

Modelo termodinámico de un motor de ignición por chispa que funciona con mezclas de gasolina con aditivos oxigenantes

Jorge Roberto Mendiola-Goné¹, Eduardo Medina-Hernández²

¹Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, México. Email: ingjrmg@gmail.com

²Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, México. Email: emhtf@unam.mx

Resumen

Se utilizó un modelo termodinámico cero dimensional de dos zonas con el objetivo de elaborar un código que permita predecir el comportamiento de un motor de ignición por chispa experimental que funciona con gasolina y con mezclas con aditivos oxigenantes. Se utilizaron como ecuaciones de gobierno la ley de conservación de masa, la ecuación de estado de los gases ideales y la primera ley de la termodinámica. Además, se empleó la segunda ley de la termodinámica para realizar un análisis de generación de entropía. Se consideraron veinte especies químicas en los productos de combustión con el fin de observar el comportamiento de algunos radicales de los tipos CH, entre otros, al usar relaciones de equivalencia estequiométrica altamente ricas. Se empleó el mecanismo extendido de Zeldovich para el cálculo de las emisiones de NO_x. El código de programación se realizó en Fortran90 y los resultados se comparan favorablemente con los obtenidos experimentalmente.

Palabras clave: Motores de combustión, aditivos oxigenantes, generación de entropía, emisiones contaminantes.

Abstract

A zero-dimensional two-zone thermodynamic model was used in order to build a programming code that allows to predict the performance of an experimental spark ignition engine that works with both gasoline and gasoline-oxygenates additives blends. The conservation of mass law, the ideal gas equation of state and the first law of thermodynamics were used as government equations. Additionally, the second law of thermodynamics was used to perform an entropy generation analysis. Twenty chemical species in the combustion products were taken into account for the chemical analysis in order to observe the behavior of some radicals of the CH type, among others, when using highly rich stoichiometric equivalence ratios. The extended Zeldovich mechanism was used to calculate the NO_x emissions. The programming code was built in Fortran90 and the results are well compared with the experimental data.

Keywords: Combustion engines, oxygenates additives, entropy generation, polluting emissions.

Nomenclatura:

			k^+, k^-	constantes de velocidad de reacción	(cm ³ /mol s)
			L	carrera del pistón	(m)
			M	peso molecular	(g/mol)
a	constante de la eficiencia de la combustión	(1)	m	masa de los gases dentro del pistón	(g)
b	longitud de la biela	(m)	\dot{m}	flujo másico	(g/s)
C	coeficiente de pérdidas por fugas blowby	(1/s)	n	constante de la forma del motor	(1)
c_p	calor específico a presión constante	(J/g K)	n	número de moles	(mol)
c_v	calor específico a volumen constante	(J/g K)	P	presión instantánea dentro del pistón	(Pa)
ct_{ij}	coeficientes termodinámicos	(1)	pO	porcentaje en masa de oxígeno del combustible	(1)
D	diámetro interior del pistón	(m)	Q_p	calor perdido	(J)
h	entalpía específica	(J/g)	\dot{Q}	flujo de calor perdido	(W)
h_p	entalpía específica de la masa perdida por fugas	(J/g)	R	constante específica de los gases ideales	(J/g K)
h_c	coeficiente convectivo de calor	(W/m ² K)			

R_n	velocidad de reacción	(mol/cm ³ s)
r	relación de compresión	(1)
S	entropía	(J/K)
S_{gen}	entropía generada	(J/K)
s	entropía específica	(J/g K)
s_p	entropía de la masa perdida por fugas	(J/g K)
T	temperatura instantánea	(K)
T_a	temperatura de flama adiabática	(K)
T_{pr}	temperatura promedio	(K)
U	energía interna	(J)
u	energía interna específica	(J/g)
V	volumen instantáneo dentro del pistón	(m ³)
V_{min}	volumen en el PMS	(m ³)
v	volumen específico	(m ³ /g)
v_{pr}	velocidad promedio	(m/s)
W	trabajo realizado	(J)
x	fracción de masa quemada	(1)
y	fracción molar	(1)
α	número de átomos de carbono en el combustible	(1)
β	número de átomos de hidrógeno en el combustible	(1)
γ	número de átomos de oxígeno en el combustible	(1)
δ	número de átomos de nitrógeno en el combustible	(1)
ε	relación estequiométrica molar	(1)
ε	relación L/2b	(1)
θ	ángulo instantáneo del cigüeñal	(rad)
θ_c	ángulo de inicio de la combustión	(rad)
θ_d	duración de la combustión	(rad)
v	proporción de nitrógeno en el aire	(1)
o	proporción de oxígeno en el aire	(1)
ρ	proporción gasolina-aditivo	(1)
Φ	relación de equivalencia estequiométrica	(1)
ω	velocidad angular del motor	(rad/s)

Subíndices:

a	relativo al aditivo oxigenante
b	relativo a la zona de gases quemados
e	relativo a las especies químicas producto de la combustión
g	relativo a la gasolina
u	relativo a la zona de gases no quemados
0	relativo a los valores en el PMI

1. Introducción

La situación actual en cuanto al uso de combustibles fósiles es cada vez más crítica ya que se depende de ellos para una gran cantidad de actividades. Con el fin de reducir las emisiones contaminantes de estos, se ha optado por utilizar aditivos oxigenantes.

En la Norma Oficial Mexicana NOM-016-CRE-2016, “Especificaciones de calidad de petrolíferos, con el objetivo de establecer las especificaciones de calidad de los petrolíferos en cada etapa de la cadena de producción y suministro”, se permite el uso del MTBE, ETBE y TAME como oxigenantes de gasolinas regular y premium hasta en un máximo de 2.7% de masa de oxígeno en el petrolífero, en todo el territorio nacional.

En Veracruz, México, el Instituto Mexicano del Petróleo se ha dado a la tarea de experimentar con mezclas de gasolina con diferentes aditivos oxigenantes. Para dichos experimentos se ha utilizado un motor monocilíndrico equipado con sensores para medir las variables más significativas durante su desempeño y sus emisiones contaminantes. Entre los trabajos realizados por González y Schifter, 2017 [1], y Schifter et al., 2017 [2-6] se ha trabajado con mezclas de gasolina con aditivos oxigenantes con contenidos de hasta un 20% en masa de oxígeno, con mezclas de gasolina-etanol-metanol con bajo contenido de oxígeno, con mezclas de gasolina con alcoholes, éteres y DMC con un 3.5 % en masa de oxígeno, con mezclas de MTBE con gasolina regular, con mezclas de gasolina con EtOH, ETBE y DMC a niveles de 2.8 % en masa de oxígeno, entre otras. En algunos resultados se observó que el uso de oxigenantes reduce los contenidos de hidrógeno y carbono, y que el contenido de oxígeno está asociado directamente con las emisiones de CO y CO₂, e inversamente asociado con emisiones NOx mientras que los combustibles con contenido de hidrógeno están directamente asociados con las emisiones de NOx e inversamente con las de CO₂. En cuanto al desempeño del combustible, se observó que para contenidos de 10% en masa de oxígeno y mayores, este depende principalmente del contenido de oxigenante.

Con el objetivo de elaborar un código de programación, denominado MICGA, que permita predecir el comportamiento y las emisiones del motor de ignición por chispa experimental utilizado en el IMP, alimentado con mezclas de gasolina con aditivos oxigenantes, en este trabajo se desarrolla un modelo termodinámico cero dimensional de dos zonas para el cual se consideran veinte especies químicas en los productos de combustión con el fin de observar el comportamiento de algunos radicales del tipo CH, entre otros, al usar relaciones de equivalencia estequiométrica altamente ricas. Además, se emplea la segunda ley de la termodinámica para realizar un análisis de generación de entropía.

2. Metodología

Para el modelo se hacen las siguientes consideraciones:

- No se considera el flujo en ninguna dimensión.
- El fluido de trabajo consiste en una zona de gases quemados (zona b) y otra de gases no quemados (zona u), las cuales son gases ideales en todo momento.
- La zona b es una mezcla de gases producto de la combustión.
- La zona u consiste en una mezcla de aire, vapor de combustible y gases residuales del ciclo anterior.

- En todo momento ambas zonas están divididas por un frente de flama infinitesimalmente delgado de forma esférica.
- Ambas zonas son sistemas termodinámicos con propiedades distintas y con interacciones de masa y energía entre sí mismos y sus alrededores comunes.
- La transferencia de calor hacia las paredes se da por la Ley de Enfriamiento de Newton.
- La presión es la misma para ambas zonas.
- Los gases quemados se encuentran en equilibrio químico durante la combustión y hasta el final de la combustión, que ocurre en parte de la carrera de expansión. Una vez que se ha quemado todo el combustible, se consideran gases congelados, esto quiere decir que su composición no cambia.
- Las propiedades del fluido se ponen en función del ángulo del cigüeñal y son resueltas numéricamente simplificando las ecuaciones de gobierno.
- Las ecuaciones de gobierno del modelo son la Ley de los Gases Ideales, la Ley de Conservación de Masa, y la Primera Ley de la Termodinámica:

$$Pv = RT \quad (1)$$

$$\frac{dm}{d\theta} = -\sum_{sal} \frac{\dot{m}}{\omega} = \frac{-cm}{\omega} \quad (2)$$

$$\frac{dU}{d\theta} = \frac{-dQ_p}{d\theta} - \frac{dW}{d\theta} - \frac{cm}{\omega} h_p \quad (3)$$

La liberación de energía química en función del ángulo del cigüeñal (θ) se representa con la función de Wiebe, como lo sugiere Heywood, 1988 [7]:

$$x(\theta) = 1 - \exp\left[-a\left(\frac{\theta - \theta_c}{\theta_d}\right)^{n+1}\right] \quad (4)$$

Integrando la ecuación (2) tenemos la masa en función de θ :

$$m(\theta) = m_0 \exp\left[\frac{-c}{\omega}(\theta - \theta_0)\right] \quad (5)$$

2.1. Análisis termodinámico

Para las variaciones de la energía interna en la ecuación (3) tenemos que:

$$\frac{dU}{d\theta} = m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = m \frac{du}{d\theta} + \frac{-cm}{\omega} [u_b x + u_u (1-x)] \quad (6)$$

Donde:

$$m \frac{du}{d\theta} = m \left[\frac{du_b}{d\theta} x + \frac{du_u}{d\theta} (1-x) + (u_b - u_u) \frac{dx}{d\theta} \right] \quad (7)$$

Diferenciando la ecuación (7) con respecto de θ y expresando en función de las temperaturas y la presión obtenemos:

$$m \frac{du}{d\theta} = m \left\{ \left(c_{pb} - \frac{Pv_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right) x \frac{dT_b}{d\theta} + \left(c_{pu} - \frac{Pv_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right) (1-x) \frac{dT_u}{d\theta} - \left[v_b \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} + \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right) x + v_u \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} + \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right) (1-x) \right] \frac{dP}{d\theta} + (u_b - u_u) \frac{dx}{d\theta} \right\} \quad (8)$$

Para las pérdidas de calor en la ecuación (3), suponiendo las áreas de transferencia de calor por Ferguson y Kirkpatrick [8], tenemos que:

$$\frac{dQ_p}{d\theta} = \frac{h_c}{\omega} \left[\frac{\pi D^2}{2} + \frac{4V}{D} \right] [(T_b - T_p)x^{1/2} + (T_u - T_p)(1-x)^{1/2}] \quad (9)$$

Donde el coeficiente h_c se predice con el método de Woschni, descrito por Heywood, 1988 [7]:

$$h_c = 3.26(v_{pr}P)^{0.8} T_{pr}^{-0.55} D^{-0.2} \quad (10)$$

Para el trabajo realizado en la ecuación (3), y con el volumen en función de θ dado por:

$$V(\theta) = V_{min} \left\{ 1 + \frac{r-1}{2} \left[1 - \cos\theta + \frac{1 - \sqrt{1 - (\epsilon \sin\theta)^2}}{\epsilon} \right] \right\} \quad (11)$$

Tenemos que:

$$\frac{dW}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} = P V_{min} \frac{r-1}{2} \sin\theta \left[1 + \frac{\epsilon \cos\theta}{\sqrt{1 - (\epsilon \sin\theta)^2}} \right] \quad (12)$$

Para la variación de las pérdidas de energía debido a fugas en la ecuación (3), Ferguson y Kirkpatrick, 2001 [8] asumen que:

$$h_p = h_b x^2 + h_u (1-x)^2 \quad (13)$$

Considerando la definición del volumen específico tenemos que:

$$v = \frac{V}{m} = v_b x + v_u (1-x) \quad (14)$$

Al diferenciar la ecuación (14) con respecto de θ y expresando en función de las temperaturas y la presión obtenemos:

$$\frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right) = \frac{v_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x \frac{dT_b}{d\theta} + \frac{v_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1-x) \frac{dT_u}{d\theta} + \left[\frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} x + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} (1-x) \right] \frac{dP}{d\theta} + (v_b - v_u) \frac{dx}{d\theta} \quad (15)$$

Aplicando la segunda ley de la termodinámica a la zona de gases no quemados y considerándola como un sistema abierto en el que existen pérdidas de masa debidas a la combustión y a las fugas tenemos que:

$$\dot{Q}_{pu} = -\omega m(1-x)T_u \frac{ds_u}{d\theta} \quad (16)$$

Al diferenciar la ecuación (16) con respecto de θ y expresando en función de las temperaturas y la presión obtenemos:

$$h_c \left(\frac{\pi D^2}{2} + \frac{4V}{D} \right) (1-x^{1/2})(T_u - T_p) = -\omega m(1-x) \left(c_{pu} \frac{dT_u}{d\theta} - v_u \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} \right) \quad (17)$$

Reacomodando las ecuaciones (3), (6), (8), (9), (12), (13), (15) y (17) se obtienen finalmente las ecuaciones a resolver:

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{f_{p1} + f_{p2} + f_{p3}}{f_{p4} + f_{p5}} \quad (18)$$

$$\frac{dT_b}{d\theta} = \frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{dP}{d\theta} - \frac{\varphi(T_b - T_p)}{c_{pb} x^{1/2}} - \frac{h_b - h_u}{c_{pb} x} \left[\frac{dx}{d\theta} - \frac{Cx}{\omega} (1-x) \right] \quad (19)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} - \frac{\varphi(1-x^{1/2})(T_u - T_p)}{c_{pu}(1-x)} \quad (20)$$

Donde:

$$f_{p1} = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right) \quad (21)$$

$$f_{p2} = \varphi \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x^{1/2} \frac{T_b - T_p}{T_b} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1-x^{1/2}) \frac{T_u - T_p}{T_u} \right] \quad (22)$$

$$f_{p3} = \frac{v_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_b - h_u}{c_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - \frac{Cx}{\omega} (1-x) \right] - [v_b - v_u] \frac{dx}{d\theta} \quad (23)$$

$$f_{p4} = \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right] x \quad (24)$$

$$f_{p5} = \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right] (1-x) \quad (25)$$

$$\varphi = \frac{h_c}{\omega m} \left(\frac{\pi D^2}{2} + \frac{4V}{D} \right) \quad (26)$$

Para resolver las ecuaciones (18)-(26), donde las incógnitas a encontrar son las temperaturas, la presión y sus derivadas, primero se deben determinar las propiedades termodinámicas mediante un análisis

químico para posteriormente emplear el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

2.2. Generación de entropía

Aplicando la segunda ley de la termodinámica al sistema tenemos que:

$$\frac{dS}{d\theta} \geq -\frac{1}{T_p} \frac{dQ_p}{d\theta} - \frac{Cm}{\omega} S_p \quad (27)$$

Con el fin de evaluar la irreversibilidad en el sistema se hace un análisis similar a lo visto por Beján, 1996 [9]. Reacomodando la ecuación (27) obtenemos:

$$\frac{dS_{gen}}{d\theta} = \frac{dS}{d\theta} + \frac{1}{T_p} \frac{dQ_p}{d\theta} + \frac{Cm}{\omega} S_p \geq 0 \quad (28)$$

Donde:

$$\frac{dS}{d\theta} = m \frac{ds}{d\theta} + s \frac{dm}{d\theta} \quad (29)$$

$$m \frac{ds}{d\theta} = m \left[\frac{ds_b}{d\theta} x + \frac{ds_u}{d\theta} (1-x) + (s_b - s_u) \frac{dx}{d\theta} \right] \quad (30)$$

$$s \frac{dm}{d\theta} = \frac{-Cm}{\omega} [s_b x + s_u (1-x)] \quad (31)$$

$$S_p = s_b x^2 + s_u (1-x^2) \quad (32)$$

Combinando las ecuaciones (28)-(32), diferenciando con respecto de θ y expresando en función de las temperaturas y la presión obtenemos la expresión para determinar la generación de entropía en función del ángulo del cigüeñal:

$$\frac{dS_{gen}}{d\theta} = m \left\{ \frac{c_{pb}}{T_b} x \frac{dT_b}{d\theta} + \frac{c_{pu}}{T_u} (1-x) \frac{dT_u}{d\theta} - \left[\frac{v_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x + \frac{v_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1-x) \right] \frac{dP}{d\theta} + (s_b - s_u) \left[\frac{dx}{d\theta} - \frac{Cx}{\omega} (1-x) \right] \right\} + \frac{1}{T_p} \frac{dQ_p}{d\theta} \geq 0 \quad (33)$$

2.3. Análisis químico

El combustible de composición $C_{\alpha}H_{\beta}O_{\gamma}N_{\delta}$, se considera como una mezcla de gasolina ($C_{\alpha_g}H_{\beta_g}O_{\gamma_g}N_{\delta_g}$) y de algún aditivo oxigenante ($C_{\alpha_a}H_{\beta_a}O_{\gamma_a}N_{\delta_a}$), mezclado con aire de composición O_2 , $v N_2$. Para determinar la composición de la mezcla de combustibles se emplea el parámetro p el cual indica la proporción que debe de haber entre gasolina y aditivo. Este parámetro está en función del porcentaje en masa de oxígeno de la mezcla de combustibles ya que así es como se maneja el uso de los aditivos oxigenantes en la NOM.

$$\alpha = \alpha_g + \rho \alpha_a \quad (34)$$

$$\beta = \beta_g + \rho \beta_a \quad (35)$$

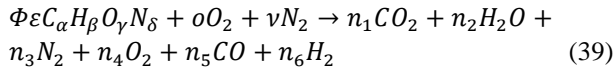
$$\gamma = \gamma_g + \rho \gamma_a \quad (36)$$

$$\delta = \delta_g + \rho \delta_a \quad (37)$$

Donde:

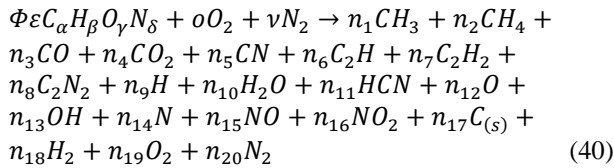
$$\rho = \frac{pOM_g}{\gamma_a M_O - pOM_a} \quad (38)$$

En la zona u las especies químicas a considerar son:



Para determinar las propiedades termodinámicas de la zona u se realiza el procedimiento descrito por Ferguson y Kirkpatrick, 2001 [8]. Los valores estándar de las propiedades de algunas especies químicas y algunos combustibles están disponibles en las Tablas de JANAF presentadas por Stull y Prophet, 1971 [10]. Para combustibles simples hay información presentada por Stull et al., 1969 [11], en el mismo formato como en las tablas de JANAF. Además, la compilación por Rossini et al., 1953 [12] es útil para hidrocarburos a temperaturas altas como 1500 K. Para facilitar los cálculos en el código de programación los valores estándar de las propiedades termodinámicas se determinarán utilizando coeficientes ajustados a curvas de polinomios

En la zona b se hace un procedimiento similar al descrito por Ferguson y Kirkpatrick, 2001 [8], pero considerando 20 especies con el fin de observar el comportamiento de radicales del tipo CH, entre otros:



Realizando las ecuaciones de equilibrio químico correspondientes en la ecuación (40) y mediante la introducción de las constantes de equilibrio químico necesarias se obtiene un sistema de 21 ecuaciones no lineales con 21 incógnitas:

$$\Phi \varepsilon \alpha = (y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + 2y_6 + 2y_7 + 2y_8 + y_{11} + y_{17})n \quad (41)$$

$$\Phi \varepsilon \beta = (3y_1 + 4y_2 + y_6 + 2y_7 + y_9 + 2y_{10} + y_{11} + y_{13} + 2y_{18})n \quad (42)$$

$$\Phi \varepsilon \gamma + 2o = (y_3 + 2y_4 + y_{10} + y_{12} + y_{13} + y_{15} + 2y_{16} + 2y_{19})n \quad (43)$$

$$\Phi \varepsilon \delta + 2v = (y_5 + 2y_8 + y_{11} + y_{14} + y_{15} + y_{16} + 2y_{20})n \quad (44)$$

$$\sum_{e=1}^{20} y_e = 1 \quad (45)$$

$$y_1 = c_1 y_{17} y_{18}^{3/2} \quad (46)$$

$$y_2 = c_2 y_{17} y_{18}^2 \quad (47)$$

$$y_3 = c_3 y_{17} y_9^{1/2} \quad (48)$$

$$y_4 = c_4 y_{17} y_{19} \quad (49)$$

$$y_5 = c_5 y_{17} y_{20}^{1/2} \quad (50)$$

$$y_6 = c_6 y_{17}^2 y_{18}^2 \quad (51)$$

$$y_7 = c_7 y_{17}^2 y_{18} \quad (52)$$

$$y_8 = c_8 y_{17}^2 y_{20} \quad (53)$$

$$y_9 = c_9 y_{18}^{1/2} \quad (54)$$

$$y_{10} = c_{10} y_{18} y_9^{1/2} \quad (55)$$

$$y_{11} = c_{11} y_{17} y_{18}^{1/2} y_{20}^{1/2} \quad (56)$$

$$y_{12} = c_{12} y_9^{1/2} \quad (57)$$

$$y_{13} = c_{13} y_{18}^{1/2} y_9^{1/2} \quad (58)$$

$$y_{14} = c_{14} y_{20}^{1/2} \quad (59)$$

$$y_{15} = c_{15} y_{19}^{1/2} y_{20}^{1/2} \quad (60)$$

$$y_{16} = c_{16} y_{19} y_{20}^{1/2} \quad (61)$$

Para resolver el sistema no lineal se emplea el método de iteración de Newton-Raphson. Al expresar las fracciones molares de 16 especies en función de las otras 4, dividiendo las ecuaciones (42), (43) y (44) entre la ecuación (41) e igualando a cero junto con la ecuación

(45) se obtiene finalmente un sistema de 4 ecuaciones lineales en función de 4 variables desconocidas:

$$F_1 = (3 + d_1)y_1 + (4 + d_1)y_2 + d_1y_3 + d_1y_4 + d_1y_5 + (1 + 2d_1)y_6 + 2(1 + d_1)y_7 + 2d_1y_8 + y_9 + 2y_{10} + (1 + d_1)y_{11} + y_{13} + d_1y_{17} + 2y_{18} = 0 \quad (62)$$

$$F_2 = d_2y_1 + d_2y_2 + (1 + d_2)y_3 + (2 + d_2)y_4 + d_2y_5 + 2d_2y_6 + 2d_2y_7 + 2d_2y_8 + y_{10} + d_2y_{11} + y_{12} + y_{13} + y_{15} + 2y_{16} + d_2y_{17} + 2y_{19} = 0 \quad (63)$$

$$F_3 = d_3y_1 + d_3y_2 + d_3y_3 + d_3y_4 + (1 + d_3)y_5 + 2d_3y_6 + 2d_3y_7 + 2(1 + d_3)y_8 + (1 + d_3)y_{11} + y_{14} + y_{15} + y_{16} + d_3y_{17} + 2y_{20} = 0 \quad (64)$$

$$F_4 = \sum_{e=1}^{20} y_e - 1 = 0 \quad (65)$$

Donde:

$$d_1 = \frac{-\beta}{\alpha} \quad (66)$$

$$d_2 = -\left(\gamma + \frac{2\theta}{\phi\varepsilon}\right)\frac{1}{\alpha} \quad (67)$$

$$d_3 = -\left(\delta + \frac{2\nu}{\phi\varepsilon}\right)\frac{1}{\alpha} \quad (68)$$

Para el cálculo de las constantes de equilibrio químico se utilizan coeficientes presentados por Natarajan, 2015 [13]. En el caso de la constante de equilibrio para OH, ésta no está presentada en el trabajo de Natarajan por lo que se emplea una expresión presentada por Olikara y Borman, 1975 [14].

2.4. Emisiones de NOx

Solo se consideró el NOx térmico el cual se predice por el mecanismo extendido de Zeldovich, descrito por Heywood, 1988 [7], en donde la velocidad de formación de la concentración de NO se expresa como:

$$\frac{d[NO]}{d\theta} = 2R_1 \frac{1-\alpha^2}{1+\alpha K} \quad (69)$$

Donde:

$$\alpha = \frac{[NO]}{[NO]_e} \quad (70)$$

$$K = \frac{R_1}{R_2 + R_3} \quad (71)$$

$$R_1 = k_1^+ [N_2]_e [O]_e = k_1^- [NO]_e [N]_e \quad (72)$$

$$R_2 = k_2^+ [N]_e [O_2]_e = k_2^- [NO]_e [O]_e \quad (73)$$

$$R_3 = k_3^+ [N]_e [OH]_e = k_3^- [NO]_e [H]_e \quad (74)$$

Los valores de las constantes de velocidad de reacción utilizados son:

$$k_1^+ = 1.8 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{38370}{T}\right) \quad (75)$$

$$k_1^- = 3.8 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{425}{T}\right) \quad (76)$$

$$k_2^+ = 1.8 \times 10^{10} T \exp\left(-\frac{4680}{T}\right) \quad (77)$$

$$k_2^- = 3.8 \times 10^9 \exp\left(-\frac{20820}{T}\right) \quad (78)$$

$$k_3^+ = 7.1 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{450}{T}\right) \quad (79)$$

$$k_3^- = 1.7 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{24560}{T}\right) \quad (80)$$

2.5. Datos de entrada del código

El código funciona de tal manera que se pueden cambiar los datos de funcionamiento del motor, así como la mezcla de combustible que se utiliza para alimentarlo. Los datos del motor utilizado corresponden a un motor monocilíndrico de ignición por chispa AVL 5401 con sistema de ignición por chispa con una bobina VW 6N0905104, con potencia máxima de 25 kW a 6000 rpm y con 4 válvulas por cilindro. A las constantes a y n utilizadas en la función de Wiebe se les asignan los valores típicos, 5 y 2 respectivamente, siendo a=7 la mejor eficiencia. Como combustible base se supone gasolina de composición C₇H₁₇ con los siguientes coeficientes termodinámicos:

- Ct_{g1} = 4.0652e+0
- Ct_{g2} = 6.0977e-2
- Ct_{g3} = -1.8801e-5
- Ct_{g4} = -3.588e+4
- Ct_{g5} = 1.545e+1

Una vez establecidos los datos de entrada y puesto en funcionamiento, el código pide los siguientes valores iniciales:

- Φ_i: Valor de Φ desde el que se harán las simulaciones.
- Φ_f: Valor de Φ hasta el que se harán las simulaciones.
- P₀: Presión inicial.
- T₀: Temperatura inicial.

La presión inicial corresponde a la presión experimental cuando el pistón se encuentra en el PMI (presión de succión).

3. Resultados

Utilizando solo gasolina (C_7H_{17}) como combustible se obtuvieron resultados similares a los obtenidos por Quintanar-Haro, 2016 [15], empleando datos del motor y condiciones iniciales iguales.

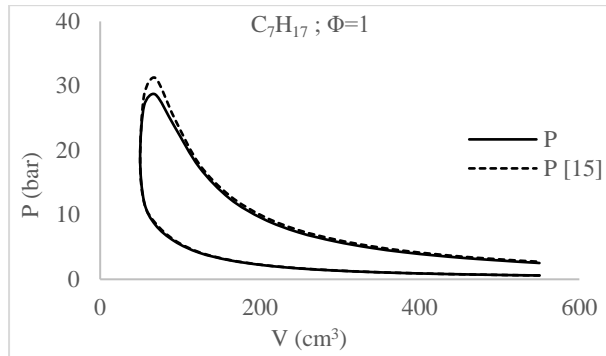


Figura 1. Comparación de diagrama P-V contra el obtenido por Quintanar-Haro, 2016 [15].

Las pequeñas variaciones se deben a que en este código se desarrolló un modelo más apegado a la realidad, utilizando un coeficiente convectivo de calor variable y dependiente de variables como la presión, temperatura, velocidad del motor y relación de calores específicos.

En cuanto a la entropía generada se observó que para mezclas pobres se tiene un incremento más pronunciado que para mezclas ricas. Una vez pasado el valor estequiométrico la curva comienza a estabilizarse.

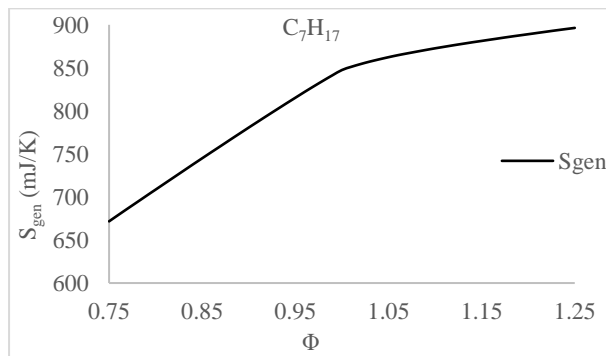


Figura 2. Entropía generada para diferentes valores de Φ .

En la figura 4 se muestran las emisiones de NO formado en los gases de escape en partes por millón de acuerdo a los resultados obtenidos por el código MICGA y experimentalmente. El error entre ambos es notorio debido a que el modelo de formación de NO, que es altamente dependiente de la temperatura, es muy susceptible a dichos cambios ya que se utiliza el mecanismo extendido de Zeldovich en donde las

ecuaciones son muy sensibles a la temperatura al tratarse de términos exponenciales, además de que solo se está considerando el mecanismo de formación de NO más dominante, que es el térmico, sin embargo, llegan a coincidir cerca del punto donde la temperatura de flama adiabática es máxima, cerca de $\Phi=1.05$.

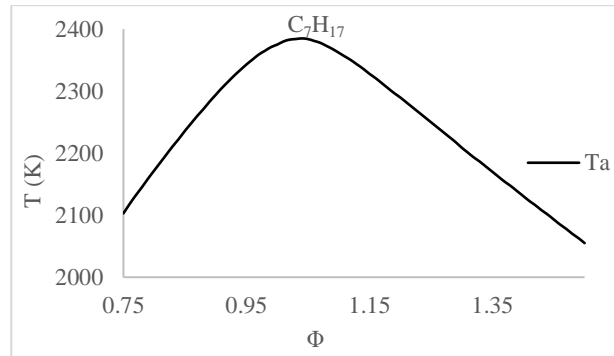


Figura 3. Temperatura de flama adiabática para diferentes valores de Φ .

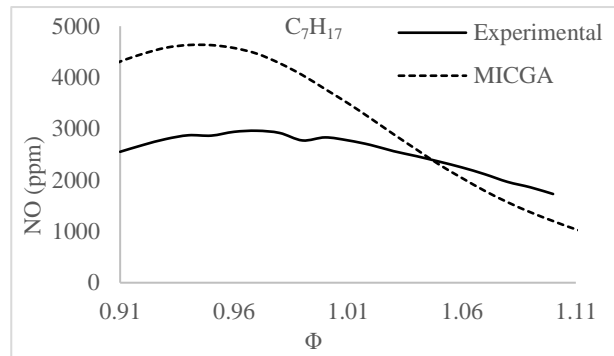


Figura 4. Variación de emisiones de óxido de nitrógeno para diferentes valores de Φ .

Se utilizaron EtOH, ETBE, MTBE, DMC y nitrometano (CH_3NO_2) para las simulaciones de mezclas de gasolina con aditivos oxigenantes, considerando 2.7% en masa de oxígeno para cada mezcla. Para los valores de los coeficientes termodinámicos de los aditivos ($ct_{a1} - ct_{a5}$) se utilizaron los correspondientes al nitrometano ya que fueron los únicos encontrados en tablas. Esto afecta muy poco ya que solo se consideran en la zona de gases no quemados y en proporciones muy pequeñas debido al porcentaje en masa de oxígeno (pO) y a la fracción de masa residual considerada.

Las figuras 5 y 6 muestra el ciclo termodinámico de cada mezcla de combustible con $\Phi=0.9$. Al igual que en los experimentos de Shifter et al., 2016 [6] todos se mantienen con una presión máxima entre 25 y 28 bar sin embargo las variaciones entre cual se eleva más entre uno con otro son diferentes.

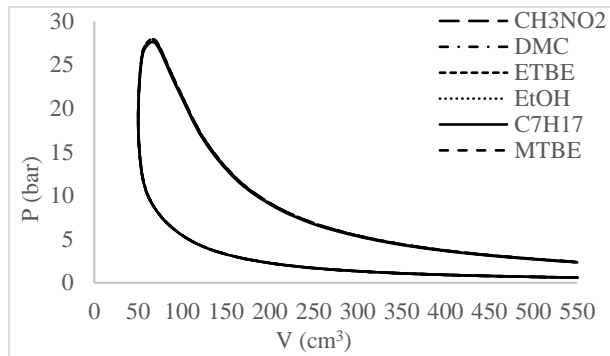


Figura 5. Comparación entre diagramas P-V para diferentes mezclas de combustibles con $\Phi=0.9$.

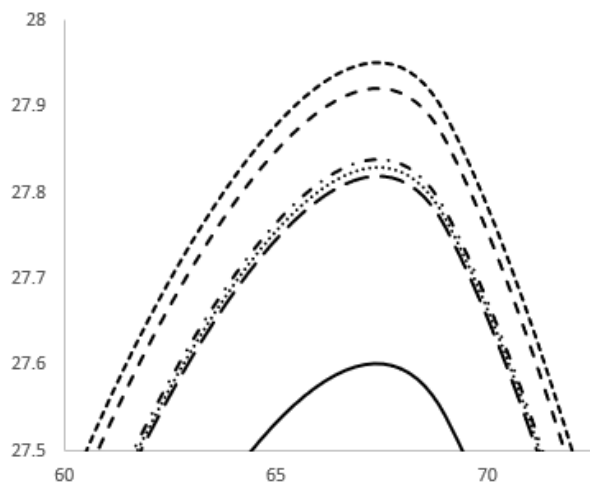


Figura 6. Acercamiento a la cresta de la figura 5.

En las temperaturas de flama adiabática calculadas se aprecia más la diferencia entre combustibles como se muestra en la figura 7, siendo las mayores alcanzadas por el ETBE y el MTBE, después casi paralelas el EtOH y el DMC, un poco más abajo el nitrometano y la más baja alcanzada por la gasolina sola.

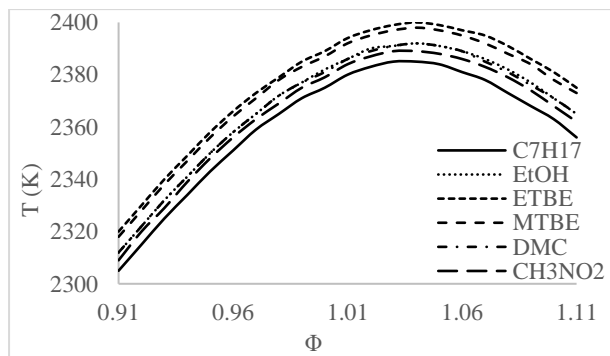


Figura 7. Comportamiento de la temperatura de flama adiabática para diferentes mezclas de combustibles.

La figura 8 muestra el comportamiento de la potencia generada donde, mientras los combustibles oxigenados van variando conforme aumenta Φ , la gasolina por si sola siempre se mantiene abajo.

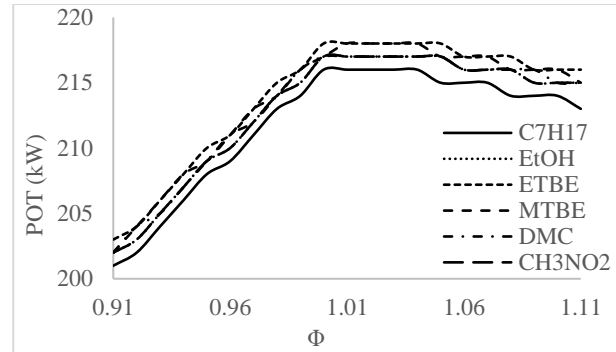


Figura 8. Comportamiento de la potencia generada para diferentes mezclas de combustibles.

En la figura 9 se muestra la entropía generada por los diferentes combustibles. Al igual que en la figura 7, el ETBE y el MTBE presentan los valores más altos y la gasolina sola el valor más bajo, sin embargo, en los valores intermedios el DMC presenta una mayor entropía generada que el nitrometano y este a su vez una mayor que el EtOH.

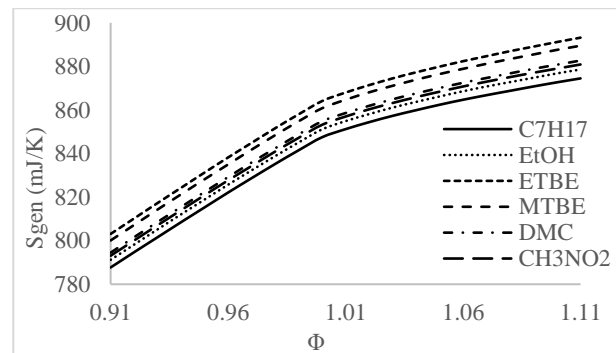


Figura 9. Comportamiento de la entropía generada para diferentes mezclas de combustibles.

La figura 10 muestra las emisiones de NO contra las de CO₂ para mezclas de gasolina con EtOH, ETBE y DMC, con porcentajes de oxígeno en el combustible de 3.5, 10 y 20%, donde al igual que en el trabajo de Shifter et al., 2017 [5] el comportamiento de las emisiones de NO disminuye conforme se aumenta el porcentaje de oxígeno en la mezcla de combustible. Sin embargo, el comportamiento de las emisiones de CO₂ varía con respecto a dicho trabajo en parte debido a que en el código de programación la cinética de este radical se considera en equilibrio.

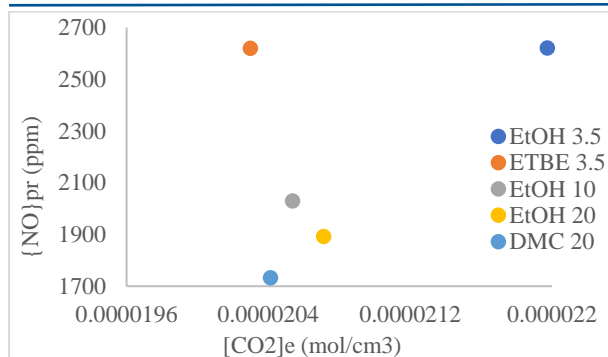


Figura 10. Comportamiento de emisiones de NO y CO₂ para diferentes mezclas de combustibles.

4. Conclusiones

Se generó un código de programación en lenguaje Fortran90 utilizando subrutinas desarrolladas y otras basadas en códigos de Fortran descritos por Ferguson y Kirkpatrick, 2001 [8] y Ferguson, 1986 [16] para simular la termodinámica de motores de combustión interna de ignición por chispa, así como la cinética de formación de NO en la zona de gases quemados mediante el modelo de formación de NO_x térmico, conocido como mecanismo de Zeldovich, descrito por Heywood. 1988 [7].

Tomando en cuenta consideraciones que se asemejan a las condiciones de operación de un motor instrumentado del cual se tienen sus datos de funcionamiento y datos experimentales de variables de interés, se obtuvieron resultados que se compararon con los resultados originales del motor, demostrando así que el código produce resultados suficientemente precisos y con un comportamiento esperado, logrando el objetivo de este trabajo, al tener un programa simple, rápido y preciso para simular las características principales de un motor.

El programa posee una gran eficiencia computacional y funciona de una manera muy sencilla y veloz. De igual manera se pueden modificar fácilmente las características principales del motor con el que se desee trabajar, así como la composición del combustible con el que se quiera experimentar. Gracias a esto se puede utilizar como prueba preliminar sobre una variedad de combustibles alternativos, relaciones aire combustible, dimensiones del cilindro, etc.

Algunos de los modelos aquí empleados, como la ley de quemado, tienen coeficientes de ajuste para la forma específica de un motor; en este trabajo se utilizan valores recomendados, sin embargo dicho modelo podría perfeccionarse basado en alguna aplicación en particular, así como incluir nuevos modelos al programa sobre

diferentes categorías, por ejemplo la dinámica de fluidos a través de las válvulas de escape y admisión, la fricción como función del régimen de giro, modelos de emisiones de hidrocarburos, modelo de retraso a la ignición, etc. Cualquiera de las categorías podría desarrollarse y modelarse como trabajo a futuro usando como base este modelo para el estudio de una aplicación en particular.

El programa puede utilizarse también de manera didáctica para entender cómo afectan los diversos parámetros de funcionamiento contemplados en el rendimiento general del motor. Es una manera de obtener una primera aproximación útil en diversas aplicaciones como predicciones generales de diseño.

5. Referencias

- [1] U. González, I. Schifter. "Oxygenated fuels properties and relationship with engine performance in port fuel injection engines". ILASS-Europe 2017, 28th Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, vol. 28, 2017.
- [2] I. Schifter, L. Díaz-Gutiérrez, R. Rodríguez-Lara, C. González-Macías, U. González-Macías. "Assessment of environmentally friendly fuel emissions from in-use vehicle exhaust: Low blend iso-stoichiometric GEM mixture as example". Environmental Monitoring and Assessment, vol. 189, n.º 5, pp. 243-260, 2017.
- [3] I. Schifter, U. González, L. Díaz, C. González-Macías, I. Mejía-Centeno. "Experimental and vehicle (on road) test investigation of spark-ignited engine performance and emissions using high concentration of MTBE as oxygenated additive". Fuel, vol. 187, pp. 276-284, 2017.
- [4] I. Schifter, U. González, L. Díaz, I. Mejía-Centeno, C. González-Macías. "Performance and emissions of gasoline-dual alcohol blends in spark-ignited single cylinder engine". International Journal of Engine Research, vol. 10, n.º 1, 2017.
- [5] I. Schifter, U. González, L. Díaz, G. Sánchez-Reyna, I. Mejía-Centeno, C. González-Macías. "Comparison of performance and emissions for gasoline-oxygenated blends up to 20 percent and implications for combustion on a spark-ignited engine". Fuel, vol. 208, pp. 673-681, 2017.
- [6] I. Schifter, U. González, C. González-Macías. "Effects of ethanol, ethyl-tert-butyl ether and dimethyl-carbonate blends with gasoline on SI engine". Fuel, vol. 183, pp. 253-261, 2016.

[7] Internal combustion engine fundamentals. J.B. Heywood, Nueva York, EE. UU.: McGraw-Hill, Inc., 1988.

[8] Internal combustion engines – Applied thermosciences (2a ed.). C.R. Ferguson, A.T. Kirkpatrick, Nueva Jersey, EE. UU.: John Wiley & Sons, Inc., 2001.

[9] Entropy generation minimization – The method of thermodynamic optimization of finite-size systems and finite-time processes. A. Bejan, Florida, EE. UU.: CRC Press LLC, 1996.

[10] JANAF thermochemical tables (2a ed.). D.R. Stull, H. Prophet, EE. UU.: National Standard Reference Data System, National Bureau of Standards, NSRDS-NBS 37, 1971.

[11] The chemical thermodynamics of organic compounds. D.R. Stull, E.F. Westrum Jr., G.C. Sinke, Nueva Jersey, EE. UU.: John Wiley & Sons, Inc., 1969.

[12] Selected Values of Physical and Thermodynamic Properties. F.D. Rossini, K.S. Pitzer, R.L. Arnett, Pensilvania, EE. UU.: American Petroleum Institute, 1953.

[13] K. Natarajan. “Computing equilibrium constants of chemical reactions – A new approach”. International Journal of ChemTech Research, vol. 7, n.º 5, pp. 2361-2367, 2015.

[14] C. Olikara, G.L. Borman. “Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Application to I.C. Engines”. SAE Paper 750468, 1975.

[15] A. Quintanar-Haro. “Estimación de emisiones producidas en un motor de combustión interna encendido por chispa mediante un modelo de zonas”. Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería, 2016.

[16] Internal combustion engines – Applied thermosciences. C.R. Ferguson, Nueva Jersey, EE.UU.: John Wiley & Sons, Inc, 1986.