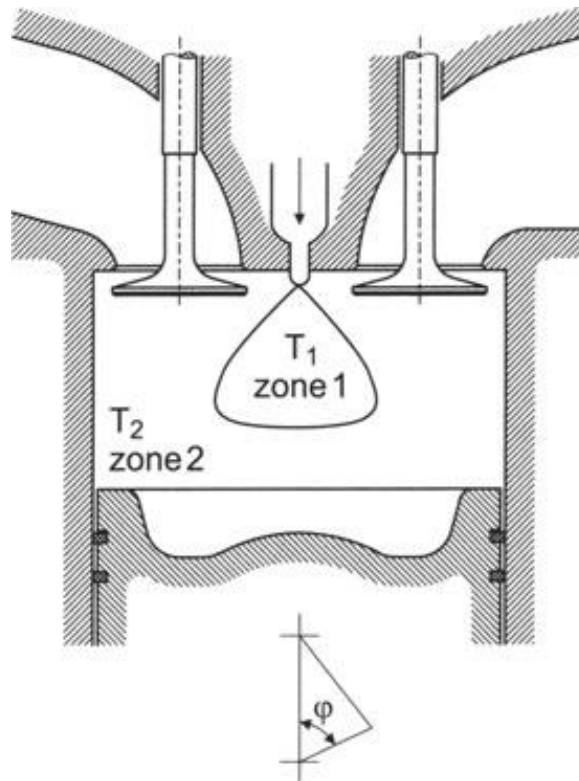


Fig. 3.2 Esquema del modelo de dos zonas dentro de la cámara de combustión.

La zona 1, llamada zona de reacción, contiene los productos quemados a alta temperatura y la zona 2, contiene aire fresco con ciertos residuos del proceso anterior en el caso de la recirculación de gases de escape. Al igual que Heider, Mohamed F. Al-Dawody [33] plantea un modelo de temperatura de dos zonas tomando como base la ecuación de gas ideal.

El presente trabajo emplea los modelos de Heider y Mohamed para estimar principalmente la temperatura de la zona quemada y no quemada.

Consideraciones tomadas en el modelo

- Se cumple la ley de conservación de masa y volumen en las dos zonas
- El comportamiento es de gas ideal en el cilindro y en cada una de las zonas
- El calor liberado es completamente lanzado en la zona 1
- La relación de equivalencia es constante e igual a uno en la zona quemada.
- La temperatura de la zona no quemada es igual a la temperatura del modelo cero dimensional hasta el punto SOC
- La presión se considera uniforme en las dos zonas

Planteamiento de ecuaciones

$$m_1 + m_2 = m_{cyl} \quad (30)$$

$$V_1 + V_2 = V_{cyl} \quad (31)$$

$$P_1 = P_2 = P_{cyl} \quad (32)$$

$$m_1 T_1 + m_2 T_2 = m_{cyl} T_{cyl} \quad (33)$$

La masa de la zona quemada (m_1) es calculada como:

$$m_1 = m_{aire}(\theta) + m_{fuel}(\theta)$$

$$m_1 = m_{fuel}(\theta) \left[\frac{afstequio}{\phi_1} + 1 \right]$$

$$m_1 = \frac{Q_{in}}{LHV} \left[\frac{afstequio}{\phi_1} + 1 \right] \quad (34)$$

La masa de la zona no quemada se determina con un simple balance:

$$m_2 = m_{cyl} - m_1 \quad (35)$$

Para la temperatura de la zona quemada (T_1) se tiene que satisfacer la siguiente expresión:

$$m_1 T_1 + m_2 T_2 = m_{cyl} T_{cyl}$$

$$m_1 T_1 = m_{cyl} T_{cyl} - m_2 T_2$$

$$T_1 = \frac{m_{cyl} T_{cyl} - m_2 T_2}{m_1}$$

$$T_1 = \frac{m_{cyl} T_{cyl} - (m_{cyl} - m_1) T_2}{m_1} \quad (36)$$

La temperatura de los gases no quemados (T2) se calcula considerando un proceso de compresión adiabático:

$$T2 = Tsoc \left(\frac{P}{Psoc} \right)^{\frac{k-1}{k}} \quad (37)$$

Donde Tsoc y Psoc son la temperatura y presión al inicio de la combustión respectivamente y P es la presión cero dimensional.

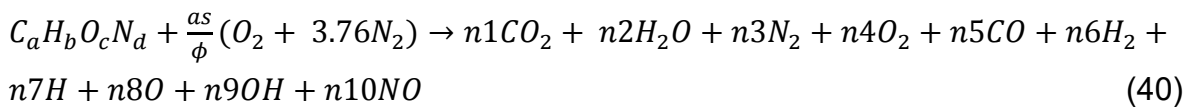
Los volúmenes de cada zona se determinan haciendo uso de la ecuación de gas ideal una vez conocidas las temperaturas T1 y T2

$$V1 = \frac{m1 R1 T1}{P} \quad (38)$$

$$V2 = \frac{m2 R2 T2}{P} \quad (39)$$

3.3 Modelo de formación de especies en equilibrio

Los productos de la combustión son evaluados asumiendo que están en equilibrio químico a una temperatura y presión dada. Este modelo se basa en el método de Olikara and Borman [34] que toma en cuenta a 10 productos de la combustión, de acuerdo a la siguiente reacción:



Realizando el balance atómico obtenemos:

$$C : a = (y1 + y5) MT \quad (41)$$

$$H : b = (2y2 + 2y6 + y7 + y9) MT \quad (42)$$

$$O : c + \frac{2as}{\phi} = (2y1 + y2 + 2y4 + y5 + y8 + y9 + y10) MT \quad (43)$$

$$N : d + \frac{(2)(3.76)as}{\phi} = (2y3 + y10) MT \quad (44)$$

Donde y es la fracción molar y MT es el número de moles totales:

$$MT = n1 + n2 + n3 + n4 + n5 + n6 + n7 + n8 + n9 + n10 \quad (45)$$

Para poder completar el sistema de ecuaciones se necesitan seis ecuaciones más. Haciendo uso de las siguientes constantes de equilibrio el sistema queda definido:

$$\frac{1}{2}H_2 \rightarrow H \quad Kp1 = \frac{y7 P^{\frac{1}{2}}}{y6^{\frac{1}{2}}} \quad (46)$$

$$\frac{1}{2}O_2 \rightarrow O \quad Kp2 = \frac{y8 P^{\frac{1}{2}}}{y4^{\frac{1}{2}}} \quad (47)$$

$$\frac{1}{2}H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow OH \quad Kp3 = \frac{y9}{y4^{\frac{1}{2}} y6^{\frac{1}{2}}} \quad (48)$$

$$\frac{1}{2}O_2 + \frac{1}{2}N_2 \rightarrow NO \quad Kp4 = \frac{y10}{y4^{\frac{1}{2}} y3^{\frac{1}{4}}} \quad (49)$$

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O \quad Kp5 = \frac{y2}{y4^{\frac{1}{2}} y6 P^{\frac{1}{2}}} \quad (50)$$

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2 \quad Kp6 = \frac{y1}{y4^{\frac{1}{2}} y5 P^{\frac{1}{2}}} \quad (51)$$

P [atm] es la presión a la cual ocurre la reacción y Kp son las constantes de equilibrio que se pueden calcular con la siguiente expresión:

$$\log Kpi = A \ln\left(\frac{T}{1000}\right) + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 \quad (52)$$

Las contantes A, B, C, D y E se encuentran en la tabla 3.1 obtenida de [34].

Tabla 3.1 Coeficientes para el cálculo de las constantes de equilibrio.

	A	B	C	D	E
$K_{p,1}$	0.432168	-0.112464×10^5	0.267269×10^1	-0.745744×10^{-4}	0.242484×10^{-8}
$K_{p,2}$	0.310805	-0.129540×10^5	0.321779×10^1	-0.738336×10^{-4}	0.344645×10^{-8}
$K_{p,3}$	-0.141784	-0.213308×10^4	0.853461	0.355015×10^{-4}	-0.310227×10^{-8}
$K_{p,4}$	0.150879×10^{-1}	-0.470959×10^4	0.646096	0.272805×10^{-5}	-0.154444×10^{-8}
$K_{p,5}$	-0.752364	0.124210×10^5	-0.260286×10^1	0.259556×10^{-3}	-0.162687×10^{-7}
$K_{p,6}$	-0.415302×10^{-2}	0.148627×10^5	-0.475746×10^1	0.124699×10^{-3}	-0.900227×10^{-8}

3.4 Modelo de formación de partículas de hollín

La formación de partículas de hollín en un proceso complejo. Por esta razón modelos empíricos simples son usados hasta hoy en día. Uno de ellos es el modelo de Nishida and Hiroyasu [35].

$$\frac{dm_{soot}}{dt} = A_b m_{fuel, a} P^{0.5} \exp\left[-\frac{E_f}{R_u T}\right] \quad (53)$$

Donde:

m_{soot} = Masa de hollín [kg]

$m_{fuel, a}$ = Masa de combustible disponible para ser quemado [kg]

P = Presión [Pa]

T = Temperatura [K]

E_f = Energía de activación

R = Constante de los gases [K]

De acuerdo a varios autores las constantes A_f y E_f se muestran en la tabla 3.2 obtenida de [36].

Tabla 3.2 Constantes A_f y E_f de acuerdo a varios autores.

	Belardini et al., 1992	Patterson et al., 1994	Hiroyasu et al., 1983
E / R	6295 K	6295 K	9622 K
A_f	100 1/s	150 1/s	-

3.5 Formación térmica de NO_x

El mecanismo térmico de formación de NO_x constituye siempre la principal parte de la cantidad total de NO_x, este mecanismo es formado por la reacción de nitrógeno con oxígeno de la atmosfera. Gracias al calor de combustión se alcanzan elevados niveles de temperatura que causan que los enlaces de átomos de nitrógeno se rompan provocando una subsecuente oxidación del NO_x, Esta fuerte dependencia con la temperatura del NO_x es debido al triple enlace que tiene con la molécula de N₂.

El mecanismo térmico que describe la formación de NO_x recibe el nombre de mecanismo extendido de Zeldovich y está dado por las siguientes reacciones:



La tasa de formación de NO_x se obtiene combinando las reacciones 54,55 y 56:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k1^+[O][N_2] + k2^+[N][O_2] + k3^+[N][OH] - k1^-[NO][N] - k2^-[NO][O] - k3^-[NO][H] \quad (57)$$

Igualmente la formación de N es:

$$\frac{d[N]}{dt} = k1^+[O][N_2] - k2^+[N][O_2] - k3^+[N][OH] - k1^-[NO][N] + k2^-[NO][O] + k3^-[NO][H] \quad (58)$$

Dado que [N] es mucho menor que las concentraciones de las otras especies es posible usar la hipótesis de Linderman [37] y fijar a cero el valor de d[N]/dt con el fin de simplificar la ecuación. Por lo tanto en el equilibrio, la concentración de [N] también será despreciada, de esta manera la formación de NO es:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k1^+[O][N_2] \left(\frac{1 - \frac{[NO]^2}{K[O_2][N_2]}}{1 + \frac{k1^-[NO]}{k2^+[O_2] + k3^+[OH]}} \right) \quad (59)$$

Donde:

$$K = \left(\frac{k1^+}{k1^-} \right) \left(\frac{k2^+}{k2^-} \right)$$

Considerando que las especies se encuentran en el equilibrio, las concentraciones en la ecuación anterior se pueden sustituir por sus respectivos valores en el equilibrio a la presión y temperatura a la cual se producen, así:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R1 \left\{ 1 - \left(\frac{[NO]}{[NO]e} \right)^2 \right\}}{1 + \left(\frac{[NO]}{[NO]e} \right) \frac{R1}{R2 + R3}} \quad (60)$$

Con:

$$R1 = k1^+[O]e[N_2]e = k1^-[NO][N]e$$

$$R2 = k2^+[N]e[O_2]e = k2^-[NO][O]e$$

$$R3 = k3^+[N]e[OH]e = k3^-[NO][H]e$$

La formación inicial de NO es obtenida de la ecuación anterior y se da cuando $[NO] < [NO]e$:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2R1 = 2k1^+[O]e[N_2]e \quad (61)$$

La concentración en equilibrio de el oxígeno es obtenido con la siguiente expresion:

$$[O]e = \frac{Kp, o [O_2]e^{\frac{1}{2}}}{(RT)^{\frac{1}{2}}} \quad (62)$$

Donde la constante de equilibrio para el oxígeno es:

$$\frac{1}{2}O_2 \rightarrow O \quad Kp, o = 3.6 \times 10^3 \exp\left(-\frac{31090}{T}\right) \quad (63)$$

Así la taza inicial de formación de NO puede ser expresada como:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{6 \times 10^{16}}{T^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{69090}{T}\right) [O_2]e^{\frac{1}{2}} [N_2]e \quad \frac{mol}{cm^3 s} \quad (64)$$

CAPÍTULO 4

VALIDACIÓN

4.1 Verificación experimental

La validación experimental del modelo se realizó solo para los perfiles de presión y temperatura con el uso de los datos experimentales proporcionadas en el artículo del autor Delgado, Álvaro [38].

Las principales características del motor analizado se muestran en la tabla 4.1.

Tabla 4.1 Especificaciones del Motor Diésel

Motor	ISUZU 4JA1
Tipo	Diésel Inyección Directa
Desplazamiento	2499 cm ³
Diámetro/Carrera	93 mm/92 mm
Relación de Compresión	18.4:1
Potencia Máxima	59kW(80hp) a 2300 rpm
Torque Máximo	170 Nm a 2300 rpm

Los datos experimentales se obtuvieron del motor ISUZU solo para tres puntos de operación, estas condiciones de funcionamiento se muestran en la tabla 4.2.

Tabla 4.2. Condiciones de operación del motor.

Parámetros	Simulación 1	Simulación 2	Simulación 3
Carga [N m]	20	40	60
Presión de Entrada [kPa]	103	110	112
Temperatura de Entrada [K]	321	325	328
Masa de Combustible Inyectada [mg]	2.02	2.81	3.54
Inicio de Inyección [°]	-23	-24	-25
Duración de la Inyección [°]	15	15	15

En el artículo [38] el autor realiza una comparación con dos modelos numéricos, uno cero dimensional y el otro multidimensional o CFD, con esto, en el presente trabajo, se logra comparar no solo con los resultados experimentales del motor sino

con otros modelos desarrollados. Dicha comparación se ilustra en las figuras 4.1 a 4.6.

De las figuras 4.1 a 4.3 se puede observar que la evolución de la presión dentro de la cámara de combustión, en términos generales se aproxima al comportamiento experimental, sin embargo se puede ver una sobre estimación de la presión, la cual puede ser atribuida a diversos factores que no se tomaron en cuenta en el modelo, como la recirculación de gases de escape, el efecto de la masa de gases filtrados (blow by) que genera sobrepresiones debido a que estos se mezclan y comprimen o bien por algunos desajustes en el modelo de transferencia de calor.

Donde se puede apreciar una mayor diferencia entre los valores simulados y la parte experimental es en la presión máxima cuando el motor trabaja a baja carga (fig. 4.1). Dicho comportamiento se asemeja más al modelo CFD pero con la diferencia que exhibe un valor de presión mucho mayor.

En la figura 4.3, después de la fase de compresión, prácticamente la curva del modelo es la misma que la experimental. En general el comportamiento mejora con forme la carga del motor aumenta, fig. 4.2 y 4.3.

Las diferencias de los valores presión máxima se muestran en la tabla 4.3.

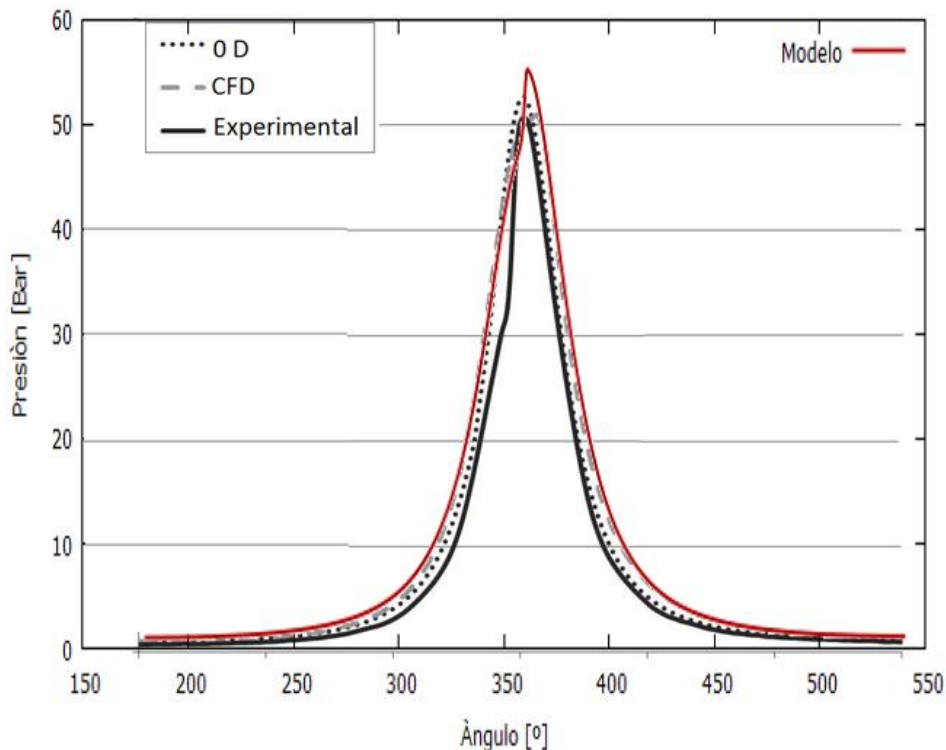


Figura 4.1 Perfil de presión a 2000 rpm y 20 N m.

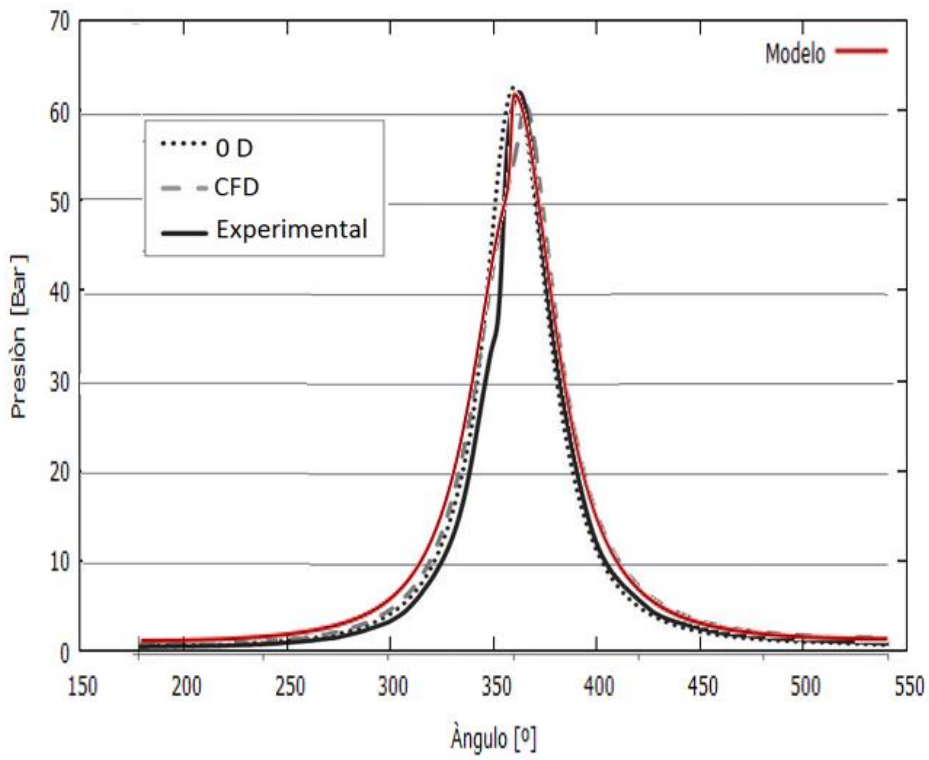


Figura 4.2 Perfil de presión a 2000 rpm y 40 N m.

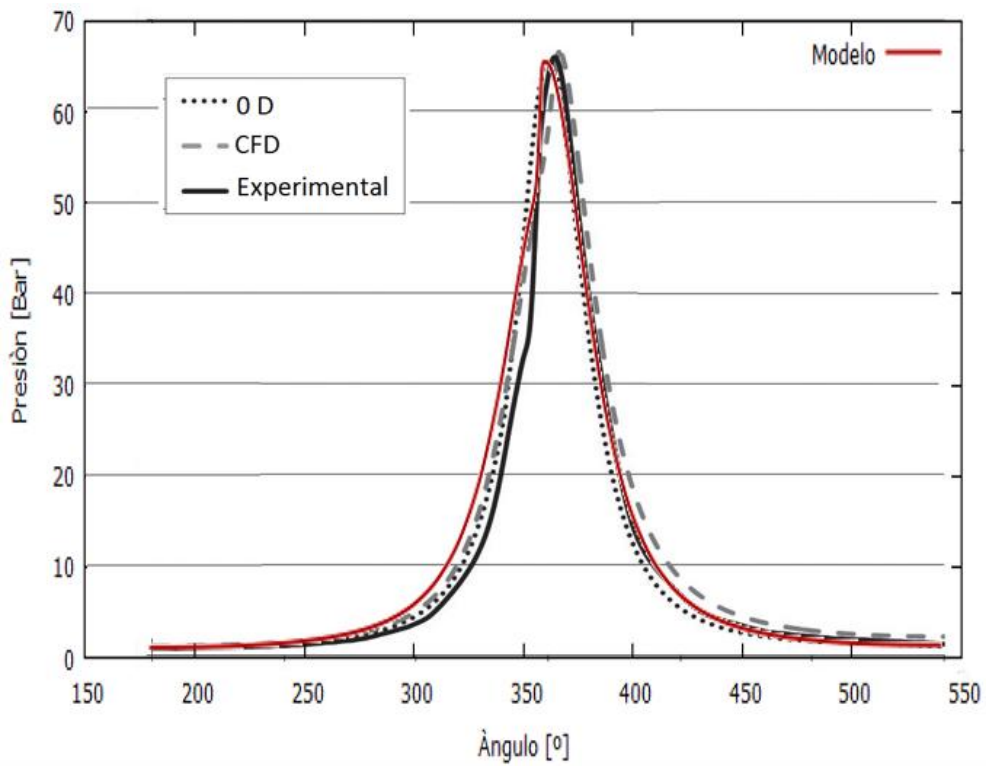


Figura 4.3 Perfil de presión a 2000 rpm y 60 N m.

Tabla 4.3 Errores relativos de valores de presión máxima

Carga	Experimental	Simulación	Error Relativo
20 [N m]	~ 51.0 [bar]	55.22 [bar]	8.27 %
40 [N m]	~ 61.0 [bar]	61.71 [bar]	1.16 %
60 [N m]	~ 66.0 [bar]	65.52 [bar]	0.73 %

Las figuras 4.4 a 4.6 ilustran la comparación de los perfiles de temperatura. A diferencia de las curvas de presión, la temperatura muestra una mayor desviación respecto a la curva experimental y a los otros modelos, se observa una clara tendencia a subestimar la temperatura al final de la carrera de compresión y durante la etapa de expansión, este hecho se puede deber principalmente al modelo que se empleó para describir la tasa de liberación de calor y al porcentaje de calor asignado en cada etapa.

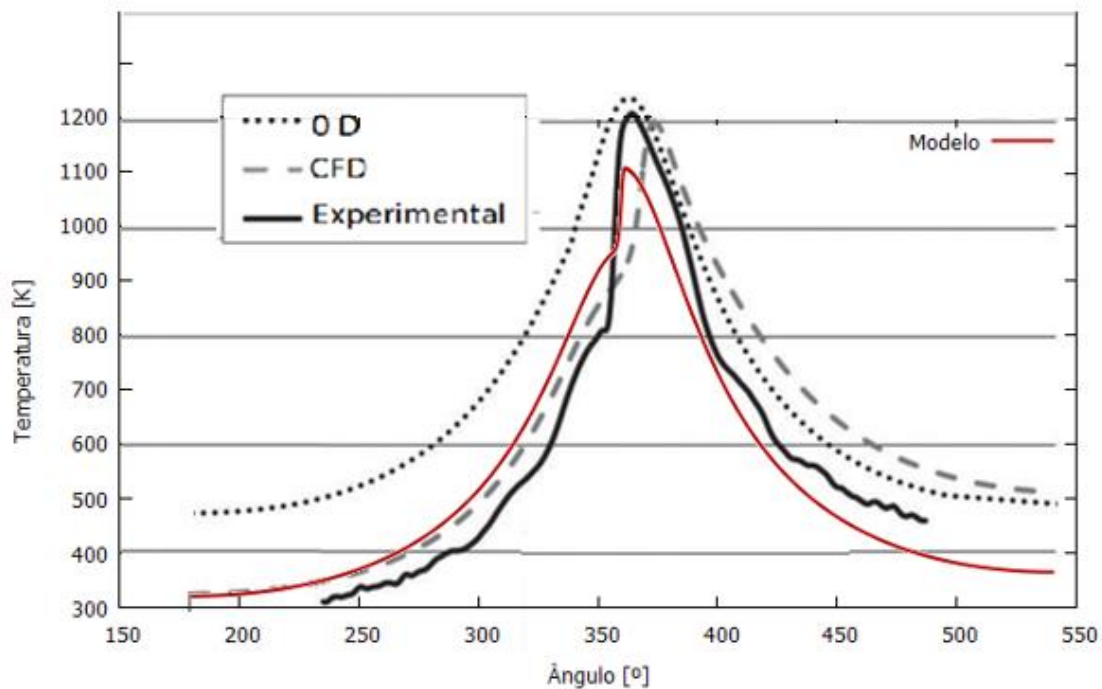


Figura 4.4 Perfil de temperatura a 2000 rpm y 20 N m.

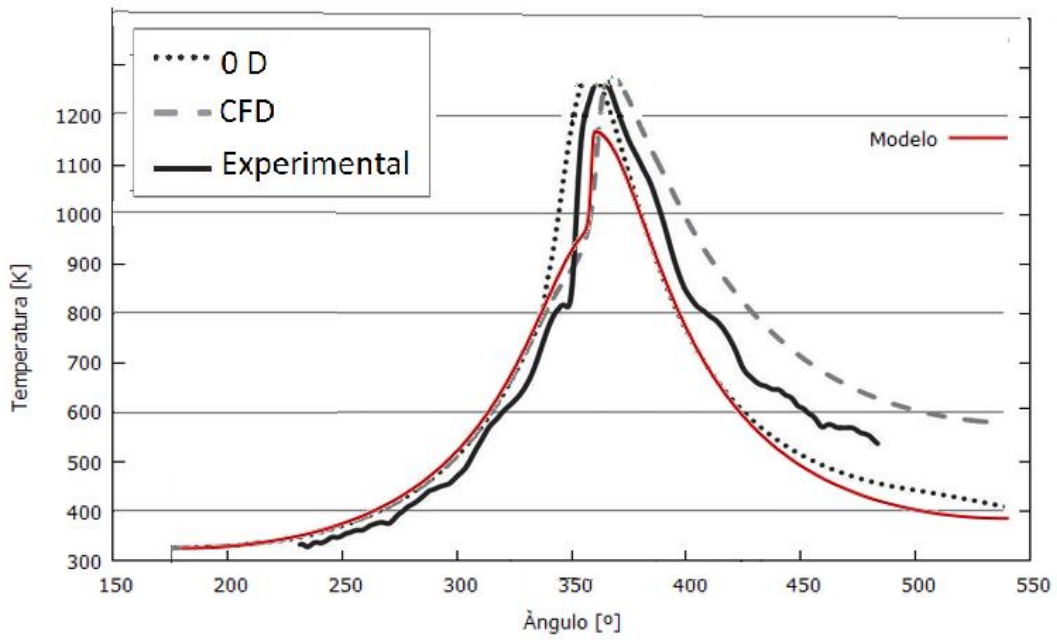


Figura 4.5 Perfil de temperatura a 2000 rpm y 40 N m.

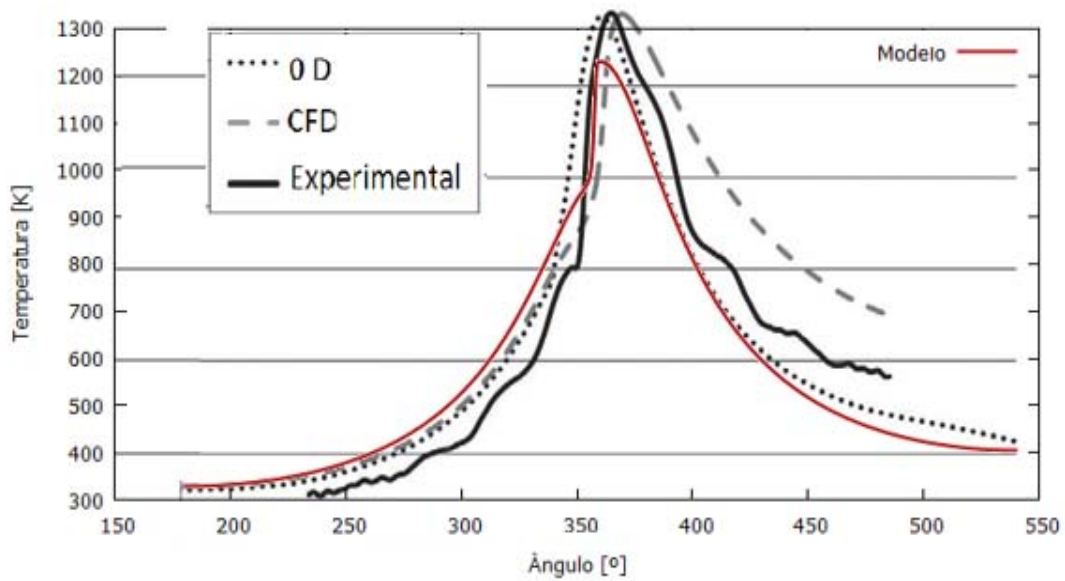


Figura 4.6 Perfil de temperatura a 2000 rpm y 60 N m.

Tabla 4.4 Errores relativos para los valores de máxima temperatura.

Carga	Experimental	Simulación	Error Relativo
20 [N m]	~ 1200 [K]	1106.0 [K]	7.8 %
40 [N m]	~ 1260 [K]	1169.0 [K]	7.2 %
60 [N m]	~ 1350 [K]	1229.0 [K]	8.9 %

CAPÍTULO 5 ANÁLISIS DE RESULTADOS

El análisis de resultados se realizó considerando los parámetros de la tabla 5.1:

Tabla 5.1 Especificaciones del motor y combustible

Combustible	C _{14.4} H _{24.9}
Poder Calorífico Inferior [kJ/kg]	44.3x10 ³
Número de cetano	45
Peso Molecular [kg/kmol]	148.6
Relación de compresión	18:1
Diámetro x Carrera [m]	0.105 x 0.125
Longitud de la Biela [m]	0.1
Desplazamiento [m ³]	1.082 x 10 ⁻³
Volumen Muerto [m ³]	6.367 x 10 ⁻⁵
Velocidad [rpm]	2500
Relación de equivalencia	0.6
Relación estequiométrica	14.36:1
Rango de Inicio de inyección [°]	-12 a -8
Duración de combustión [°]	70
Duración de combustión de pre mezcla [°]	10
Presión de entrada [Bar]	1
Temperatura de entrada [k]	300.0

5.1 Resultados del modelo de primera zona

La figura 5.1 muestra el calor integrado liberado dentro de la cámara de combustión, se puede observar que la liberación de calor justo al inicio de la combustión y durante la fase de pre mezcla se da bruscamente debido a que en un periodo muy corto (10 °) cerca del 60% del calor total se libera en el cilindro. Este fenómeno se puede observar de mejor manera en la fig. 5.2 que muestra la tasa de liberación de calor debido a las fases de pre mezcla y difusión. Los dos valores máximos de la fig. 5.1 son una característica de la combustión en motores Diésel, que a diferencia de los motores de gasolina, la combustión por difusión es importante.

Respecto al cambio de pendiente localizado cerca del ángulo 370 ° es debido a que la fase de combustión por difusión empieza a predominar, la cual de acuerdo al modelo, tiene un periodo de duración mayor y por lo tanto la liberación del calor se dé más lentamente hasta alcanzar el calor total que se puede liberar.

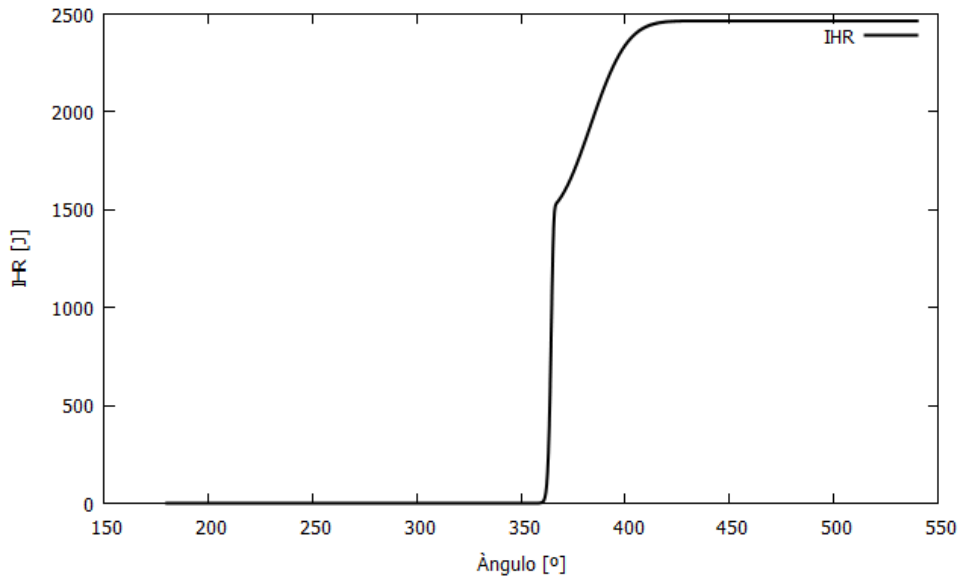


Fig. 5.1 Calor Integrado liberado en la cámara de combustión.

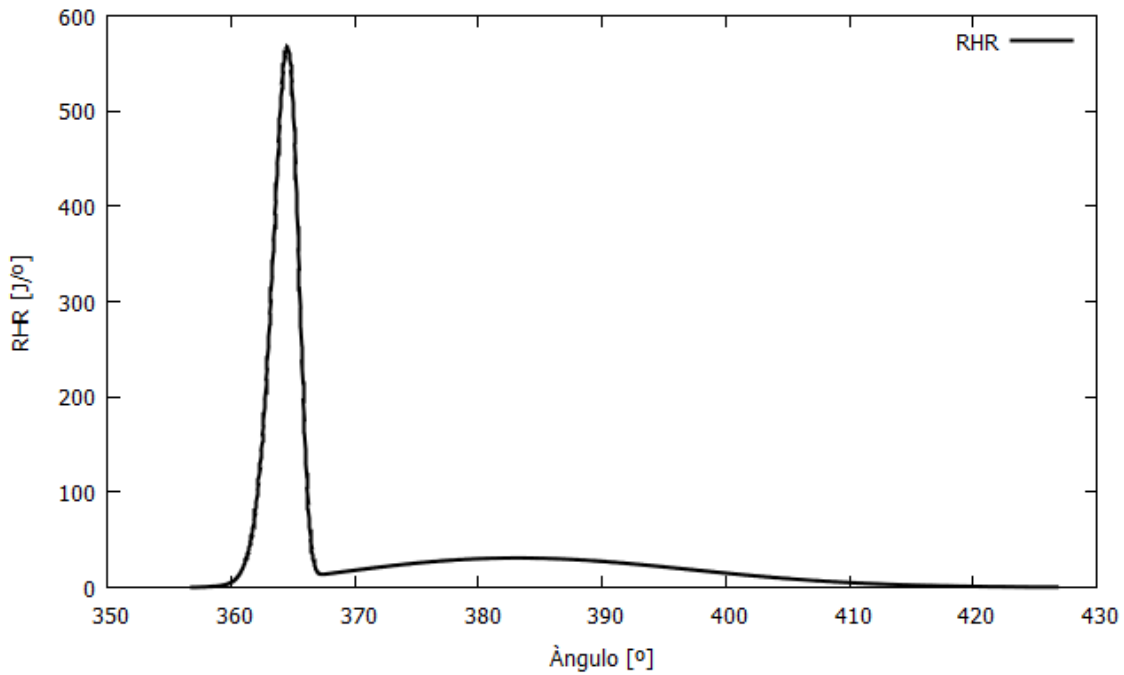


Fig. 5.2 Taza de calor liberado en la cámara de combustión.

En la figura 5.3 se puede ver el desarrollo de la presión dentro del cilindro. El cambio claro de pendiente se debe a que justo en el inicio de la inyección más un corto periodo de retraso se inicia la combustión, la elevada liberación de energía ocasiona que los niveles de presión se incrementen considerablemente. El valor máximo de presión que se puede ver es cerca de 92 bares.

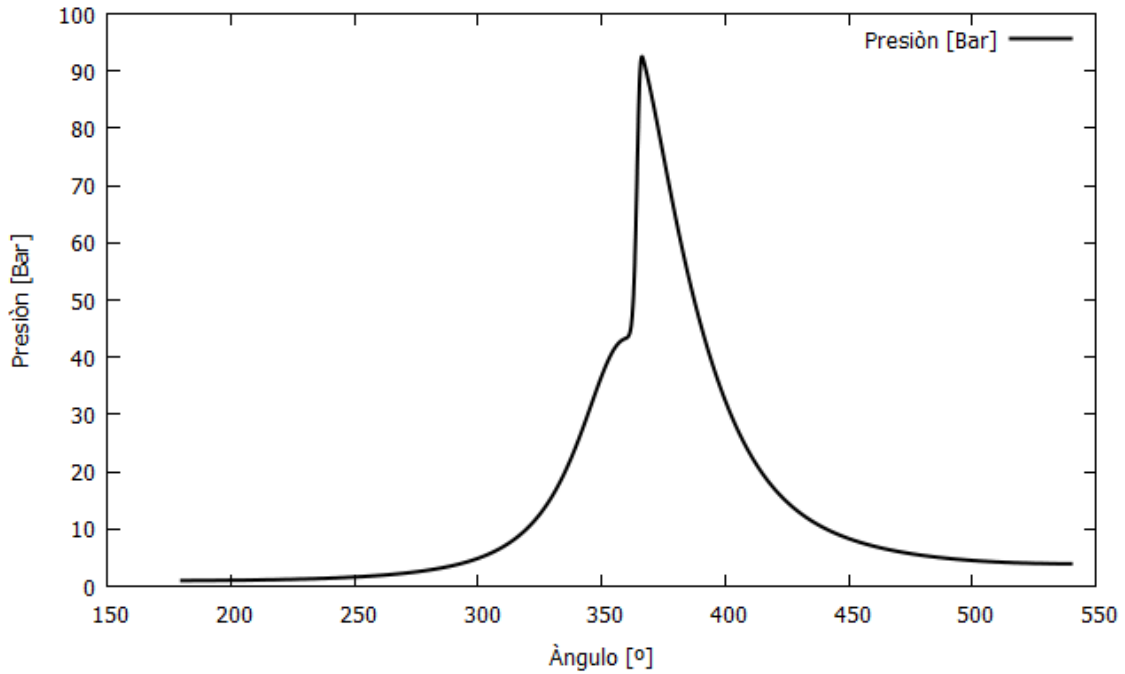


Fig. 5.3 Presión dentro de la cámara de combustión.

La fig. 5.4 muestra el perfil de temperatura, los efectos de la liberación de calor se observan de mejor manera en el incremento de la temperatura, el segundo incremento se debe a la fase combustión por difusión.

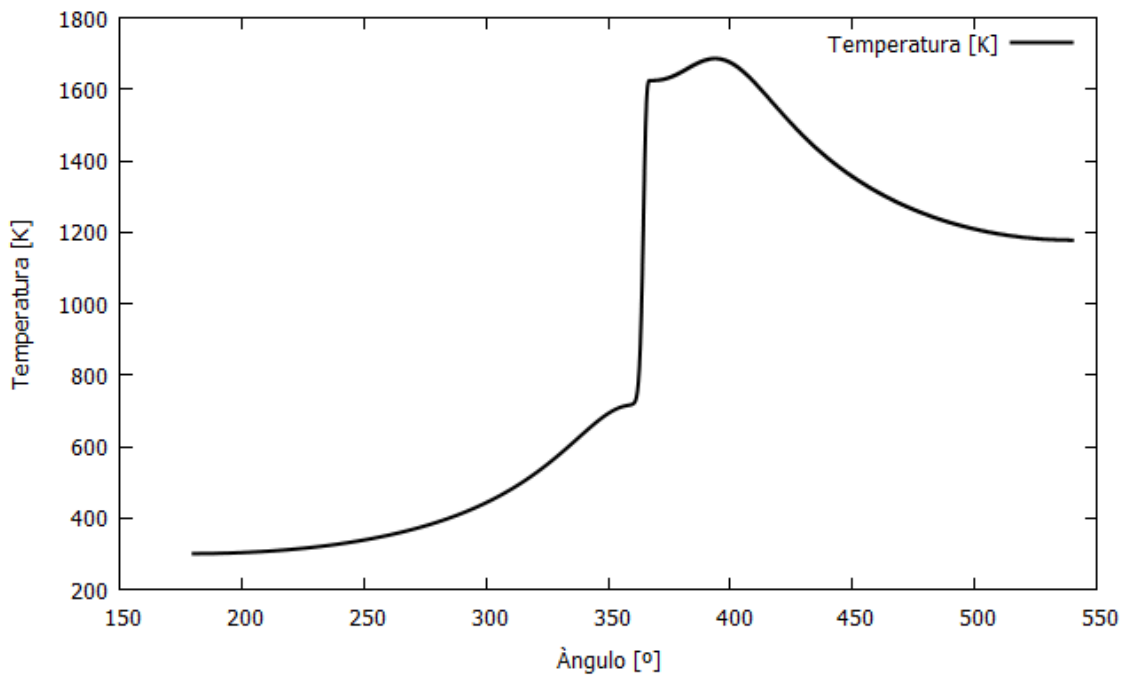


Fig. 5.3 Perfil de temperatura en la cámara de combustión.

Las figuras 5.4, 5.5 y 5.6 ilustran la transferencia de calor a través de las fronteras del cilindro, el trabajo y el volumen, respectivamente.

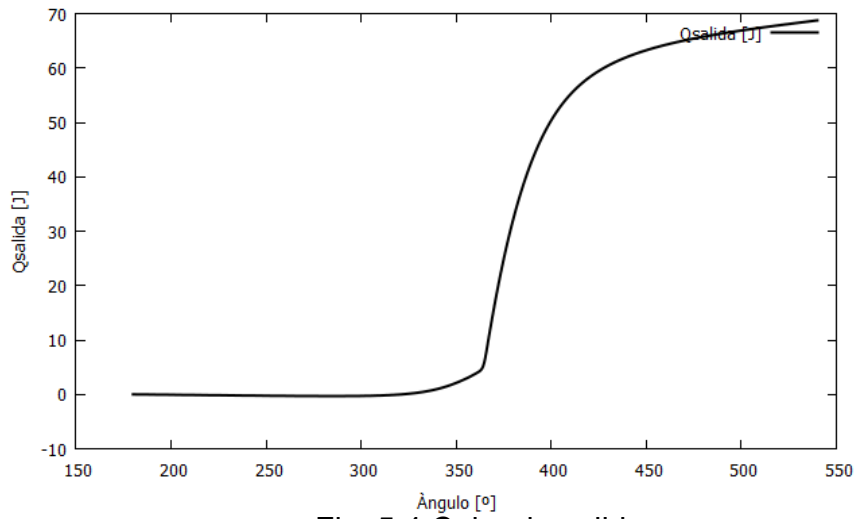


Fig. 5.4 Calor de salida.

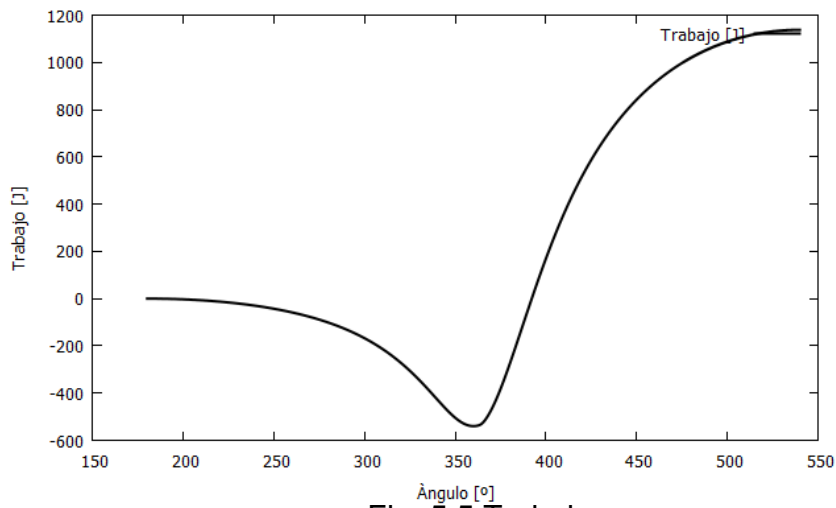


Fig. 5.5 Trabajo.

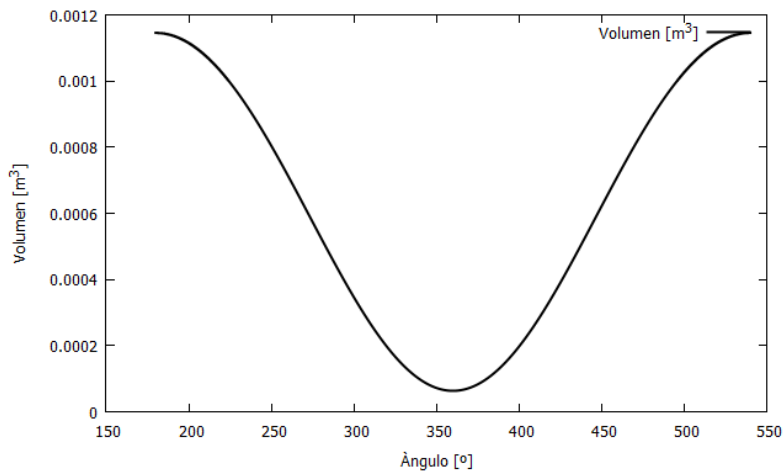


Fig. 5.6 Volumen.

5.2 Resultados del modelo de 2 zonas

Del modelo de dos zonas se obtuvieron las temperaturas de la zona quemada y no quemada que se muestran en la fig. 5.7. Se observa que la temperatura de la zona quemada es considerablemente mayor que la temperatura promedio obtenida del modelo de una zona, esto es por el hecho de que en la zona quemada es donde se da la reacción y donde se libera todo el calor, por lo tanto los gases quemados adquieren una elevada temperatura. El valor más alto de la temperatura de la zona quemada es alrededor de los 2800 y de la zona no quemada es de 422 [K].

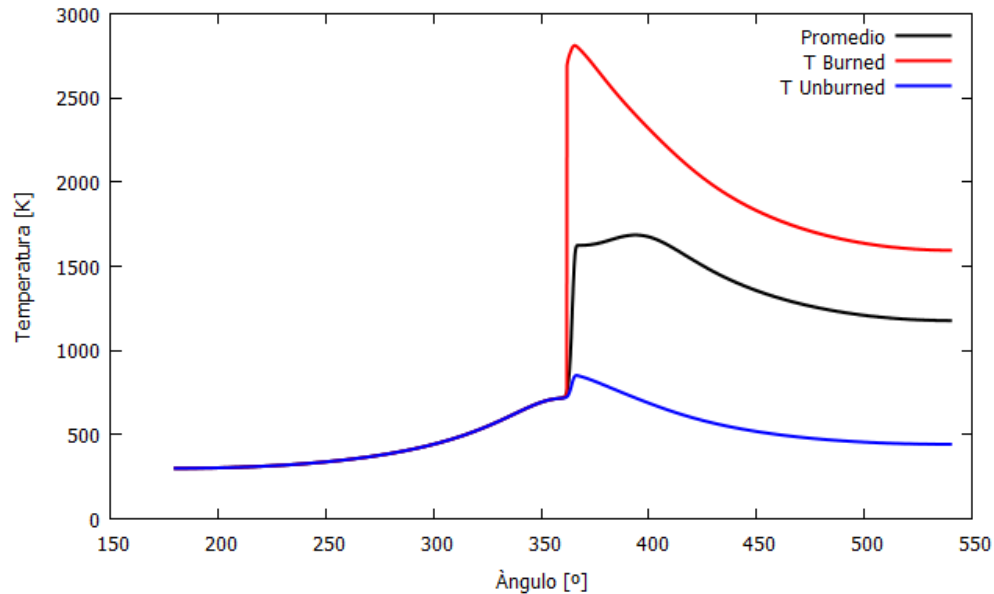


Fig. 5.7 Temperaturas obtenidas del segundo modelo.

La temperatura de la zona quemada a plena carga alcanza los 3000K y al final del ciclo es alrededor de los 2000 K. Ver figura 5.8.

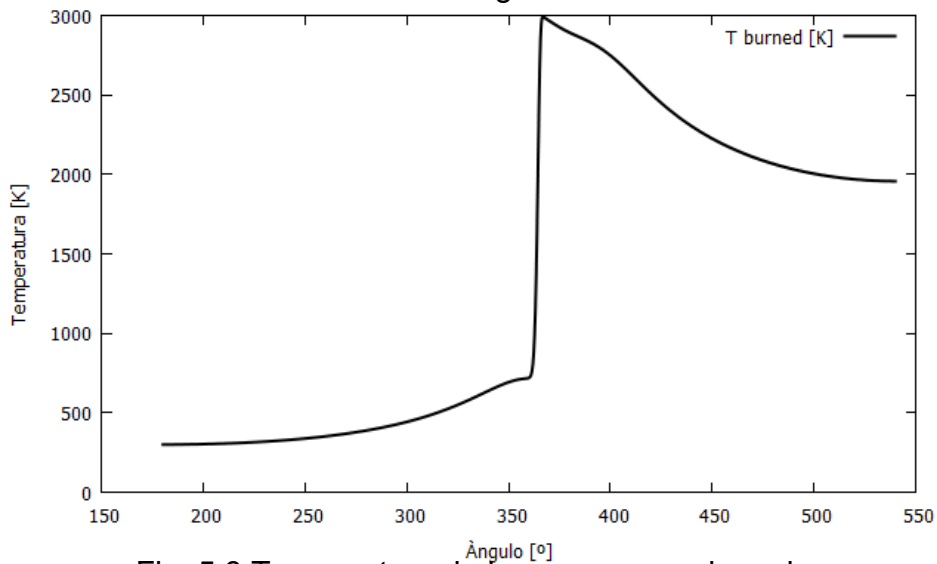


Fig. 5.8 Temperatura de la zona quemada a plena carga

5.3 Resultados de la concentración en equilibrio

La figura 5.9 muestra las fracciones mol de los productos de la combustión para una relación de equivalencia de 0.6. Como se observa en la figura, tanto el CO, el H como el NO empiezan a incrementar conforme la temperatura aumenta en cambio el H₂O, CO₂ y el O₂ disminuyen ligeramente debido a que estos productos empiezan a disociarse. La disociación es importante por arriba de los 2000 K, por debajo de esta se presentan valores muy bajos de CO y H que pueden ser muy bajos como para tomarlos en consideración, básicamente por debajo de esta temperatura los productos predominantes son el H₂O, CO₂, N₂ y en el caso de mezcla pobre el O₂.

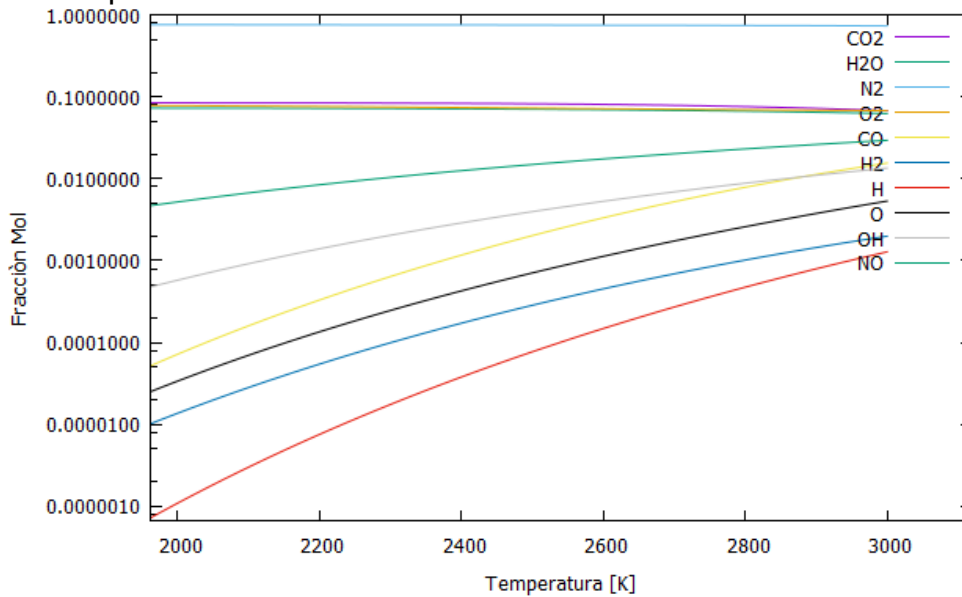


Fig.5.9 Fracciones mol a $\phi=0.6$

El efecto de la temperatura y la disociación de los productos de la combustión se ilustran de mejor manera en la figura 5.10.

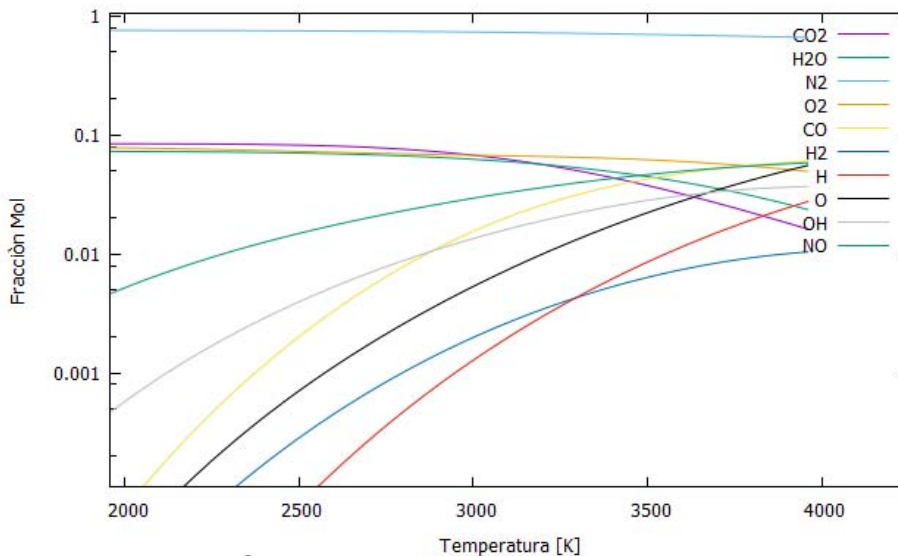


Fig.5.10 Efecto de la temperatura en la composición a $\phi=0.6$

La figura 5.11 muestra el cambio de la composición para una temperatura de salida de los productos de la combustión de 2500 K. De acuerdo a [43] se comprueba que para mezcla pobres la presencia de H, CO y H₂ es relativamente baja en motores de encendido por compresión, además dicha presencia incrementa para valores de $\phi > 1$.

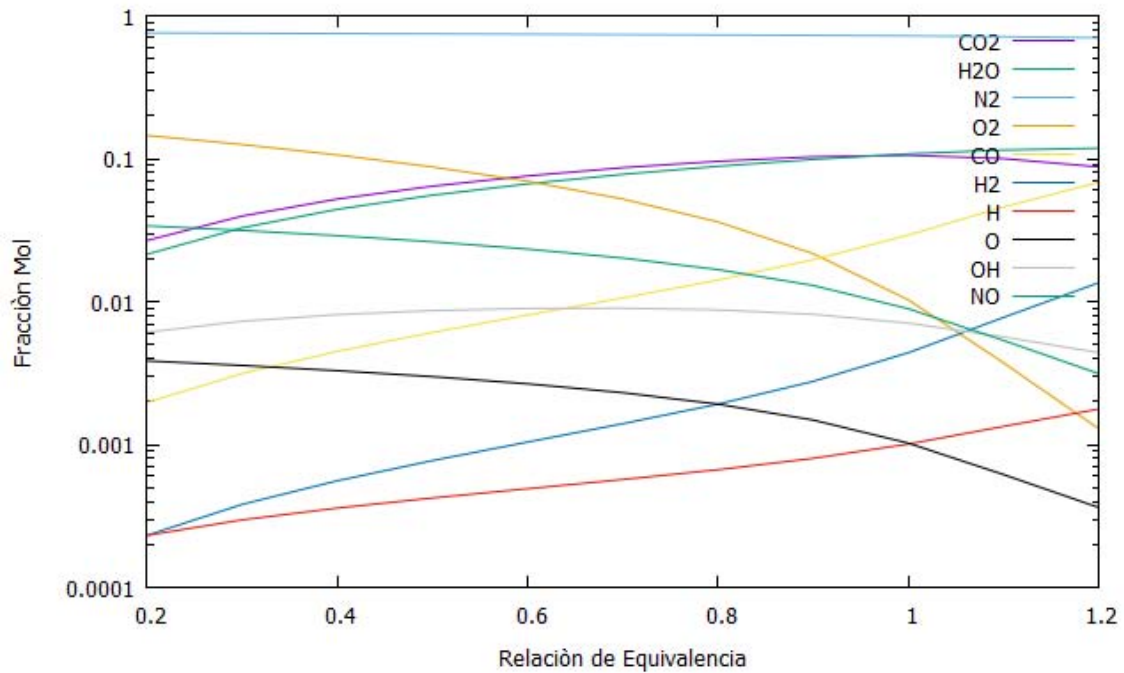


Fig. 5.11. Fracciones mol a T=2500 K.

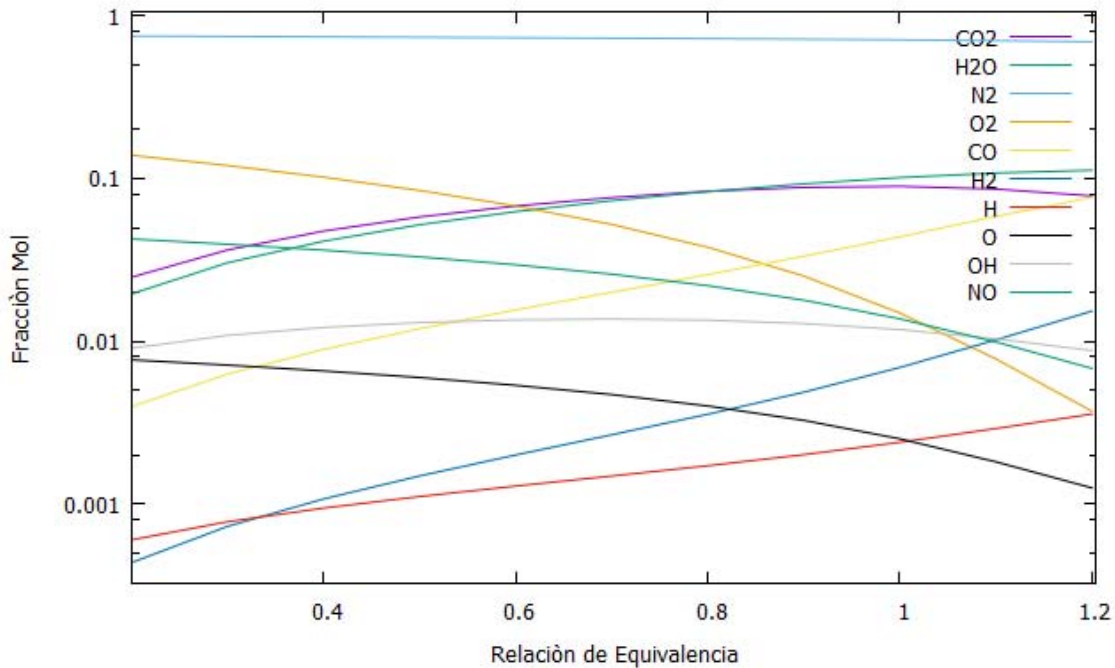


Fig.5.12. Fracciones mol a T=3000 K.

5.4 NO

En la figura 5.13 se puede observar que la presencia del NO aumenta conforme la temperatura lo hace y esta disminuye cuando la temperatura es relativamente baja, el rápido incremento del NO se debe a las altas temperaturas alcanzadas en la cámara de combustión. Los resultados obtenidos se acercan a lo efectuado por Wilhelmsson [44] mostrando un ligero aumento en los datos obtenidos.

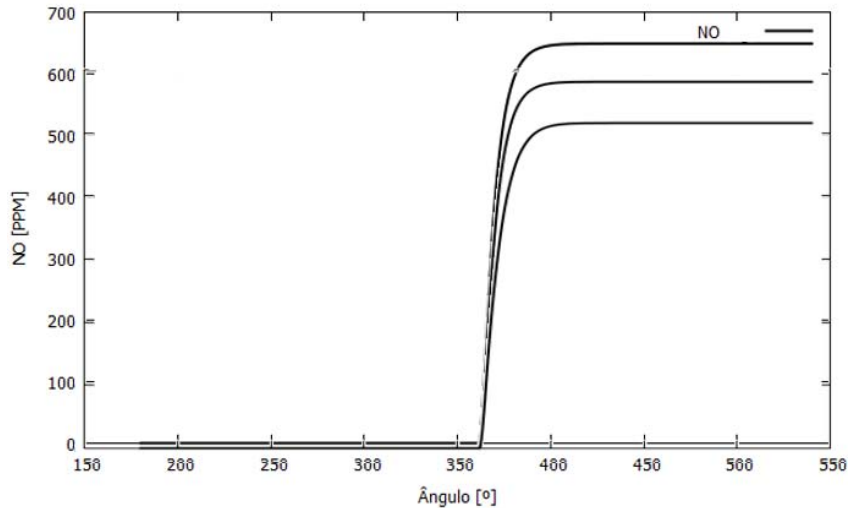


Fig.5.13 Cambio con la temperatura de la concentración de NO.

5.5 Hollín

Tanto el NO como el Hollín son los dos compuestos de mayor importancia en las emisiones de un motor de encendido por compresión, la formación del hollín depende principalmente de la cantidad de combustible disponible para ser quemado y de los niveles de temperatura así como otros fenómenos químicos de nucleación y oxidación. Algo de suma importancia observado en la figura 5.14 es que a diferencia del NO el Hollín tiende a disminuir a altas temperaturas y no incrementa como lo hace el NO. Además la formación de hollín se da tan rápidamente como el caso del NO por lo tanto tarda más en estabilizarse.

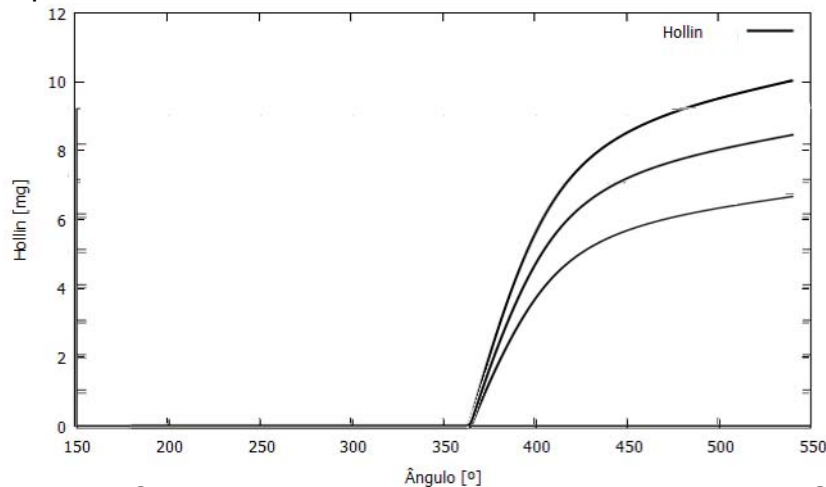


Fig. 5.14. Cambio con la temperatura de la concentración Soot.

5.6 Análisis Paramétrico

Analizar el efecto que tienen diversos parámetros en el proceso de combustión y en el desempeño del motor diésel es de suma importancia, para ello se realizaron diversas simulaciones variando algunos parámetros tales como el inicio de la inyección, duración de la combustión, retardo de autoencendido y proporción de calor liberado en cada fase.

El retardo de autoencendido como el inicio de inyección son parámetros de gran relevancia que determinan que tan exitoso es el proceso de combustión.

5.6.1 Variación del Inicio de Inyección

La presión se ilustra en la fig. 5.15. El punto de presión máxima tiende a acercarse al PMS y presentar un ligero incremento conforme el inicio de la inyección se aleja de este, punto esto se debe a diversos factores que involucran principalmente el número de cetano del combustible y las revoluciones a las cuales gira el motor. El retrasar el inicio de la inyección puede favorecer si el combustible posee un número de cetano no muy alto (45), debido a que el autoencendido tarda más, la mezcla tiene el suficiente tiempo para encenderse en un rango no mayor al PMS, punto en el cual teóricamente se debe dar el punto de máxima presión. Al acercarse más el inicio de la inyección al PMS, la mezcla no puede encenderse antes del PMS y lo hace después alcanzando una menor presión.

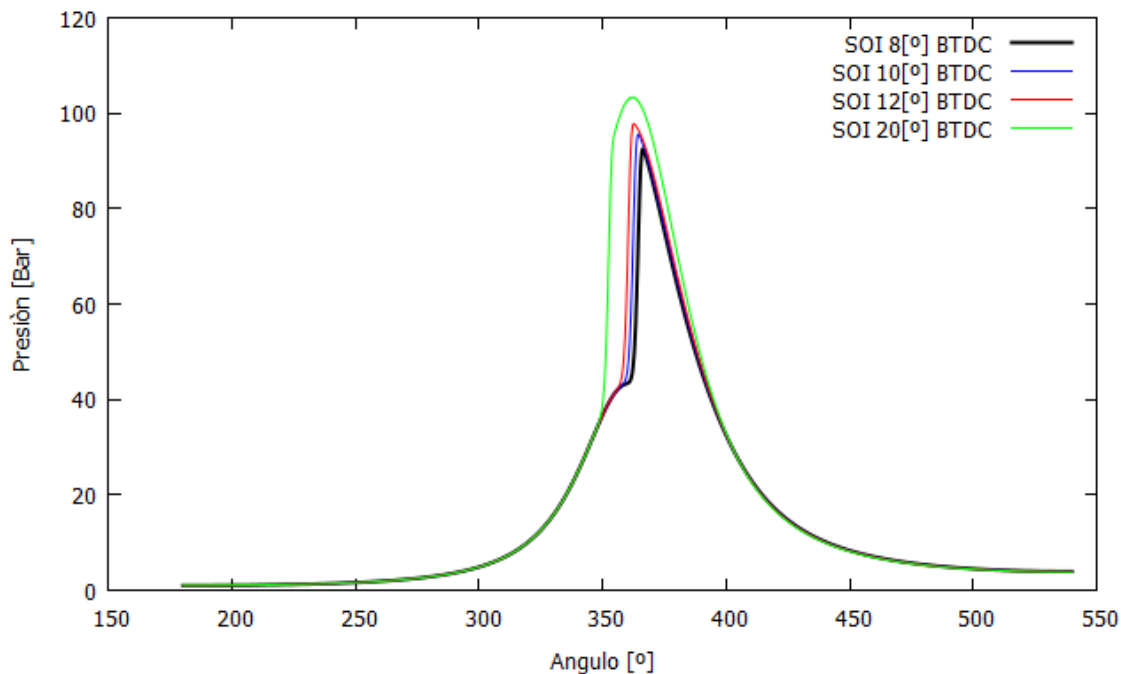


Fig. 5.15. Presión para distintos inicios de inyección.

El efecto de que el inicio de la combustión se dé mucho antes del PMS se refleja más claramente en la tasa de liberación de calor y en la transferencia de calor hacia

el exterior, fig. 5.16 y fig. 5.17, respectivamente, al iniciar la liberación de calor un porcentaje de esta energía cruza las paredes del cilindro sin aun haber finalizado la carrera de compresión agregando la etapa de expansión en la cual se da el mayor rechazo de calor la cantidad de energía de salida aumenta considerablemente conforme el inicio de inyección se retrasa. Este fenómeno nos muestra la importancia de calcular precisamente el punto en el que se debe inyectar el combustible para que el autoencendido se localice lo más próximo al PMS.

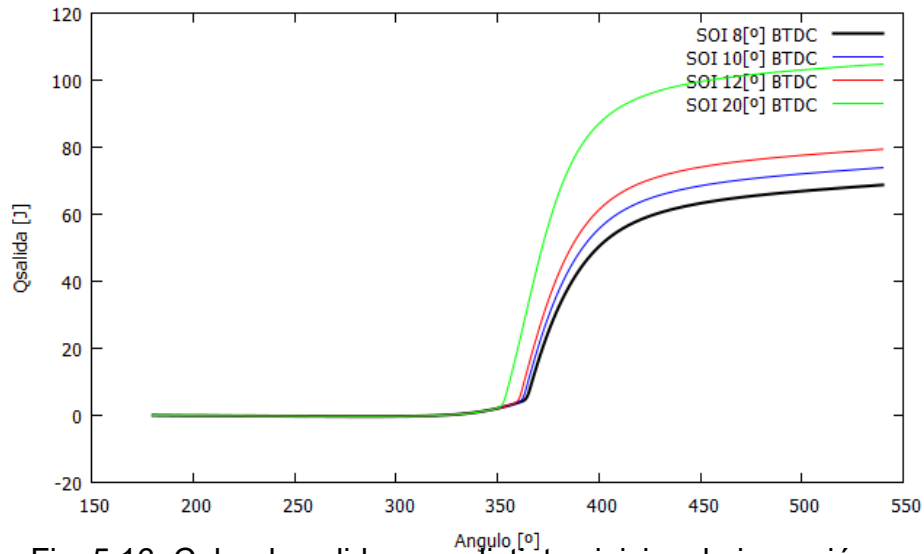


Fig. 5.16. Calor de salida para distintos inicios de inyección.

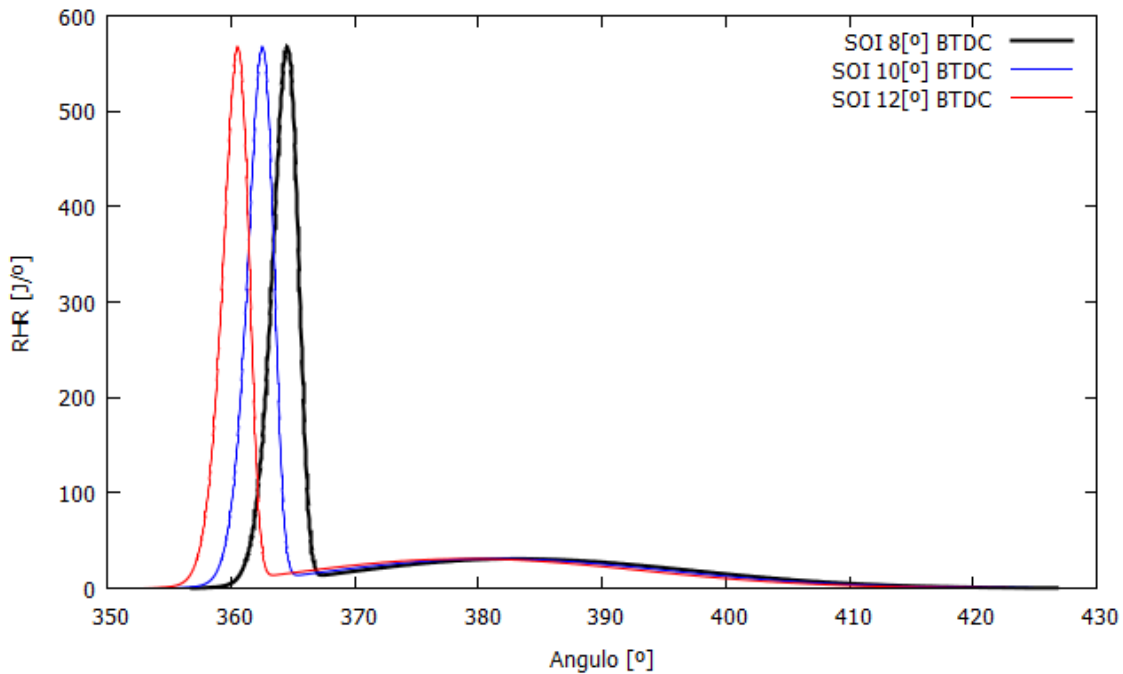


Fig. 5.17. RHR para distintos inicios de inyección.

Se puede notar en la fig. 5.18 y 5.19, un ligero aumento en la temperatura y en el trabajo como consecuencia del aumento de presión y de una mejor localización del inicio de la combustión.

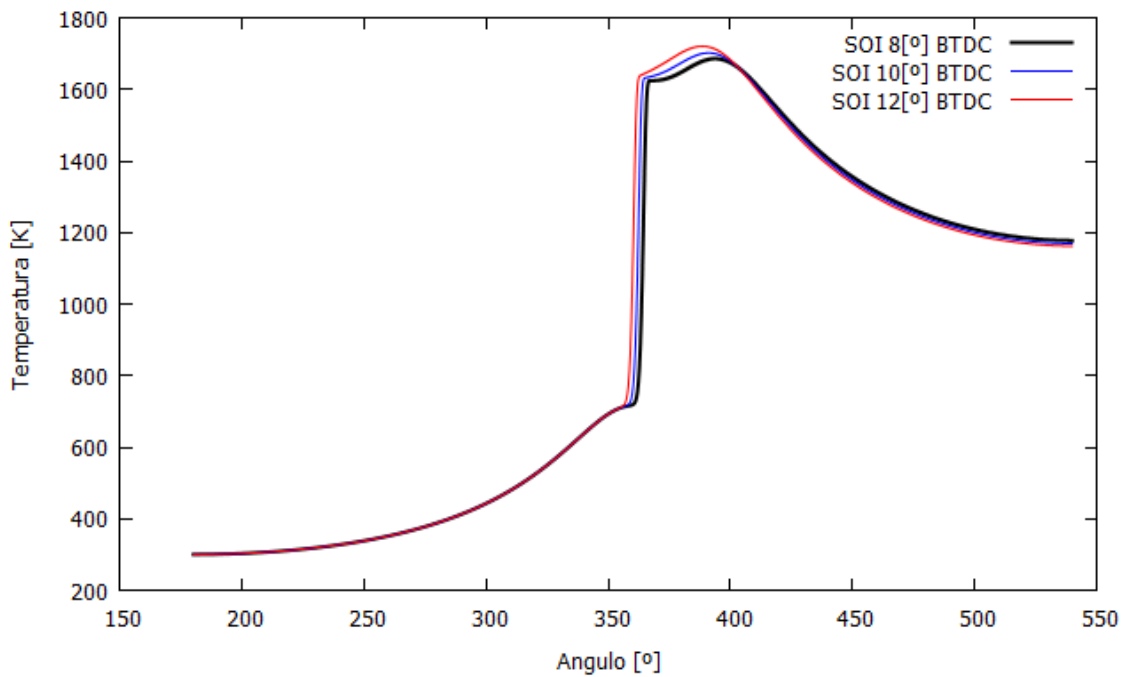


Fig. 5.18. Temperatura para distintos inicios de la inyección.

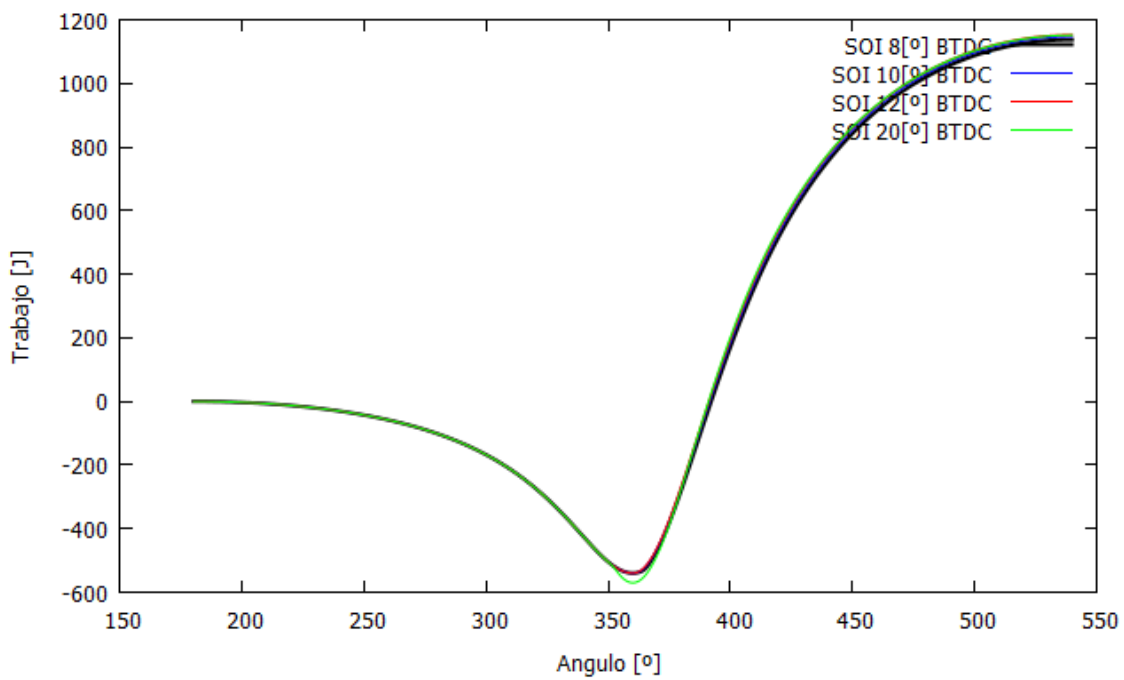


Fig. 5.19. Trabajo para distintos inicios de la inyección.

5.6.2 Variación del Retardo de Autoencendido (ID)

En la figura 5.20 se puede apreciar el efecto del retardo de autoencendido sobre la presión. En el caso hipotético de un $ID=0$, considerando un combustible con alto número de cetano y que el inicio de la inyección se dé muy cerca del PMS, la combustión iniciaría prácticamente en el PMS alcanzando en ese punto la máxima presión y por lo tanto el mejor rendimiento.

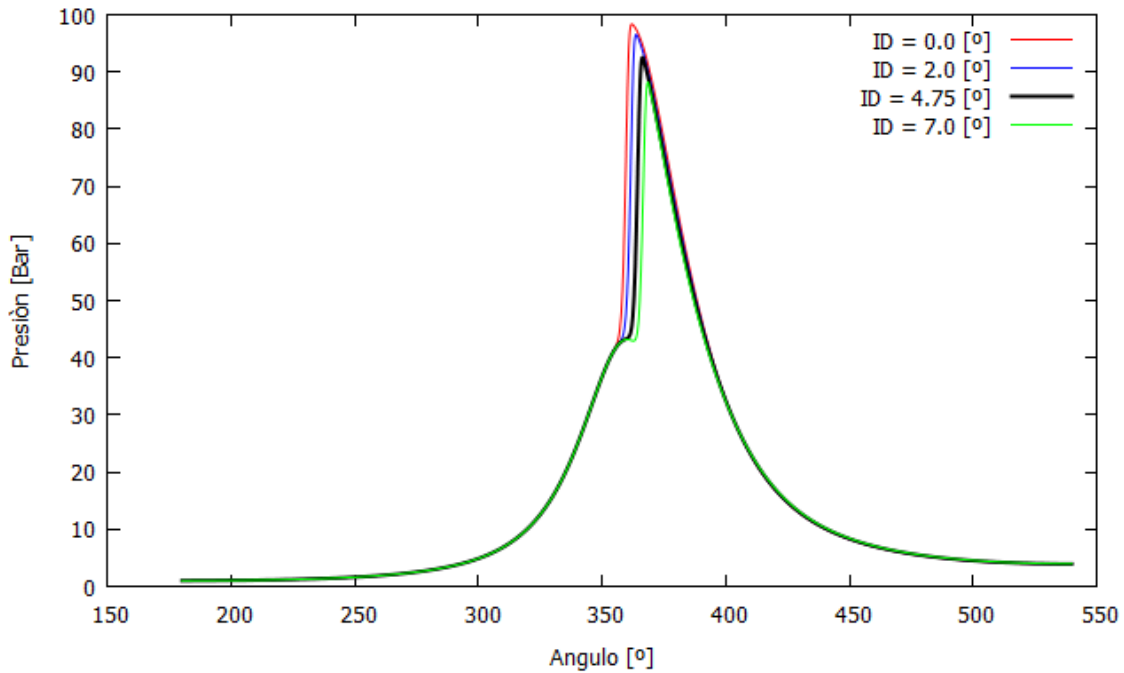


Fig. 5.20. Efecto del ID en el perfil de presión.

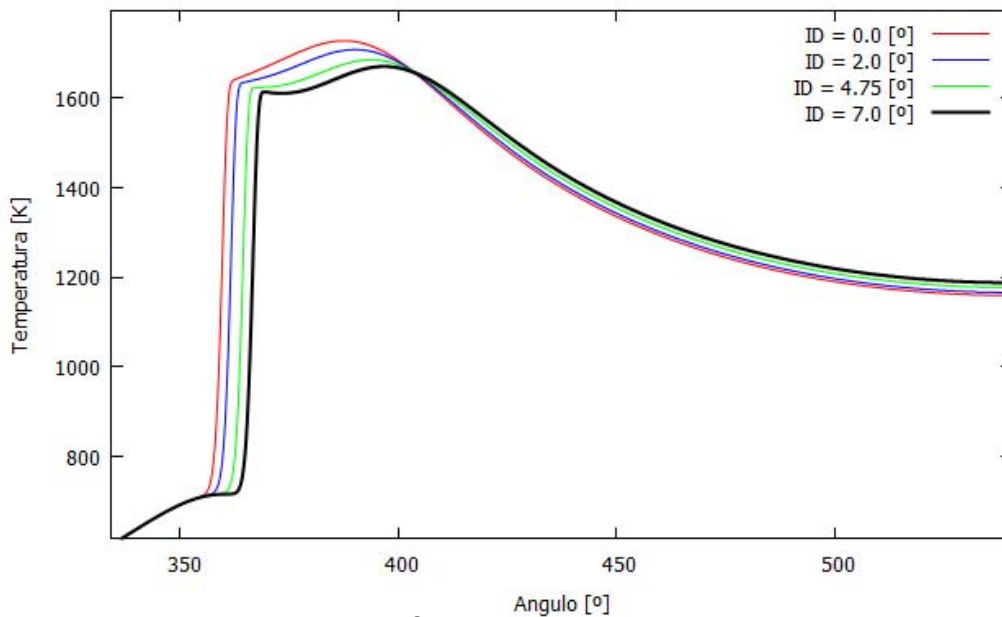


Fig. 5.21. Efecto del ID en la temperatura.

Inversamente a lo que ocurre con la variación del inicio de la inyección, el calor rechazado disminuye conforme aumenta el ID. Esto es por la simple razón de que al aumentar el retardo de autoencendido el inicio de la combustión y por tanto la liberación de calor tienden a darse después del PMS, por lo tanto no existe energía considerable que pueda ser rechazada antes de la etapa de expansión.

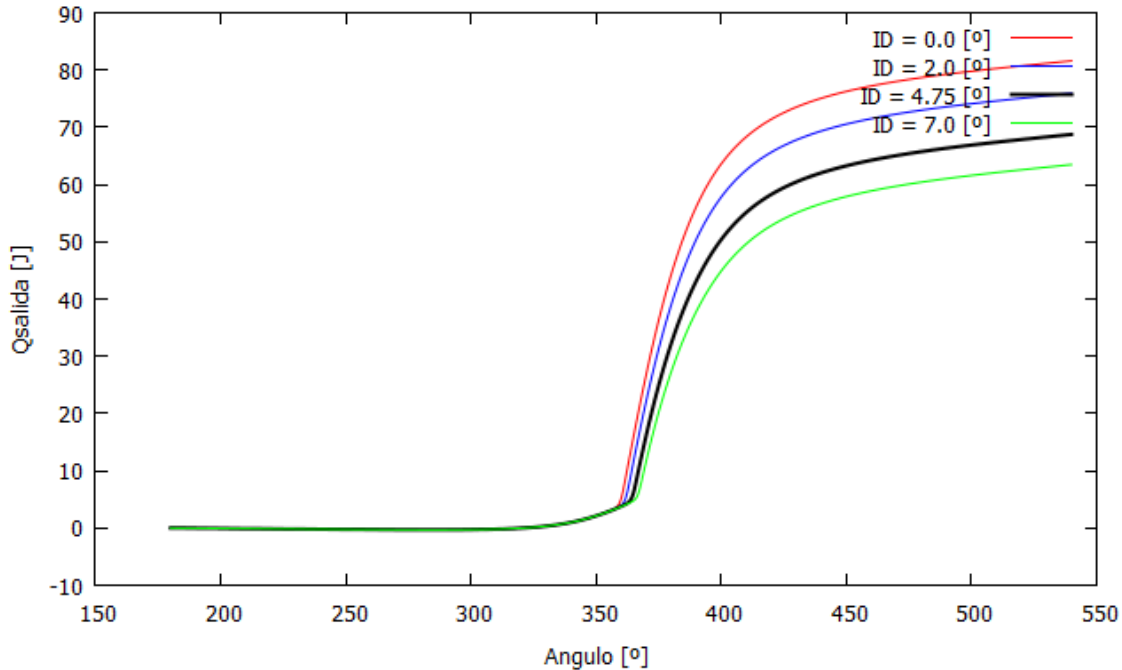


Fig. 5.22. Efecto del ID en calor rechazado.

5.6.3 Variación de la duración en la mezcla y difusión

La variación de la duración de la combustión por difusión se muestra en la figura 5.23.

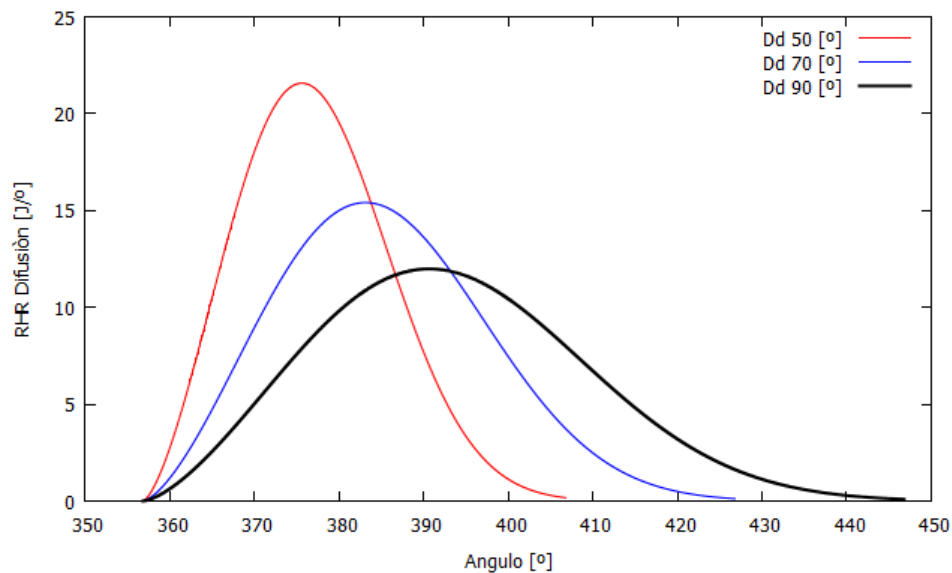


Fig. 5.23. Variación de la duración de la combustión por difusión.

La presión prácticamente no cambio ante la duración de la fase de difusión en gran medida por que en el modelo termodinámico el porcentaje de calor liberado en esta fase fue menor que en la fase de pre mezcla y por lo tanto su variación no tiene repercusiones considerables.

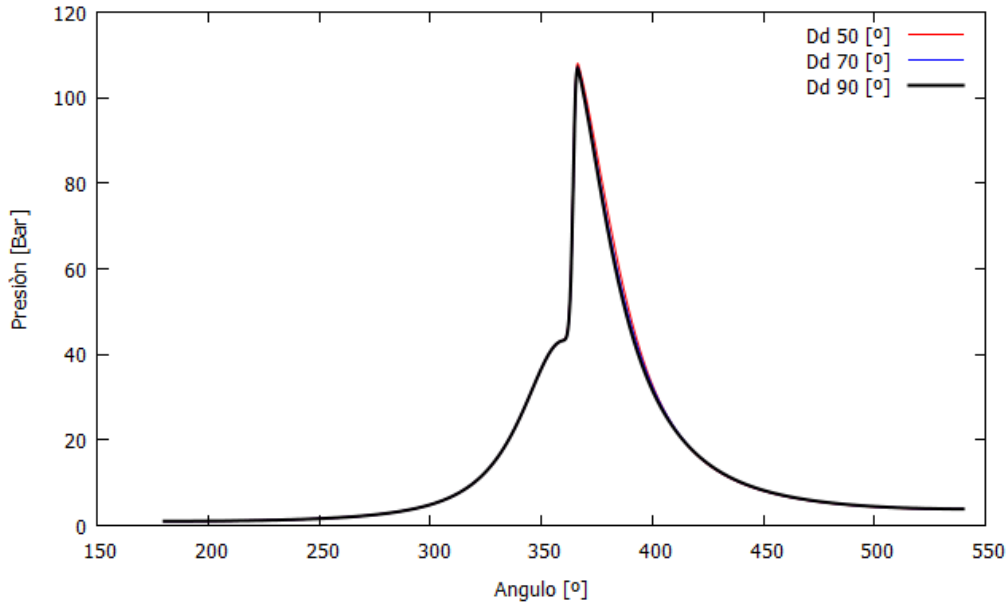


Fig. 5.24. Efecto de la duración de la fase de combustión por difusión en la presión.

El trabajo como el calor de salida se ven afectados ligeramente. El trabajo entregado se ve favorecido al reducir el tiempo en el que se desarrolla la fase de combustión por difusión, fig. 5.25, en cambio el calor de salida aumenta cuando esto pasa, fig. 5.26.

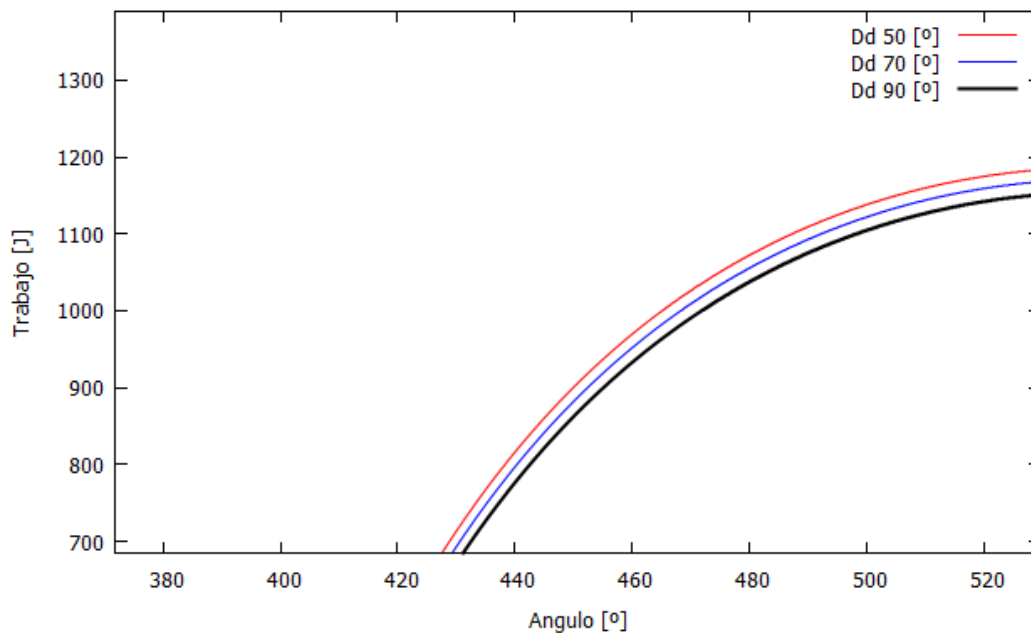


Fig. 5.25. Efecto de la duración de la fase de combustión por difusión en el trabajo.

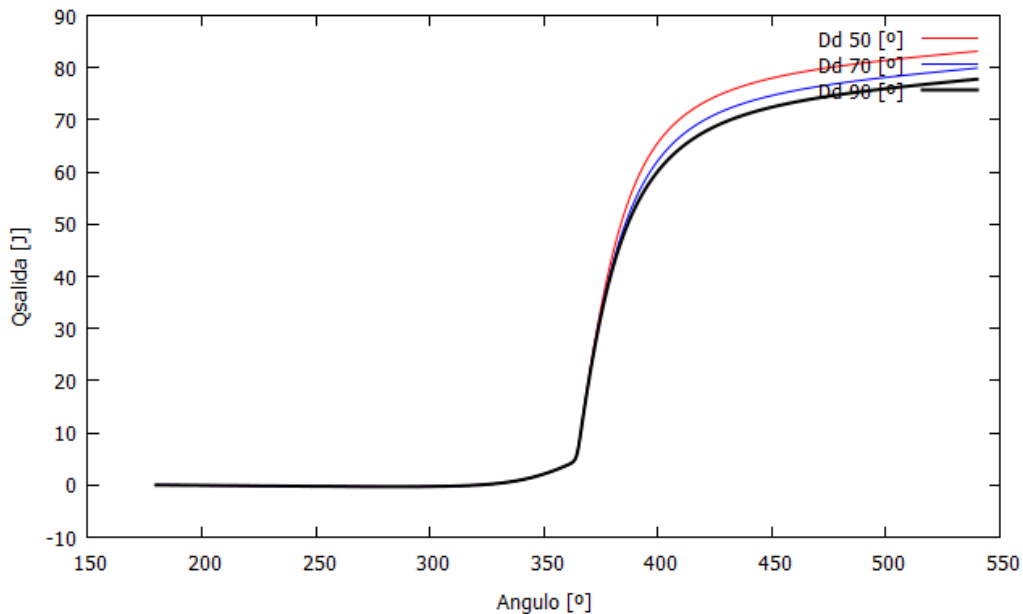


Fig. 5.26. Efecto de la duración de la fase de combustión por difusión en el calor rechazado.

5.6.4 Variación del porcentaje de calor liberado en cada fase de la combustión

En comparación con los otros factores analizados variar el porcentaje de calor liberado en cada fase de la combustión si afecta considerablemente a la presión, esto se puede observar en la figura 5.27. Conforme disminuye el porcentaje de calor liberado en la pre mezcla la presión también disminuye. Como se mencionó en las secciones anteriores, la liberación de calor en la pre mezcla tiende a ser más violenta entre más corto sea el periodo de duración y mayor el porcentaje de energía asignado, por consiguiente si disminuimos ese porcentaje de calor, la cantidad de energía que se tiene que liberar será menor para el mismo tiempo de duración. La explicación anterior se observa de mejor manera con la tasa de liberación de calor, fig. 5.28,

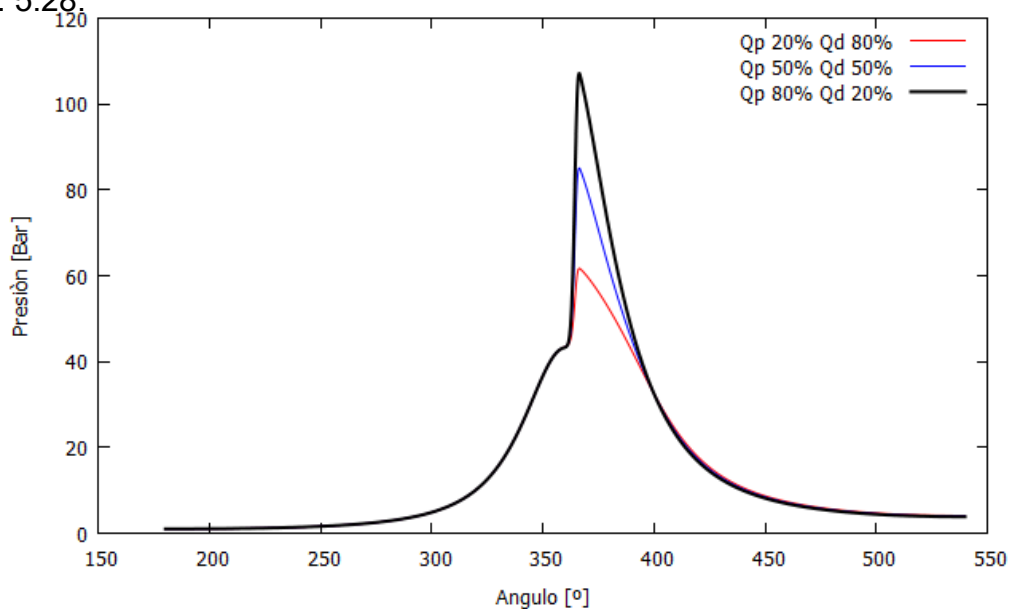


Fig. 5.27. Efecto del porcentaje de calor liberado en cada fase sobre la presión.

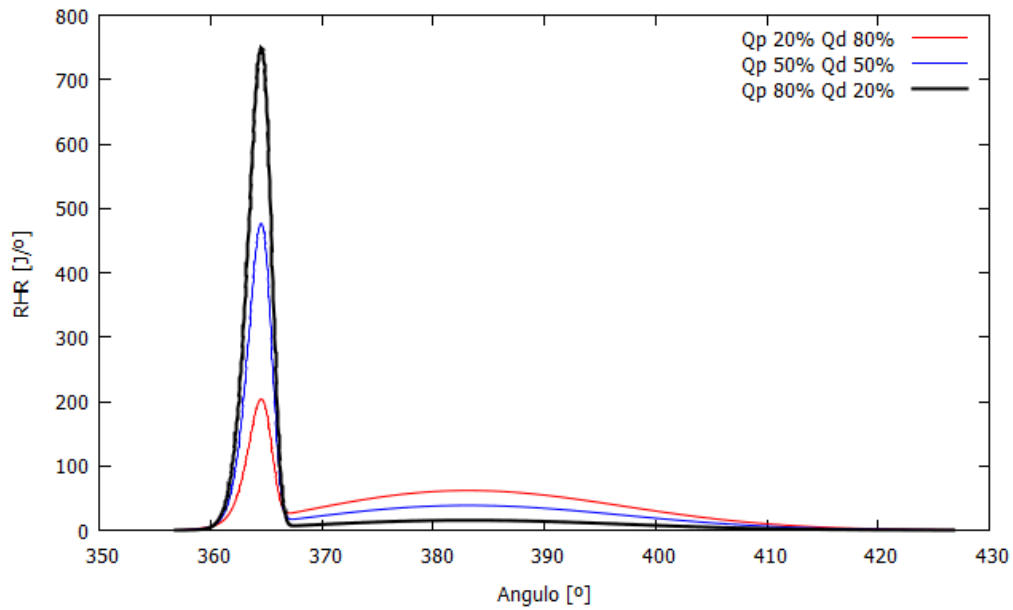


Fig. 5.28. Efecto del porcentaje de calor liberado en cada fase.

Debido a la disminución de la presión, el trabajo y la temperatura de igual manera tiende a disminuir, fig. 5.29 y fig. 5.30.

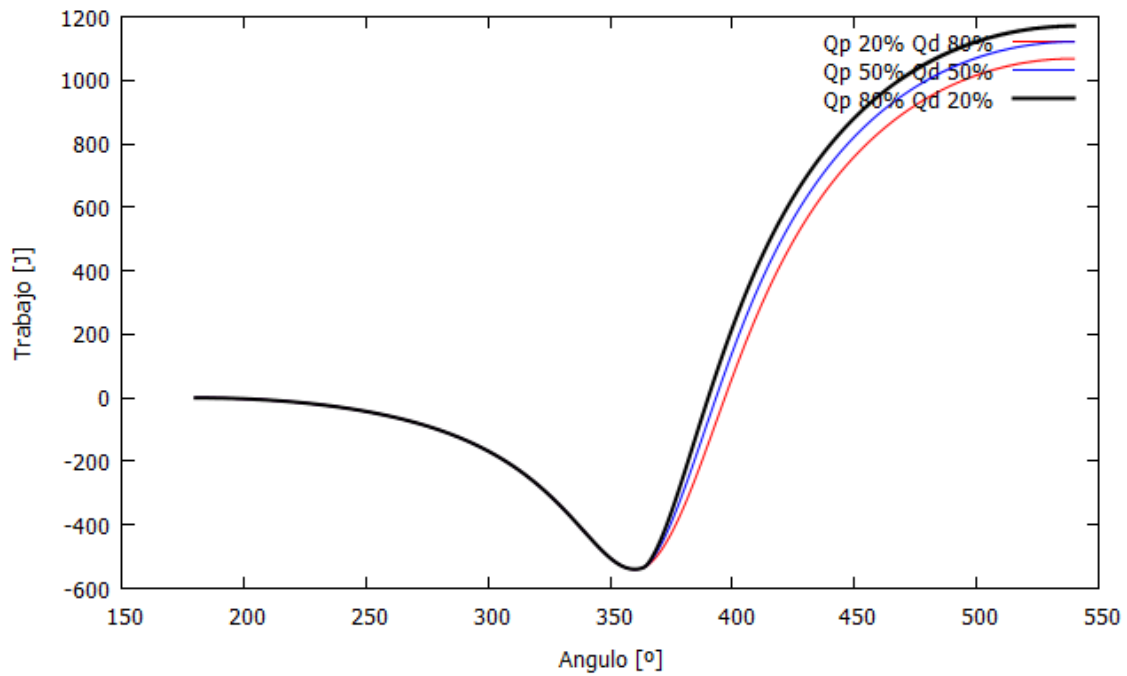


Fig. 5.29. Efecto del porcentaje de calor liberado en cada fase sobre el trabajo.

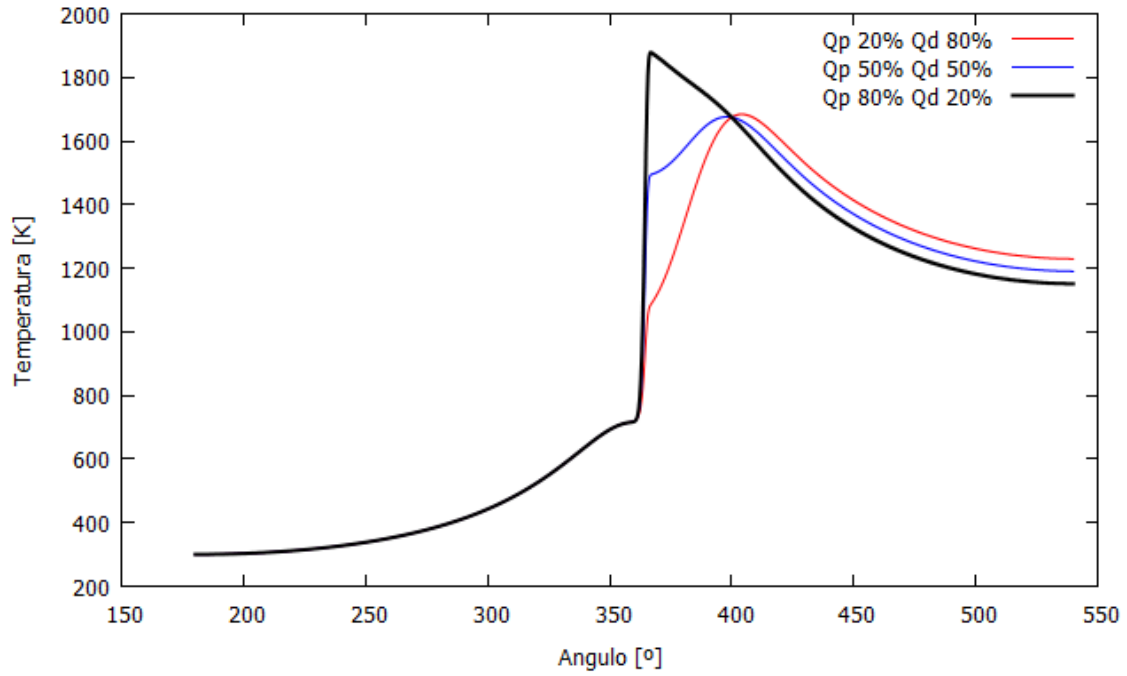


Fig. 5.30. Efecto del porcentaje de calor liberado en cada fase sobre la temperatura.

CAPÍTULO 6 CONCLUSIONES

6.1 Conclusiones

En este trabajo se presentó el desarrollo de un modelo termodinámico de un motor de encendido por compresión, mediante el uso de sub modelos se logró describir el comportamiento de la presión y temperatura dentro de la cámara de combustión, la tasa de liberación y transferencia de calor. Se tomó como base el modelo de primera zona para desarrollar un modelo empírico de dos zonas del cual se obtuvo la temperatura, masa y volumen de los gases quemados y no quemados. La solución al sistema de ecuaciones diferenciales del modelo se realizó en fortran 90.

El modelo se validó experimentalmente para un motor Diésel ISUZU 4JA1 de 2500 cm³ y de inyección directa para tres puntos de operación variando las condiciones de temperatura y presión de entrada y masa de combustible inyectada. Los resultados del modelo se compararon con dos modelos numéricos, el primero cero dimensional y el segundo multi dimensional CFD.

Los resultados de la presión mostraron una sobrestimación de los valores experimentales debido en gran parte al modelo de liberación de calor, al efecto de los gases filtrados y a la recirculación de gases de escape que no fueron tomados en cuenta en el modelo termodinámico. En términos generales la presión se adaptó de mejor manera a la curva experimental conforme la carga aumentaba. En cuanto a la temperatura, los resultados del modelo termodinámico mostraron una diferencia considerable especialmente en los valores de máxima temperatura y en la etapa de expansión.

Se realizaron diversas simulaciones variando algunos parámetros tales como el inicio de la inyección, duración de la combustión, retardo de autoencendido y proporción de calor liberado en cada fase. Este análisis paramétrico permitió conocer los factores de mayor relevancia en el proceso de la combustión en el motor de encendido por compresión.

El retardo de autoencendido como el inicio de inyección son parámetros que están relacionados y que determinan que tan exitoso es el proceso de combustión. Las simulaciones arrojaron que para un combustible con número de Cetano relativamente bajo la inyección debe iniciar mucho antes de llegar al PMS.

Para que se den las condiciones adecuadas en la pre mezcla y se auto encienda lo más cercanamente al PMS, si no es así la presión disminuye y hay una mayor pérdida de calor a través de las paredes de la cámara de combustión.

El punto preciso en el cual se debe inyectar tiene que ver con un fenómeno físico llamado retardo de autoencendido, los resultados obtenidos mostraron que este fenómeno depende principalmente del número de Cetano, de las revoluciones a las cuales el motor gira y las condiciones de entrada. Teóricamente el punto en el cual se debe iniciar la combustión debe ser el PMS.

La variación de la proporción de calor liberado en las fases de premezclado y difusión afectaron considerablemente a la presión, se observó que entre menor sea el porcentaje de calor asignado en la fase de pre mezcla y mayor sea el tiempo en el cual se desarrolla menor va ser la presión alcanzada, por consiguiente el trabajo obtenido disminuirá.

En general el presente trabajo muestra desde el punto de vista global o termodinámicamente el comportamiento de las variables involucradas en el proceso de combustión de un motor Diésel. Como una mejora al modelo es necesario desarrollar modelos multidimensionales que involucren los fenómenos físicos y químicos que se dan dentro de la cámara de combustión para representar con más fidelidad y precisión estos procesos.

REFERENCIAS

- [1] Çengel, Y. A., & Boles, M. A. "Termodinámica ",5a. ed. México: McGraw- Hill. 2006
- [2] John B. Heywood, Internal combustion engine fundamentals, McGraw-Hill international editions, 1988.
- [3] Pablo P. Lluca,"modelado cfd del proceso de combustión en un motor diésel de pequeña cilindrada", 2015.
- [4] Gunter, P. Merker,"Combustion Engines Development", Springer, 2009.
- [5] Zheng QP, Zhang HM, Zhang DF. A computational study of combustion in compression ignition natural gas engine with separated chamber. Fuel. 2005;84(12-13):1515-23.
- [6] Jayashankara B, Ganesan V. Effect of fuel injection timing and intake pressure on the performance of a DI Diesel engine - A parametric study using CFD. Energy Convers Manage. 2010;51(10):1835-48.
- [7] Shi Y, Reitz RD. Optimization of a heavy-duty compression-ignition engine fueled with Diesel and gasoline-like fuels. Fuel. 2010;89(11):3416-30.
- [8] Way RJB. Methods for Determination of Composition and Thermodynamic Properties of Combustion Products for Internal Combustion Engine Calculations. PI Mech Eng. 1976;190(1):687-97.
- [9] Hardenberg HO, Hase FW. An Empirical Formula for Computing the Pressure Rise Delay of a Fuel from Its Cetane Number and from the Relevant Parameters of Direct-Injection Diesel Engines. Warrendale, PA: SAE International; 1979 Feb. Report No. 790493.
- [10] Gardner TP, Henein NA. Diesel Starting: A Mathematical Model. Warrendale, PA: SAE International; 1988 Feb. Report No. 880426.
- [11] Harris HD, Pearce F. A universal mathematical model of Diesel engine performance. J Agr Eng Res. 1990;47:165-76.
- [12] Arrègle J, López JJ, García JM, Fenollosa C. Development of a zero-dimensional Diesel combustion model. Part 1: Analysis of the quasi-steady diffusion combustion phase. Appl Therm Eng. 2003;23(11):1301-17.

- [13] Chmela FG, Pirker GH, Wimmer A. Zero-dimensional ROHR simulation for DI Diesel engines - A generic approach. *Energ Convers Manage.* 2007;48(11):2942-50.
- [14] Galindo J, Hernandez J. Modelado de Motores. En: Motores de combustión interna alternativos. Payri F, Desantes JM. España: Reverte: 2011. p. 746-796.
- [15] Probert RP. The influence of spray particle size and distribution in the combustion of oil droplets. *Philos Mag.* 1946;37(265):94-105.
- [16] Tanasawa PH. On the combustion rate of a group of particles. Tech Report Tohoko Univ. 1953;18:61-74.
- [17] Austen AEW, Lyn W-T. Relation between Fuel Injection and Heat Release in a Direct-Injection Engine and the Nature of the Combustion Processes. *P I Mech Eng.* 1960;14(1):47-62.
- [18] Lyn WT. Study of burning rate and nature of combustion in Diesel engines. *Symp (Int) Combust.* 1963;9(1):1069-82.
- [19] Cook HA. Appraisal of Effects of Operating Conditions and Engine Design on Combustion in Reciprocating Engines by Engine Cycle Calculations. Warrendale, PA: SAE International; 1963 Jan. Report No. 630083.
- [20] Cook HA. Diesel Engine Cycle Analysis of Relationships of Fuel Injection to Fuel Compression Ignition Characteristics and Best Fuel Utilization. Society of Automotive Engineers; 1965.
- [21] Nagao F, Ikegami M, Oshima K. An Analysis of Combustion Knock in a Diesel Engine. *Bull JSME.* 1967;10(39):532-42.
- [22] Shipinski J, Myers PS, Uyehara OA. A Spray-Droplet Model for Diesel Combustion. *P I Mech Eng.* 1969;184(10):28-35.
- [23] Shipinski J, Uyehara OA, Myers PS. Experimental correlation between rate of injection and rate of heat release in a Diesel engine. 1968. Report No. 68-DGP-11.
- [24] Whitehouse ND, Way R. Rate of Heat Release in Diesel Engines and Its Correlation with Fuel Injection Data. *P I Mech Eng.* 1969;184(10):17-27.
- [25] Whitehouse ND, Way RJB. A Simple Method for the Calculation of Heat Release Rates in Diesel Engines Based on the Fuel Injection Rate. Warrendale, PA: SAE International; 1971 Feb. Report No. 710134.

[26] Whitehouse ND, Sareen BK. Prediction of Heat Release in a Quiescent Chamber Diesel Engine Allowing for Fuel/air Mixing. Society of Automotive Engineers; 1974.

[27] Grigg HC, Syed MH. The Problem of Predicting Rate of Heat Release in Diesel Engines. P I Mech Eng. 1969;184(10):192-202.

[28] Rakopoulos CD, Antonopoulos KA, Rakopoulos DC. Development and application of multi-zone model for combustion and pollutants formation in direct injection Diesel engine running with vegetable oil or its bio-Diesel. Energ Convers Manage. 2007;48(7):1881-901.

[29] G. Fernando G. Sánchez, "Modelado de la combustión en motores Diésel: revisión del estado del arte.

[30] Vibe II (1970) Brennverlauf und Kreisprozeß von Verbrennungsmotoren. VEB Verlag Technik, Berlin.

[31] C. Ferguson, A. Kirkpatrick, Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences. Review of wiebe funtions.

[32] Heider G (1996) Rechenmodell zur Vorausberechnung der NO-Emission von Dieselmotoren. Dissertation, TU Munchen.

[33] Mohamed F. Al-Dawody, "Theoretical modeling of combustion characteristics and performance parameters of biodiesel in DI diesel engine with variable compression ratio", international journal of energy and environment, 2013.

[34] C.Olikara and G. Borman, "A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I.C. engines," SAE Technical Paper 750468, SAE International, 1975.

[35] Nishida K, Hiroyasu H (1989) Simplified three-dimensional modeling of mixture formation and combustion in a DI diesel engine. SAE Paper, 890269.

[36] Taskinen Pertti, "Modelling of Spray Combustion, Emission Formation and Heat transfer in medium speed Diesel engine", 2005.

[37] Fabrizio Diotallevi, "Development of a Multi-Zone Model for NOx Formation in Diesel Engines".

[38] DELGADO, Álvaro, OLMOS, Luis y RIVERO, Saúl. Comparative study of the indicated cycle of a Diesel engine using simulation and experimental data. Rev. UIS. Ingenierías, 2014, vol.13, n.1, p.p 23-31.

[39] Ed, Jorgensen," Introduction to Programming using Fortran 95/2003/2008", 2016.

[40] William H. Press, "Numerical recipes in Fortran 90: the art of parallel scientific computing ", Second Edition.

[41] Serrano, A. Miguel," Física computacional", Universidad de Murcia.

[41] Carnahan, Brice, "Applied Numerical Methods", Krieger 1990.

APÉNDICE A

PROGRAMA GENERAL EN FORTRAN

```
Program Modelo
implicit none
  call Solmodelo
  call SolEquivalencia
  call SolTemperatura
end program Modelo

subroutine Solmodelo
implicit none
integer, parameter :: n = 12          ! Numero de Ecuaciones Diferenciales
double precision ti, tf, dt, tmax ,dQin ! t= variable independiente,
ti=Valor inicial, dt = incremento , tmax valor máximo de t
double precision xi(n), xf(n) ! xi(n) arreglo de valores iniciales, xf arreglo de soluciones
double precision, parameter :: pi = acos(-1.0)      ! Pi
double precision, parameter :: rad = pi/180.0, deg=180.0/pi ! Radianes y Grados
integer i
external d1x

! Documentos para resultados
open (unit=6, file='Resul2Zonas.dat')
open (unit=11, file='RazonesdeCambio.dat')

! Condiciones Iniciales
ti = 180.0*rad          ! Valor inicial del ángulo (°)
xi(1) = 0.0            ! Valor inicial del calor de entrada (J)
xi(2) = 0.001082+0.00006367 ! Valor inicial del volumen (m3)
xi(3) = 0.0           ! Valor inicial del calor de salida (J)
xi(4) = 100000.0     ! Valor inicial de la presión (Pa)
xi(5) = 300.0        ! Valor inicial de la temperatura (K)
xi(6) = 0.0          ! Valor inicial del trabajo (J)
xi(7) = 0.0          ! Valor inicial del volumen del spray (m3)
xi(8) = 0.0          ! Valor inicial de la masa de zona 1 (kg)
xi(9) = 300.0        ! Valor inicial de la temperatura burned [K]
xi(10) =0.001146046844 ! Valor inicial del volumen de la zona 2 (m3)
xi(11) =300.0        ! Valor inicial de Temperatura unburned [K]
xi(12) =0.0          ! Valor inicial de Hollín

! Paso y límite de integración
dt = 0.1*rad          ! Paso o Incremento
tmax = 540.0*rad      ! Angulo máximo (§)
```

! Imprimir encabezado y condiciones iniciales

```
write (6,*) ' Solución de modelo termodinámico '
write (6,*) ' Metodo: Runge-Kutta 4th order '
write (6,100)
write (6,102) ti*deg, xi(1), xi(2), xi(3), xi(4)/100000.0, xi(5), xi(6), xi(7), xi(8), xi(9), xi(10),
xi(11), xi(12)
```

! Integración de Ecuaciones Diferenciales

```
do while (ti <= tmax)
  tf = ti + dt
  call rk4n(d1x,ti, tf, xi, xf, n)
  write(6,102) tf*deg, xf(1), xf(2), xf(3), xf(4)/100000.0, xf(5), xf(6), xf(7), xf(8), xf(9),
xf(10),xf(11),xf(12)
```

! Preparar para siguiente paso

```
ti = tf
do i = 1,n
  xi(i) = xf(i)
end do
end do
```

```
100 format
(5x,'Angulo',11x,'Qin',11x,'Vol',6x,'Qsal',8x,'Pre',6x,'Temp',6x,'Trabajo',6x,'Volumen1',6x,'M
asa1',6x,'Tu',6x,'Vol2',6x,'Tb',6x,'Holl• n')
101 format(5x,'Angulo',11x,'dQin',11x,'dSoot')
102 format(13(1pe12.3))
end subroutine Solmodelo
```

subroutine d1x(t, x, dx, n)

```
!=====
! Sistema de ecuaciones a resolver por RJK
! Entradas...
! n - Número de ecuación
! t - Variable independiente
! x() - variable dependiente
! Salidas...
! dx()- dx/dt - Ecuaciones diferenciales
!=====
implicit none
integer n
double precision t, hc, ww, po, Ap,st, Vs, cons, cons1
double precision dQin,dQp,dQd,dQin2, IQd,IQp,xb,dxb,Tburn
```


double precision x(n), dx(n), ar(n), k

! Parámetros Generales

double precision, parameter :: pi = acos(-1.0) ! Pi
double precision, parameter :: rad = pi/180.0, deg=180.0/pi ! radianes y grados
double precision, parameter :: LHV = 44300000.0 ! Poder calorífico inferior del Diésel J/kg
double precision, parameter :: Qp = 0.60*LHV*0.000055655 ! Calor liberado en la fase de pre mezcla (J)
double precision, parameter :: Qd = 0.40*LHV*0.000055655 ! Calor liberado en la fase de difusión (J)
double precision, parameter :: cw = 6.908 ! Constante de Vibe
double precision, parameter :: mp = 7.0 ! Factores de forma de cada fase
double precision, parameter :: w = 2500.0/60.0 ! Velocidad (rpm)
double precision, parameter :: md = 1.5 ! Factores de forma de cada fase
double precision, parameter :: tc = 70.0*rad ! Duración de combustión difusión °
double precision, parameter :: tpc = 10.0*rad ! Duración de la pre mezcla de combustión [°]
double precision, parameter :: SOC = 352.0*rad+0.083076484 ! Inicio de la combustión más ID
double precision, parameter :: L = 0.125 ! Carrera (m)
double precision, parameter :: Lr = 0.1 ! Longitud de la biela (m)
double precision, parameter :: Di = 0.105 ! Diámetro interno del cilindro (m)
double precision, parameter :: Vc = 0.00006367 ! Volumen muerto (m3)
double precision, parameter :: a = L/2 ! Longitud de la manivela
double precision, parameter :: Vd = 0.001082 ! Volumen desplazado (m3)
double precision, parameter :: cm = 2.0*2500.0*L/60.0 ! Velocidad del pistón (m/s)
double precision, parameter :: Tein = 300.0 ! Temperatura entrada (K)
double precision, parameter :: Pe = 100000.0 ! Presión de entrada (Pa)
double precision, parameter :: Tw = 400.0 ! Temperatura de pared (K)
double precision, parameter :: V1 = Vc + Vd ! Volumen inicial
double precision, parameter :: R = 286.7 ! Constante de gases (J/kg K)
double precision, parameter :: m = Pe*V1/(R*Tein) ! Masa (Kg)
double precision, parameter :: Ru = 8.31447 ! Constante universal (kJ/kmolK)
double precision, parameter :: phi1 = 1.0 ! Relación de equivalencia
double precision, parameter :: afstoic = 14.33 ! Estequiometrico
double precision, parameter :: rc = 18.0 ! Relación de compresión
double precision, parameter :: CN = 45.0 ! Numero de Cetano
double precision, parameter :: EA = 618840/(CN + 25.0) ! Energía aparente de Activación (J/mol)
double precision, parameter :: TTC=Tein*rc**(k-1.0) ! Temperatura al final de la compresión (K)
double precision, parameter :: PTC=1.0*rc**k ! Presión al final de la compresión (bar)

```

double precision, parameter :: Sp = w*2*pi*a           ! Velocidad del pistón (m/s)
double precision, parameter :: ID = 0.071580155!rad*(0.36+0.22*(Sp))*exp(
EA*(1/(Ru*TTC)-1/17190)*(21.2/(PTC-12.4))**(0.63) )

! Constantes
double precision, parameter :: C1 = m*R
double precision, parameter :: C2 = 3.26/(w*C1**(-0.55))
double precision, parameter :: C3 = Vd*Tein/(Pe*V1)

!====
! Constantes para la formación de hollín
double precision, parameter :: C4 = 6295 ! Ef/R (K)
double precision, parameter :: Af = 150 ! 1/s
double precision, parameter :: ms = 2000*(4/3)*pi*(13e-9)**2 !masa de hollín (Kg)
!====

!====
! Sistema de Ecuaciones del Modelo de Primer Zona
!====
if ((t >=180.0*rad .and. t <= SOC+ID)) then

dx(1) = 0.0
x(1) = 0.0
else if ((t >SOC+ID .and. t <= EOC)) then

dQp = cw*(Qp/(tpc*deg))*(mp+1)*((t-SOC+ID)/tpc)**(mp)*exp(-cw*((t-
SOC+ID)/tpc)**(mp+1))
! Taza de Calor liberado en la fase de pre mezcla
IQp = (1 - exp(-cw*((t-SOC+ID)/tpc)**(mp+1)))*Qp
! Calor integrado de la fase de pre mezcla

dQd = cw*(Qd/(tc*deg))*(md+1)*((t-SOC+ID)/tc)**(md)*exp(-cw*((t-SOC+ID)/tc)**(md+1))
! Taza de Calor liberado en la fase de difusion
IQd = (1 - exp(-cw*((t-SOC+ID)/tc)**(md+1)))*Qd
! Calor integrado de la fase de difusión

dQin2=(IQp+IQd)           ! Calor integrado total

dQin = cw*(Qp/(tpc*deg))*(mp+1)*((t*deg-SOC*deg+ID)/(tpc*deg))**(mp)*exp(-cw*((t*deg-
SOC*deg+ID)/(tpc*deg))**(mp+1)) + cw*(Qd/(tc*deg))*(md+1)*((t*deg-
SOC*deg+ID)/(tc*deg))**(md)*exp(-cw*((t*deg-SOC*deg+ID)/(tc*deg))**(md+1))
! Total Rate heat release
write (11,103) t*deg,dQin,dQin2,dQp,dQd,IQp,IQd,ID

```

$dx(1) = (cw*(Qp/tpc)^{(mp+1)}*((t-SOC+ID)/tpc)^{(mp)}*exp(-cw*((t-SOC+ID)/tpc)^{(mp+1)}) + cw*(Qd/tc)^{(md+1)}*((t-SOC+ID)/tc)^{(md)}*exp(-cw*((t-SOC+ID)/tc)^{(md+1)}))$
 ! dx(1) = dQ/dtheta Calor de entrada (Heat release)

else
 dx(1)=0.0
 end if

$dx(2) = (pi*Di*Di*0.25) * (a*SIN(t) + (a*a*SIN(t)*COS(t))/(Lr*Lr-a*a*SIN(t)*SIN(t))^{(1/2)})$!
 dx(2) = dV/dtheta Derivada del volumen

if ((t>=180.0*rad .and. t <= SOC+ID)) then
 cons = 0.0
 else
 cons = 0.00324
 end if

$po = Pe*(V1/x(2))^{(k)}$! Presión motor Pa
 $Ap = (pi*Di*Di*0.25 + Di*pi*(a*(1- COS(t)) + Lr - (Lr*Lr - a*a*SIN(t)*SIN(t))^{(1/2)}))$!
 Área de trasferencia
 $ww = 2.28*cm + cons*C3*(x(4)-po)$! Velocidad del gas del cilindro w
 $hc = 3.26*(Di^{(-0.2)})*((x(2)*x(4)/C1)^{(-0.53)})*((x(4)/1000.0)^{(0.8)})*((ww)^{(0.8)})$
 ! Coeficiente de convección
 $dx(3) = -(1.0/(w*360))*hc*Ap*((x(2)*x(4)/C1)-Tw)$! dx(3) = dQsal/dtheta Calor de salida

$k = 1.38-0.2*exp(-900/x(5))$! Índice poli trópico
 $dx(4) = ((k-1)/x(2))*(dx(1)-dx(3))-(k*x(4)/x(2))*(dx(2)) + (x(4)/(k-1))*(-0.2*exp(-900/x(5)))*(900/(x(5)*x(5)))*dx(5)$! dx(4) = dP/dtheta Derivada de la presión

$dx(5) = (1/C1)*(x(4)*dx(2) + x(2)*dx(4))$! dx(5) = dT/dtheta Derivada de la Temperatura

$dx(6) = x(4)*dx(2)$! dx(6) = dW/dtheta Trabajo

!=====
 ! Sistema de ecuaciones del modelo de dos zonas
 !=====

$x(7) = x(8)*R1*x(9)/x(4)$! x(7) = Volumen de la zona quemada [m3]
 $dx(8) = (1/LHV)*(afstoic/phi1 + 1)*dx(1)$! dx(8) Masa de la zona 1 quemada (kg)

if ((t >=180.0*rad .and. t <= SOC+ID)) then
 $dx(9) = (1/C1)*(x(4)*dx(2) + x(2)*dx(4))$
 else

```

dx(9) = 682.5*((k-1)/k)*(dx(4)/3465000)*(x(4)/3465000)**(-1/k)
! dx(9) Temperatura de zona no quemada
end if

```

```

x(10) = x(2)- x(7)                                ! dx(10) Volumen de la zona 2

```

```

if ((t >=180.0*rad .and. t <= SOC+ 5*rad)) then
dx(11)=dx(5)
else
x(11) = (m*x(5) - (m-x(8))*x(9))/x(8)           ! x(11) Temperatura de zona quemada
end if

```

```

!=====
! Ecuación de creación de partículas de Hollín (Soot) y NO
!=====

```

```

dx(12)=Af*(x(1)/(LHV))*x(4)*exp(-C4/x(5))*(1/(w*360))           ! dx(12) Tasa de Formación
de Hollín (soot)

```

```

if (t>SOI) then
dx(13)=((170.3*0.07829/(x(9)*1e6))**(0.5)*(170.3*0.758/(x(9)*1e6))*((6e16)/(x(11)**(0.5))))*
exp(-69090/x(11)))/(360*w)
end if

```

```

!=====

```

```

101 format(5x,'Angulo',11x,'dQin',11x,'dSoot')
103 format(12(1pe12.3))
end subroutine d1x

```

APÉNDICE B

SUBROUTINA PARA LA SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES

```
subroutine rk4n(fcn,ti, tf, xi, xf, n)
!=====
! fcn(t,x,dx,n)- Funciones dx/dt (función o subrutina d1x)
! Entradas...
! ti - Inicio de variable independiente
! tf - Solución o avance de la variable independiente
! xi() - Arreglo de valores iniciales
! n - Número de ecuaciones diferenciales de primer orden
! Salidas...
! xf() - Arreglo que contiene la solución de las ecuaciones
!=====
implicit none
integer n,j
double precision ti, tf
double precision xi(n), xf(n)
double precision h, t
double precision x(n), dx(n)
double precision k1(n),k2(n),k3(n),k4(n)

h = tf-ti
t = ti

!* evaluar k1
call fcn(t, xi, dx, n)
do j=1,n
    k1(j) = h*dx(j)
    x(j) = xi(j) + k1(j)/2.0
end do

!* evaluar k2
call fcn(t+h/2.0, x, dx, n)
do j=1,n
    k2(j) = h*dx(j)
    x(j) = xi(j) + k2(j)/2.0
end do
```

```

!* evaluar k3
call fcn(t+h/2.0, x, dx, n)
do j=1,n
  k3(j) = h*dx(j)
  x(j) = xi(j) + k3(j)
end do

!* evaluar k4 y obtener resultado
call fcn(t+h, x, dx, n)
do j=1,n
  k4(j) = h*dx(j)
  xf(j) = xi(j) + k1(j)/6.0+k2(j)/3.0+k3(j)/3.0+k4(j)/6.0
end do

end subroutine rk4n

```

APÉNDICE C

SUBROUTINA PARA LA SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES NO LINEALES

```

subroutine SolTemperatura
integer i , iflag , itmax , N, cons1, dt
parameter (N=11)
double precision tol
double precision u_g(N) , u(N)
double precision MT,Temp,Pre,Ru, KP1,KP2,KP3,KP4,KP5,KP6,phi

```

```

!Documento para guardar resultados
open (unit=11, file='CompoQuimTemp.dat')

```

```

itmax =500      ! Numero Máximo de Iteraciones
tol = 1.0e-10   ! Tolerancia
iflag = 1       ! Cálculo del jacobiano
phi=0.60        ! Relación de equivalencia

```

```

u_g(1) = 8.449E-2      !CO2
u_g(2) = 7.285E-2      !H2O
u_g(3) = 7.591E-1      !N2
u_g(4) = 7.829E-2      !O2
unknon_g(5) = 5.092E-5 !CO
u_g(6) = 1.002E-5      !H2

```

```

u_g(7) = 7.065e-7      !H
u_g(8) = 2.471E-5     !O
u_g(9) = 4.726E-4     !OH
u_g(10) =4.668E-3     !NO
u_g(11) = 170.3       !Numero de moles totales

! Encabezado
write (11,*) '          Modelo de Equilibrio Químico para 10 especies'
write (11,*) '          Método : Newton '
write (11,100)

do dt = 0,2000,1
  Temp = 1960.0 + dt
! Llamada de subrutina de Newton para resolver las ecuaciones
call NEWTON(N,itmax,tol,iflag,phi,Temp,u_g,u)

! Escribir la soluciones en el documento .txt
write (11,102) Temp,u(1),u(2),u(3),u(4),u(5),u(6),u(7),u(8),u(9),u(10),u(11)

! Actualización de valores iniciales
  do i = 1, N
    u_g(i)= u(i)
  end do
end do
100format(6x,'Temp',8x,'CO2',9x,'H2O',10x,'N2',10x,'O2',10x,'CO',10x,'H2',10x,'H',11x,'O',
12x,'OH',12x,'NO',12x,'MT')
102 format(12(1pe12.3))

End subroutine SolTemperatura

subroutine SolEquivalencia
integer i , iflag , itmax , N, cons1, dt
parameter (N=11)
double precision tol
double precision u_g(N) , u(N)
double precision MT,Temp,Pre,Ru, KP1,KP2,KP3,KP4,KP5,KP6,phi

Temp=2500.0
! Constantes de equilibrio
KP1=10**( 0.432168*log(Temp/1000) -0.112464e5/Temp + 0.267269e1 - (0.745744e-
4)*Temp+ (0.242484e-8)*Temp**2.0) ! H2/2 <-> H
KP2=10**( 0.310805*log(Temp/1000) -0.129540e5/Temp + 0.321779e1 - (0.738336e-
4)*Temp+ (0.344645e-8)*Temp**2.0) ! O2/2 <-> O

```

```

KP3=10**(-0.141784*log(Temp/1000) -0.213308e4/Temp + 0.853461 + (0.355015e-
4)*Temp -(0.310227e-8)*Temp**2.0) !H2 + O2 <-> OH
KP4=10**((0.150879e-1)*log(Temp/1000) -0.470959e4/Temp + 0.646096 + (0.272805e-
5)*Temp - (0.154444e-8)*Temp**2.0) ! O2 + N2<-> NO Si Cuple
KP5=10**(1*(-0.752364*log(Temp/1000) +0.124210e5/Temp - 0.260286e1 + (0.259556e-
3)*Temp - (0.162687e-7)*Temp**2.0)) ! H2 + O2<-> H2O Si cumple
KP6=10**(1*(-0.415302e-2)*log(Temp/1000) +0.148627e5/Temp - 0.475746e1 +
(0.124699e-3)*Temp - (0.900227e-8)*Temp**2.0)) ! CO + O2<-> CO2 Si cumple

```

```

write(*,*)
write(*,*) KP1
write(*,*) KP2
write(*,*) KP3
write(*,*) KP4
write(*,*) KP5
write(*,*) KP6

```

```

! Documento para guardar resultados
open (unit=11, file='ComposicionQuim.dat')

```

```

itmax = 200      ! Número Máximo de Iteraciones
tol = 1.0e-10   ! Tolerancia
iflag = 1       ! Cálculo del Jacobiano

```

```

! Valores sugeridos
u_g(1) = 2.679E-02      !CO2
u_g(2) = 2.146E-02      !H2O
u_g(3) = 7.600E-01      !N2
u_g(4) = 1.455E-01      !O2
u_g(5) = 1.967E-03      !CO
u_g(6) = 2.312E-04      !H2
u_g(7) = 2.311E-04      !H
u_g(8) = 3.844E-03      !O
u_g(9) = 6.104E-03      !OH
u_g(10) =3.391E-02      !NO
u_g(11) = 5.008E+02     !Numero de moles totales

```

```

! Encabezado
write (11,*) '      Modelo de Equilibrio Quimico para 10 especies'
write (11,*) '      Metodo : Newton '
write (11,100)
do dt = 0,10,1
  phi = 0.2 + dt*0.1

```



```
!Llamada de subrutina de Newton para resolver las ecuaciones
call NEWTON(N,itmax,tol,iflag,phi,Temp,u_g,u)
```

```
! Escribir la soluciones en el documento .txt
write (11,102) phi,u(1),u(2),u(3),u(4),u(5),u(6),u(7),u(8),u(9),u(10),u(11)
```

```
! Actualizacion de valores iniciales
```

```
  do i = 1, N
    u_g(i)= u(i)
  end do
end do
100
format(6x,'Phi',8x,'CO2',9x,'H2O',10x,'N2',10x,'O2',10x,'CO',10x,'H2',10x,'H',11x,'O',12x,'O
H',12x,'NO',12x,'MT')
102 format(12(1pe12.3))
```

```
End subroutine SolEquivalencia
```

```
! Subrutina de Newton-Rahpson para la solución de las ecuaciones
subroutine NEWTON(N,ltmax,Tol,lflag,phi,Temp,U_g,U)
```

```
implicit none
double precision d , rnorm , Tol
integer i , lflag , iter , ltmax , j , N, cons2
double precision a(N,N) , U_g(N) , U(N) , b(N), phi, Temp
integer ipvt(N)
```

```
!
```

```
! Inicializar matriz A y vector B
```

```
do i = 1 , N
  U(i) = U_g(i)
  b(i) = 0.0
  do j = 1 , N
    a(i,j) = 0.0
  end do
end do
```

```
! Inicio de la solución Iterativa
```

```
iter = 0
!100 iter = iter + 1
```

```
do cons2 = iter , ltmax, 1
  if ( iter<=ltmax ) then
```

```

! Entrada del sistema de ecuaciones no lineales
  call RESIDUALS(N,phi,Temp,U,b)

! Checar tolerancia
  rnorm = 0.00
  do i = 1 , N
    rnorm = rnorm + b(i)**2
  end do

  rnorm = SQRT(rnorm)
  if ( rnorm<Tol ) return
!
  call JACOBIANO(Iflag,phi,Temp,N,U,a)
!
! Método de LU para la descomposición de la matriz A
  call LUDCMP(a,N,N,ipvt,d,phi,Temp)
!
!  $A \cdot (X_{iter+1} - X_{iter}) = -B$ 
! for Newton Raphson method  $B = X_{iter+1} - X_{iter}$ 
  do i = 1 , N
    b(i) = -b(i)
  end do
!
  call LUBKSB(a,N,N,ipvt,b,phi,Temp)
!
  do i = 1 , N
    U(i) = U(i) + b(i)
  end do
end if
end do

write (11,*) 'No Convergencia !'
write (*,*) 'No Convergencia !'

return
end subroutine NEWTON

```

```

!Subrutina para ingresar las ecuaciones no lineales
subroutine RESIDUALS(N,phi,Temp,U,R)
implicit none
integer i , N
double precision U(N) , R(N)
double precision MT,Temp,Pre,Ru,phi
double precision KP1,KP2,KP3,KP4,KP5,KP6

```

```
Pre=1.0 ! Bar
Ru = 8.31447
```

```
! Igualar Ecuaciones a Cero
```

```
do i = 1 , N
```

```
    R(i) = 0.00
```

```
end do
```

```
KP1=10**( 0.432168*log(Temp/1000) -0.112464e5/Temp + 0.267269e1 - (0.745744e-4)*Temp+ (0.242484e-8)*Temp**2.0) ! H2/2 <-> H
```

```
KP2=10**( 0.310805*log(Temp/1000) -0.129540e5/Temp + 0.321779e1 - (0.738336e-4)*Temp+ (0.344645e-8)*Temp**2.0) ! O2/2 <-> O
```

```
KP3=10**( -0.141784*log(Temp/1000) -0.213308e4/Temp + 0.853461 + (0.355015e-4)*Temp - (0.310227e-8)*Temp**2.0) !H2 + O2 <-> OH
```

```
KP4=10**( (0.150879e-1)*log(Temp/1000) -0.470959e4/Temp + 0.646096 + (0.272805e-5)*Temp - (0.154444e-8)*Temp**2.0) ! O2 + N2<-> NO Si Cumple
```

```
KP5=10**(1*( -0.752364*log(Temp/1000) +0.124210e5/Temp - 0.260286e1 + (0.259556e-3)*Temp - (0.162687e-7)*Temp**2.0)) ! H2 + O2<-> H2O Si cumple
```

```
KP6=10**(1*( -(0.415302e-2)*log(Temp/1000) +0.148627e5/Temp - 0.475746e1 + (0.124699e-3)*Temp - (0.900227e-8)*Temp**2.0)) ! CO + O2<-> CO2 Si cumple
```

```
! Ecuaciones de Incógnitas
```

```
R(1) = (U(1) + U(5))*U(11)-14.4
```

```
R(2) = ( 2.0*U(2) + 2.0*U(6)+ U(7)+ U(9) )*U(11)- 24.9
```

```
R(3) = ( 2.0*U(1) + U(2)+ 2.0*U(4)+ U(5) + U(8) + U(9) + U(10) )*U(11) -2*20.625/(phi)
```

```
R(4) =( 2*U(3) + U(10) )*U(11) - 2*3.773*20.625/(phi)
```

```
R(5) = (U(7)*Pre**(0.5))/(U(6)**(0.5)) - KP1
```

```
R(6) = U (8)*Pre**(0.5)/( U (4)**(0.5)) - KP2
```

```
R(7) = U (9)/((U (4)**(0.5))*U (6)**(0.5)) - KP3
```

```
R(8) = U (10)/((U (4)**(0.5))*U (3)**(0.25)) - KP4
```

```
R(9) = U (2)/((U (4)**(0.5))*U (6)*Pre**(0.5))- KP5
```

```
R(10) = U (1)/((U (4)**(0.5))*U (5)*Pre**(0.5))- KP6
```

```
R(11) = U(1) + U(2)+ U(3) + U(4)+ U(5) + U(6)+U(7) + U (8)+U (9) + U (10)-1.0
```

```
return
```

```
end subroutine RESIDUALS
```

```
!Subrutine para evaluar la matriz del jacobiano
```

```
subroutine JACOBIANO(lflag,phi,Temp,N,U,A)
```

```
implicit none
```

```
double precision diff , EPSL,phi,Temp
```

```
integer i , lflag , j , N
```

```
double precision A(N,N) , U(N), uj(N), fun(N), funj(N)
```

```
parameter (EPSL=1.0e-5)
```

```

!
do i = 1 , N
  do j = 1 , N
    A(i,j) = 0.0
  end do
end do
!
if ( Iflag>0 ) then
!  Evaluar la matriz del jacobiano numéricamente
do i = 1 , N
  uj(i) = U(i)
end do

call RESIDUALS(N,phi,Temp,U,fun)

do i = 1 , N
  diff = DMAX1(EPSSL,DABS(EPSSL*U(i)))
  uj(i) = U(i) + diff

call RESIDUALS(N,phi,Temp,uj,funj)
  do j = 1 , N
    A(j,i) = (funj(j)-fun(j))/diff
  end do
  uj(i) = U(i)
end do
end if
return
end subroutine JACOBIAN

```

```

subroutine LUDCMP(A,N,Np,Indx,D,phi,Temp)
implicit none
integer N , Np , Indx(N) , NMAX
double precision D , A(Np,Np) , TINY, phi,Temp
parameter (NMAX=500,TINY=1.0E-20)
integer i , imax , j , k
double precision aamax , dum , sum , vv(NMAX)

```

```

D = 1.
do i = 1 , N
  aamax = 0.0
  do j = 1 , N
    if ( ABS(A(i,j))>aamax ) aamax = ABS(A(i,j))
  end do

```

```

        if ( aamax==0.0 ) then
! write(*,*) "Matriz singular "
        return
        else
        vv(i) = 1./aamax
        end if
end do

do j = 1 , N
do i = 1 , j - 1
    sum = A(i,j)
    do k = 1 , i - 1
        sum = sum - A(i,k)*A(k,j)
    end do
    A(i,j) = sum
end do

aamax = 0.0
do i = j , N

    sum = A(i,j)
    do k = 1 , j - 1
        sum = sum - A(i,k)*A(k,j)
    end do
    A(i,j) = sum
    dum = vv(i)*ABS(sum)
    if ( dum>=aamax ) then
        imax = i
        aamax = dum
    end if
end do

if ( j/=imax ) then
do k = 1 , N
    dum = A(imax,k)
    A(imax,k) = A(j,k)
    A(j,k) = dum
end do
D = -D
vv(imax) = vv(j)
end if
Indx(j) = imax
if ( A(j,j)==0.0 ) A(j,j) = TINY
if ( j/=N ) then

```

```

        dum = 1./A(j,j)

        do i = j + 1 , N
            A(i,j) = A(i,j)*dum
        end do
    end if
end do
end subroutine LUDCMP

subroutine LUBKSB(A,N,Np,Indx,B,phi,Temp)
implicit none
integer N , Np , Indx(N)
double precision A(Np,Np) , B(N) ,phi, Temp
integer i , ii , j , ll
double precision sum
ii = 0
do i = 1 , N
    ll = Indx(i)
    sum = B(ll)
    B(ll) = B(i)
    if ( ii/=0 ) then
        do j = ii , i - 1
            sum = sum - A(i,j)*B(j)
        end do
    else if ( sum/=0.0 ) then
        ii = i
    end if
    B(i) = sum
end do
do i = N , 1 , -1
    sum = B(i)
    do j = i + 1 , N
        sum = sum - A(i,j)*B(j)
    end do
    B(i) = sum/A(i,i)
end do
end subroutine LUBKSB

```