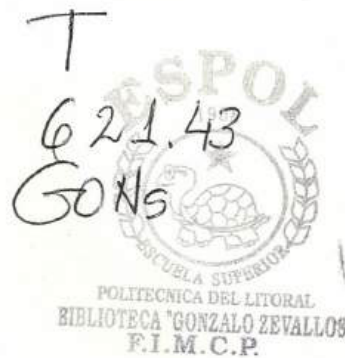




ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería en Mecánica y Ciencias de la Producción

**"Simulación Termodinámica Cero-Dimensional de un Motor de
Combustión Interna Monocilíndrico de Cuatro Tiempos de
Encendido por Chispa Trabajando con Gasolina"**

TESIS DE GRADO

Previo a la obtención del Título de:

INGENIERO MECÁNICO

Presentada por:

Esteban Daniel González Juez

GUAYAQUIL – ECUADOR

Año: 2001

AGRADECIMIENTO

A mi padre, por su motivante y
constante apoyo.

A todos quienes hacen la ESPOL,
por haberme permitido estudiar
esta fascinante carrera.

Al Ing. Jorge Duque, por su ayuda
en este trabajo.

DEDICATORIA

A MI PAPA

A MI MAMA

A MI HERMANA



TRIBUNAL DE GRADUACIÓN



Ing. Eduardo Rivadeneira P.
DECANO DE LA FIMCP



Ing. Jorge Duque R.
DIRECTOR DE TESIS



Ing. Francisco Andrade S.
VOCAL



Ing. Álvaro Tinajero M.
VOCAL

DECLARACIÓN EXPRESA

"La responsabilidad del contenido de esta Tesis de Grado, me corresponden exclusivamente; y el patrimonio intelectual de la misma a la ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL"

(Reglamento de Graduación de la ESPOL).

A handwritten signature in dark ink, reading "Esteban González", with a horizontal line drawn through the end of the signature.

Esteban D. González Juez

RESUMEN

La simulación por computadora se ha convertido en una de las más poderosas herramientas de la ingeniería. Las ventajas inherentes de la simulación de fenómenos físicos por computadora la han convertido en un paso obligatorio del proceso de diseño, lo que hace imprescindible que ésta forme parte del arsenal de herramientas de todo ingeniero.

Este trabajo tiene como objetivos principales efectuar una simulación termodinámica cero-dimensional de un motor de combustión interna monocilíndrico de cuatro tiempos de encendido por chispa trabajando con gasolina, y proporcionar a la Facultad de Ingeniería en Mecánica y Ciencias de la Producción un programa de computadora, escrito en Matlab, que pueda ser utilizado en cursos básicos del área de termofluidos.

Se simularán los procesos de compresión, combustión, expansión, escape, y admisión utilizando principios básicos de la termodinámica y resultados experimentales de la literatura. El modelo permitirá predecir la variación de la potencia, eficiencia térmica, eficiencia volumétrica, y emisiones de NO y

CO del motor al variar parámetros como: diámetro del cilindro, carrera, relación de compresión, diámetros de las válvulas de escape y admisión, adelanto de la apertura de la válvula de escape y retraso del cierre de la válvula de admisión, revoluciones por minuto, adelanto de la ignición, porcentaje de aire, temperatura en el colector de admisión, presión en el colector de admisión, y presión en el colector de escape.

Se presentará un análisis de la influencia de estos parámetros sobre el comportamiento del motor utilizando el modelo propuesto. Se compararán los resultados obtenidos con el modelo propuesto con aquellos obtenidos por modelos más complejos y mediante pruebas de laboratorio disponibles en la literatura.

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
RESUMEN.....	V
INDICE GENERAL.....	VII
INDICE DE FIGURAS.....	XII
INDICE DE TABLAS.....	XV
NOMENCLATURA UTILIZADA.....	XVII
INTRODUCCION.....	1
 CAPÍTULO 1	
1. FUNDAMENTOS.....	5
1.1. Primera ley de la termodinámica.....	6
1.2. Gases ideales.....	7
1.3. Ciclos ideales.....	8
1.4. Principales diferencias entre el ciclo ideal y el caso real.....	14
1.5. Procesos de compresión y expansión.....	17
1.6. Calores de reacción y combustibles.....	19

1.7. Principios de combustión.....	21
1.8. Temperatura de flama adiabática.....	23
1.9 Disociación.....	25
1.10. Modelaje de la combustión.....	26
1.11. Equilibrio químico.....	28
1.12. Principios de cinética química.....	30
1.13. Emisiones gaseosas en MCIECH.....	33
1.14. Algunas características de diseño, condiciones de operación del motor y parámetros de funcionamiento.....	36
1.15. Métodos numéricos.....	41

CAPÍTULO 2

2. EQUILIBRIO QUIMICO.....	45
2.1. Ley de acción de masas.....	47
2.2. Valores de las constantes de reacción.....	53
2.3. Cálculos de equilibrio químico.....	54
2.4. Descripción del algoritmo utilizado en el modelo.....	56
2.5. Temperatura de flama adiabática considerando equilibrio químico.....	61

CAPÍTULO 3

3. CONSTRUCCIÓN DEL MODELO.....	66
---------------------------------	----

3.1. Procedimiento general.....	69
3.2. Gas ideal.....	75
3.3. Propiedades termodinámicas de los gases y del combustible.....	76
3.4. Proceso de compresión.....	78
3.5. Proceso de combustión.....	80
3.5.1. Descripción del modelo de combustión.....	82
3.5.2. Fracción de masa de los gases quemados.....	84
3.5.3. Variación de la fracción de masa de los gases quemados con el ángulo de cigüeñal.....	86
3.5.4. Cálculo de la variación de presión durante la combustión.....	88
3.5.5. Duración de la combustión y velocidades de combustión.....	90
3.5.6. Procedimiento.....	95
3.6. Proceso de expansión.....	96
3.7. Procesos de escape y admisión.....	99
3.7.1. Descripción del modelo de escape-admisión.....	100
3.7.2. Flujo de masa a través de un orificio.....	104
3.7.3. Variación del área del orificio.....	105
3.7.4. Cálculo de la variación de presión durante el escape y la admisión.....	107

3.7.5. Eficiencia volumétrica.....	108
3.7.6. Procedimiento.....	110
3.8. Transferencia de calor dentro del cilindro.....	110
3.8.1. Algunas fórmulas del coeficiente de transferencia de calor.....	111
3.8.2. Cálculo de la variación de presión debida a la transferencia del calor del fluido a las paredes internas del cilindro.....	113
3.8.3. Procedimiento.....	116
3.9. Emisiones de monóxido de nitrógeno.....	117
3.9.1. Descripción del modelo.....	117
3.9.2. Cálculo de las emisiones de monóxido de nitrógeno....	119
3.10. Emisiones de monóxido de carbono.....	122
3.11. Resumen de las características del modelo.....	123

CAPÍTULO 4

4. VALIDACION DEL MODELO.....	126
4.1. Comparación entre resultados obtenidos con el algoritmo de equilibrio químico y el programa STANJAN.....	127
4.2. Comparación entre resultados obtenidos con el modelo propuesto y el programa AIRCYCLE.....	129

4.3. Comparación entre resultados obtenidos con el modelo propuesto y datos experimentales.....	133
--	-----

CAPÍTULO 5

5. RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSION.....	141
5.1. Mejora de las predicciones del modelo al ir aumentando su complejidad.....	142
5.2. Influencia de la relación de compresión.....	146
5.3. Influencia de las revoluciones por minuto.....	150
5.4. Influencia del adelanto de la ignición.....	155
5.5. Influencia del tamaño de las válvulas.....	161
5.6. Influencia de los ángulos de apertura de la válvula de escape y del ángulo de cierre de la válvula de admisión.....	165
5.7. Influencia de las condiciones externas.....	166
5.8. Influencia del porcentaje de aire.....	171

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	175
-------------------------------------	-----

APÉNDICES

BIBLIOGRAFIA

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pag.
Figura 1.1 Ciclo Otto de aire estándar.....	10
Figura 1.2 Ciclo Otto de aire-combustible.....	13
Figura 1.3 Comparación entre resultados de ciclo Otto de aire-combustible y resultados experimentales.....	14
Figura 1.4 Diagrama P-V de un MCIECH obtenido mediante experimentación.....	15
Figura 1.5 Equilibrio químico para la reacción $A=B$	29
Figura 1.6 Emisiones típicas de un MCIECH al variar la relación aire-combustible.....	36
Figura 1.7 Algoritmo del intervalo medio.....	42
Figura 2.1 Comparación de la temperatura de flama adiabática al asumir combustión completa y al asumir equilibrio químico..	47
Figura 3.1 Diagrama P-V típico de un MCIECH.....	74
Figura 3.2 Diagrama esquemático de una onda de combustión unidimensional estacionaria.....	83
Figura 3.3 Combustión en un recipiente rígido.....	83
Figura 3.4 Variación de la fracción de gases quemados con el ángulo de cigüeñal.....	88
Figura 3.5 Velocidades laminares de combustión de varios combustibles.....	91
Figura 3.6 Velocidad de combustión dependiente de la presencia de residuos.....	93
Figura 3.7 Variación de la composición durante la expansión según el modelo propuesto.....	98
Figura 3.8 Diagrama para el análisis del proceso de escape.....	101
Figura 3.9 Punto de inicio de entrada de mezcla fresca F en un diagrama P-V.....	109
Figura 3.10 Curva HP-RPM para diversas correlaciones del coeficiente de transferencia de calor entre el fluido y las paredes internas del cilindro.....	112

	Pag.
Figura 3.11 Distribución de temperaturas en °C en las paredes internas del cilindro de un MCIEC.....	115
Figura 3.12 Variación de la temperatura promedia de las paredes internas del cilindro con el ángulo de cigüeñal.....	116
Figura 3.13 Variación del NO durante la expansión según equilibrio químico y según cinética química.....	122
Figura 4.1 Temperatura de flama adiabática calculada con STANJAN y con equiv10.m.....	129
Figura 4.2 Efecto de la relación de compresión sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto.....	132
Figura 4.3 Efecto de las RPM sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto.....	132
Figura 4.4 Efecto del porcentaje de aire sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto.....	133
Figura 4.5 MCIECH monocilíndrico de relación de compresión variable PLINT TE-15/A.....	136
Figura 4.6 Efecto de la relación de compresión sobre el desempeño según datos experimentales y según el modelo propuesto...	137
Figura 4.7 Efecto de la relación de compresión sobre las emisiones según datos experimentales y según el modelo propuesto...	137
Figura 4.8 Efecto de las RPM sobre el desempeño según datos experimentales y según el modelo propuesto.....	138
Figura 4.9 Efecto de las RPM sobre las emisiones según datos experimentales y según el modelo propuesto.....	138
Figura 4.10 Efecto del adelanto de la ignición sobre el desempeño según datos experimentales y según el modelo propuesto...	139
Figura 4.11 Efecto del adelanto de la ignición sobre las emisiones según datos experimentales y según el modelo propuesto...	139
Figura 4.12 Efecto del porcentaje de aire sobre el desempeño según datos experimentales y según el modelo propuesto.....	140
Figura 4.13 Efecto del porcentaje de aire sobre las emisiones según datos experimentales y según el modelo propuesto.....	140
Figura 5.1 Curva HP-RPM para diversos modelos.....	143
Figura 5.2 Curvas HP-AIRE, SFC-AIRE, TMAX-AIRE, EFVOL-AIRE según combustión completa y según combustión en equilibrio químico.....	144
Figura 5.3 Curvas HP-CR, SFC-CR, TMAX-CR, EFVOL-CR.....	147
Figura 5.4 Curvas HP-RPM, SFC-RPM, HP-AIRE, SFC-AIRE para diversas relaciones de compresión.....	147
Figura 5.5 Disminución del consumo específico al aumentar la relación de compresión es más pronunciado al estar el acelerador semiabierto.....	149
Figura 5.6 Efecto de la relación de compresión sobre las emisiones.....	149

	Pag.
Figura 5.7 Diagrama P-V a diversas RPM.....	152
Figura 5.8 Efecto de las RPM sobre las emisiones.....	154
Figura 5.9 Diagrama P-V para diversos adelantos de la ignición.....	156
Figura 5.10 Curvas <i>HP-SA</i> , <i>SFC-SA</i> , <i>TMAX-SA</i> , <i>EFVOL-SA</i>	157
Figura 5.11 Variación típica del adelanto de la ignición con las RPM	158
Figura 5.12 Efecto de la variación del adelanto de la ignición con las RPM.....	159
Figura 5.13 Efecto del adelanto de la ignición sobre las emisiones.....	160
Figura 5.14 Diagrama P-V para diversos tamaños de válvulas (<i>DVA=DVE</i>).....	162
Figura 5.15 Diagrama P-V para diversos tamaños de válvulas (<i>DVA≠DVE</i>).....	163
Figura 5.16 Utilización de válvulas de admisión de mayor tamaño que las de escape mejora la potencia producida.....	164
Figura 5.17 Mejora de la potencia al utilizar un mayor tamaño de válvulas es más pronunciada a elevadas RPM.....	165
Figura 5.18 Diagrama P-V al variar la presión del colector de admisión...	167
Figura 5.19 Mejora de la potencia a determinada presión del colector de admisión al modificar el adelanto a la ignición.....	169
Figura 5.20 Variación del adelanto de la ignición con las RPM y la presión del colector de admisión.....	169
Figura 5.21 Diagrama P-V al variar la presión del colector de escape.....	171
Figura 5.22 Efecto del porcentaje de aire sobre las emisiones.....	173
Figura 5.23 Curva de Hook.....	174
Figura A1 Componentes esenciales de un MCIECH	
Figura A2 Diagrama de presiones en el interior del cilindro de un MCIECH	
Figura A3 Diagrama de distribución	
Figura A4 Combustión en MCIECH	

ÍNDICE DE TABLAS

	Pag.
Tabla 1.1 <i>Procesos termodinámicos de un ciclo Otto de aire estándar</i>	10
Tabla 1.2 Calores de reacción inferior por unidad de masa para algunos hidrocarburos líquidos.....	21
Tabla 2.1 Valores de los coeficientes de la fórmula de la constante de reacción $K_p(T)$	54
Tabla 3.1 Justificación de la utilización de la ecuación de estado de gases ideales en el modelo.....	76
Tabla 3.2 Coeficientes de la correlación de Woschni del coeficiente de transferencia de calor entre el fluido y las paredes internas del cilindro.....	113
Tabla 3.3 Escalas de tiempo de diversas reacciones químicas que ocurren durante la combustión y expansión.....	119
Tabla 3.4 Coeficientes para el cálculo de la constante específica de tasa de reacción de las reacciones del mecanismo térmico de producción de NO.....	121
Tabla 4.1 Fracciones volumétricas de los gases producto de la combustión según STANJAN y según equiv10.m.....	128
Tabla 4.2 Características de diseño y condiciones de operación del motor a analizar.....	131
Tabla 4.3 <i>Características de diseño del motor PLINT TE-15/A y condiciones de operación utilizadas para realizar las pruebas experimentales</i>	134
Tabla 5.1 Influencia de la relación de compresión sobre el desempeño del motor.....	148
Tabla 5.2 Influencia de las RPM sobre el desempeño del motor.....	153
Tabla 5.3 Influencia del adelanto de la ignición sobre el desempeño del motor.....	157
Tabla 5.4 Influencia del tamaño de las válvulas sobre el desempeño del motor.....	162

	Pag.
Tabla 5.5 Influencia del ángulo de apertura de la válvula de escape y del ángulo de cierre de la válvula de admisión sobre el desempeño del motor.....	166
Tabla 5.6 Influencia de la presión del colector de admisión sobre el desempeño del motor.....	168
Tabla 5.7 Influencia de la presión del colector de escape sobre el desempeño del motor.....	171
Tabla 5.8 Influencia del porcentaje de aire sobre el desempeño del motor.....	171

NOMENCLATURA UTILIZADA

Símbolo	Significado	Unidad utilizada en este trabajo
A	área de orificio; área	mm ²
AC	cantidad de carbono en la mezcla	kmol
AH	cantidad de hidrógeno en la mezcla	kmol
AO	cantidad de oxígeno en la mezcla; área máxima de orificio	kmol; mm ²
AN	cantidad de nitrógeno en la mezcla	kmol
AIRE	razón aire utilizado sobre aire estequiométrico	%
B	diámetro del cilindro o calibre	mm, m
c _p	calor específico a presión constante	kJ/kmol K
c _v	calor específico a volumen constante	kJ/kmol K
CR	relación de compresión	
DV	diámetro de la válvula	mm
DVA	diámetro de la válvula de admisión	mm
DVE	diámetro de la válvula de escape	mm
EFVOL	eficiencia volumétrica	%
G	función de Gibbs	kJ/kmol K
h	entalpía específica; coeficiente de transferencia de calor	kJ/kmol K; kW/m ² K
H	entalpía	kJ/K
H _{rp}	calor de reacción a presión constante	kJ/kmol
k	constante específica de rapidez de reacción	
K _p	constante de reacción o constante de equilibrio químico	
K	razón de calores específicos	
KP	razón de calores específicos de los productos de la combustión	
KR	razón de calores específicos de los reactivos	
L	longitud de la biela	mm

Símbolo	Significado	Unidad utilizada en este trabajo
M, m	masa	kg
MEP	presión media efectiva	atm
n	número de moles de determinada especie; fracción de masa de gases quemados	kmol
N	numero de moles totales; número total de elementos	kmol
NM	número de moles de mezcla fresca	kmol
NX	número de moles de residuos	kmol
P	presión	atm
PA	presión ambiental	atm
PM	presión en colector de admisión	atm
PMAX	presión máxima del ciclo	atm
PO	presión en colector de escape	atm
Q	flujo de calor	kJ
R	constante de gas universal	kJ/kmol K
R'	constante de gas específica	kJ/kg K
RPM	revoluciones por minuto	
s	entropía específica	kJ/kmol K
S	entropía; recorrido del pistón o carrera	kJ/kmol K; mm
SA	adelanto de la ignición	°APMS
SFC	consumo específico de combustible	kg/kW hora
t	tiempo	s
T	temperatura absoluta	K
TA	temperatura ambiental	K
TFA	temperatura de flama adiabática	K
TM	temperatura en el colector de admisión	K
TMAX	temperatura máxima del ciclo	K
TW	temperatura de las paredes internas del cilindro	K
u	energía interna específica	kJ/kmol
U	energía interna	kJ
Urp	calor de reacción a volumen constante	kJ/kmol
v	velocidad	m/s
vp	velocidad media del pistón	m/s
V	volumen	kJ/atm, cm ³
V _{DISP}	volumen desplazado	kJ/atm, cm ³
V _{PMI}	volumen en punto muerto inferior	kJ/atm, cm ³
V _{PMS}	volumen en punto muerto superior	kJ/atm, cm ³
W	trabajo	kJ
WCOMP	trabajo de compresión	kJ

Abreviatura	Significado
APMI	antes del punto muerto inferior
APMS	antes del punto muerto superior
cte	constante
DPMI	después del punto muerto inferior
DPMS	después del punto muerto superior
ecu	ecuación
MCI	motor de combustión interna
MCIEC	motor de combustión interna encendido por compresión
MCIECH	motor de combustión interna encendido por chispa
PMI	punto muerto inferior
PMS	punto muerto superior

INTRODUCCIÓN

Es una ventaja obvia la predicción del desempeño de un motor de combustión interna (MCI) sin tener que: primero construir el MCI, luego colocar en éste varios instrumentos, y finalmente llevar a cabo las pruebas experimentales. La simulación por computadora de un MCI no busca reemplazar la serie de pruebas experimentales que forman parte del proceso de diseño de un MCI, sino reducirlas, produciendo ahorros considerables de tiempo y dinero (13).

El propósito principal de este trabajo es realizar una simulación termodinámica de los procesos de compresión, combustión, expansión, escape, y admisión de un motor de combustión interna monocilíndrico de encendido por chispa trabajando con gasolina. Se busca predecir la variación de parámetros de funcionamiento del motor como: potencia, eficiencia térmica, eficiencia volumétrica, y emisiones de NO y CO del MCI al variar características de diseño y parámetros de funcionamiento como: diámetro del cilindro, carrera, relación de compresión, diámetros de las válvulas de escape y admisión, adelanto de la apertura de la válvula de

escape y retraso del cierre de la válvula de admisión, revoluciones por minuto, adelanto de la ignición, porcentaje de aire, temperatura en el colector de admisión, presión en el colector de admisión, y presión en el colector de escape.

Una simulación realista del flujo de gases en las diversas partes de un MCI debe considerar un flujo, generalmente turbulento, cuyas propiedades dependan del tiempo y de las tres coordenadas del espacio. Para resolver un problema de tal magnitud, se debe recurrir a técnicas de la mecánica de fluidos computacionales (CFD) (13). Principios de la termodinámica, mecánica de fluidos, química, transferencia de calor, y transferencia de masa deben combinarse para tratar un fenómeno de tal complejidad como la combustión en un MCI. La combustión en MCI es todavía un fenómeno no completamente entendido (9) (13). Lo mismo ocurre con los procesos de transferencia de calor en diversas partes del MCI, que son todavía temas de investigación. Debido a la complejidad de los fenómenos físicos que ocurren durante los procesos de un MCI, se deben realizar varias suposiciones para simplificar el problema y poder simular los procesos del MCI.

El tomar todo el MCI como sistema no es el procedimiento adecuado. Se recomienda (10) dividir tal sistema en tres subsistemas: colectores de admisión y escape, fluido refrigerante, y fluido dentro del cilindro. En este trabajo, el sistema a analizar es el fluido dentro del cilindro.

Las propiedades termodinámicas del fluido dentro del cilindro son funciones de la posición y del tiempo. Por ejemplo, es claro que, a un tiempo determinado, la temperatura en un punto cerca de la llama será mayor que en un punto cerca de las paredes del cilindro. Un modelo que considere tal variación es llamado modelo multi-dimensional. En tales modelos, gradientes de temperatura, presión, y de concentración de especies gaseosas son considerados. El problema es que la enorme cantidad de ecuaciones planteadas por un modelo multi-dimensional requiere el uso de super-computadoras y de mucho tiempo de computo (13). Por tal razón, los modelos multi-dimensionales se utilizan principalmente para la simulación del proceso de combustión en el diseño de cámaras de combustión. Modelos más sencillos deben utilizarse para la simulación de los procesos de compresión, combustión, expansión, escape, y admisión de un MCI cuando el objetivo es predecir el desempeño del MCI (13). Ya que éste es el propósito del presente trabajo, se recurrirá entonces a un modelo más sencillo. El más sencillo de todos es el llamado modelo cero-dimensional. Este considera que las propiedades termodinámicas del fluido dentro del cilindro son funciones del tiempo solamente, y no de su posición dentro del cilindro.

Fenómenos como la transferencia de calor del fluido dentro del cilindro hacia las paredes internas del cilindro y la combustión de un MCIECH serán modelados mediante la utilización de resultados experimentales.

El valor de los parámetros de funcionamiento de un MCI dependerá de sus características de diseño y condiciones de operación. No es el propósito de este trabajo realizar una predicción exacta del valor de los parámetros de funcionamiento de un MCI, sino predecir el comportamiento de tales parámetros al variar las características de diseño y condiciones de operación del MCI. Poniéndolo de otra forma, por ejemplo, el modelo no realizará una predicción exacta de la potencia para determinado adelanto de la ignición, lo que sí realizará es una curva de "Potencia vs. Adelanto de la Ignición" cuya forma será parecida a la obtenida por experimentación.

El capítulo 1 presenta una descripción rápida y somera de los fundamentos termodinámicos utilizados a lo largo del trabajo. El algoritmo de equilibrio químico utilizado en el modelo es detallado en el capítulo 2. El capítulo 3 detalla el modelo del MCIECH utilizado. Se presentan claramente las suposiciones realizadas para simplificar el caso real del MCIECH. Un paso importante en el planteamiento de todo modelo es su validación. Esto se presenta en el capítulo 4, donde los resultados del modelo propuesto son comparados con aquellos obtenidos por un modelo más sofisticado y por pruebas de laboratorio. El capítulo 5 presenta un análisis de la influencia de diversas características de diseño y condiciones de operación sobre el desempeño de un MCIECH utilizando el modelo propuesto. Este capítulo bien puede ser utilizado en un curso de MCI a nivel de pregrado.



CAPÍTULO 1

1 FUNDAMENTOS

El propósito principal de este trabajo es realizar una simulación termodinámica de los procesos de compresión, combustión, expansión, escape, y admisión de un motor de combustión interna (MCI) de encendido por chispa. La simulación de estos procesos, que se detallará en el capítulo 3, requiere la aplicación de varios principios y conceptos termodinámicos. Este capítulo busca que el lector tenga una idea clara de los principios y conceptos termodinámicos fundamentales aplicables a MCI, a través de someras descripciones, de forma que logre un mejor entendimiento del análisis termodinámico tratado posteriormente. El orden en que se presenta esta información es el utilizado generalmente en textos de termodinámica como (3) y (7).

La simulación termodinámica realizada permitirá la predicción de las emisiones de un MCIECH. Una introducción sobre emisiones gaseosas es necesaria, y se dará en la sección 1.10.

En la sección 1.13 se definirán conceptos básicos aplicables a MCI que se utilizarán a lo largo de este trabajo.

Este capítulo termina con una descripción del muy útil, en lo que a cálculos termodinámicos se refiere, algoritmo del intervalo medio.

Se supondrá que el lector posee conocimientos básicos sobre MCI. En el Apéndice se muestra un breve repaso.

La información presentada se obtuvo de las referencias (3), (7), (8), (9), (12), y (13).

1.1 Primera ley de la termodinámica

Para la descripción de los procesos de un MCI se utilizan ecuaciones que deben ser resueltas mediante técnicas numéricas. Se habla entonces de una metodología de paso a paso para resolver tales ecuaciones; comúnmente con incrementos de un grado, o menos, en el ángulo de cigüeñal (3) (13) (esto se detallará en la sección 3.1). La forma más conveniente de la primera ley de la termodinámica, para aplicar tal metodología, es la diferencial para sistemas abiertos donde los cambios en energía potencial se desprecian (13):

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} - \frac{dW}{dt} + \sum \frac{dH}{dt} \quad \text{Ecu. 1.1}$$

ó:

$$\frac{d(m \cdot u)}{dt} = \sum \frac{dQ_s}{dt} - P \cdot \frac{dV}{dt} + \sum h \cdot \frac{dm}{dt} \quad \text{Ecu. 1.2}$$



donde U es energía interna, Q flujo de calor, W trabajo, H entalpía, m masa, u energía interna específica, P presión, V volumen, h entalpía específica, y el subíndice s se refiere a las superficies a través de las cuales ocurre transferencia de calor fuera del sistema. La sumatoria de entalpías incluye el efecto de flujos entrando o saliendo del sistema.

1.2 Gases ideales

Un gas ideal está definido como una sustancia cuya ecuación de estado es (7) (8):

$$P \cdot V = N \cdot R \cdot T \quad \text{Ecu. 1.3}$$

donde P es la presión del gas, V el volumen del gas, N el número de moles totales del gas, R la constante de gas universal, y T la temperatura del gas.

Para gases reales, la ecuación de estado puede modificarse a:

$$P \cdot V = Z \cdot N \cdot R \cdot T \quad \text{Ecu. 1.4}$$

donde Z, el factor de compresibilidad del gas, puede considerarse como un factor de corrección en la ecuación de estado de un gas

publicó el primer análisis de este ciclo: el análisis del ciclo Otto de aire estándar (13).

Los modelos más simples para el análisis termodinámico de MCIECH y MCIEC se basan en ciclos de aire estándar. En un ciclo de aire estándar de MCI:

- Se toma como sistema de análisis el fluido dentro del cilindro del MCI.
- El sistema es cerrado, por lo que el fluido se usa repetidamente.
- El fluido de trabajo a través del ciclo es aire, y es modelado como un gas ideal.
- Todos los procesos son reversibles y adiabáticos.
- El proceso de combustión es reemplazado por un proceso reversible de transferencia de calor.
- Como el sistema es cerrado, el proceso de escape de la máquina real es reemplazado por una eliminación reversible de calor a volumen constante para regresar el fluido a su estado inicial antes de la compresión.

El ciclo Otto de aire estándar es usualmente utilizado como una base de comparación de los procesos que ocurren en un MCIECH. Se

asume que los procesos de compresión y expansión son isentrópicos. El proceso es como sigue (figura 1.1 y tabla 1.1):

Figura 1.1
Ciclo Otto de aire estándar (3)

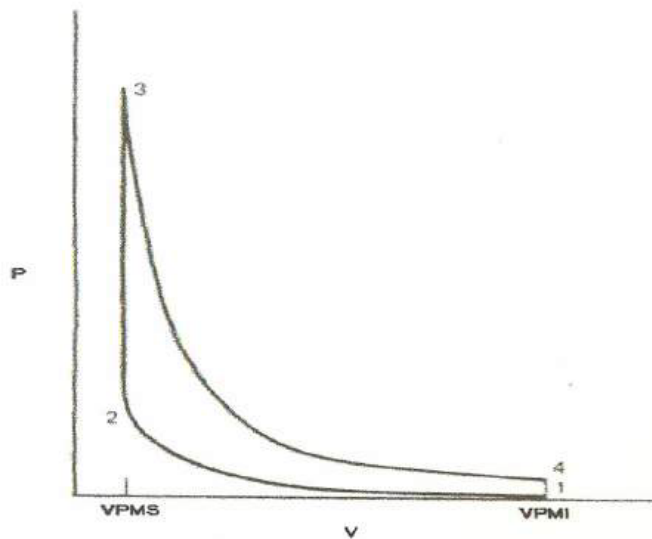


Tabla 1.1
Procesos termodinámicos de un ciclo Otto de aire estándar (13)

1-2	Compresión isentrópica de aire a través de una relación de volúmenes V_{PMI}/V_{PMS} llamada relación de compresión CR
2-3	Adición de calor Q_{23} a volumen constante
3-4	Expansión isentrópica de aire hasta el volumen original V_{PMI}
4-1	Rechazo de calor Q_{41} a volumen constante para completar el ciclo

La eficiencia del ciclo Otto η_{Otto} es:

$$\eta_{Otto} = \frac{W_{ciclo}}{Q_{23}} = \frac{Q_{23} - Q_{41}}{Q_{23}} = 1 - \frac{Q_{41}}{Q_{23}} \quad \text{Ecu. 1.5}$$

Al considerar el aire como un gas ideal con calores específicos c_v y c_p constantes, para una masa m de aire se tiene:

$$Q_{23} = m \cdot c_v \cdot (T_3 - T_2) \quad Q_{41} = m \cdot c_v \cdot (T_4 - T_1)$$

entonces:

$$\eta_{Otto} = 1 - \frac{T_4 - T_1}{T_3 - T_2} \quad \text{Ecu. 1.6}$$

Para los dos procesos isentrópicos 1-2 y 3-4, $T \cdot V^{K-1}$ es una constante. Entonces:

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{T_3}{T_4} = CR^{K-1} \quad \text{Ecu. 1.7}$$

donde K es la razón de calores específicos c_p/c_v . Entonces:

$$T_3 = T_4 \cdot CR^{K-1} \quad T_2 = T_1 \cdot CR^{K-1}$$

Sustituyendo en la ecuación 1.6 queda:

$$\eta_{Otto} = 1 - \frac{T_4 - T_1}{CR^{K-1} \cdot (T_4 - T_1)} = 1 - \frac{1}{CR^{K-1}} \quad \text{Ecu. 1.8}$$

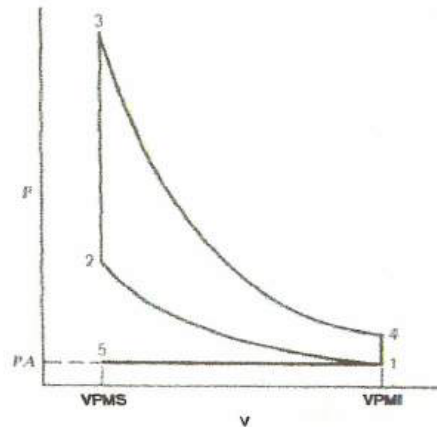
El valor de η_{Otto} depende entonces de la relación de compresión CR . A mayor CR , mayor será la eficiencia del MCIECH. Este efecto de CR sobre la eficiencia del MCIECH es observable en la práctica (12).

Nótese como a partir de un ciclo idealizado como el ciclo Otto de aire estándar se puede analizar el efecto de una característica de diseño como CR sobre el desempeño del motor. Pero, ¿cómo influyen otras características de diseño y condiciones de operación sobre el desempeño del motor? ¿Es posible utilizar cálculos termodinámicos para realizar tal análisis? ¿Cuán realistas son los resultados obtenidos? Estas preguntas se responderán poco a poco a lo largo de todo este trabajo.

La figura 1.2 (3) muestra un ciclo Otto de aire-combustible. Difiere del ciclo Otto de aire estándar por la inclusión de un proceso de escape de 1 a 5 y un proceso de admisión de 5 a 1 (el sistema ya no es cerrado), y por la consideración de una combustión adiabática a volumen constante de 2 a 3 en lugar de una adición de calor de una fuente externa a volumen constante.

Al incluir los efectos de la mezcla aire-combustible en el análisis termodinámico, se obtienen menores eficiencias térmicas η_{Otto} (13), aproximando los resultados teóricos al caso real. También, es posible analizar el efecto de la relación aire-combustible sobre el desempeño del motor.

Figura 1.2
Ciclo Otto de aire-combustible (3)



En otras palabras, un ciclo Otto de aire-combustible es un ciclo Otto de aire estándar que se ha modificado de forma que los resultados obtenidos se aproximen más al caso real. El ciclo Otto de aire-combustible también permite analizar la influencia de otras características de diseño y condiciones de operación sobre el desempeño del motor, además de las que permite el ciclo Otto de aire estándar. Pero, esto todavía no es suficiente.

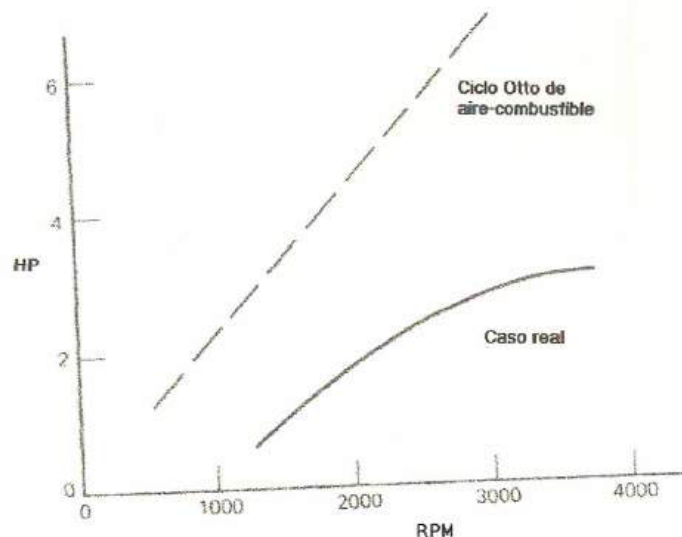
Este trabajo busca modificar aun más ese ciclo Otto de aire estándar de forma que se obtengan resultados más realistas y se añada la influencia de parámetros cuyo efecto sobre el desempeño del motor no es posible incluir en un análisis de ciclos ideales: diámetros de

las válvulas de escape y admisión, adelanto de la apertura de la válvula de escape y retraso del cierre de la válvula de admisión, revoluciones por minuto, y adelanto de la ignición.

1.4 Principales diferencias entre el ciclo ideal y el caso real

La figura 1.3 (3) compara las predicciones de un modelo de ciclo Otto aire-combustible con resultados experimentales. Queda claro que todavía queda mucho trabajo por hacer para aproximar la curva ideal a la experimental.

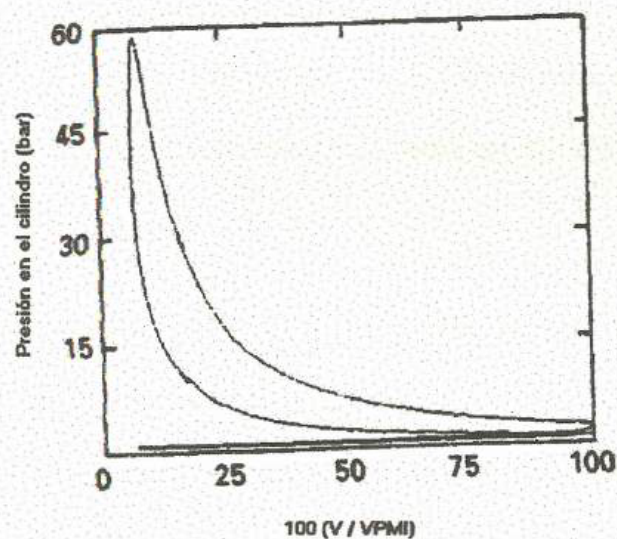
Figura 1.3
Comparación entre resultados de ciclo Otto de aire-combustible y resultados experimentales (3)



Para lograr esto, el ciclo Otto de aire-combustible debe ser modificado para lograr una mayor aproximación al comportamiento de motores reales. Se sugieren tres modificaciones: combustión

progresiva, procesos de escape y admisión que consideren el movimiento del pistón y el flujo de gases, y transferencia de calor (3). Con la inclusión de estas modificaciones, es de esperar que el diagrama P-V del ciclo Otto de aire-combustible mostrado en la figura 1.2 adquiriera una forma que se parezca más a los diagramas P-V obtenidos mediante mediciones en MCIECH, como el mostrado en la figura 1.4 (13).

Figura 1.4
Diagrama P-V de un MCIECH obtenido mediante experimentación (13)



El proceso de combustión de acuerdo con el ciclo Otto aire-combustible (proceso 2-3 figura 1.2) ocurre a volumen constante. El volumen dentro del cilindro de un MCIECH depende del ángulo de cigüeñal, el cual es función del tiempo. Para un determinado tiempo

t_1 el volumen dentro del cilindro es V_1 , y para un tiempo t_2 el volumen es V_2 . Ahora bien, si un proceso ocurre a volumen constante en un MCIECH, el tiempo no cambia, y se dice que tal proceso es instantáneo. Por tanto, la combustión de acuerdo con el ciclo Otto aire-combustible es instantánea. Realmente, la combustión en un MCIECH no es instantánea como lo indica el ciclo Otto aire-combustible. La chispa salta antes del PMS, y la combustión se completa algunos grados después del PMS. El tiempo requerido para la combustión depende de varios factores, siendo los más importantes las revoluciones por minuto del motor, la localización de la bujía, el tamaño y geometría de la cámara de combustión, y la composición de los gases reactivos (esto se tratará en detalle en la sección 3.5.5).

Se mencionó previamente que los ciclos ideales asumen que los procesos de un MCI son reversibles. Los procesos reversibles se caracterizan por ser adiabáticos, sin fricción, y sumamente lentos (7). Durante los procesos de escape y admisión reales, el pistón se mueve a una velocidad finita, no aproximadamente cero como se ha supuesto en los ciclos ideales. Las válvulas se abren y cierran gradualmente, no instantáneamente. Las velocidades a las cuales los gases fluyen dentro y fuera del volumen de control están controladas por diferencias de presión a través de las válvulas, por el

área efectiva de tales orificios, y por la velocidad del pistón. La termodinámica y la mecánica de fluidos se combinan para realizar un análisis de tales procesos.

Durante la admisión y parte de la compresión, el calor se transfiere de las paredes internas del cilindro hacia el fluido. La temperatura del fluido se eleva poco a poco durante la compresión, hasta que se llega a un punto en el cual, de ahí en adelante, el calor se transfiere del fluido hacia las paredes internas del cilindro. Esta pérdida de energía del fluido se traduce en una disminución de la eficiencia y de la potencia del motor que debe ser tomada en cuenta si se desean obtener resultados realistas (3) (13).

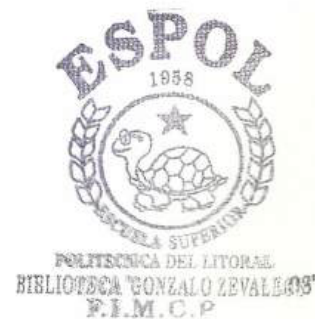
1.5 Procesos de compresión y expansión

Idealmente, los procesos de compresión y expansión son adiabáticos y reversibles, es decir, isentrópicos.

Al analizar los procesos de compresión y expansión isentrópicos entre un estado inicial i y un estado final e, se obtienen las siguientes ecuaciones para gases ideales:

$$\frac{T_e}{T_i} = \left(\frac{P_e}{P_i} \right)^{\frac{K-1}{K}} = \left(\frac{V_i}{V_e} \right)^{K-1} \quad \text{Ecu. 1.9}$$

donde se ha asumido un valor de K constante.



Realmente el valor de K disminuye al aumentar la temperatura, por lo que las ecuaciones previas no son exactas. La suposición de K constante producirá mayores errores para procesos de expansión desde temperaturas altas que para procesos de admisión desde temperaturas bajas (3). Esto quiere decir que al realizar los cálculos termodinámicos asumiendo K constante, el error será mayor en el proceso de expansión que en el de compresión.

El procedimiento más adecuado para analizar compresiones y expansiones se basa en el hecho de que estos procesos ocurren idealmente a entropía constante. Este procedimiento consiste en encontrar la entropía en el estado i y luego, utilizando alguna técnica iterativa, encontrar la temperatura en el estado e de forma que se igualen las entropías en los estados i y e , dada alguna otra propiedad del estado e . En otras palabras se debe resolver la siguiente ecuación (3):

$$\Delta S = S(P_e, T_e) - S(P_i, T_i) = 0$$

$$\Delta S = S(V_e, T_e) - S(V_i, T_i) = 0 \quad \text{Ecu. 1.10}$$

donde el estado i está totalmente determinado (se conoce su temperatura T_i y presión P_i o volumen V_i) y se conoce una propiedad del estado e (presión P_e o volumen V_e).

1.6 Calores de reacción y combustibles

Cuando una cantidad unitaria (un mol por ejemplo) de combustible y una cantidad estequiométrica de oxígeno (cantidad mínima requerida para quemar todo el combustible) reaccionan, los calores de reacción, H_{rp} y U_{rp} , representan la energía requerida para llevar a los productos de la combustión a las condiciones iniciales, 298 K, de los reactivos, la reacción llevándose a cabo a presión constante o volumen constante, respectivamente.

H_{rp} y U_{rp} son propiedades del combustible, referidas específicamente a mezclas con una cantidad de oxígeno estequiométrico, reaccionando a una temperatura constante estándar de 298 K.

La relación entre H_{rp} y U_{rp} , dadas en kJ/kmol, es (3):

$$H_{rp} - U_{rp} = 2480 \cdot (N_p - N_r) \cdot R \cdot T \quad \text{Ecu. 1.11}$$

donde N_p y N_r denotan, respectivamente, la cantidad de moles totales de las especies gaseosas en los productos y en los reactivos para una mezcla reactiva de combustible y oxígeno estequiométrico, R es la constante de gas universal en kJ/kmol K, y T es la temperatura en K (298 K en este caso).

El término calor de reacción inferior se refiere a valores de H_{rp} y U_{rp} en los que el H_2O de los productos es gaseoso. Se considera la

presencia de H_2O líquido al utilizar el término calor de reacción superior. Para el caso de análisis de MCI, debido a que los gases de escape están muy calientes, se tiene H_2O gaseoso en los productos (7).

Se puede demostrar teóricamente que los calores de reacción son aproximadamente independientes de la temperatura (3).

El valor de H_{rp} o U_{rp} de determinado combustible depende de su estado: líquido o gaseoso.

Cuando una reacción representa la formación de un compuesto a partir de sus elementos, el calor de reacción se lo denomina calor de formación. El calor de formación a partir de elementos en estado estándar se lo identifica con el superíndice $^\circ$ y se lo llama calor de formación estándar o entalpía estándar de formación. Por ejemplo, la reacción de formación del CO_2 es: $\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$. Los elementos, como el C y el O_2 del ejemplo, tienen calores de formación iguales a cero.

Los combustibles líquidos más utilizados en general son los hidrocarburos, de la forma química C_xH_y , donde el más común en MCIECH es la gasolina. La gasolina es una mezcla de varios hidrocarburos. Esta se la suele aproximar con la fórmula química del octano C_8H_{18} al realizar los cálculos termodinámicos y químicos (3)

(7). Los alcoholes, de la forma química $C_xH_yO_z$, tienen una aplicación mínima en MCIECH al compararlos con la gasolina.

La tabla 1.2 (7) muestra el valor del calor de reacción inferior por unidad de masa q_l de diversos hidrocarburos líquidos. Nótese la poca variación de q_l para los diversos combustibles.

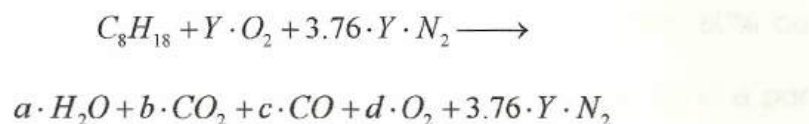
Tabla 1.2
Calores de reacción inferior por unidad
de masa para algunos hidrocarburos líquidos (7)

Combustible	q_l (kJ/kg)
n-Decano, $C_{10}H_{22}$	44240
Fuel oil (valor común)	42550
Gasolina (valor común)	43240
Queroseno (valor común)	42550
n-Octano, C_8H_{18}	43930
n-Pentano, C_5H_{12}	44482

1.7 Principios de combustión

Se define a la combustión como una reacción química donde se lleva a cabo la oxidación de un combustible, con desprendimiento de calor.

El presente trabajo trata principalmente sobre la combustión de gasolina. La combustión de un mol de gasolina (modelada con la fórmula C_8H_{18}) está dada por la siguiente ecuación (3) (7):



Ecu. 1.12

cuando no se consideran los efectos de la disociación. Los compuestos de la izquierda se denominan reactivos, y los compuestos de la derecha productos. Para el caso de aire húmedo existirá H_2O en los reactivos.

Aire (u oxígeno) estequiométrico es la cantidad de aire (u oxígeno) que se requiere para quemar completamente una unidad (un mol por ejemplo) de combustible. Todo el oxígeno suministrado en los reactivos es utilizado, y no aparece oxígeno libre en los productos ($d=0$). En este caso se habla de 100% aire (o 100% oxígeno). Para una cantidad de oxígeno estequiométrico, la ecuación anterior queda:



Nótese que $c=0$, $d=0$, y $Y=12.5$ moles. Tal valor de Y se lo designa como Y_{cc} (donde el subíndice cc significa combustión completa).

Comúnmente se requiere un exceso o deficiencia de aire en un MCI. Un exceso de 20% de aire o 120% de aire significa que se están utilizando $1.2 \cdot 12.5 = 15$ moles de aire por mol de gasolina. Para tal caso $c=0$ y $d \neq 0$. Tal mezcla con exceso de aire se denomina mezcla

pobre (en combustible). Una deficiencia de 20% de aire o 80% de aire significa que se están utilizando $0.8 \cdot 12.5 = 10$ moles de aire por mol de gasolina. En tal caso, $c \neq 0$ y $d = 0$. Se está hablando entonces de una mezcla rica (en combustible).

Los valores de a , b , c , y d se los calcula a partir de balances de masa.

El término combustión completa se lo utiliza de dos maneras. Primero, para referirse a una combustión con 100% de aire o más, donde ha ocurrido una oxidación completa del combustible, y la presencia de CO en los productos es nula cuando el combustible es un hidrocarburo C_xH_y . También se la utiliza para denominar a un proceso de combustión donde no ocurre disociación, y el uso de las ecuaciones previas es válido (3).

1.8 Temperatura de flama adiabática

Las ecuaciones gobernantes de los procesos de compresión 1-2 y de expansión 3-4 del ciclo Otto de aire-combustible (figura 1.2) están dadas por 1.9 y 1.10. Se muestra a continuación el planteamiento de las ecuaciones gobernantes del proceso de combustión 2-3 del ciclo Otto de aire-combustible.

Lo que se busca es determinar la temperatura al final de la combustión. Cuando se asume que la combustión es adiabática, esta temperatura se denomina temperatura de flama adiabática.

Combustión adiabática es aquella que se lleva a cabo sin transferencia de calor fuera del sistema. En un MCI tal sistema es el fluido dentro del cilindro, y se asume que la transferencia de calor del fluido hacia las paredes internas del cilindro es nula. La ecuación de la primera ley (ecuación 1.2) aplicada a un proceso de combustión adiabática ($dQ_s=0$) a volumen constante dentro del cilindro de un MCI ($-pdV/dt=0$ y $dm/dt=0$) queda (3) (13):

$$U_r(T_r) = U_p(T_p) \quad \text{Ecu. 1.13}$$

donde los reactivos (subíndice r) son la mezcla de aire y combustible, y los productos (subíndice p) una mezcla de gases conocida (conocemos las especies presentes y el número de moles de cada especie).

La temperatura de flama adiabática es la temperatura a la cual la energía interna de los productos iguala la energía interna de los reactivos. Esta se determina mediante el uso de técnicas iterativas para resolver la ecuación 1.13.

1.9 Disociación

Pruebas experimentales demuestran que los productos de la combustión no solo incluyen los gases mencionados previamente: CO_2 , CO , O_2 , H_2O y N_2 . Además de estos, existen muchos otros compuestos en los productos de la combustión (3) (13).

Una de las razones de que esto ocurra es que, a elevadas temperaturas, muchas de las moléculas de éstos gases se descomponen en otros compuestos. Por ejemplo, un mol de N_2 presente en los productos de la combustión, a elevadas temperaturas puede disociarse en dos moles de N :



Algo parecido ocurrirá con los otros compuestos gaseosos de los productos.

Se define a la disociación como un proceso químico, en el cual un compuesto se descompone en elementos más simples por la acción del calor (13).

Para que se produzca tal descomposición, cierta cantidad de energía es requerida, lo que trae consigo una disminución de la temperatura al final de la combustión, disminuyendo la eficiencia del ciclo.



La disociación también influye sobre el tipo y cantidad de especies gaseosas presentes al final del proceso de expansión de un MCI; es decir influye sobre las emisiones gaseosas del MCI.

Para poder analizar los efectos de la disociación en MCI es necesario llevar a cabo cálculos de equilibrio químico. Una introducción a este tema se dará en la sección 1.11. También deben quedar claros algunos conceptos de la cinética química; esto se discutirá en la sección 1.12. El capítulo 2 profundiza el tema de equilibrio químico.

1.10 Modelaje de la combustión

Se recomienda que esta sección sea leída posteriormente junto con la sección 3.5.

El modelo propuesto en este trabajo se lo puede considerar como un conjunto de submodelos; un submodelo para cada proceso del MCIECH: compresión, combustión, expansión, y escape-admisión.

El submodelo de la combustión es uno de los elementos clave en la simulación de los procesos de un MCI, y quizás el más complejo. Esto se debe a que en la realidad la combustión en un MCI ocurre en un flujo turbulento, tridimensional, y dependiente del tiempo (9) (13).

Existen tres formas de análisis de la combustión. En orden de aumento de complejidad son:

- Modelos cero-dimensionales
- Modelos cuasi-dimensionales
- Modelos multi-dimensionales

Los tres modelos pueden ser utilizados para estimar el comportamiento del MCI. Los modelos multi-dimensionales son los únicos capaces de introducir los efectos de la geometría de la cámara de combustión. Generalmente, los modelos cero-dimensionales y los casi-dimensionales se utilizan para simulaciones de MCI, y los multi-dimensionales, por su complejidad, para el diseño de cámaras de combustión solamente (13).

El modelo cero-dimensional será el utilizado en este trabajo. El modelo cero-dimensional para MCIECH divide al fluido en tres zonas: gas no quemado, gas quemado, y gas quemado adyacente a las paredes de la cámara de combustión. En un modelo cero-dimensional de combustión, la relación entre la fracción de masa de gases quemados y el ángulo de cigüeñal se basa en observaciones empíricas (13). Este modelo resulta muy útil para realizar la predicción de las emisiones (13).

Los modelos cuasi-dimensionales y multi-dimensionales son considerablemente más complejos en comparación con los modelos

cero-dimensionales. La referencia (13) presenta una breve descripción de estos modelos.

1.11 Equilibrio químico

Cuando hay equilibrio químico, la rapidez a la que los productos de una reacción química se forman a partir de los reactivos es igual a la rapidez a la que los reactivos se producen a partir de los productos.

Imagínese que se tiene una reacción sencilla:



y su inversa:



donde RR_{AB} es la rapidez de reacción de $A \rightarrow B$, y RR_{BA} es la rapidez de reacción de $B \rightarrow A$, k_f es la constante específica de la reacción $A \rightarrow B$, k_b es la constante específica de la reacción $B \rightarrow A$, $[A]$ es la concentración de la especie A, y $[B]$ es la concentración de la especie [B].

Ahora, supóngase que la reacción se inicia con el compuesto A puro. Como A reacciona para formar el compuesto B, la concentración de A disminuye, en tanto que la concentración de B se incrementa (figura 1.5 a). A medida que $[A]$ decrece, la rapidez de la reacción

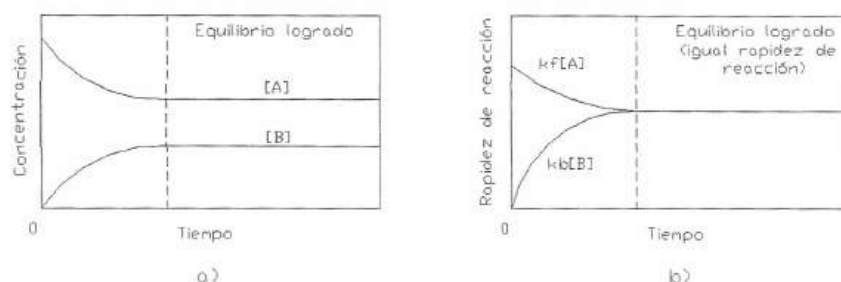
hacia adelante decrece (figura 1.5 b). En forma semejante, a medida que [B] se incrementa, la rapidez de la reacción inversa aumenta. Finalmente, la reacción llega a un punto en el cual la rapidez de las reacciones hacia delante y atrás son la misma (figura 1.5 b); los compuestos A y B están en equilibrio. Por consiguiente en el equilibrio:

$$k_f \cdot [A] = k_b \cdot [B] \quad \text{Ecu. 1.14}$$

Reordenando esta ecuación tenemos que:

$$\frac{[B]}{[A]} = \frac{k_f}{k_b} = cte \quad \text{Ecu. 1.15}$$

Figura 1.5
Equilibrio químico para la reacción A=B (15)



Una vez establecido el equilibrio, las concentraciones de A y de B no cambian. Esto no significa que A y B dejen de reaccionar. Por el contrario, el equilibrio es dinámico. El compuesto A aún se convierte en el compuesto B, y el B en el A, pero ambos procesos se realizan a la misma rapidez. Para indicar que la reacción se efectúa hacia delante y en dirección inversa, se utiliza una flecha doble:



o también un signo de igualdad:



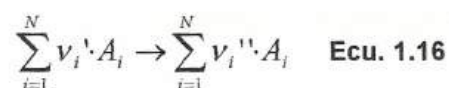
1.12 Principios de cinética química

Todas las reacciones químicas, ya sea la hidrólisis o la combustión, requieren cierto tiempo, dependiendo de las condiciones del sistema. Es decir, ocurren a una determinada rapidez. En ocasiones, como durante el proceso de combustión de un MCI, esta rapidez es muy grande y puede asumirse como infinita (9). Otras veces, la suposición de rapidez infinita produce resultados poco realistas, como durante el proceso de expansión, y debe recurrirse a la teoría de la cinética química (13).

La rapidez a la que ocurre una reacción determinada dependerá de: concentración de los compuestos químicos, temperatura, presión, presencia de un catalizador o inhibidor, y efectos de radiación (9).

La rapidez de reacción puede expresarse en términos de la concentración de cualquier reactivo como la rapidez de disminución de la concentración de ese reactivo (la rapidez de consumo de ese reactivo). También puede expresarse en términos de la concentración del producto como la rapidez de aumento de la concentración de ese producto. Una unidad convencional para la rapidez de reacción es moles/m³ s.

Una reacción química de un solo paso de complejidad arbitraria puede representarse por la siguiente ecuación estequiométrica:



donde ν_i' son los coeficientes estequiométricos de los reactivos, ν_i'' son los coeficientes estequiométricos de los productos, A la especificación arbitraria de todas las especies químicas, y N el número total de compuestos involucrados.

La ley de acción de masas dice que la rapidez de desaparición de una especie química es proporcional al producto de las concentraciones de las especies químicas reactivos, cada

concentración elevada a una potencia igual al correspondiente coeficiente estequiométrico. Entonces la rapidez de reacción RR está dada por (7):

$$RR = k \cdot \prod_{i=1}^N [A_i]^{v_i'} \quad \text{Ecu. 1.17}$$

donde $[A_i]$ indica la concentración de la especie A_i , y k es una constante de proporcionalidad llamada constante específica de rapidez de reacción. Para una reacción química determinada, k es independiente de la concentración $[A_i]$ y depende solamente de la temperatura. En general, k se expresa como (7):

$$k = B \cdot T^\alpha \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot T}\right) \quad \text{Ecu. 1.18}$$

donde BT^α representa la frecuencia de colisión y el término exponencial es el factor de Boltzmann, que especifica la fracción de colisiones que tienen una energía mayor a la energía de activación E_a . Tal energía de activación es la energía requerida para que ocurra la reacción; esto es, es la energía requerida para mover los reactivos sobre la barrera de energía de manera que la reacción comience (9).

La rapidez neta de producción de A_i es entonces (7):

$$\frac{d[A_i]}{dt} = (v_i'' - v_i') \cdot RR = (v_i'' - v_i') \cdot k \cdot \prod_{i=1}^N [A_i]^{v_i'} \quad \text{Ecu. 1.19}$$

Se utilizan generalmente técnicas numéricas para resolver esta ecuación.

Es de resaltar que para una reacción química que procede en determinada dirección, la constante específica de rapidez se la denomina constante específica de rapidez hacia delante, y se le añade el subíndice f o el superíndice +. La constante específica de rapidez hacia atrás, a la cual se le añade el subíndice b o el superíndice -, se referirá a la misma reacción química pero en la otra dirección, y tendrá un valor diferente.

1.13 Emisiones gaseosas en MCIECH

El término emisiones se refiere a los productos de la combustión, detectados en el escape, que contribuyen a la contaminación ambiental.

Se entiende por contaminación ambiental la acumulación en el aire de productos tóxicos que pueden provocar perjuicios graves en los seres humanos, animales, y vegetación.

Tres son las principales emisiones gaseosas de los MCI: monóxidos de nitrógeno NO_x , dióxido de carbono CO , e hidrocarburos HC .

Durante la combustión, el monóxido de nitrógeno NO es el único óxido de nitrógeno que se forma. Pero, a medida que el NO se enfría

puede ser oxidado a NO_2 . Para referirse a esta mezcla de NO y NO_2 se utiliza el símbolo NO_x . Subsecuentemente, el NO se oxidará a NO_2 en el ambiente, y es éste NO_2 el que reacciona con hidrocarburos no quemados HC en presencia de la luz ultravioleta para formar el smog fotoquímico (13).

El CO se concentra más en el lado de mezclas ricas (sección 1.7), ya que la combustión no es completa. Con mezclas pobres, el CO está siempre presente debido a la disociación, pero en cantidades despreciables. El efecto del CO en los seres humanos es un reemplazo del oxígeno que transportan los glóbulos rojos por CO , produciendo daños irreparables (1).

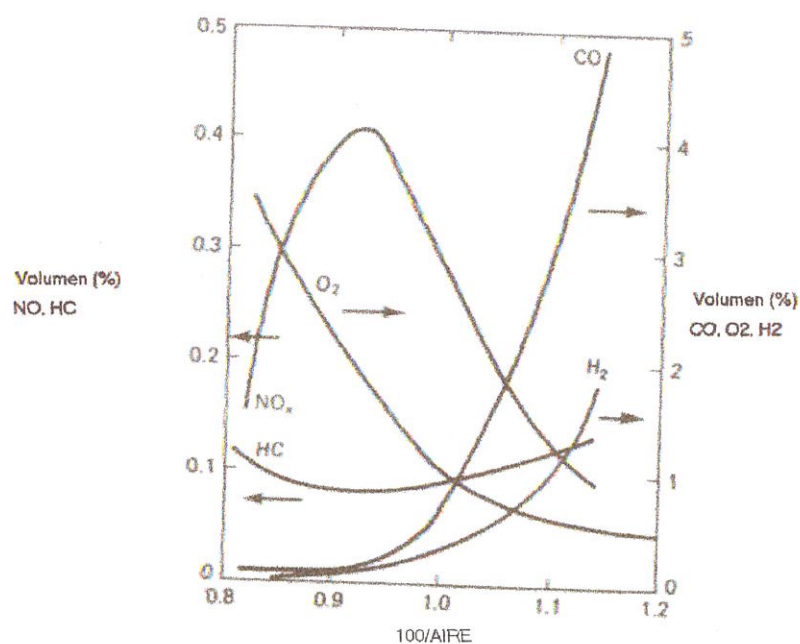
Los hidrocarburos HC, también llamados "inquemados", son moléculas de combustible inicial e hidrocarburos parcialmente oxidados. Se cree que las emisiones de HC se originan en los puntos de la flama donde hace contacto con los límites fríos, en hendeduras, y películas de aceite (13). Las emisiones de HC, además de contribuir a la contaminación ambiental, constituyen también una pérdida de combustible.

Las concentraciones de CO y NO_x reales son mayores que las predichas por los cálculos de equilibrio químico (6) (13). La cinética química envuelta es compleja, y todavía es motivo de investigación

(13). Téngase en cuenta que la oxidación de un simple compuesto como el propano (C_3H_8) envuelve cerca de 100 reacciones y 30 especies, y para poder modelar tal proceso totalmente se requeriría resolver un sistema de 30 ecuaciones diferenciales parciales simultáneas no-lineales.

Las emisiones de CO , NO_x y HC varían entre distintos motores, y son dependientes de diversas variables como adelanto de la ignición, carga, velocidad, y especialmente la relación aire-combustible. La figura 1.5 (13) muestra emisiones típicas de un MCIECH de automóvil al variar la relación aire-combustible. Se discutirá en detalle en el capítulo 5.

Figura 1.6
Emisiones típicas de un MCIECH al variar la relación aire-combustible



1.14 Algunas características de diseño, condiciones de operación del motor y parámetros de funcionamiento

Entre las características de diseño de un motor tenemos: diámetro de cilindro o calibre, recorrido del pistón o carrera, longitud de la biela, relación de compresión, diámetros de las válvulas de escape y admisión, adelanto de la apertura de la válvula de escape y retraso del cierre de la válvula de admisión. Las características de diseño de un motor son parámetros del motor que sólo puede modificar el diseñador del motor, no el operador o condiciones externas al motor (presión y temperatura ambiental).

Algunas condiciones de operación son: las revoluciones por minuto, adelanto de la ignición, porcentaje de aire, temperatura en el colector de admisión, presión en el colector de admisión o presión de trabajo y presión en el colector de escape o contrapresión. Estos son parámetros que pueden ser modificados por el operador del motor o condiciones externas al motor (presión y temperatura ambiental).

Los parámetros de funcionamiento son aquellos que permiten comparar el desempeño de diversos motores. Entre estos tenemos: presión media efectiva, eficiencia térmica, potencia del motor, consumo específico de combustible, eficiencia volumétrica y emisiones gaseosas.

La relación de compresión CR se define como la relación de volúmenes máximos y mínimos debidos al movimiento del pistón. El volumen mínimo es llamado también volumen de la cámara de combustión. En otras palabras, la relación de compresión es la relación entre el volumen en el punto muerto inferior V_{PMI} y el volumen en el punto muerto superior V_{PMS} :

$$CR = \frac{V_{PMS}}{V_{PMI}} \quad \text{Ecu. 1.20}$$

Los diámetros de las válvulas de escape DVE y admisión DVA, el adelanto a la apertura de la válvula de escape θ_{ex} y el retraso del

cierre de la válvula de admisión θ_{in} son parámetros de gran influencia sobre los procesos de escape y admisión. El adelanto a la apertura de la válvula de escape se expresa en grados antes del punto muerto inferior. El retraso al cierre de la válvula de admisión se expresa en grados después del punto muerto inferior. El propósito de estos dos últimos parámetros es mejorar los procesos de escape y admisión, de forma que se obtengan mayores potencias.

El adelanto de la ignición SA se define como el punto en el cual se energizará la bujía, de forma que salte la chispa, en grados antes del punto muerto superior.

Porcentaje de aire AIRE es la relación porcentual entre moles de aire utilizado y moles de aire estequiométrico del combustible utilizado (sección 1.7). Se utiliza también el término razón equivalente ϕ , que no es más que el recíproco de AIRE: $100/\text{AIRE}$. La relación aire-combustible $r_{a/f}$ se relaciona con AIRE mediante:

$$r_{a/f} = \frac{\text{AIRE}}{6.64} \quad \text{Ecu. 1.21}$$

cuando el combustible es gasolina C_8H_{18} .

La presión media efectiva MEP se define como la presión que, si actuara durante todo el proceso de expansión o trabajo, produciría el trabajo de ciclo WNET. Es decir:

$$WNET = MEP \cdot \pi \cdot S \cdot \frac{B^2}{4} \quad \text{Ecu. 1.22}$$

$$MEP = \frac{WNET}{V_{DISP}} \quad \text{Ecu. 1.23}$$

donde S es la carrera, y B el calibre. La presión media efectiva es un parámetro que no es influenciado por el tamaño del motor (nótese la división por el volumen desplazado V_{DISP}). Esto permite comparar motores de diversos tamaños utilizando la presión media efectiva.

La eficiencia térmica η_{th} es la relación porcentual entre la energía producida por el motor, WNET, y la energía entregada por el combustible, $U_{rp} \cdot NM / (1 + 4.76 \cdot Y)$:

$$\eta_{th} = \frac{WNET}{\frac{U_{rp} \cdot NM}{1 + 4.76 \cdot Y}} \quad \text{Ecu. 1.24}$$

donde NM es el número total de moles de la mezcla fresca (reactivos), y Y esta dada por la ecuación 1.12.

La potencia podría considerarse como el parámetro de funcionamiento de mayor interés. La principal unidad de medición de la potencia en motores de tamaño mediano (de automóvil) es el caballo de fuerza HP:

$$HP = \frac{WNET \cdot RPM}{89.5} \quad \text{Ecu. 1.25}$$

La eficiencia térmica del motor es pocas veces indicada por los fabricantes de motores; se prefiere el uso del consumo específico de combustible SFC. Este parámetro indica la potencia producida por una cantidad determinada de combustible. Su unidad en el sistema SI es kg/kW hora.

$$sfc = \frac{3600}{\eta_{th} \cdot Ql} \quad \text{Ecu. 1.26}$$

donde Ql es el calor de reacción H_{rp} expresado en kJ/kg. A partir de la ecuación 1.23 queda claro que a mayor eficiencia térmica, menor consumo específico de combustible.

La eficiencia volumétrica η_v o eficiencia de bombeo se define como la relación en porcentaje entre el volumen ocupado por la mezcla fresca que es introducida dentro del cilindro en el proceso de admisión, medido a temperatura y presión del colector de admisión (TM y PM respectivamente), y el volumen de desplazamiento V_{DISP} :

$$V_{DISP} = V_{PMI} - V_{PMS}$$

$$\eta_v = \frac{8 \cdot NM \cdot TM / PM}{V_{DISP}} \quad \text{Ecu. 1.27}$$

Las emisiones gaseosas se suelen expresar en porcentaje volumétrico de la mezcla de gases productos de la combustión. Suponga una mezcla de N gases productos de la combustión $A_1, A_2,$

... A_N . Los moles de A_i están dados por $[A_i]$. Por tanto, el porcentaje volumétrico de A_i en la mezcla es:

$$\% \text{ volumétrico de } A_i = 100 \cdot \frac{[A_i]}{\sum_{j=1}^N [A_j]} \quad \text{Ecu. 1.28}$$

1.15 Métodos numéricos

Al realizar cálculos termodinámicos, frecuentemente se presentan ecuaciones del tipo $F(T)=0$, donde F es una función de la temperatura T :

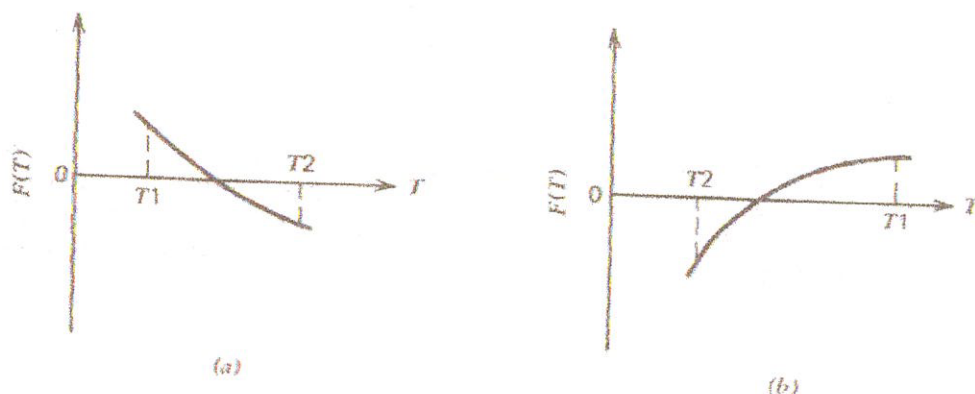
$$F(T) = U_e(T) - U_i(T_i)$$

$$F(T) = S(P_e, T) - S(P_i, T_i)$$

La primera ecuación bien pudiera aplicarse al caso de un proceso de combustión adiabática a volumen constante (secciones 1.8), y la segunda a un proceso de compresión o expansión (sección 1.5). Estas ecuaciones pueden ser resueltas utilizando el algoritmo del intervalo medio o el de Newton-Raphson. El algoritmo del intervalo medio es muy sencillo es el más recomendado (3). El algoritmo de Newton-Raphson requiere más información sobre $F(T)$, pero su convergencia es mucho más rápida (3).

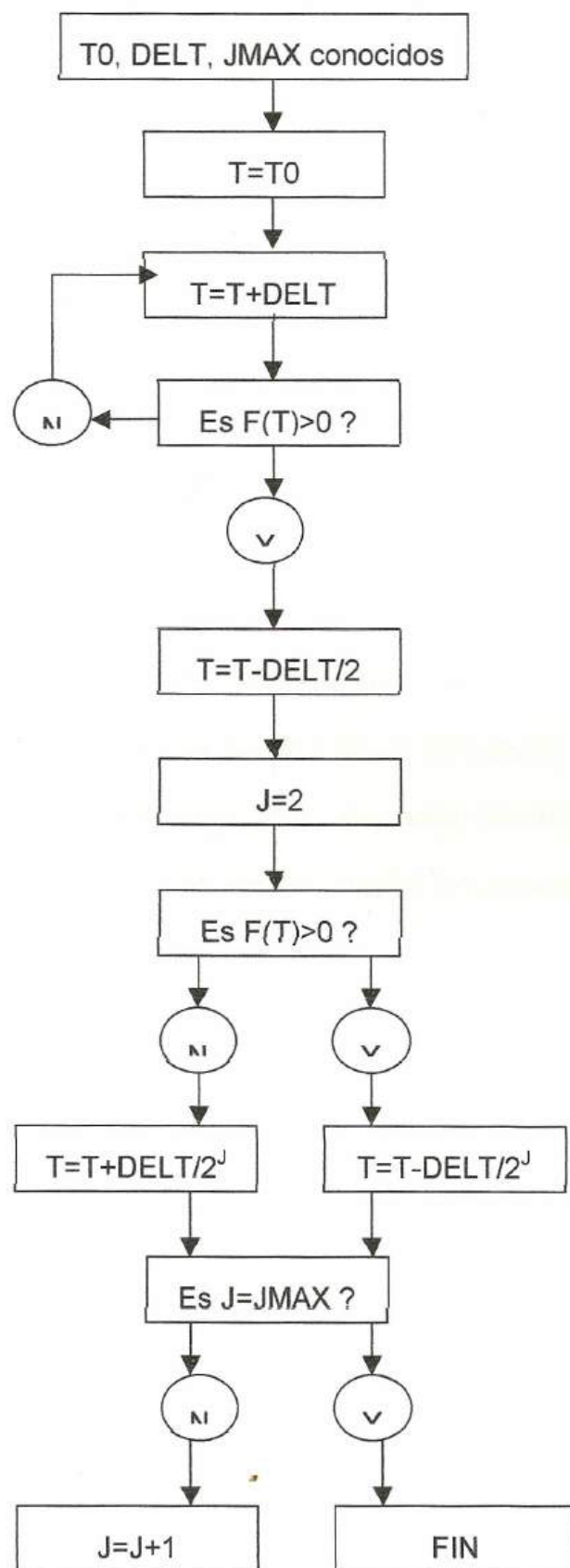
A continuación se describirá el algoritmo del intervalo medio.

Figura 1.7
Algoritmo del intervalo medio (3)



Antes de comenzar la búsqueda, se debe "cerrar" la solución dentro de un intervalo. Ya que $F(T)$ tendrá un valor único (para una misma T no habrán dos valores de F), cuando $F(T_1) \cdot F(T_2) < 0$ la solución deberá estar entre T_1 y T_2 . El primer paso es encontrar T_1 y T_2 (estableciendo el intervalo). Una vez encontrados, se puede calcular $T_3 = (T_1 + T_2)/2$. Al examinar los productos $F(T_1) \cdot F(T_3)$ ó $F(T_2) \cdot F(T_3)$, se puede determinar si la solución se encuentra en el intervalo entre T_1 y T_3 ó entre T_2 y T_3 . (Siempre existe la remota posibilidad de que $F(T_3) = 0$. El algoritmo puede escribirse de forma que maneje tal situación). Tal rutina de dividir el intervalo puede continuar hasta disminuir que el error sea mínimo. Eso sí, se debe tener en cuenta siempre que a mayor exactitud, mayor tiempo de cómputo es requerido.

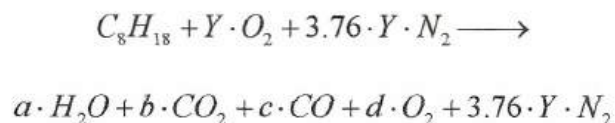
Al conocer más sobre el comportamiento de $F(T)$, el algoritmo se simplifica. Por ejemplo, si sabemos que la función aumenta o disminuye con T (caso común en cálculos termodinámicos), solo debemos mirar al signo de $F(T_3)$. A continuación se muestra el algoritmo recomendado por (3) (T_0 es la primera estimación de T , $DELT$ es un intervalo, $JMAX$ determina el número de iteraciones del programa y por tanto influye en el error):



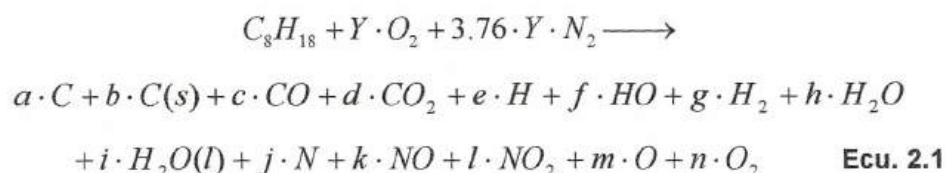
CAPÍTULO 2

2 EQUILIBRIO QUIMICO

La combustión de un mol de gasolina está dada por la ecuación 1.12 cuando no se consideran los efectos de la disociación. Se dijo en la sección 1.7 que la combustión dada por esta ecuación se denomina combustión completa. Esta ecuación se repite a continuación:



En la sección 1.9 se mencionó que pruebas experimentales en MCIECH demuestran que los productos de la combustión no solo incluyen los gases mencionados por la ecuación previa (3) (4) (13). Realmente, la combustión no es completa, y la combustión de un mol de gasolina pudiera aproximarse mejor con la siguiente ecuación:



El fenómeno de la disociación es el responsable de que esto ocurra.

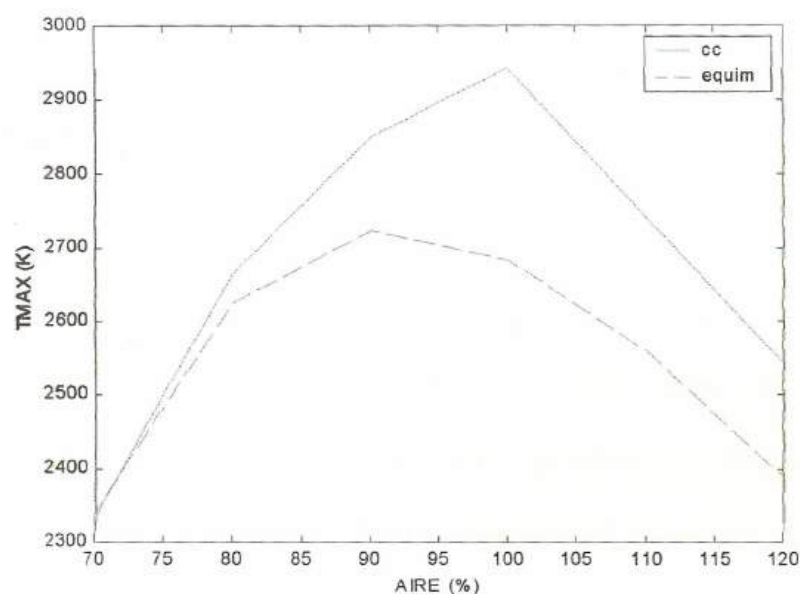
Las temperaturas durante el proceso de combustión de un MCIECH son lo suficientemente altas como para que ocurra la disociación. El efecto de la disociación es una disminución de la temperatura al final de la combustión, en comparación a la que se obtendría de no ocurrir la disociación, y por ende una disminución del trabajo de ciclo y de la eficiencia térmica (3) (4) (13).

Ya que el objetivo de este trabajo es lograr una simulación de los procesos de un MCIECH lo más realista posible, no se pueden dejar de lado los efectos de la disociación sobre el desempeño del motor (3) (13). Para incluir tales efectos en el análisis termodinámico, se requiere realizar cálculos de equilibrio químico.

La figura 2.1 muestra las predicciones de la temperatura al final del proceso de combustión de un MCIECH determinado al considerar una combustión completa cc (no hay disociación) y al considerar equilibrio

químico equim (hay disociación). Esta figura se realizó utilizando el modelo propuesto en este trabajo y se discutirá en detalle en la sección 5.1.

Figura 2.1
Comparación de la temperatura de flama adiabática
al asumir combustión completa y al asumir equilibrio químico

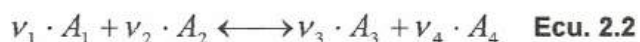


La sección 1.11 introdujo el tema de equilibrio químico. En este capítulo se profundizará el tema y se mostrará como se realizaron los cálculos de equilibrio químico que forman parte del modelo propuesto en este trabajo.

2.1 Ley de acción de masas

A continuación se presentará la deducción de la ley de acción de masas según (3).

Considérese un recipiente rígido y aislado, que contiene cinco gases: A_1 , A_2 , A_3 , A_4 , y A_x . El número de moles de cada gas es representado por n_1 , n_2 , n_3 , n_4 , y n_x . El gas A_x es químicamente inerte, pero los otros cuatro gases interactúan de acuerdo a la siguiente reacción reversible:



donde ν_i son los coeficientes estequiométricos. La presión y la temperatura de la mezcla son P y T .

Queremos responder la pregunta: ¿Está en equilibrio químico la mezcla de gases? Cuando el sistema está en equilibrio termodinámico, ninguno de sus parámetros termodinámicos cambiará con el tiempo. Si el sistema está en equilibrio químico, ninguno de los parámetros termodinámicos, y ninguno de los parámetros químicos, cambiará con el tiempo. En el presente caso, el sistema estará en equilibrio químico si no cambian en el tiempo n_1 , n_2 , n_3 , n_4 , n_x , P y T .

Equilibrio químico significa equilibrio termodinámico y la ausencia de una tendencia de las reacciones químicas reversibles de proceder en una dirección en preferencia a la otra dirección (3) (7) (9).

Según la segunda ley de la termodinámica, en un sistema aislado la entropía sólo puede aumentar (3) (7). Si la entropía de un sistema no cambia para todas las posibles variaciones de los parámetros del sistema, el equilibrio prevalece. Si la entropía puede cambiar por las variaciones de uno o más parámetros, el equilibrio no ha sido alcanzado. El procedimiento para obtener las ecuaciones gobernantes es formular la entropía total del sistema y aplicar las restricciones. Para una mezcla de gases la entropía total S es:

$$S = \sum_i n_i \cdot s_i \quad \text{Ecu. 2.3}$$

$$dS = \sum_i n_i \cdot ds_i + \sum_i s_i \cdot dn_i \quad \text{Ecu. 2.4}$$

Los diferenciales de entropía pueden ser eliminados al sustituir:

$$ds_i = \frac{du_i + p_i \cdot dv_i}{T} \quad \text{Ecu. 2.5}$$

donde T no lleva subíndice pues se ha asumido una temperatura de equilibrio. La energía interna del sistema de gases, U , es constante:

$$U = \sum_i n_i \cdot u_i = cte \quad \text{Ecu. 2.6}$$

entonces

$$\sum_i n_i \cdot du_i = - \sum_i u_i \cdot dn_i \quad \text{Ecu. 2.7}$$

donde los términos du_i pueden ser eliminados de la expresión de dS .

Ya que el volumen es constante:

$$V = n_i \cdot v_i = cte \quad \text{Ecu. 2.8}$$

$$dv_i = -\frac{v_i \cdot dn_i}{n_i} \quad \text{Ecu. 2.9}$$

donde v_i es el volumen por mol, y los términos dv_i se eliminan de la expresión de dS . Utilizando la definición de entalpía:

$$h = u + p \cdot v$$

el diferencial de la entropía total tiene la forma:

$$T \cdot dS = -\sum_i (h_i - T \cdot s_i) \cdot dn_i \quad \text{Ecu. 2.10}$$

Aplicando la conservación de la masa se obtiene:

$$\frac{dn_1}{v_1} = \frac{dn_2}{v_2} = -\frac{dn_3}{v_3} = -\frac{dn_4}{v_4} \quad \text{Ecu. 2.11}$$

Combinando las ecuaciones 2.10 y 2.11 resulta:

$$T \cdot dS = [v_3(h_3 - Ts_3) + v_4(h_4 - Ts_4) - v_1(h_1 - Ts_1) - v_2(h_2 - Ts_2)] \cdot \frac{dn_1}{v_1}$$

Ecu. 2.12

Si el término dentro de los corchetes es cero, es decir sí:

$$v_3(h_3 - Ts_3) + v_4(h_4 - Ts_4) = v_1(h_1 - Ts_1) + v_2(h_2 - Ts_2)$$

Ecu. 2.13

entonces $dS=0$ para todos los valores de dn_1 , positivo, negativo, o cero. A medida que pasa el tiempo n_1 , n_2 , n_3 , y n_4 cambian de acuerdo con la reacción reversible $v_1A_1 + v_2A_2 = v_3A_3 + v_4A_4$. Siempre y cuando la ecuación 2.12 permanezca válida, S no cambiará, de tal forma que esta ecuación plantea las condiciones bajo las cuales el sistema está en equilibrio químico. Sin embargo, esta ecuación no tiene una forma útil. Cuando la entropía se expande, se obtiene:

$$s_i = \int_0^T c_{pi} \cdot \frac{dT}{T} - R \cdot \ln(p_i) + s_{oi} \quad \text{Ecu. 2.14}$$

donde s_{oi} denota el valor de referencia a una temperatura de cero absoluto y una presión de una atmósfera. El término $(h_i - T \cdot s_i)$ toma la forma:

$$h_i - T \cdot s_i = R \cdot T \cdot \ln(p_i) + h_i - f_i(T) \quad \text{Ecu. 2.15}$$

donde:

$$f_i(T) = h_i - T \cdot \int_0^T c_{pi} \cdot \frac{dT}{T} - T \cdot s_{oi} \quad \text{Ecu. 2.16}$$

llegando a una expresión más concisa:

$$K_p = \frac{p_3^{v_3} p_4^{v_4}}{p_1^{v_1} p_2^{v_2}} \quad \text{Ecu. 2.17}$$

La ecuación 2.17 es llamada ley de acción de masas. Es una relación entre la constante de reacción, K_p , y las presiones parciales y los coeficientes estequiométricos de los gases. Cuando esta ecuación se cumple, el sistema de cinco gases se encuentra en equilibrio químico.

Otras formas que puede tomar tal ley son:

$$K_p = \frac{n_3^{v_3} n_4^{v_4}}{n_1^{v_1} n_2^{v_2}} \cdot \left(\frac{P}{N} \right)^{v_3+v_4-v_1-v_2} \quad \text{Ecu. 2.18}$$

$$K_p = \frac{x_3^{v_3} x_4^{v_4}}{x_1^{v_1} x_2^{v_2}} \cdot (P)^{v_3+v_4-v_1-v_2} \quad \text{Ecu. 2.19}$$

donde n_i indica el número de moles del gas i , N el número de moles totales de la mezcla, y x_i la fracción molar del gas i .

A K_p se la suele denominar constante de reacción dadas las presiones parciales. K_c es la constante de reacción dado el número de moles de cada gas de la mezcla, y se la define como:

$$K_c = \frac{n_3^{v_3} n_4^{v_4}}{n_1^{v_1} n_2^{v_2}} \quad \text{Ecu. 2.20}$$

La relación entre K_p y K_c está dada por las ecuaciones 2.18 y 2.20.

La deducción de la ley de acción de masas requirió la diferenciación de la entropía S . Se debe establecer ahora si se ha obtenido un máximo o un mínimo de la entropía. Al hallar la segunda derivada de S , se puede demostrar que el resultado obtenido es un máximo (3). Cuando la entropía es máxima, el "desorden" también lo es. Ya que no es posible "alcanzar más desorden", se ha llegado a un estado de equilibrio.

En lugar de maximizar la entropía, se pudo haber minimizado la energía libre de Gibbs, llegándose al mismo resultado.

La ley de acción de masas ha sido obtenida para un sistema aislado. Se puede demostrar que ésta puede ser aplicada a cualquier sistema, sin importar las restricciones (3).

2.2 Valores de las constantes de reacción

Las constantes de reacción, para mezclas de gases ideales, son dependientes de la temperatura solamente; para gases reales, la constante de reacción es una función muy débil de la presión (3) (7).

Por convención, se deben utilizar presiones en atmósferas, al realizar cálculos que incluyan las constantes de reacción.

Los valores de las constantes de reacción pueden determinarse a partir de tablas o utilizando formulas del tipo (3):

$$K_p = \exp \left[\frac{a}{T} + \left(b + \frac{c}{T} \right) \cdot \ln(T) + d \right] \quad \text{Ecu. 2.21}$$

La tabla 2.1 (3) muestra los valores de los coeficientes a, b, c, y d para algunas reacciones químicas que ocurren durante la combustión.

Tabla 2.1
Valores de los coeficientes de la fórmula de la constante de reacción Kp (3)

Reacción	a	b	c	d
$\text{CO} + .5\text{O}_2 = \text{CO}_2$	33805	0.7422	165.8	-16.5739
$2\text{O} = \text{O}_2$	57126	-0.01	599	-16.3201
$\text{O}_2 + \text{N}_2 = 2\text{NO}$	-14096	-0.6893	-1375.3	9.668
$2\text{H} = \text{H}_2$	33587	0.5604	3327	-20.8683
$\text{O} + \text{H} = \text{OH}$	44216	-0.1319	1298	-13.1303
$\text{H}_2 + .5\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$	42450	-1.074	-2147	3.2515

2.3 Cálculos de equilibrio químico

El primer paso es determinar cuales serán las especies presentes en la mezcla de productos de la combustión. Se suele asumir la presencia de todas o algunas de las siguientes especies: C, C(s), CO, CO₂, H, HO, H₂, H₂O, H₂O(l), N, NO, NO₂, N₂, O, y O₂ (3). La inclusión de hidrocarburos de la forma C_xH_y es posible, pero complica mucho más el problema (3) (13). Se deberá también seleccionar qué reacciones químicas se llevan a cabo entre las especies.

Luego se deben llevar a cabo los cálculos de equilibrio químico. Existen dos métodos para efectuar tales cálculos: el método de la *formulación de las constantes de equilibrio* y el método de la minimización de la energía libre de Gibbs (13).

El método de la formulación de las constantes de equilibrio es el más sencillo y antiguo. Una vez planteadas las ecuaciones de balance de masa, se plantean ecuaciones utilizando la ley de acción de masas (ecuación 2.17) para las diversas reacciones presentes. El resultado es un sistema de ecuaciones no lineales. Entre las desventajas de este método tenemos: algunas dificultades numéricas, difícil manejo de especies condensadas, y mayores dificultades para extender el método para incluir los efectos de ecuaciones de estado de gases no ideales (9) (13). Debido a estas desventajas, se desarrolló el método de la minimización de la energía libre de Gibbs.

La mayoría de los actuales programas de equilibrio químico utilizan el procedimiento de la minimización de la energía libre de Gibbs. El resultado de este método también es un sistema de ecuaciones no lineales.

Por último, sin importar que método se utilice, deben resolverse un sistema de n ecuaciones no lineales con n incógnitas. Tales

incógnitas serán el número de moles de cada especie de la mezcla. Se utilizan métodos numéricos para resolver tal sistema de ecuaciones. El más eficiente es la iteración de Newton-Raphson.

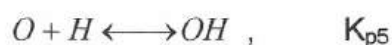
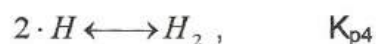
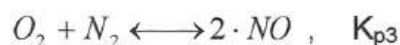
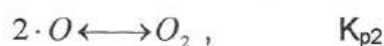
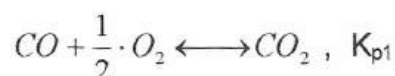
La composición en equilibrio es afectada por la relación de las cantidades de los elementos presentes (en este caso C, H, O, y N) y por la temperatura y presión. Debido el gran rango de valores que pueden tener estos parámetros, pueden surgir dificultades en la aplicación de los métodos numéricos.

2.4 Descripción del algoritmo utilizado en el modelo

A continuación se listan las características del algoritmo `equiv10.m` utilizado para realizar los cálculos de equilibrio químico en la simulación del MCIECH, objetivo de este trabajo. Tal algoritmo es detallado en (3). En el Apéndice se muestran las líneas de programación de este algoritmo escrito en Matlab. Su validación se presentará en la sección 4.1.

- El algoritmo calculará el número de moles de cada especie gaseosa de los productos de la combustión (estas son las incógnitas), para determinados valores de la temperatura y volumen de la mezcla.

- Principalmente por su sencillez, se utilizará el método de la formulación de las constantes de equilibrio. Existirán problemas numéricos, inherentes de este método.
- La suposición de gases ideales es muy adecuada para los objetivos de este trabajo (sección 3.2). Además, como ya se explicó (sección 2.3), resulta difícil la utilización de ecuaciones de estado de gases reales en el método de la formulación de las constantes de equilibrio.
- Se considerará la presencia de las siguientes diez especies gaseosas en los productos de la combustión: CO_2 , CO , O_2 , O , NO , N_2 , H , H_2 , OH , y H_2O .
- Tales especies obedecen las siguientes reacciones químicas:



- Los valores de las constantes de equilibrio (o constantes de reacción) para determinada temperatura se determinan a partir de la ecuación 2.21. El uso de esta fórmula está restringido a valores de temperatura entre 1600 y 6000 K. Este rango es suficientemente adecuado, pues es de esperar temperaturas máximas de ciclo alrededor de 2800 K. Además de facilitar los cálculos, el uso de fórmulas de equilibrio químico o de cualquier propiedad termodinámica, reduce las posibilidades de cometer errores, al comparar con el uso de tablas y una posterior interpolación.

A cada especie gaseosa se le asigna un número del 1 al 10 de acuerdo al siguiente orden: CO_2 , CO , O_2 , O , NO , N_2 , H , H_2 , OH , H_2O . Por ejemplo, el número de moles de CO_2 será N_1 .

Al aplicar balances de masa, se obtiene para la cantidad de carbono AC :

$$AC = N_1 + N_2 \quad \text{Ecu. 2.22}$$

pues de las diez especies gaseosas, solo la número 1 CO_2 y la número 2 CO poseen carbono. Los balances de masa para las cantidades de H , O , y N (AH , AO , y AN respectivamente) quedan:

$$AH = 2[N_8 + N_{10}] + N_7 + N_9 \quad \text{Ecu. 2.23}$$

$$AO = 2[N_1 + N_3] + N_2 + N_4 + N_5 + N_9 + N_{10} \quad \text{Ecu. 2.24}$$

$$AN = N_5 + 2N_6 \quad \text{Ecu. 2.25}$$

Ahora, deben hallarse los siguientes valores:

$$W1 = K_{p1} \sqrt{\frac{RT}{V}} \quad W2 = K_{p2} \frac{RT}{V}$$

$$W3 = K_{p3} \quad W4 = K_{p4} \frac{RT}{V}$$

$$W5 = K_{p5} \frac{RT}{V} \quad W6 = K_{p6} \sqrt{\frac{RT}{V}}$$

Luego de aplicar la ley de acción de masas (ecuación 2.21) a cada una de las reacciones químicas mencionadas previamente, se obtienen las siguientes seis ecuaciones:

$$W1 = \frac{N1}{N2 \cdot \sqrt{N3}} \quad \text{Ecu. 2.26}$$

$$W2 = \frac{N3}{N4^2} \quad \text{Ecu. 2.27}$$

$$W3 = \frac{N5^2}{N3 \cdot N6} \quad \text{Ecu. 2.28}$$

$$W4 = \frac{N8}{N7^2} \quad \text{Ecu. 2.29}$$

$$W5 = \frac{N9}{N4 \cdot N7} \quad \text{Ecu. 2.30}$$

$$W6 = \frac{N10}{N8 \cdot \sqrt{N3}} \quad \text{Ecu. 2.31}$$

Que junto con las cuatro ecuaciones obtenidas a partir de balances de masa forman un sistema de diez ecuaciones no lineales con diez incógnitas.

La búsqueda de la solución de este sistema de ecuaciones no lineales no es sencilla. Se deben evitar valores negativos del número de moles. Debido al amplio rango de valores de la relación AC:AH:AO:AN, y de los valores de temperatura y volumen (o presión), se pueden dar casos en que los resultados no converjan. Además, se tiene que tener en cuenta los inherentes problemas numéricos del método de la formulación de las constantes de equilibrio. Para más información sobre como se resolvió este problema, puede revisarse en el Apéndice las líneas de programación del algoritmo equiv10.m.

Después de utilizar este algoritmo se observó:

- El algoritmo opera satisfactoriamente para valores de $AN=0$.
- El algoritmo no opera satisfactoriamente si $AO=0$ ó $AH=0$ ó $AC=0$.
- AO deberá ser mayor a AC.
- Se pueden producir resultados no válidos cuando al valor de AO es grande, al comparar con los valores de AC o AH. En otras palabras, pueden producirse resultados no deseados para elevadas relaciones aire-combustible.
- Los resultados obtenidos concuerdan con los predichos por el programa STANJAN (sección 4.1).

La mejor forma de mejorar el cálculo de equilibrio químico es reemplazar el algoritmo propuesto por uno que utilice el método de la minimización de la energía libre de Gibbs, para 10 o 12 especies gaseosas en los productos de la combustión. Esto evitaría los problemas de convergencia de resultados a elevadas relaciones aire-combustible, logrando mejores resultados al realizar la predicción de las emisiones (sección 5.8). Además, la convergencia de resultados sería más rápida.

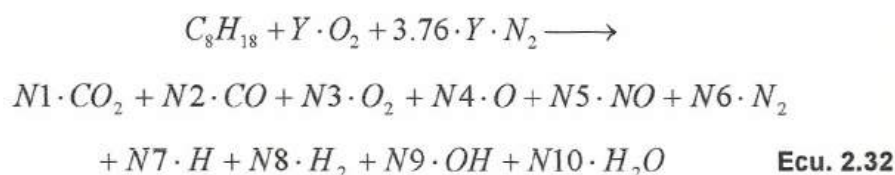
2.5 Temperatura de flama adiabática considerando equilibrio químico

Los cálculos para hallar la temperatura de flama adiabática del proceso de combustión de un MCIECH requieren solucionar la ecuación 1.13, que se repite a continuación:

$$U_r(T_r) = U_p(T_p)$$

donde U_r y T_r son respectivamente la energía interna y la temperatura de los reactivos al inicio de la combustión, y U_p y T_p son respectivamente la energía interna y la temperatura de los productos al final de la combustión. T_p es la temperatura de flama adiabática.

La combustión de un mol de gasolina, al considerar la presencia de las diez especies gaseosas mencionadas en la sección 2.4, está dada por la siguiente ecuación (compare con ecuación 1.12):



Se conocen entonces cuales son los reactivos y cuales son los productos. Los moles de cada uno de los reactivos también se conocen, pues están dados por la relación aire-combustible que es un dato conocido (secciones 1.7 y 1.14). La temperatura de los reactivos T_r también es conocida. Por tanto se tiene U_r . Los moles de cada uno de las especies en los productos son desconocidas. La temperatura de los productos T_p es también desconocida. Se requiere entonces de un proceso iterativo junto con cálculos de equilibrio químico.

El calor de reacción a volumen constante del combustible $C_{MC}H_{MH}O_{MO}$ se lo encuentra a partir del calor de reacción a presión constante, pues este último es el más utilizado y el que se presenta en las tablas de combustibles:

$$U_{rp} = H_{rp} - 2480 \cdot (MC + 0.5 \cdot MH - 1 - Y_{cc}) \quad \text{Ecu. 2.33}$$

donde U_{rp} y H_{rp} están dados en kJ/kmol, MC y MH en kmol.

La energía interna del combustible u_c se halla a partir de la definición de U_{rp} :

$$u_c = 6886 \cdot MC + 0.5 \cdot 54838 \cdot MH - U_{rp} - 14722 \cdot Y_{cc} \quad \text{Ecu. 2.34}$$

La energía interna de los reactivos a 298 K es:

$$U_r(298) = u_c + Y \cdot u_{O_2} + 3.76 \cdot Y \cdot u_{N_2} = u_c + 64740 \cdot Y \quad \text{Ecu. 2.35}$$

La capacidad calorífica de la mezcla reactiva está dada por:

$$C_v = c_v(\text{combustible}) + Y \cdot c_v(O_2) + 3.76 \cdot Y \cdot c_v(N_2) \quad \text{Ecu. 2.36}$$

donde $c_v(\text{combustible})$, $c_v(O_2)$ y $c_v(N_2)$ son funciones de la temperatura.

Por último, la energía interna de los reactivos a una temperatura T_r queda:

$$U_r = (6886 MC + 0.5 \cdot 54838 MH - U_{rp} - 14722 Y_{cc}) + 64740 Y + \int_{298}^{T_r} C_v dT \quad \text{Ecu. 2.37}$$

La energía interna de los productos es:

$$U_p = \sum_i n_i \cdot u_i(T) \quad \text{Ecu. 2.38}$$

donde n_i es el número de moles de la especie i , u_i es la energía interna de la especie i , y T_p es la temperatura de los productos. Al llegar al resultado deseado, $U_r = U_p$, la temperatura T_p es la temperatura de flama adiabática.

El procedimiento utilizado para encontrar la temperatura de flama adiabática es el siguiente:

1. Determinar U_r utilizando las ecuaciones 2.33 a 2.37.
2. Seleccionar un valor arbitrario de la temperatura de los productos T_p . Se puede empezar con un valor de $T_p=2000$ K por ejemplo.
3. Encontrar el valor de la energía interna específica u (kJ/kmol) de cada una de las especies gaseosas de los productos utilizando el valor de T_p asumido en el paso 2.
4. Con el valor de T_p encontrado en el paso 2, y sabiendo que la combustión ocurre a volumen constante (sección 1.8), es posible llevar a cabo los cálculos de equilibrio químico que permitan encontrar el número de moles de cada especie de los productos.
5. Véase si se cumple la siguiente ecuación:

$$F(T_p) = \sum_i n_i \cdot u_i(T_p) - U_r(T_r) = 0. \quad \text{Ecu. 2.39}$$

6. Si $F(T_p)$ es mayor a cero, escoja un valor menor de T_p , caso contrario escoja un valor mayor.
7. Repetir este procedimiento hasta que el valor de $F(T_p)$ sea lo más cercano a cero.

Mas información sobre el procedimiento utilizado **puede** encontrarse al revisar el algoritmo de temperatura de flama adiabática utilizado tfaeq.m escrito en Matlab. Las líneas de programación de este algoritmo se dan en el Apéndice.

Se sugieren tres modificaciones al ciclo Otto aire-combustible: un proceso de combustión progresiva, procesos de escape y admisión que consideren el movimiento del pistón y del flujo de gases, y consideración de los efectos de la transferencia de calor de los gases hacia las paredes internas del cilindro (3). Además de esto, es importante considerar la existencia de equilibrio químico durante la combustión en MCIECH (2) (3) (13).

En (3) se presenta un modelo de MCIECH que modifica el ciclo Otto de aire-combustible para incluir una combustión progresiva y procesos de escape y admisión más realistas. El modelo propuesto en este trabajo se basó en el modelo presentado en (3), al cual se le añadieron los efectos debidos a la transferencia de calor de los gases hacia las paredes internas del cilindro según procedimientos dados en (2) y (13), y la capacidad para predecir las emisiones de NO según (2), (6) y (13). Al introducir el efecto de la transferencia de calor en los cálculos termodinámicos se produce una disminución de la potencia del motor y de su eficiencia térmica, aproximando los resultados al caso real (3). Se consideró importante realizar los cálculos de cinética química que permiten predecir las emisiones de NO, pues actualmente se está realizando un gran esfuerzo investigativo para lograr MCIECH de gran eficiencia y bajas emisiones de NO (11) (13).

En este capítulo se detallan las características y procedimientos de cálculo del modelo termodinámico cero-dimensional de un MCIECH, objetivo de este trabajo.

Una suposición importante realizada en este trabajo, y por el modelo "base" presentado en (3), es considerar que las propiedades del fluido dentro del cilindro dependen solo del ángulo de cigüeñal, y no de su posición (coordenadas x , y , z) dentro del cilindro. Tal modelo es llamado cero-dimensional, y su utilización es adecuada llevar a cabo la simulación de los procesos de un MCIECH (2) (13). Cuando la variación de las propiedades del fluido con las tres coordenadas del espacio son incluidas en el análisis, es necesario el uso de supercomputadoras. Un modelo de este tipo es llamado multi-dimensional.

El propósito de este modelo no será la predicción exacta de determinado parámetro de funcionamiento del motor, sino la predicción del comportamiento de ese parámetro al variar determinada característica de diseño o condición de operación, asumiendo que las demás no varían ("ceteris paribus"). Poniéndolo de otra forma, por ejemplo, el modelo no realizará una predicción exacta de la potencia del motor para determinado adelanto de la ignición, lo que sí realizará es una curva de "Potencia vs. Adelanto de la Ignición" cuya forma será parecida a la obtenida por experimentación, asumiendo que la relación de compresión, RPM, relación

aire-combustible, presión en el colector de admisión, etc. permanecen constantes.

3.1 Procedimiento General

Toda simulación de un sistema físico, un MCIECH en este caso, comienza con la delimitación de tal sistema. El tomar todo el MCIECH como sistema no es el procedimiento adecuado. Se recomienda dividir tal sistema en tres subsistemas (10):

- Colectores de admisión y escape
- Fluido refrigerante
- Fluido dentro del cilindro

Este último subsistema es el que será modelado. Se modelaran los fenómenos físicos y químicos que ocurren dentro del cilindro durante los procesos de admisión, compresión, combustión, expansión y escape.

Se busca realizar un diagrama P-V, conocidas ciertas características de diseño y condiciones de operación del motor, a partir del cual se calcularán sus parámetros de funcionamiento. En otras palabras, se "dibujará" un diagrama P-V utilizando principalmente cálculos termodinámicos.

Para realizar el diagrama P-V se utilizará un procedimiento llamado de paso a paso, que se detalla a continuación (13):

- El estado inicial i se conoce completamente. Se conoce su presión P_i y volumen V_i .
- Se asume un intervalo de tiempo dt . Ya que el ángulo de giro del cigüeñal es función del tiempo, en la aplicación del procedimiento de paso a paso a los procesos de un MCIECH, resulta más conveniente asumir un intervalo de ángulo de giro del cigüeñal $d\theta$. Un intervalo muy pequeño producirá resultados más precisos, pero el tiempo de cómputo es mayor. Este intervalo no será el mismo a lo largo de todo el procedimiento, dependerá del proceso (compresión, combustión, expansión, o escape-admisión) y de las condiciones presentes (presión y temperatura) (3). Al realizar varias pruebas con el modelo propuesto, se encontró que un intervalo de ángulo de 1° o menos es adecuado.
- El ángulo del estado e puede determinarse pues $\theta_e = \theta_i + d\theta$. Conocido θ_e , se puede determinar el volumen en e V_e pues el volumen dentro del cilindro depende del ángulo.

- El proceso que lleva al fluido del estado i al estado e es conocido. Este proceso puede ser el de compresión, combustión, expansión, escape, o admisión.
- Conocido el volumen en el estado e y el proceso de i a e , es posible encontrar la presión en el estado e a partir de (3) (11):

$$P_e = P_i + dP \quad \text{Ecu. 3.1}$$

$$dP = dP_{\text{mov}} + dP_{\text{comb}} + dP_{\text{ht}} + dP_{\text{flow}} \quad \text{Ecu. 3.2}$$

donde dP_{mov} es el cambio de presión debido al movimiento del pistón, dP_{comb} es debido al proceso de combustión, dP_{ht} es debido a la transferencia de calor del fluido a las paredes internas del cilindro, y dP_{flow} es debido al fluido que entra y sale del cilindro. Como se verá en las secciones siguientes, todos estos cambios de presión pueden ser calculados. Generalmente requerirán el conocimiento de:

$$dV = V_e - V_i \quad \text{Ecu. 3.3}$$

que es fácilmente determinado pues el volumen V_i es conocido y el volumen V_e se determina a partir del intervalo de ángulo $d\theta$. También, como se verá más adelante, se requerirán conocer las condiciones de presión P y temperatura T dentro del cilindro. Es decir las expresiones de dP tendrán una forma:

$$dP = f(P, T)$$

donde se hará que $P=P_i$ y $T=T_i$.

- La temperatura en e puede ser determinada ahora a partir de la ecuación de estado de gases ideales:

$$T_e = \frac{P_e \cdot V_e}{N_e \cdot R} \quad \text{Ecu. 3.4}$$

donde R es la constante de gas universal, y el número de moles totales en e N_e se encuentra a partir de la ley de conservación de la masa entre los estados i y e. Con excepción de los procesos de escape y admisión, la masa dentro del cilindro permanecerá constante.

- El trabajo del ciclo W_{net} puede encontrarse sumando diferenciales de trabajo dW entre los puntos i y e:

$$dW = \left(P_i + \frac{dP}{2} \right) \cdot dV \quad \text{Ecu. 3.5}$$

Los pasos previos se repiten hasta terminar de dibujar el diagrama P-V.

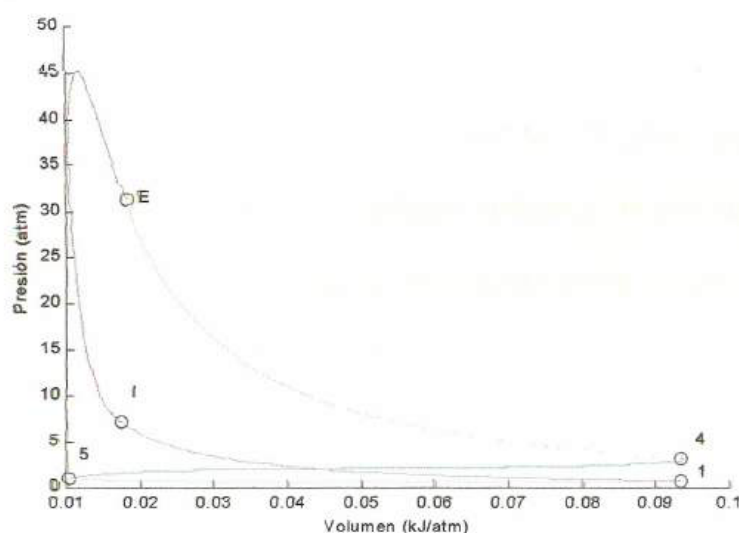
Surge una pregunta: ¿dónde comienza el procedimiento de paso a paso? Una respuesta sería en cualquier lugar, pues, al final los resultados deberán converger numéricamente. Por convención y sencillez, se comienza el procedimiento en el inicio de la compresión (3). Pero, al comenzar el procedimiento no se conocen las

propiedades al inicio de la compresión (punto 1 figura 3.1). Estas deben ser asumidas:

- Se asumen las propiedades del punto 1. Se puede asumir cualquier valor, pero se recomienda asumir una presión y temperatura iguales a las del colector de admisión, PM y TM, y un número de moles de gases residuales NX igual a cero (3). El volumen en el punto 1 es conocido, ya que el ángulo de cierre de la válvula de admisión (punto de inicio de la compresión) es dado.
- Llévase a cabo el procedimiento de paso a paso descrito previamente a lo largo de todo el ciclo compresión-combustión-expansión-escape-admisión.
- Se llega a un nuevo estado 1, con nuevos valores de presión, temperatura, y número de moles de cada especie gaseosa. NX ya no será igual a cero. Utilizar estos nuevos valores y volver a llevar a cabo el procedimiento de paso a paso a lo largo de todo el ciclo.
- Repetir los tres pasos previos hasta que los valores de las propiedades del punto 1 converjan, es decir, su cambio porcentual sea mínimo. Se encontró, al utilizar el modelo propuesto, que 4 ó 5 repeticiones son suficientes.

El resultado será un diagrama como el mostrado en la figura 3.1 (obtenida utilizando el modelo propuesto). El punto 1 marca el comienzo de la compresión. La ignición ocurre en el punto I, dando comienzo a la combustión. La combustión termina en E, y comienza la expansión. En el punto 4 se abre la válvula de escape, y se cierra en 5. Al mismo tiempo se abre la válvula de admisión, que se cierra en 1.

Figura 3.1
Diagrama P-V típico de un MCIECH



Es importante resaltar, que en todos los procesos (compresión, combustión, expansión, o escape-admisión) se comienza el análisis asumiendo condiciones sin transferencia de calor. Luego se corrige el resultado añadiendo el término dP_{ht} (ecuación 3.2).

3.2 Gas ideal

Los siguientes puntos justifican la suposición de gas ideal:

- El uso de la ecuación de estado de gas ideal en el análisis de MCI es sugerido por (2), (3), (7), (9), y (13).
- La ecuación de estado de gas ideal es utilizada por programas de simulación de MCI sofisticados como el SUPERSTATE de CDL (14), y por tablas de propiedades termodinámicas como las Tablas Termoquímicas de la JANAF.
- La principal limitante del uso de la ecuación de estado de gas ideal es la presencia de presiones elevadas. El peor caso, en el análisis de MCIECH, sería la presión máxima dentro del cilindro predicha por el ciclo Otto ideal de aire-combustible de un motor con relación de compresión elevada, 10:1 por ejemplo, trabajando con un porcentaje de aire un poco menor al 100%, 95% en este caso. La presión máxima del ciclo calculada es de 86 atm, a una temperatura de 2890 K. La siguiente tabla muestra los factores de compresibilidad encontrados a partir de las propiedades reducidas, utilizando gráficas del factor de compresibilidad dadas en (7).

Tabla 3.1
Justificación de la utilización de la ecuación de estado
de gases ideales en el modelo

Gas	Temperatura crítica (K)	Presión crítica (atm)	Temperatura reducida	Presión reducida	Factor de compresibilidad
CO ₂	73	304	1.178	9.507	1
CO	35	134	2.457	21.567	1.02
H ₂	12.8	33	6.719	87.576	1
NO	65	183	1.323	15.792	1
N ₂	33.5	126	2.567	22.937	1
O ₂	49.7	154	1.730	18.766	1
H ₂ O	217.7	647	0.395	4.467	0.99

Queda justificada la utilización de la ecuación de estado de gas ideal, pues los valores del factor de compresibilidad son muy cercanos a uno. También téngase en cuenta que las presiones máximas reales serán todavía menores.

3.3 Propiedades termodinámicas de los gases y del combustible

- Los cálculos termodinámicos a realizar requerirán el conocimiento de la energía interna específica u en kJ/kmol y del calor específico a volumen constante c_v en kJ/kmol K de los siguientes gases: CO₂, CO, O₂, O, NO, N₂, H, H₂, OH, y H₂O. Ambas propiedades son funciones de la temperatura solamente para gases ideales.

- También se requerirá conocer el calor de reacción del combustible a volumen constante U_{rp} en kJ/kmol y su calor específico a volumen constante c_v en kJ/kmol K. El calor de reacción es independiente de la temperatura (esto puede demostrarse (3)), y el calor específico a volumen constante es función únicamente de la temperatura.

- La energía interna específica y el calor específico a volumen constante de los gases se determinarán con las siguientes expresiones (3):

$$u(T) = A + (B - 8.314) \cdot T + C \cdot \ln(T) \quad \text{Ecu. 3.6}$$

$$c_v(T) = B - 8.314 + \frac{C}{T} \quad \text{Ecu. 3.7}$$

donde A, B, y C son coeficientes que dependerán del gas y del rango de temperatura. Ambas expresiones son válidas para el intervalo de 400 a 6000 K.

- Se utilizará el calor de reacción H_{rp} del combustible en estado gaseoso, pues es de esperar que el combustible de la mezcla aire-combustible dentro del cilindro se encuentre en estado gaseoso. El combustible entra al carburador en estado líquido, pero en éste, el combustible es evaporado debido a un proceso de estrangulación en presencia de abundante aire. Algo parecido ocurre en los sistemas de inyección. Además, las elevadas temperaturas dentro del cilindro

terminarán de evaporar aquellas gotitas de combustible todavía presentes después de la carburación (1) (3).

- El calor específico a volumen constante del combustible se determinará utilizando una expresión que facilite su integración en la ecuación 2.37 (3):

$$c_v(T) = a + b \cdot T - R \quad \text{Ecu. 3.8}$$

donde R es la constante de gas universal, y a y b son coeficientes que dependen del combustible. El rango válido de esta expresión es de 298 a 900 K.

- No se considerará la presencia de humedad en el aire.

3.4 Proceso de compresión

El proceso de compresión modelado ocurre con transferencia de calor del fluido a las paredes del cilindro y con una razón de calores específicos constante. Lo más adecuado es ir variando esta razón de calores específicos (que disminuye con el aumento de temperatura), pero se encontró al utilizar el modelo propuesto que diferencia entre los resultados obtenidos por ambos métodos es mínima, siendo el primero más sencillo. Esta metodología es recomendada por (3).

Se mencionó previamente que se busca dibujar un diagrama P-V realizando cálculos termodinámicos. Esto requiere aplicar el procedimiento de paso a paso descrito (sección 3.1), donde es necesario encontrar cambios de presión dP dados por la ecuación 3.2. El procedimiento de paso a paso aplicado al proceso de compresión queda:

- Se conoce la presión P_1 , temperatura T_1 , volumen V_1 y número de moles de cada especie gaseosa en el punto 1 (figura 3.1). Para el primer ciclo de cálculos se puede asumir que P_1 y T_1 son iguales a la presión y temperatura en el colector de admisión, y que no existen gases residuales $N_X=0$ (sección 3.1).
- La razón de calores específicos en el punto 1, K_R , debe ser calculada. Un valor de $K_R \approx 1.3$ es común.
- La compresión terminará en el punto I. El ángulo de cigüeñal en el punto I es conocido pues el adelanto a la ignición SA (dado en grados antes del PMS) es un dato conocido. Esto determina el volumen en el punto I. Se sabe entonces donde terminarán los cálculos del proceso de compresión.

- Al realizar varias pruebas con el modelo propuesto, se encontró que un intervalo de integración, o intervalo de ángulo $d\theta$, de 1° es adecuado.
- La ecuación 3.2 aplicada al proceso de compresión, haciendo $dP_{comb}=0$ (pues no hay combustión durante la compresión) y $dP_{flow}=0$ (pues no hay salida ni entrada de gases durante la compresión), queda:

$$dP = dP_{mov} + dP_{ht} \quad \text{Ecu. 3.9}$$

A partir de la ecuación de estado de gases ideales (sección 1.5) se encuentra que:

$$dP_{mov} = -\frac{KR \cdot P1 \cdot V1^{KR}}{V^{KR+1}} \cdot dV \quad \text{Ecu. 3.10}$$

para el proceso de compresión únicamente. V es el volumen dentro del cilindro en un tiempo determinado. Queda entonces:

$$dP = -\frac{KR \cdot P1 \cdot V1^{KR}}{V^{KR+1}} \cdot dV + dP_{ht} \quad \text{Ecu. 3.11}$$

donde se discutirá posteriormente el cálculo de la variación de presión debida a la transferencia de calor del fluido a las paredes internas del cilindro dP_{ht} .

3.5 Proceso de combustión

Las características del modelo de combustión son:

- Los reactivos se encuentran en una condición inicial totalmente mezclada (característico de MCIECH).
- La ignición es instantánea, de manera que el instante en que salta la chispa marca el inicio de la combustión.
- La combustión ocurre progresivamente, no instantáneamente.
- Expresiones empíricas relacionan la fracción de masa de gases quemados con el ángulo de cigüeñal (2) (3) (13).
- Se mantiene el equilibrio químico durante la combustión. Se simulará también el caso, menos realista, de combustión completa (sección 1.7). Ya que el propósito del modelo es didáctico, resulta útil analizar las razones de la diferencia de resultados obtenidos por ambos casos.
- La duración de la combustión se basa en una expresión empírica aplicada a motores de automóvil (3).
- No se toma en cuenta la geometría de la cámara de combustión, pues esto requeriría introducir en los cálculos la variación de las propiedades termodinámicas del gas con la posición dentro del cilindro.

Estos puntos se detallarán en las secciones siguientes.

3.5.1 Descripción del modelo de combustión

En el presente modelo se considerarán ondas de combustión planas unidimensionales (realmente las ondas son esféricas y tridimensionales). La figura 3.2 (9), que muestra la onda de combustión moviéndose en un ducto muy largo de área constante, ayuda a visualizar la situación física. La onda de combustión se está moviendo hacia la izquierda. El subíndice r (reactivos) designa condiciones de gases no quemados delante de la onda, el subíndice p (productos) indica condiciones de gases quemados detrás de la onda, T es temperatura, P presión, y u velocidad. Se toma como marco de referencia un punto en la onda de combustión, de tal manera que u_r y u_p son las velocidades relativas de los gases quemados y los gases no-quemados, respectivamente, con relación a la onda de combustión.

Figura 3.2
Diagrama esquemático de una onda de combustión unidimensional estacionaria (9)

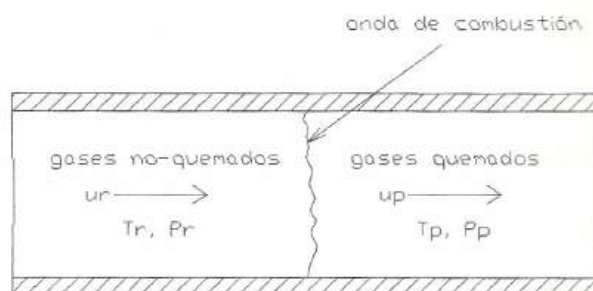
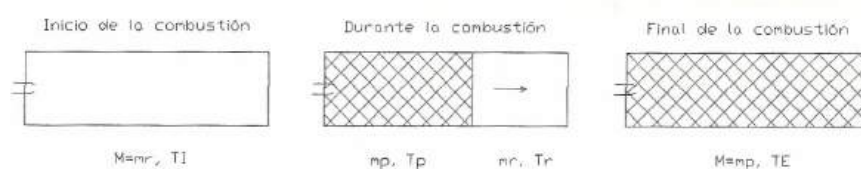


Figura 3.3
Combustión en un recipiente rígido (3)



La figura 3.3 (3) muestra la misma situación, pero en un recipiente rígido (por ejemplo la cámara de combustión de un MCIECH cuando la combustión es instantánea). P_I y T_I son la presión y temperatura justo antes de que salte la chispa, al final

de la compresión. P_E y T_E son la presión y temperatura al final de la combustión.

3.5.2 Fracción de masa de los gases quemados

Para poder encontrar una expresión de dP durante el proceso de combustión (ecuación 3.2) es necesario encontrar primero como varía la presión dentro del cilindro con la fracción de masa de los gases quemados.

La fracción de masa de gases quemados se define como la razón entre la masa de gases quemados y la masa total de gases presentes dentro de la cámara de combustión.

Se considera por ahora al proceso de combustión como adiabático y a volumen constante; más adelante se incluirán los efectos del movimiento del pistón dP_{mov} y de la transferencia de calor dP_{ht} (sección 3.5.4). La relación energética entre el estado inicial de la combustión I y algún estado final es (figura 3.3):

$$M \cdot u_r(T_I) = m_r u_r(T_r) + m_p u_p(T_p) \quad \text{Ecu. 3.12}$$

donde M es la masa total de gas presente, m_r y m_p la masa de reactivos y productos, T_r y T_p la temperatura de reactivos y productos, y u_r y u_p el calor específico a volumen constante de reactivos y productos respectivamente.

De la ecuación de gases ideales, considerando el volumen constante:

$$\frac{T_E \cdot N_p}{T_I} = \frac{T_I \cdot N_r}{T_I}$$

$$T_E = \frac{P_E \cdot N_r}{P_I \cdot N_p} \cdot T_I \quad \text{Ecu. 3.13}$$

donde N_r y N_p son las moles iniciales de los reactivos antes de la combustión y las moles de los productos después de la combustión.

Al aplicar la relación energética entre el estado inicial de la combustión I y el estado al final de la combustión E se obtiene (figura 3.3):

$$u_r(T_I) = u_p(T_E)$$

Utilizando esta expresión, y tomando que durante la combustión $M = m_r + m_p$, la ecuación 3.12 queda:

$$m_r c_{vr} \cdot (T_r - T_I) + m_p c_{vp} (T_p - T_E) = 0 \quad \text{Ecu. 3.14}$$

y luego a:

$$a \cdot (1 - n) \cdot (T_r - T_I) + n \cdot (T_p - T_E) = 0 \quad \text{Ecu. 3.15}$$

donde:

$$a = \frac{c_{vr}}{c_{vp}} \quad b = \frac{N_r}{N_p} \quad n = \frac{m_p}{M}$$

y n es la fracción de masa de gases quemados, tal como se definió previamente. Al aplicar las condiciones de volumen del recipiente rígido constante y compresión isentrópica de los reactivos por parte de la onda de combustión, se llega a la siguiente ecuación:

$$n = \frac{(a-b) \cdot \left(\frac{P}{P_I}\right)^{\frac{KR-1}{KR}} + b \cdot \frac{P}{P_I} + a}{(a-b) \cdot \left(\frac{P}{P_I}\right)^{\frac{KR-1}{KR}} + b \cdot \frac{P_E}{P_I} + a} \quad \text{Ecu. 3.16}$$

Para una mezcla reactivo típica de MCIECH, $a \approx 0.7$ y $b \approx 0.95$ son valores razonables (3). La ecuación previa se reduce a:

$$n = \frac{0.95 \cdot P - 0.7 \cdot P_I}{0.95 \cdot P_E - 0.7 \cdot P_I} \quad \text{Ecu. 3.17}$$

donde P es la presión en cualquier instante durante la combustión.

3.5.3 Variación de la fracción de masa de los gases quemados con el ángulo de cigüeñal

Se utilizarán relaciones empíricas para determinar la relación entre la fracción de masa de gases quemados n y el ángulo de cigüeñal θ .

Estudios fotográficos tomados a través de cabezales de cilindro de cuarzo, revelan que el frente de flama se desarrolla rápidamente y se aleja de la bujía en direcciones radiales. La rapidez a la que el frente de flama convierte los reactivos a productos $dn/d\theta$ puede ser aproximadamente determinada mediante estos métodos.

La relación entre n y θ puede tomar las siguientes formas:

$$n = \frac{\theta - \theta_i}{\Delta\theta_c}, \text{ tasa uniforme Ecu. 3.18}$$

$$n = \left(\frac{\theta - \theta_i}{\Delta\theta_c} \right)^2, \text{ ley de cuadrados Ecu. 3.19}$$

$$n = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \cos \frac{\theta - \theta_i}{\Delta\theta_c} \pi \right), \text{ expresión empírica del coseno Ecu. 3.20}$$

$$n = 1 - \exp \left(-a \cdot \left(\frac{\theta - \theta_i}{\Delta\theta_c} \right)^{m+1} \right), \text{ expresión empírica de Wiebe}$$

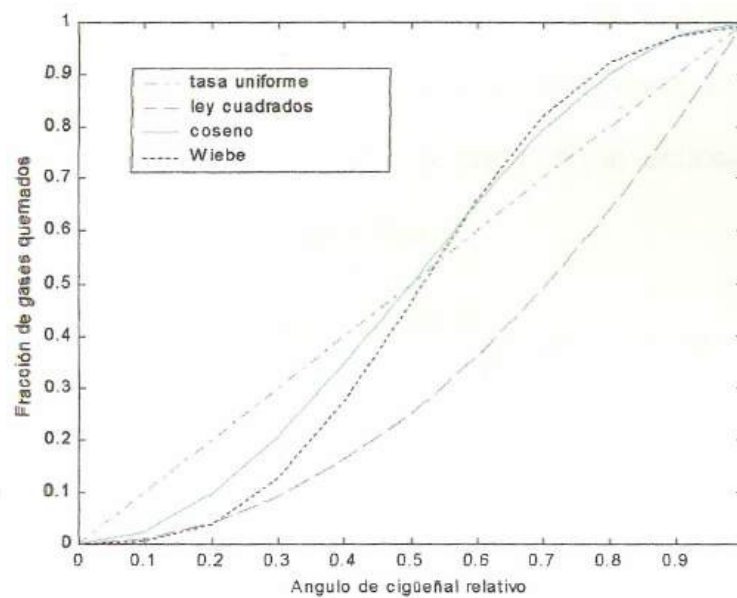
Ecu. 3.21

donde típicamente $a=5$ y $m=2$ (13).

La figura 3.4 muestra la forma de las diversas variaciones de n con θ planteadas. La relación de tasa uniforme no es realista en las etapas tempranas de la combustión, pues el frente de flama comienza como una muy pequeña esfera entre los electrodos de la bujía, de forma que $dn/d\theta$ debe ser muy pequeña para $\theta \approx \theta_i$. Las otras curvas si muestran este comportamiento. La relación de ley de cuadrados predice un

continuo crecimiento del frente de flama; esto no ocurre realmente en MCIECH. Por tales razones, las dos ecuaciones empíricas planteadas son las más realistas. La expresión de Wiebe, además, puede ser ajustada para determinado motor al variar el valor de los parámetros a y b .

Figura 3.4
Variación de la fracción de gases quemados con el ángulo de cigüeñal



3.5.4 Cálculo de la variación de presión durante la combustión

Durante la combustión $dP_{\text{flow}}=0$, entonces la ecuación 3.2 queda:

$$dP = dP_{mov} + dP_{comb} + dP_{hi} \quad \text{Ecu. 3.22}$$

donde:

$$dP_{mov} = -P \cdot K \cdot \frac{dV}{V} \quad \text{Ecu. 3.23}$$

P y V son la presión y volumen dentro del cilindro en un instante determinado y el valor de K se halla con:

$$K = KR + (KP - KR) \cdot n \quad \text{Ecu. 3.24}$$

donde KR y KP son las razones de calores específicos de los reactantes y productos. La razón de utilizar la ecuación 3.24 es que, durante la combustión, hay reactantes y productos al mismo tiempo. Nótese que al comienzo de la combustión, $n=0$, $K=KR$ y al final, $n=1$, $K=KP$. A partir de la ecuación 3.17, despejando $dP_{comb}=P-P_i$, se obtiene:

$$dP_{comb} = \frac{0.95 \cdot P_3 - 0.7 \cdot P_2}{0.95} \cdot \frac{V_{PMS}}{V} \cdot dn \quad \text{Ecu. 3.25}$$

dn se obtiene de la diferenciación de cualquiera de las expresiones de $n=f(\theta)$ (ecuaciones 3.18 a 3.21), P_2 es la presión al final del proceso de compresión si este llegara hasta el PMS, y P_3 es la presión que se obtiene a partir de una combustión adiabática a volumen constante a partir de 2 (figura 1.2). Nótese, que se ha tomado $P_i=P_2$ y $P_E=P_3$ en la ecuación 3.17 para hallar la ecuación 3.25.

3.5.5 Duración de la combustión y velocidades de combustión

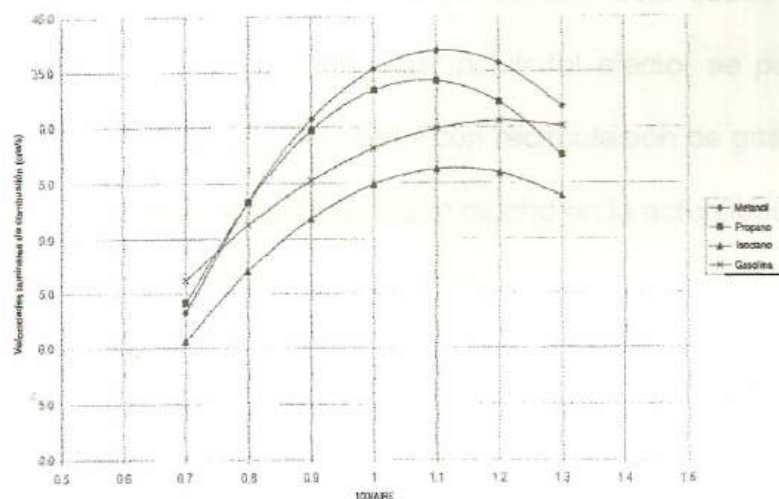
El ángulo del punto de inicio de la combustión (punto I en figura 3.1) es conocido, pues está dado por el avance a la ignición ϕ que es una condición de operación del motor. Por tanto, también se conoce su volumen. En este punto se inicia el ciclo de cálculos de la combustión, pero ¿dónde termina? La respuesta a esta pregunta la da el tiempo de duración de la combustión.

El tiempo que dura la combustión dependerá del tipo de combustible. La figura 3.5 (13) muestra las velocidades de combustión laminar de diversos combustibles. Claro está que a mayor velocidad de combustión, menor será el tiempo de duración de la combustión. La velocidad de combustión real no es la laminar, pero a partir de ésta se pueden realizar algunas conclusiones válidas. Por ejemplo, en la figura 3.5 se muestra que el metanol tiene una mayor velocidad de combustión que la gasolina, de forma que la duración de la combustión es menor, por tanto la combustión se aproxima más al caso ideal de combustión instantánea a volumen constante (duración de combustión cero), lográndose una mayor eficiencia y trabajo de ciclo. Esta es una de las razones por las que el metanol es un

común combustible de autos de carreras (otra es que permite utilizar mayores relaciones de compresión) (10).

Al observar la figura 3.5 se deduce que el tiempo de duración de la combustión también dependerá del porcentaje de aire. Esto se debe principalmente a que el porcentaje de aire influye sobre la temperatura durante la combustión, de la cual depende la velocidad de combustión. A mayores temperaturas de combustión, mayores velocidades de combustión.

Figura 3.5
Velocidades laminares de combustión de varios combustibles (13)



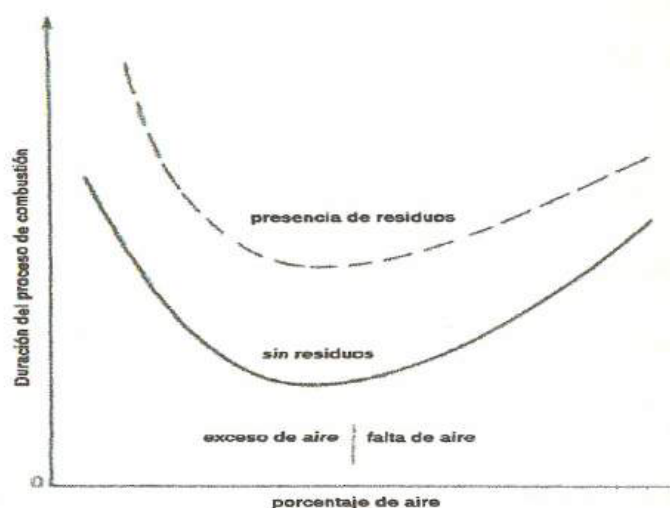
Las RPM del motor también influyen sobre el tiempo de duración de la combustión. A mayores RPM, mayor será la velocidad de los gases dentro del cilindro. Esta turbulencia mejora la mezcla aire-combustible y puede aumentar el área del

frente de flama, reduciendo el tiempo requerido para que termine la combustión (4) (10). También, la turbulencia en la vecindad de la región de la bujía puede demorar el establecimiento de un frente de flama.

Los residuos de la combustión pueden considerarse como "obstáculos" que reducen la velocidad de combustión, aumentando el tiempo de combustión. Esto puede verse en la figura 3.6 (3). Establecer una relación entre la presencia de residuos y la duración de la combustión requeriría una mayor investigación de datos empíricos publicados; esto queda fuera del alcance de este trabajo. De incluir tal efecto, se pudiera modelar el desempeño del motor con recirculación de gases de escape, que es un método utilizado mucho en la actualidad para reducir las emisiones de NO_x (1) (13).

La duración de la combustión depende de muchos factores. Se han mencionado los más importantes.

Figura 3.6
Velocidad de combustión dependiente de la presencia de residuos (3)



En el modelo propuesto se calculará el intervalo de duración de la combustión en ángulo de giro del cigüeñal $\Delta\theta_c$. Para esto se utilizará una expresión empírica aplicable a motores de gasolina de calibre alrededor de 100 mm funcionando con gasolina (3):

$$\Delta\theta_c = 40 + 5 \cdot \left(\frac{RPM}{600} - 1 \right) + 166 \cdot \left(\frac{100}{AIRE} - 1.1 \right)^2 \quad \text{Ecu. 3.26}$$

Nótese la dependencia de la duración de la combustión del porcentaje de aire AIRE y de las RPM.

Por ejemplo, para un motor que este funcionando a 3000 RPM y con un porcentaje de aire AIRE del 100%, se tendría que:

$$\Delta\theta_c = 40 + 5 \cdot \left(\frac{3000}{600} - 1 \right) + 166 \cdot \left(\frac{100}{100} - 1.1 \right)^2 = 61.66^\circ$$

O sea el tiempo requerido para la combustión Δt_c sería:

$$\Delta t_c = 61.66^\circ \cdot \frac{1_{-rev}}{360^\circ} \cdot \frac{\min}{3000_{-rev}} \cdot \frac{60_{-s}}{1_{-min}} = 0.0034_{-s}$$

Un análisis muy interesante es la prueba de diversos combustibles en el motor. El modelo pudiera extenderse para analizar tal problema, siempre y cuando se tengan expresiones del tipo $\Delta\theta_c = F(\text{RPM}, \text{AIRE})$ para diversos combustibles. Se pudiera también encontrar las velocidades de combustión para los diversos combustibles, y predecir $\Delta\theta_c$ en base al tamaño de la cámara de combustión. Estas velocidades de combustión, turbulentas, pueden determinarse a partir de (2):

$$u_t = ff \cdot u_l \quad \text{Ecu. 3.27}$$

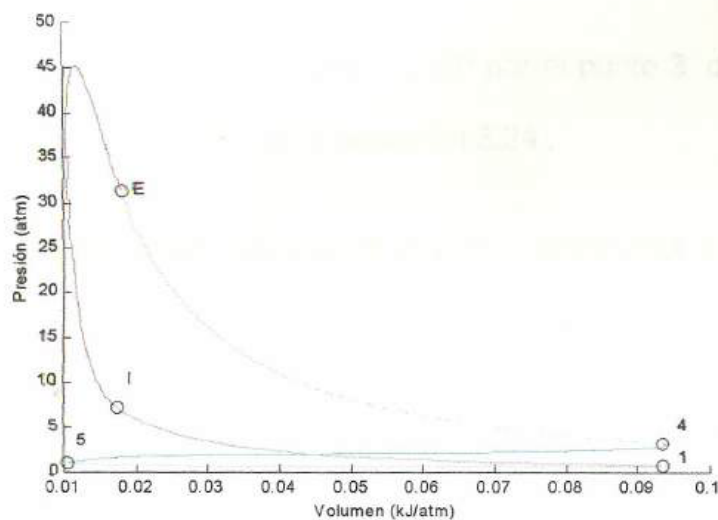
donde u_l es la velocidad de combustión laminar, u_t es la velocidad de combustión turbulenta, y ff es el factor de flama. Ya que el propósito del modelo no es la predicción exacta de determinado parámetro de funcionamiento del motor sino el comportamiento de este parámetro, bien pudiera utilizarse el siguiente método de cálculo de $\Delta\theta_c$ para combustibles diferentes a la gasolina:

- Determinar $\Delta\theta_c$ a partir de la ecuación 3.26.

- Encontrar la relación entre la velocidad de combustión laminar del combustible deseado con la de la gasolina para determinado porcentaje de aire utilizando la figura 3.5.
- Multiplique el $\Delta\theta_c$ encontrado en el primer paso por la relación del paso previo para hallar la duración de la combustión del combustible deseado.

3.5.6 Procedimiento

Figura 3.1 (Repetición)
Diagrama P-V típico de un MCIECH



- El punto I (figura 3.1) está totalmente determinado, pues es el punto al final de la compresión.
- La duración de la combustión en grados se determina a partir de la ecuación 3.26 para las condiciones existentes. Se

conoce entonces el ángulo y volumen del punto final de la combustión, y por tanto, donde terminarán los cálculos de combustión.

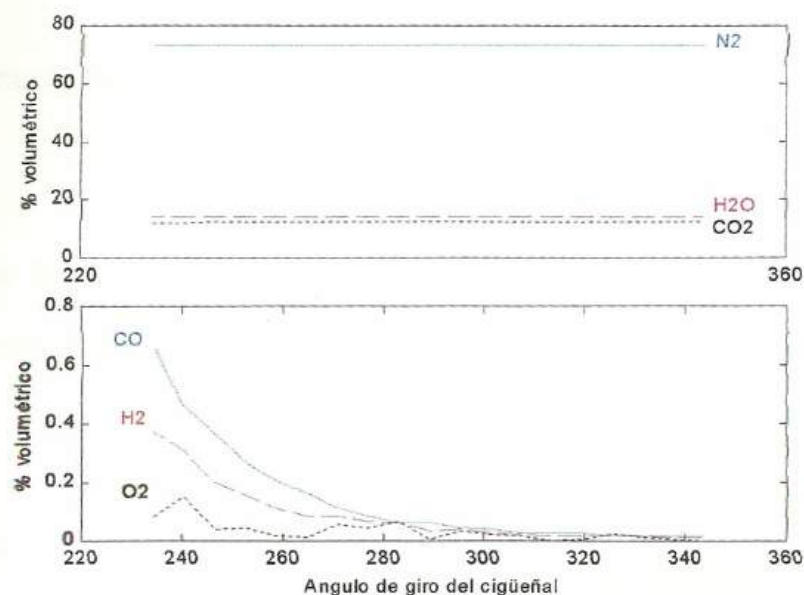
- Llévese el proceso de compresión hasta un punto 2 ($V_2=V_{PMS}$, $\theta_2=180^\circ$) utilizando el procedimiento dado en la sección 3.4.
- Encontrar el punto 3 sabiendo que el proceso 2-3 es una combustión adiabática a volumen constante. En otras palabras, encontrar la temperatura de flama adiabática T_3 (sección 2.5)
- K_R es dado por el punto 1 y K_P por el punto 3, de forma que se puede hallar K con la ecuación 3.24.
- Determinados los puntos 2 y 3, y conocidas pues sus presiones P_2 y P_3 , es posible aplicar las ecuaciones 3.22, 3.23, y 3.25.

3.6 Proceso de expansión

El proceso de expansión modelado ocurre con transferencia de calor del fluido a las paredes del cilindro y con una razón de calores específicos constante (sección 3.5).

El número de moles de cada especie gaseosa durante la expansión se asume constante, simplificando el algoritmo y disminuyendo el tiempo de cómputo. Esto no ocurre realmente, pues al variar la temperatura de la mezcla gaseosa, las condiciones del equilibrio químico cambian, por lo que la composición cambiará. Tal cambio es mínimo para todas las especies gaseosas en consideración (2). La figura 3.7, que se obtuvo utilizando el modelo propuesto, muestra la variación del número de moles de las especies gaseosas N_2 , H_2O , CO_2 , CO , H_2 y O_2 para un MCIECH con $CR=9$, $AIRE=100\%$, $SA=30^\circ APMS$. Los resultados mostrados en esta figura soportan la suposición realizada. Gases como el NO , O , H , y OH no se presentan pues su porcentaje volumétrico en la mezcla es mínimo, como para que influyan en los resultados. Debe resaltarse que esta suposición es válida para los cálculos del proceso de expansión, pero no si se desea predecir las emisiones gaseosas, donde el procedimiento es diferente (secciones 3.9 y 3.10).

Figura 3.7
Variación de la composición durante la expansión según el modelo propuesto



Los cálculos de expansión siguen el siguiente esquema:

- El punto E (figura 3.1) está totalmente determinado.
- El volumen del punto 4 (figura 3.1), que marca el fin del proceso de expansión, está dado por el adelanto a la apertura de la válvula de escape θ_{ex} , que es una condición de operación del motor.
- La razón de calores específicos en el punto E, KP , debe calcularse. Un valor de $KP \approx 1.24$ es común.
- Se encontró, al utilizar el modelo propuesto, que el intervalo de integración, o intervalo de ángulo $d\theta$, debe ser menor a 1° .

- La ecuación 3.2 aplicada a este proceso, haciendo $dP_{comb}=0$ y $dP_{flow}=0$, queda:

$$dP = dP_{mov} + dP_{ht} \quad \text{Ecu. 3.28}$$

A partir de la ecuación de estado de gases ideales se encuentra que:

$$dP_{mov} = -\frac{KP \cdot PE \cdot VE^{KP}}{V^{KP+1}} \cdot dV \quad \text{Ecu. 3.29}$$

donde PE y VE son la presión y volumen en el punto E, y V es el volumen dentro del cilindro a determinado instante. Queda entonces:

$$dP = -\frac{KP \cdot PE \cdot VE^{KP}}{V^{KP+1}} \cdot dV + dP_{ht} \quad \text{Ecu. 3.30}$$

3.7 Procesos de escape y admisión

A los procesos de escape y admisión se los analizará en conjunto, por lo que en adelante se los referirá como el proceso escape-admisión. Esto se debe a que los cálculos realizados en ambos procesos son muy parecidos.

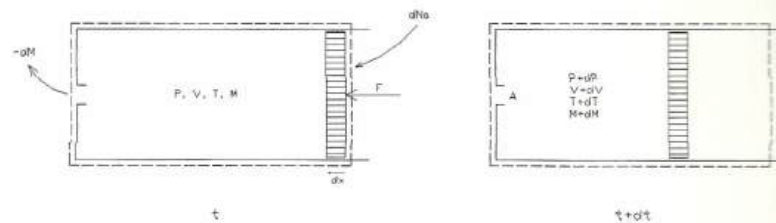
Las características del modelo escape-admisión son:

- Procesos de escape y admisión con transferencia de calor. No se considera la transferencia de los gases quemados a la válvula de escape. Este es un efecto importante (2) (13), pero su análisis está fuera del alcance de este trabajo.

- Se tomará en consideración el efecto del adelanto a la apertura de la válvula de escape y el retraso al cierre de la válvula de admisión. El retraso al cierre de la válvula de escape y el adelanto a la apertura de la válvula de admisión, o traslape de válvulas, son factores muy influyentes en el desempeño del motor. Este análisis requiere el conocimiento de las velocidades del fluido en el múltiple de admisión y de escape, además de la distribución de velocidades del fluido dentro del cilindro (entran en consideración términos de la inercia del fluido), para lo que se utilizan técnicas de CFD (dinámica de fluidos con computadora) (3). No se analizará el traslape de válvulas.
- Se utilizará una relación muy sencilla entre el área de orificio (área a través de la cual fluyen los gases) y el ángulo de cigüeñal, típica de motores de automóvil.

3.7.1 Descripción del modelo de escape-admisión

Figura 3.8
Diagrama para el análisis del proceso de escape (3)



La figura 3.8 (3) muestra el proceso de escape, y el volumen de control utilizado para el análisis. El pistón se mueve de la derecha a la izquierda. En el tiempo t , el estado del gas dentro del cilindro está dado por P , V , T , y M (presión, volumen, temperatura, y masa respectivamente), mientras que en el tiempo posterior $t+dt$, estos han cambiado a $P+dP$, $V+dV$, $T+dT$, y $M+dM$. La conservación de la masa requiere que una porción de masa $-dM$ deje el cilindro en el intervalo dt . Claramente, M disminuye, por lo que dM es negativo. P_0 denota la presión del colector de escape. A un tiempo t la energía en el volumen de control es:

$$M \cdot c_v \cdot T$$

Durante el intervalo de tiempo dt , la cantidad de energía

$$-dM \cdot c_p \cdot T$$

deja el volumen de control, y trabajo realizado por la fuerza F entra al volumen de control:

$$F \cdot dx = (P - PO) \cdot AP \cdot dx = -(P - PO) \cdot dV$$

donde AP es el área del pistón y dx es positivo. Durante dt , una cantidad de aire dN_a (subíndice a significa aire), entrará al volumen de control, con energía dada por:

$$h_a \cdot dN_a = (u_a + PO \cdot v_a) \cdot dN_a = u_a \cdot dN_a - PO \cdot dV$$

Por ahora se asume que no hay transferencia de calor a través de los límites del volumen de control. La energía en el volumen de control en el tiempo $t+dt$ es:

$$(M + dM) \cdot c_v \cdot (T + dT) + u_a \cdot dN_a$$

Se conocen entonces los flujos de energía del volumen de control. Es posible ahora aplicar la primera ley de la termodinámica. La ecuación resultante es, despreciando términos con diferenciales de segundo orden:

$$-P \cdot dV + (c_p - c_v) \cdot T \cdot dM - M \cdot c_v \cdot dT = 0 \quad \text{Ecu. 3.31}$$

El gas de escape es considerado como gas ideal, entonces:

$$\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V} = \frac{dM}{M} + \frac{dT}{T} \quad \text{Ecu. 3.32}$$

Eliminando dT entra las últimas dos ecuaciones:

$$\frac{1}{KP} \cdot \frac{dP}{P} + \frac{dV}{V} - \frac{dM}{M} = 0 \quad \text{Ecu. 3.33}$$

Integrando esta última ecuación se obtiene:

$$P \cdot \left(\frac{V}{M} \right)^{KP} = P \cdot v^{KP} = cte \quad \text{Ecu. 3.34}$$

que pudo haber sido obtenida en un solo paso, sin realizar este análisis, al notar que el gas que queda dentro del cilindro del motor sufre un cambio de estado adiabático reversible. El cambio puede ser causado por el movimiento del pistón o por el flujo de gas o por una combinación de los dos. La ecuación 3.33 puede escribirse como:

$$\frac{dP}{dt} = KP \cdot P \cdot \left(\frac{1}{M} \cdot \frac{dM}{dt} - \frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{dt} \right) \quad \text{Ecu. 3.35}$$

Aplicando el procedimiento anterior al proceso de admisión, se obtiene:

$$\frac{dP}{dt} = KR \cdot \left(\frac{R' \cdot TM}{V} \cdot \frac{dM}{dt} - \frac{P}{V} \cdot \frac{dV}{dt} \right) \quad \text{Ecu. 3.36}$$

donde R' es la constante de gas específica, y TM la temperatura en el colector de admisión. Nótese que ambas ecuaciones requieren el conocimiento del flujo de masa dM/dt.

3.7.2 Flujo de masa a través de un orificio

Cuando un gas a presión P y temperatura T con una razón de calores específicos K fluye a través de una apertura con área efectiva A (A es el producto del área real del orificio por un adecuado coeficiente de descarga) hacia una región a presión P_o , el flujo debe ser considerado en dos regímenes, subsónico y supersónico. La razón de presiones crítica que define los dos regímenes CRIT dependerá solamente del valor K del gas:

$$CRIT = \left(\frac{K+1}{2} \right)^{\frac{K}{K-1}} \quad \text{Ecu. 3.37}$$

Cuando P/P_o es menor que CRIT, el flujo es subsónico, y:

$$\frac{dM}{dt} = A \cdot P_o \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot K}{R' \cdot T \cdot (K-1)} \left(\frac{P}{P_o} \right)^{\frac{K-1}{K}} \left[\left(\frac{P}{P_o} \right)^{\frac{K-1}{K}} - 1 \right]} \quad \text{Ecu. 3.38}$$

Si P/P_o excede CRIT, entonces el flujo es supersónico y:

$$\frac{dM}{dt} = A \cdot P \cdot \sqrt{\frac{K}{R' \cdot T} \left(\frac{2}{K+1} \right)^{\frac{K+1}{K-1}}} \quad \text{Ecu. 3.39}$$

donde para el aire y productos de la combustión $R' \approx 0.29$ kJ/kg K y $CRIT \approx 1.8$.

En el proceso de escape, P es la presión dentro del cilindro, P_o es la presión del colector de escape, y T es la temperatura dentro del cilindro. En el proceso de admisión, P es la presión

del colector de admisión, P_o la presión dentro del cilindro, y T la temperatura en el colector de admisión.

3.7.3 Variación del área de orificio

Un detallado tratado de los procesos de escape y admisión, requiere la especificación de la variación del área de orificio (área a través de la cual fluye el gas) con el ángulo del cigüeñal.

AO es el máximo valor del área de orificio. Este valor está dado por:

$$AO = \frac{\pi \cdot DV^2}{4} \quad \text{Ecu. 3.40}$$

donde DV es el diámetro de la válvula, de escape o admisión según sea el caso. Nótese que este valor no es realmente el área a través de la cual fluye el gas, pues no ha sido corregida con un coeficiente de descarga, pero resulta adecuado para los propósitos del modelo.

La variación del área de orificio A con el ángulo de cigüeñal θ estará dada por (3):

$$A_{ex} = AO \cdot \left\{ 180 \cdot \frac{\theta + \theta_{ex}}{180 + \theta_{ex}} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad \text{Ecu. 3.41}$$

durante el escape, y (3):

$$A_{in} = AO \cdot \left\{ 180 \cdot \frac{\theta - \theta_{in}}{180 - \theta_{in}} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad \text{Ecu. 3.42}$$

durante la admisión. θ_{ex} es el ángulo de apertura de la válvula de escape, y θ_{in} es el ángulo de cierre de la válvula de admisión.

Un análisis más completo del flujo a través de las válvulas incluiría (13):

- Área de orificio determinada a partir del diámetro de la válvula, alzada de la válvula, y coeficiente de descarga. Inclusive se puede simular el efecto del ángulo de maquinado de la cara de la válvula.
- Variación de la alzada de la válvula con el ángulo de cigüeñal, determinado a partir del perfil de la leva. Resultaría interesante la simulación de una leva de perfil variable, método utilizado mucho en la actualidad para mejorar el desempeño del motor para un mayor rango de RPM.
- Coeficiente de descarga para diversas condiciones de operación del motor. El coeficiente de descarga es función de (13): la dirección del flujo de gases, la alzada de la válvula, la relación de presiones (presión dentro del cilindro y presión del

colector de escape o admisión), el ángulo de maquinado de la cara de la leva, el ángulo del asiento de la leva, y la geometría del colector (de admisión o escape).

- El modelo se puede corregir para incluir los resultados de un modelo mecánico del sistema leva-seguidor-válvula.

Todos estos efectos pueden ser fácilmente incluidos en el modelo.

3.7.4 Cálculo de la variación de presión durante el escape y la admisión

La ecuación 3.35 muestra la variación de la presión debida al movimiento del pistón dP_{mov} y al flujo de gas dP_{flow} durante el escape. Incluyendo el término de la transferencia de calor dP_{ht} y tomando en cuenta que $dP_{\text{comb}}=0$, tenemos para el escape:

$$dP = KP \cdot P \cdot \left(\frac{1}{M} \cdot \frac{dM}{dt} - \frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{dt} \right) \cdot dt + dP_{\text{ht}} \quad \text{Ecu. 3.43}$$

y para la admisión:

$$dP = KR \cdot \left(\frac{R \cdot TM}{V} \cdot \frac{dM}{dt} - \frac{P}{V} \cdot \frac{dV}{dt} \right) \cdot dt + dP_{\text{ht}} \quad \text{Ecu. 3.44}$$

donde dt (en s) es determinado a partir del intervalo de ángulo $d\theta$ (en °) con:

$$dt = \frac{d\theta}{6 \cdot RMP} \quad \text{Ecu. 3.45}$$

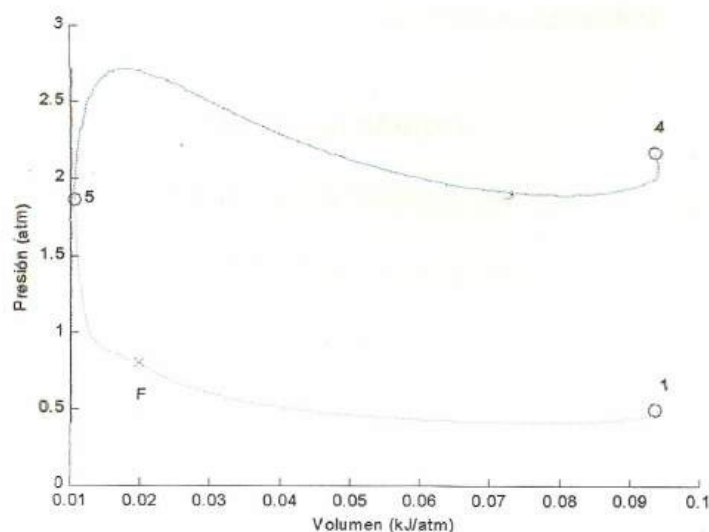
3.7.5 Eficiencia volumétrica

Cuando el pistón se encuentra en el PMS, la masa de gases de escape en el volumen dentro del cilindro es M_{PMS} , y representa los gases residuales que quedarán dentro del cilindro en el siguiente ciclo. La presión del cilindro P en el PMS es mayor que la del colector de admisión PM. Si no hay traslape de válvulas (suposición del modelo), entonces la válvula de escape se cerrará justo en el PMS, e inmediatamente se abrirá la de admisión. Al abrirse la válvula de admisión se producirá una reducción de presión en el espacio de trabajo, y al mismo tiempo, gas de escape fluirá hacia el colector de admisión, desplazando mezcla fresca. El flujo hacia fuera de gases de escape continuará hasta que la presión dentro del cilindro P se reduce a PM. Con un mayor movimiento del pistón, P caerá bajo PM, y la dirección del flujo se revertirá. El gas de escape que al principio fluyó hacia el colector de admisión, regresará al volumen de trabajo.

La mezcla fresca no entrará al cilindro hasta que todo el gas de escape haya regresado al espacio de trabajo. Un correcto tratado del proceso de admisión identifica el instante cuando $M=M_{PMS}$, o sea, la masa de gases dentro del cilindro es otra vez igual a la masa de gases que existía al final del escape. Se

denominará a este punto como punto F. Esta condición marca el inicio del flujo de mezcla fresca dentro del cilindro. La figura 3.9, obtenida utilizando el modelo propuesto, muestra el punto F en un diagrama P-V para un determinado motor bajo determinadas condiciones. La posición del punto F en el diagrama P-V es un indicativo de la eficiencia volumétrica: cuanto más cerca este el punto F al PMS, mayor será la eficiencia volumétrica.

Figura 3.9
Punto de inicio de entrada de mezcla fresca F en un diagrama P-V



El propósito de un detallado tratado del proceso de admisión requiere calcular la masa de carga fresca al inicio de la compresión. Esto se logra al sumar pequeñas porciones de carga fresca, dM , que fluyen hacia dentro del cilindro:

$$M_{PMI} = M_{PMS} + \sum dM \quad \text{Ecu. 3.46}$$

La eficiencia volumétrica (sección 1.14) se calcula a partir de:

$$\eta_v = \frac{(M_{PMI} - M_{PMS}) \cdot R \cdot TM}{PM \cdot VDISP} \quad \text{Ecu. 3.47}$$

3.7.6 Procedimiento

La aplicación del procedimiento de paso a paso (sección 3.1) al proceso de escape-admisión es más complicada, desde el punto de vista numérico, que la mostrada para los procesos analizados previamente. Varias modificaciones son requeridas para que los resultados converjan numéricamente (3). Para más información, se recomienda revisar el Apéndice.

3.8 Transferencia de calor dentro del cilindro

Típicamente de 20 a 35 % de la energía del combustible pasa al refrigerante del motor (4) (10) (13) . Cerca de la mitad se debe a la transferencia de calor del fluido a las paredes internas del cilindro, y el resto a la transferencia de calor del fluido hacia el sistema de escape (válvula, colector). Este último efecto no será tomado en cuenta, pues esta fuera del alcance de este trabajo.

El principal objetivo de los cálculos de esta sección es la determinación del coeficiente de transferencia de calor h . Este es una función de la posición y del tiempo. Un conocimiento de la variación espacial es requerido si se han de determinar los esfuerzos

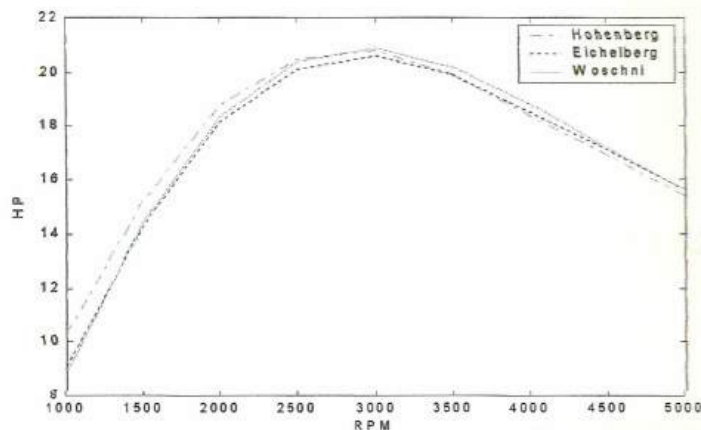
térmicos. Tal conocimiento también es requerido para un cálculo preciso de las emisiones. Una correlación simple que proporcione un valor promediado sobre el espacio es suficiente para los objetivos de este trabajo (2) (13).

En un MCIECH alrededor de 20% de la transferencia de calor es debida a la radiación. Esta es usualmente incluida en las correlaciones de los coeficientes, o es despreciada (17).

3.8.1 Algunas expresiones del coeficiente de transferencia de calor

Las correlaciones planteadas a continuación se derivan de mediciones experimentales. Es de resaltar que, a pesar de que se obtienen valores diferentes del coeficiente de transferencia de calor para las diversas correlaciones, tal diferencia es prácticamente "borrada" en las predicciones del desempeño del motor. Esto se debe a que un 10% de error en la predicción de la transferencia de calor dentro del cilindro, produce un 1% de error en la predicción del desempeño del motor (13). La figura 3.10 muestra la variación HP vs. RPM para tres diferentes correlaciones de un motor determinado bajo determinadas condiciones, de acuerdo con cálculos realizados utilizando el modelo propuesto.

Figura 3.10
Curva HP-RPM para diversas correlaciones del coeficiente de transferencia de calor entre el fluido y las paredes internas del cilindro



El valor de h estará dado en $\text{kW/m}^2 \text{K}$, vp es la velocidad media del pistón en m/s , B es el calibre en m , y P y T la presión en atm y temperatura en K del fluido dentro del cilindro.

Una de las más tempranas correlaciones para transferencia de calor dentro del cilindro es debida a Eichelberg (1939):

$$h = 0.00243 \cdot vp^{\frac{1}{3}} \cdot (P \cdot T)^{\frac{1}{2}} \quad \text{Ecu. 3.48}$$

La correlación de Woschni (1967) es:

$$h = 0.1298 \cdot P^{0.8} \cdot u^{0.8} \cdot B^{-0.2} \cdot T^{-0.55} \quad \text{Ecu. 3.49}$$

donde u está dado por:

$$u = C1 \cdot vp + C2 \cdot \frac{VDISP \cdot T1}{P1 \cdot V1} (P - P') \quad \text{Ecu. 3.50}$$

T_1 , P_1 y V_1 se refieren al punto 1, inicio de la compresión. P' es la presión que existiría dentro del cilindro si no hubiera combustión:

$$P' = P_1 \cdot \left(\frac{V_1}{V} \right)^K \quad \text{Ecu. 3.51}$$

donde se pudiera hacer $K=1.3$. Los valores de C_1 y C_2 se dan en la siguiente tabla:

Tabla 3.2
Coeficientes de la correlación de Woschni del coeficiente de transferencia de calor entre el fluido y las paredes internas del cilindro (13)

Proceso	C1	C2
Escape-Admisión	6.18	0
Compresión	2.28	0
Combustión y Expansión	2.28	0.00324

Hohenberg (1979) propone una expresión más simple:

$$h = \frac{0.1298 \cdot P^{0.8}}{VDISP^{0.06} \cdot T^{0.4}} \cdot (vp + 1.4) \quad \text{Ecu. 3.52}$$

3.8.2 Cálculo de la variación de presión debida a la transferencia del calor del fluido a las paredes internas del cilindro

Se requerirá conocer la temperatura de las paredes internas del cilindro y un área de transferencia de calor, junto con las correlaciones previas, para determinar dP_{ht} .

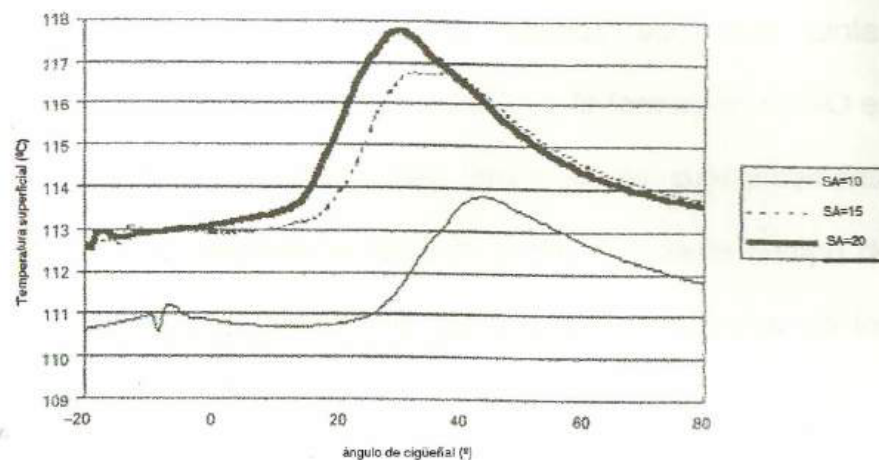
Al revisar estudios sobre la distribución de temperaturas de las paredes internas del cilindro (2), parecería inadecuado asumir una única temperatura de las paredes internas del cilindro T_W

(figura 3.11 (2) muestra la distribución de temperaturas en un MCIEC). Pero debe recordarse que h es un coeficiente promedio de transferencia de calor entre el fluido y las paredes internas del cilindro, por lo tanto requerirá una temperatura promedio. Este procedimiento es el adecuado (2) (3) (13). La variación de TW con el ángulo de cigüeñal es poca (2) (13) como lo muestra la figura 3.12 (13) para diversos adelantos de la ignición SA. Un valor de $TW=350$ K es adecuado para la mayoría de los casos (13).

$$dP_{ht} = \frac{h \cdot A \cdot (TW - T)}{m \cdot c_v \cdot T} \cdot P \cdot dt \quad \text{Ecu. 3.54}$$

donde P es la presión dentro del cilindro en un instante determinado, m es la masa del fluido dentro del cilindro, c_v el calor específico del fluido dentro del cilindro, y dt está dado por la ecuación 3.45. La ecuación 3.54 es aplicable a cualquier proceso, siempre y cuando se utilicen los correctos coeficientes $C1$ y $C2$ en caso de aplicar la correlación de Woschni.

Figura 3.12
Variación de la temperatura promedio de las paredes internas del cilindro con el ángulo de cigüeñal (13)

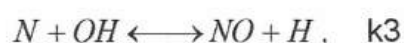
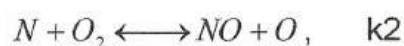
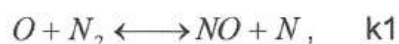


3.8.3 Procedimiento

Previamente se ha visto la presencia del término dP_{ht} para los diversos procesos (ecuaciones 3.11, 3.22, 3.30, 3.43, y 3.44). Es cuestión solo de calcular dP_{ht} dadas las condiciones de presión, temperatura y volumen del estado inicial (sección 3.1), y sumar este dP_{ht} a la ecuación de dP del proceso.

3.9 Emisiones de monóxido de nitrógeno

El mecanismo térmico de formación de monóxido de nitrógeno se basa en las ecuaciones de Zeldovich (2) (13):



donde k_1 , k_2 , y k_3 son constantes específicas de rapidez de reacción. Las constantes específicas de rapidez de reacción (sección 1.13) para el mecanismo térmico son muy lentas comparadas con aquellas de la combustión, y la formación de NO es significativa solamente cuando hay temperaturas suficientemente altas (por ejemplo mayores a 1800 K) y hay suficiente tiempo de exposición. Entonces, se asume que todas las especies de los productos, a parte del NO, están en equilibrio químico.

3.9.1 Descripción del modelo

En el análisis de MCIECH es adecuado solo considerar el mecanismo de formación de NO térmico (2) (13).

El proceso de combustión es modelado al dividir el fluido dentro del cilindro en dos regiones: los gases quemados y los no quemados, separados por una región muy delgada (véanse

secciones 1.10 y 3.5.1). Se asume que el proceso de combustión ocurre instantánea y completamente. Subsecuentemente, el gas quemado o productos es asumido en un estado de equilibrio termodinámico para las siguientes especies: CO_2 , CO , O_2 , O , N_2 , H , H_2 , OH , y H_2O . También se calcula el valor en equilibrio del óxido nítrico, ahora denotado por NO_e . El valor del nivel de óxido nítrico cinéticamente controlado, denotado por NO , puede ser resuelto al resolver una ecuación diferencial (ecuación 3.64). La cinética del NO ha sido separada de la reacción de combustión, lo que es aceptable pues la cinética de la oxidación de hidrocarburos es de algunos órdenes de magnitud más rápida que la cinética de formación del NO (13) (6). Esto queda claro, justificando la suposición, al observar la escala de tiempo τ de las siguientes reacciones que ocurren durante la combustión y expansión (a mayor escala de tiempo más tiempo "demora la reacción"):



Tabla 3.3
Escalas de tiempo de diversas reacciones químicas que ocurren durante la combustión y expansión (13)

Reacción	τ (s)
$H+O_2 \rightarrow OH+O$	$2 \cdot 10^{-7}$
$H+OH+A \rightarrow H_2O+A$	$7 \cdot 10^{-5}$
$CH_4+A \rightarrow CH_3+H+A$	$5 \cdot 10^{-4}$
$CH_3+OH \rightarrow CH_2+H_2O$	$2 \cdot 10^{-6}$
$CH+N_2 \rightarrow HCN+N$	$3 \cdot 10^{-6}$
$O+H_2 \rightarrow OH+H$	$2 \cdot 10^{-5}$
$N_2+O \rightarrow NO+N$	$4 \cdot 10^{-2}$
$CH_4+OH \rightarrow CH_3+H_2O$	$2 \cdot 10^{-7}$
$CO+OH \rightarrow CO_2+H$	$2 \cdot 10^{-5}$
$CH_2+N_2 \rightarrow HCN+NH$	0.2

3.9.2 Cálculo de las emisiones de monóxido de nitrógeno

La ecuación 1.17 (sección 1.12):

$$\frac{d[A_i]}{dt} = (v_i'' - v_i') \cdot RR = (v_i'' - v_i') \cdot k \cdot \prod_{i=1}^N [A_i]^{v_i'} \quad \text{Ecu. 3.55}$$

aplicada a las reacciones del mecanismo de térmico queda:

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} = & k1^+ \cdot [O] \cdot [N_2] + k2^+ \cdot [N] \cdot [O_2] + k3^+ \cdot [N] \cdot [OH] - k1^- \cdot [NO] \cdot [N] \\ & - k2^- \cdot [NO] \cdot [O] - k3^- \cdot [NO] \cdot [H] \end{aligned}$$

Ecu. 3.56

donde $[A]$ es la concentración de la especie A, kn^+ es la constante específica de reacción hacia delante de la reacción n,

y k_n^- es la constante específica de reacción hacia atrás de la reacción n.

Ya que la concentración de nitrógeno atómico N es baja, generalmente no es calculada en la evaluación de los productos en equilibrio químico. Se puede asumir que es invariante, de forma que:

$$\frac{d[N]}{dt} = k1^+ \cdot [O] \cdot [N_2] - k2^+ \cdot [N] \cdot [O_2] - k3^+ \cdot [N] \cdot [OH] - k1^- \cdot [NO] \cdot [N] + k2^- [NO] \cdot [O] + k3^- \cdot [NO] \cdot [H] = 0$$

Ecu. 3.57

Las constantes específicas de rapidez de reacción hacia delante y hacia atrás pueden ser relacionadas mediante:

$$R1 = k1^+ \cdot [O]_e \cdot [N_2]_e = k1^- \cdot [NO]_e \cdot [N]_e \quad \text{Ecu. 3.58}$$

$$R2 = k2^+ \cdot [N]_e \cdot [O_2]_e = k2^- \cdot [NO]_e \cdot [O]_e \quad \text{Ecu. 3.59}$$

$$R3 = k3^+ \cdot [N]_e \cdot [OH]_e = k3^- \cdot [NO]_e \cdot [H]_e \quad \text{Ecu. 3.60}$$

donde $[]_e$ indica la concentración en equilibrio químico. El valor de $[N]$ no se tiene, pues no se ha considerado la presencia de esta especie en los productos. Se utilizan las siguientes relaciones:

$$K_{c1} = \frac{k1^+}{k1^-} \quad \text{Ecu. 3.61}$$

$$K_{c2} = \frac{k2^+}{k2^-} \quad \text{Ecu. 3.62}$$

$$K_c = \frac{k_3^+}{k_3^-} \quad \text{Ecu. 3.63}$$

donde K_c es la constante de equilibrio químico, y $K_c = K_p$ (véanse las ecuaciones 2.18 y 2.20 sección 2.1). Aplicando las ecuaciones previas, se llega a:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2 \cdot R_1 \cdot \left\{ 1 - \left(\frac{[NO]}{[NO]_e} \right)^2 \right\}}{1 + \frac{R_1}{R_2 + R_3} \cdot \left(\frac{[NO]}{[NO]_e} \right)} \quad \text{Ecu. 3.64}$$

La solución de esta ecuación diferencial proporciona el resultado deseado, que es $[NO]$.

Las constantes específicas de rapidez de reacción se calculan a partir de (sección 1.12):

$$k = B \cdot T^\alpha \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot T}\right) \quad \text{Ecu. 3.65}$$

donde B , α , y $-E_a/RT$, según Miller & Bowman (1989) (13) son:

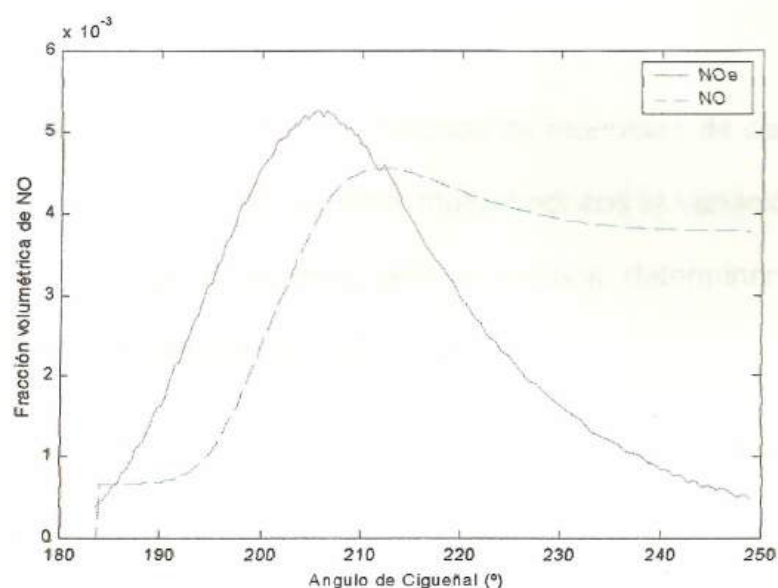
Tabla 3.4
Coeficientes para el cálculo de la constante específica de tasa de reacción de las reacciones del mecanismo térmico de producción de NO (13)

Reacción	B	α	$-E_a/RT$
$N_2 + O \rightarrow NO + N$	$3.3 \cdot 10^{12}$	0.3	0
$N + O_2 \rightarrow NO + O$	$6.4 \cdot 10^9$	1	3160
$N + OH \rightarrow NO + H$	$3.8 \cdot 10^{13}$	0	0

Esto para determinar solo k^+ (nótese la dirección de la reacción).

La figura 3.13, obtenida utilizando el modelo propuesto, muestra la diferencia entre las predicciones de la concentración de NO según los cálculos de equilibrio químico (NO_e) y los de la cinética química (NO). Nótese que a partir de determinado ángulo de giro de cigüeñal, la concentración de NO se vuelve constante; se dice que se "congela". La temperatura a la que esto ocurre se llama "temperatura de congelamiento".

Figura 3.13
Variación del NO durante la expansión según
equilibrio químico y según cinética química



3.10 Emisiones de monóxido de carbono

Las emisiones de monóxido de carbono estarán entre aquellas predichas por los cálculos de equilibrio químico a máxima presión y aquellas en el punto de apertura de la válvula de escape: para

mezclas ricas estarán más cerca del valor de máxima presión, y para mezclas pobres más cerca del valor del punto de apertura de la válvula de escape (13). Así como con las emisiones de óxido nítrico, esto es consecuencia de una caída de la rapidez de reacción durante la expansión, de forma que se alcanza una temperatura en que la composición de monóxido de carbono pareciera "congelarse". Las emisiones de CO pueden modelarse mediante la especificación de una temperatura de congelamiento, en la cual se evalúa la concentración de equilibrio. Modelos más precisos incluyen efectos de la cinética química.

El principal determinante de las emisiones de monóxido de carbono es el porcentaje de aire. En motores multicilíndricos la variación del porcentaje de aire entre cilindros, será el principal determinante de las emisiones de monóxido de carbono (13).

El modelo utilizado, considerará que las emisiones de monóxido de carbono del MCIECH serán aquellas en el punto de apertura de la válvula de escape, considerando equilibrio químico.

3.11 Resumen de las características del modelo

- Modelo termodinámico cero-dimensional de un MCIECH monocilíndrico de cuatro tiempos trabajando con gasolina C_8H_{18}

- El sistema a analizar es el fluido dentro del cilindro de escape y
- Parámetros de funcionamiento del MCIECH se encuentran a partir del diagrama P-V del ciclo del motor "dibujado" mediante cálculos termodinámicos, utilizando un procedimiento de paso a paso
- Gases obedecen la ecuación de estado de gas ideal
- Se utilizan expresiones empíricas para calcular las diversas propiedades termodinámicas de los gases
- Todos los procesos ocurren con transferencia de calor desde el fluido hacia las paredes internas del cilindro
- Compresión con razón de calores específicos constante
- Modelo de combustión cero-dimensional, onda de combustión plana unidimensional, combustión en equilibrio químico de 10 especies (CO_2 , CO , O_2 , O , NO , N_2 , H , H_2 , OH , H_2O), expresión empírica de duración de la combustión típica de motores de automóvil funcionando con gasolina, expresiones empíricas de la relación entre fracción de masa de gases quemados y ángulo del cigüeñal
- Expansión con razón de calores específicos constante y números de moles de cada especie gaseosa constantes



- Se considera el adelanto a la apertura de la válvula de escape y el retraso al cierre de la admisión durante el proceso de escape-admisión. No se considera el traslape de válvulas
- Relación sencilla entre área de paso de los gases y ángulo del cigüeñal durante escape-admisión. No se incluyen coeficientes de descarga
- Emisión de NO calculada según cinética química (mecanismo térmico de Zeldovich extendido)
- Emisión de CO calculada según equilibrio químico

CAPÍTULO 4

4 VALIDACION DEL MODELO

Un paso de gran importancia en la construcción de todo modelo es el análisis de los resultados obtenidos (9). Este análisis se dividirá en dos partes.

Primero, en este capítulo, se compararán los resultados obtenidos con el modelo propuesto con aquellos obtenidos por un modelo más sofisticado (16) y por pruebas de laboratorio disponibles en la literatura (5). En este capítulo, no se discutirá en detalle las figuras mostradas. Esto se dejará para el capítulo 5.

El estudio, tanto teórico como experimental, del comportamiento de los *parámetros de funcionamiento de un MCIECH* al variar sus características de diseño y condiciones de operación se viene realizando desde los inicios del MCIECH. Existe gran cantidad de información respecto a este tema,

por ejemplo (1) (2) (3) (4) (7) (10) (11) (12) (13) (15). En el capítulo 5 se discutirá la forma de las curvas de funcionamiento de un MCIECH (de características dadas por tabla 4.2) predichas por el modelo propuesto, y se compararán con la forma de curvas experimentales de acuerdo con lo mencionado en la bibliografía.

4.1 Comparación entre resultados obtenidos con el algoritmo de equilibrio químico y el programa STANJAN

STANJAN es uno de los programas para realizar cálculos de equilibrio químico más utilizados y difundidos. Esta disponible en la Internet en muchos lugares, entre ellos (16). Utiliza el método de la minimización de la energía libre de Gibbs (sección 2.3). Logra, en menor tiempo, mejores resultados que el algoritmo equiv10.m utilizado por el modelo propuesto.

Supóngase una combustión adiabática de C_8H_{18} a volumen constante. Los reactivos se encuentran, luego de la compresión, en una cámara de combustión de 102.6 cm^3 a 740 K y 14 atm (datos típicos en MCIECH de automóvil). Considérese la presencia de diez especies gaseosas en los productos de la combustión: CO_2 , CO, O_2 , O, NO, N_2 , H, H_2 , OH, y H_2O . La figura 4.1 muestra la temperatura de flama adiabática TFA, al variar el porcentaje de aire AIRE, calculada utilizando STANJAN (TFA) y utilizando los algoritmos del modelo propuesto equiv10.m y tfaeq.m (TFA*). La tabla 4.1 compara

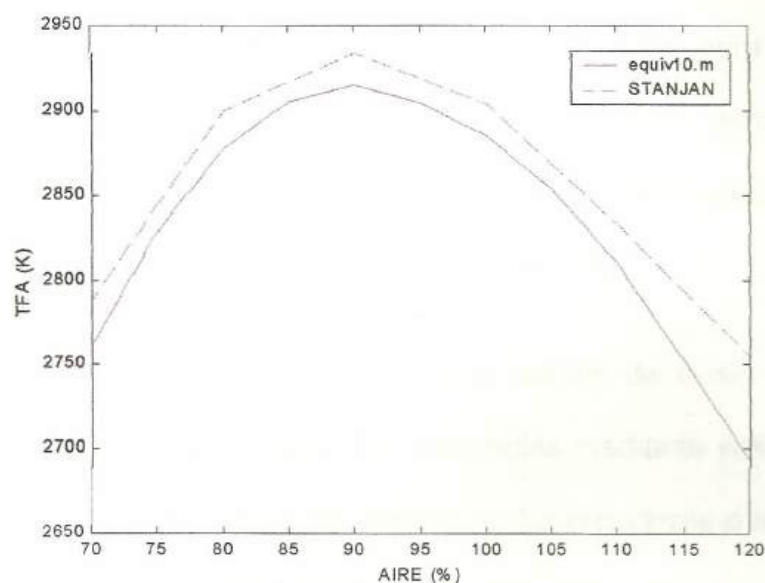
las fracciones volumétricas de cada especie gaseosa de los productos de la combustión según STANJAN (sin *) y según equiv10.m (con *).

Tabla 4.1
Fracciones volumétricas de los gases producto de la combustión según STANJAN y según equiv10.m

AIRE (%) →	70	80	90	100	110	120
TFA (K)	2787.8	2900.1	2934.1	2903.6	2832.9	2754.8
TFA* (K)	2760.7	2877.4	2915.0	2884.6	2809.8	2692.9
CO ₂	5.14E-02	7.07E-02	8.63E-02	9.44E-02	9.94E-02	9.53E-02
CO ₂ *	5.19E-02	7.12E-02	8.68E-02	9.51E-02	9.77E-02	9.69E-02
CO	1.08E-01	7.48E-02	4.70E-02	2.80E-02	1.37E-02	9.21E-03
CO*	1.08E-01	7.46E-02	4.67E-02	2.74E-02	1.52E-02	7.45E-03
O ₂	7.40E-05	7.31E-04	3.64E-03	9.90E-03	1.84E-02	2.95E-02
O ₂ *	6.56E-05	6.79E-04	3.51E-03	9.93E-03	1.92E-02	3.00E-02
O	5.63E-05	2.71E-04	6.90E-04	1.03E-03	9.21E-04	1.04E-03
O*	5.14E-05	2.59E-04	6.80E-04	1.04E-03	1.11E-03	8.85E-04
NO	6.48E-04	2.41E-03	5.69E-03	9.11E-03	1.07E-02	1.30E-02
NO*	5.82E-04	2.24E-03	5.42E-03	8.84E-03	1.12E-02	1.19E-02
N ₂	6.58E-01	6.84E-01	7.02E-01	7.15E-01	7.26E-01	7.30E-01
N ₂ *	6.58E-01	6.84E-01	7.03E-01	7.16E-01	7.24E-01	7.30E-01
H	2.04E-03	2.11E-03	1.67E-03	1.10E-03	5.14E-04	3.75E-04
H*	1.88E-03	1.99E-03	1.59E-03	1.05E-03	6.94E-04	5.59E-04
H ₂	4.20E-02	2.10E-02	1.04E-02	5.41E-03	2.46E-03	1.61E-03
H ₂ *	4.25E-02	2.13E-02	1.04E-02	5.44E-03	3.78E-03	5.46E-03
OH	1.84E-03	4.34E-03	6.92E-03	8.10E-03	7.02E-03	7.07E-03
OH*	1.54E-03	3.74E-03	6.08E-03	7.26E-03	8.06E-03	1.13E-02
H ₂ O	1.36E-01	1.40E-01	1.36E-01	1.28E-01	1.21E-01	1.13E-01

AIRE (%) →	70	80	90	100	110	120
H ₂ O*	1.36E-01	1.40E-01	1.36E-01	1.28E-01	1.19E-01	1.06E-01

Figura 4.1
Temperatura de flama adiabática calculada con STANJAN y con equiv10.m



4.2 Comparación entre resultados obtenidos con el modelo propuesto y el programa AIRCYCLE

El programa AIRCYCLE (16) es un programa con fines didácticos, empleado actualmente en el curso de MCI de la Universidad de Minnesota. Utiliza un modelo de MCIECH más sofisticado que el propuesto en este trabajo. No se basa en un simple ciclo Otto de aire estándar como parecería indicar el nombre. Este modelo, en comparación con el modelo propuesto, incluye además: un análisis

más detallado del proceso de combustión, una variación del área de paso de los gases con el ángulo de cigüeñal más realista, consideración de la presencia del traslape de válvulas, efectos de los colectores de admisión y escape, entre otros.

El objetivo didáctico de AIRCYCLE y su disponibilidad (es un freeware) fueron las razones por las que se lo escogió para validar el modelo propuesto. Existen otros programas parecidos, pero su costo es de algunos cientos de dólares. Los más sofisticados, pueden incluso costar algunos miles de dólares (18) (19).

Las figuras 4.2 a 4.4 comparan varias curvas de desempeño del MCIECH descrito en la tabla 4.1, calculadas mediante AIRCYCLE y mediante el modelo propuesto motor4.m. Lo importante a resaltar de estas figuras es el similar comportamiento del motor predicho por ambos modelos. Nótese que la "forma" de determinada curva obtenida por un modelo es igual a la obtenida por el otro modelo. Una de las principales razones de la diferencia entre ambas predicciones es el tratamiento más realista del proceso escape-admisión que realiza el programa AIRCYCLE. Por ejemplo, el área máxima a través de la cual fluyen los gases (sección 3.7.3) es un orificio de diámetro igual al diámetro de válvula según el modelo

propuesto. Esto no ocurre realmente. AIRCYCLE realiza correcciones, de forma que tal área se reduce.

Tabla 4.2
Características de diseño y condiciones de operación del motor a analizar

Calibre	100 mm
Carrera	100 mm
Longitud de la biela	200 mm
Relación de compresión	8
Diámetro de la válvula de admisión	25 mm
Diámetro de la válvula de escape	25 mm
RPM	3000
Adelanto de la ignición	30°APMS
Adelanto a la apertura del escape	10°APMI
Retraso al cierre de la admisión	10°DPMI
Temperatura de las paredes internas del cilindro	380 K
Porcentaje de aire	100 %
Temperatura del colector de admisión	300 K
Presión del colector de admisión	1 atm
Presión del colector de escape	1 atm
Combustión	en equilibrio químico
Variación de la fracción de gases quemados con el ángulo del cigüeñal	dada por ecuación 3.20
Correlación del coeficiente de transferencia de calor	dada por ecuación 3.49
Número de iteraciones del ciclo de cálculos	5

Figura 4.2
Efecto de la relación de compresión sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto

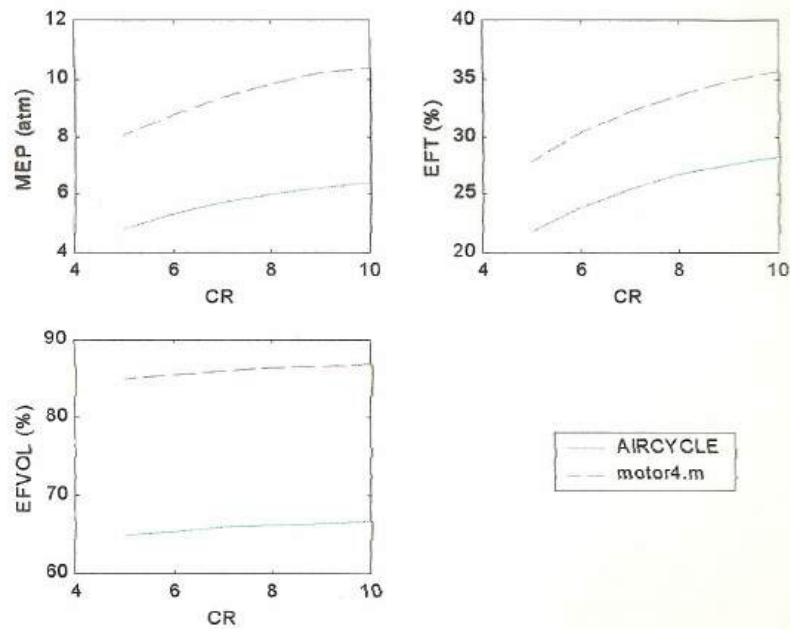


Figura 4.3
Efecto de las RPM sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto

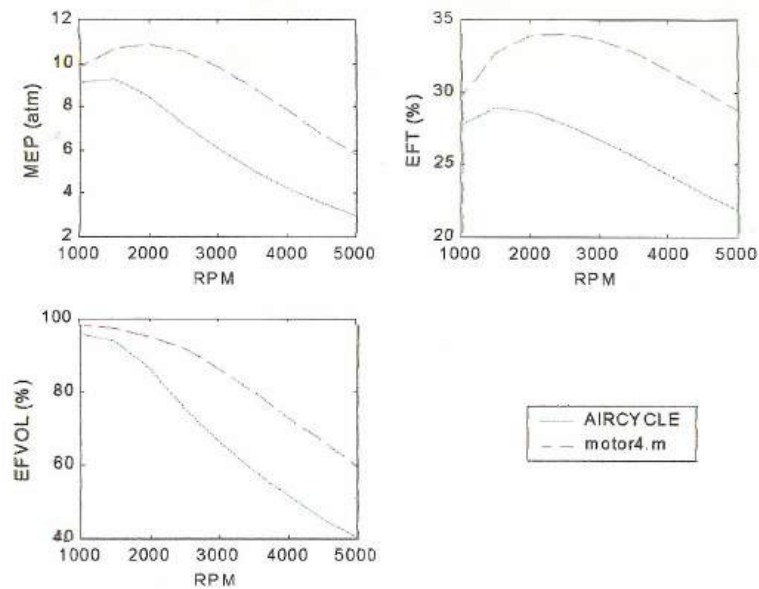


Figura 4.2
Efecto de la relación de compresión sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto

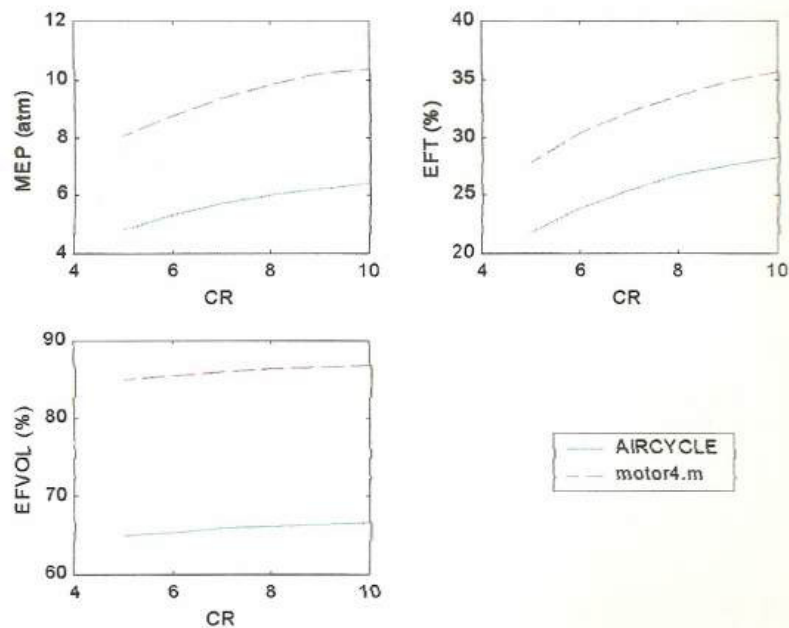


Figura 4.3
Efecto de las RPM sobre el desempeño según AIRCYCLE y según el modelo propuesto

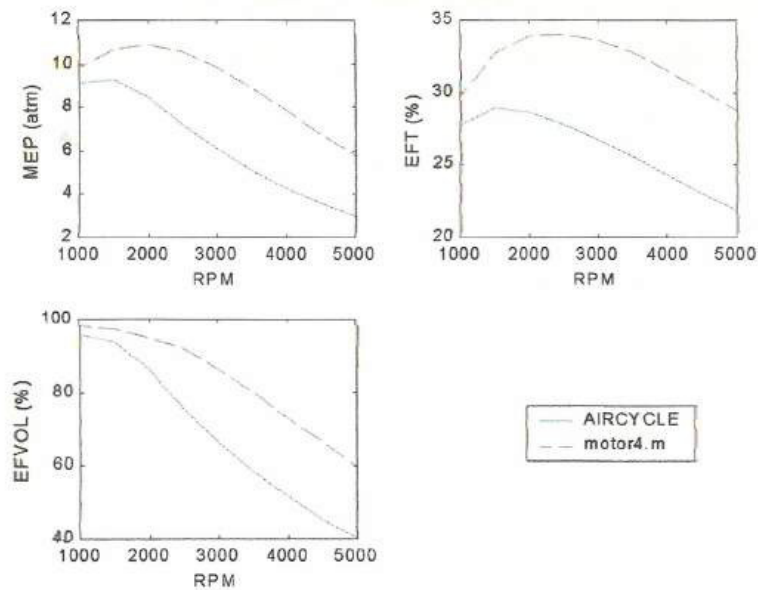
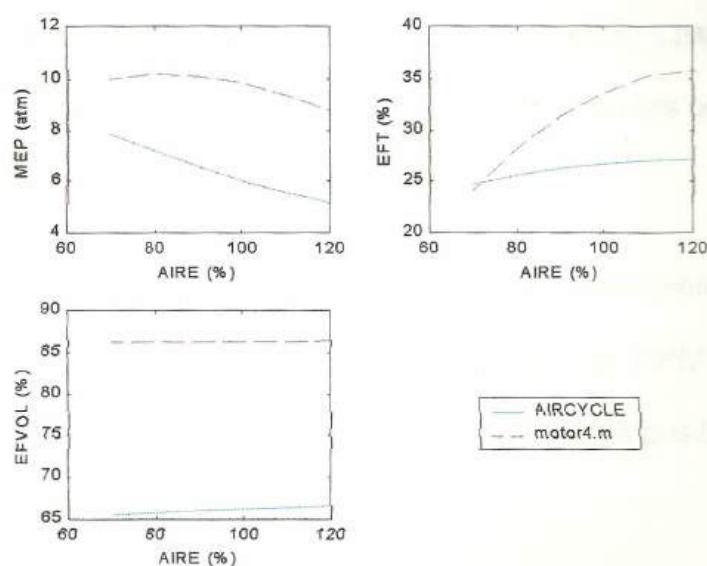


Figura 4.4
Efecto del porcentaje de aire sobre el desempeño según
AIRCYCLE y según el modelo propuesto



4.3 Comparación entre resultados obtenidos con el modelo propuesto y pruebas experimentales (5)

Se validaron los resultados logrados mediante el modelo propuesto con resultados experimentales dados en (5). Estos fueron obtenidos mediante pruebas realizadas en un MCIECH monocilíndrico, de cuatro tiempos, enfriado por agua, de relación de compresión variable, marca PLINT modelo TE-15/A (figura 4.5) perteneciente a la Facultad de Ingeniería Mecánica de la ESPOL. La tabla 4.2 muestra las características de diseño del motor PLINT TE-15/A y las condiciones de operación que se utilizaron (5) para realizar las

pruebas experimentales. El motor permite la variación de: la relación de compresión, el adelanto de la ignición, el porcentaje de aire, la presión del colector de admisión, y las RPM. Las figuras 4.6 a 4.13 comparan los resultados experimentales con las predicciones del modelo propuesto motor4.m.

La principal desventaja de los resultados experimentales mostrados en (5) es el reducido rango de variación de las RPM del motor. Nótese, por ejemplo, que en la figura 4.8 que no es posible apreciar la forma de la curva HP-RPM.

Es importante resaltar que el modelo propuesto busca realizar una simulación termodinámica, por lo que no toma en cuenta las pérdidas por fricción en el motor. Esta es una de las razones de la gran diferencia entre las predicciones realizadas por motor4.m y los datos experimentales.

Tabla 4.3
Características de diseño del motor PLINT TE-15/A y condiciones de operación utilizadas para realizar las pruebas experimentales (5)

Calibre	85 mm
Carrera	82.5 mm
Longitud de la biela	164.3 mm
Relación de compresión	8
Diámetro de la válvula de admisión	25 mm (estimado)

Diámetro de la válvula de escape	25 mm (estimado)
RPM	2000
Adelanto de la ignición	12°APMS
Adelanto a la apertura del escape	20°APMI (estimado)
Retraso al cierre de la admisión	20°DPMI (estimado)
Temperatura de las paredes internas del cilindro	400 K
Porcentaje de aire	98 %
Temperatura del colector de admisión	300 K
Presión del colector de admisión	0.95 atm (estimado)
Presión del colector de escape	1 atm
Combustión	en equilibrio químico
Variación de la fracción de gases quemados con el ángulo del cigüeñal	dada por ecuación 3.20
Correlación del coeficiente de transferencia de calor	dada por ecuación 3.49
Número de iteraciones del ciclo de cálculos	5

Figura 4.5
MCIECH monocilíndrico de relación de compresión variable PLINT TE-15/A (5)

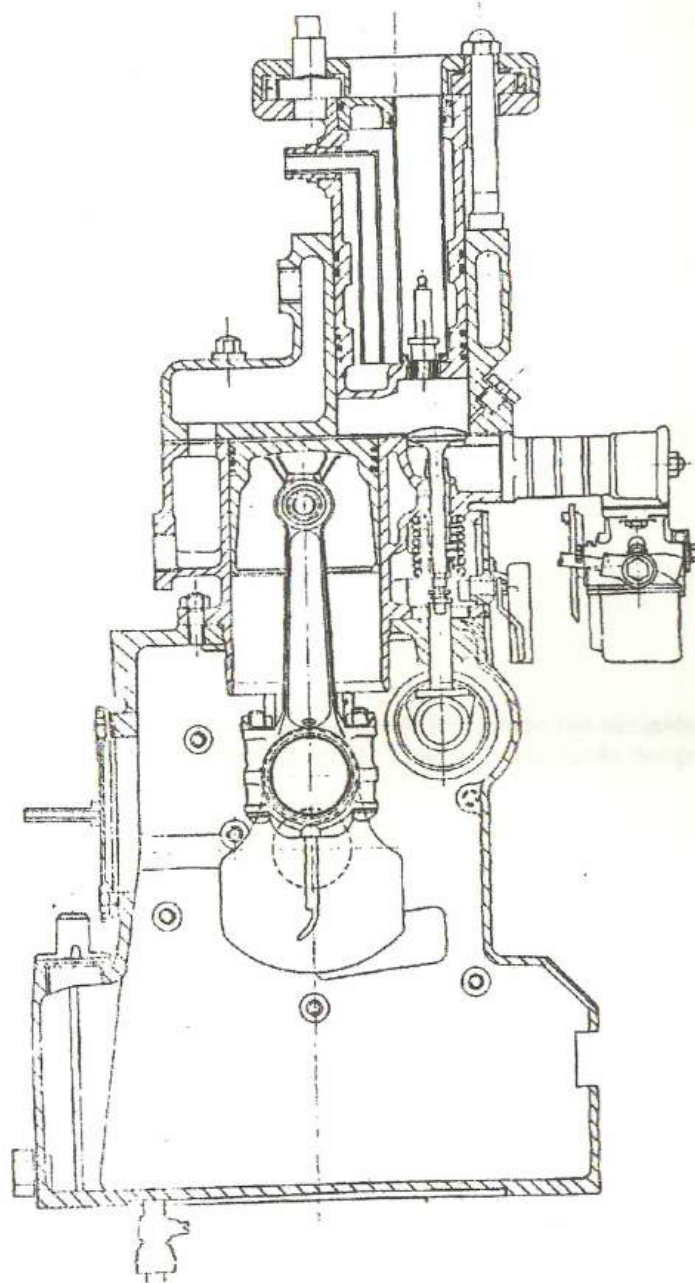


Figura 4.6
Efecto de la relación de compresión sobre el desempeño según
datos experimentales (5) y según el modelo propuesto

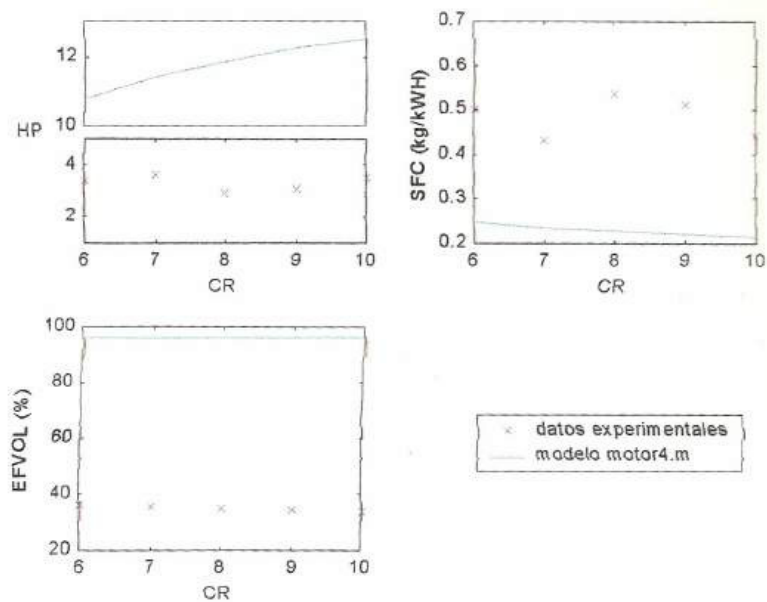


Figura 4.7
Efecto de la relación de compresión sobre las emisiones según
datos experimentales (5) y según el modelo propuesto

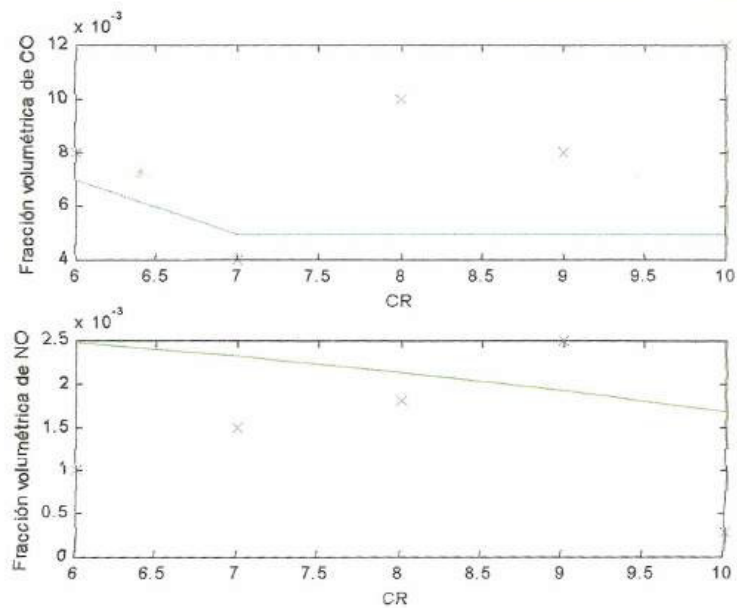


Figura 4.10
Efecto del adelanto de la ignición sobre el desempeño según datos
experimentales y según el modelo propuesto

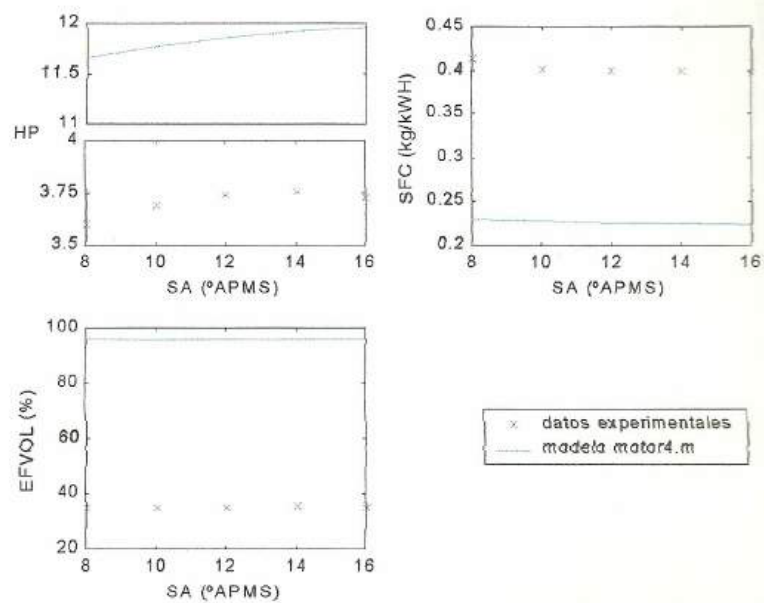


Figura 4.11
Efecto del adelanto de la ignición sobre las emisiones según
datos experimentales (5) y según el modelo propuesto

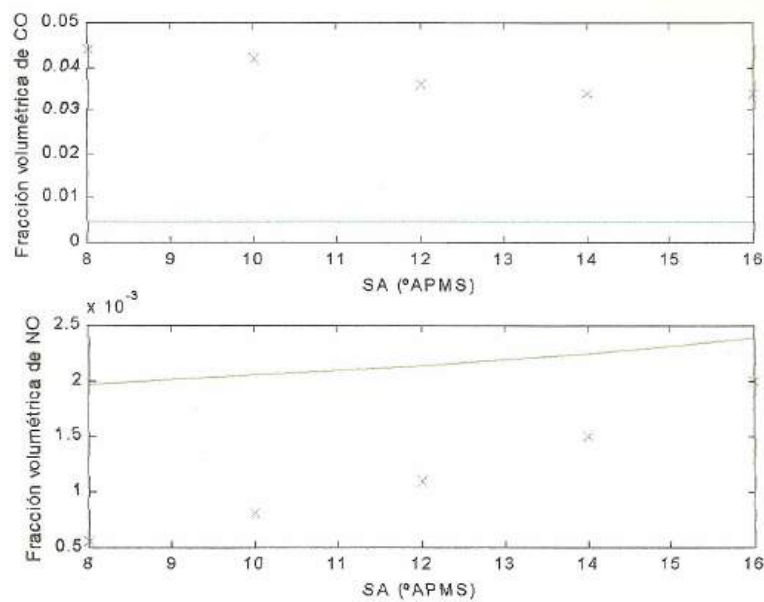


Figura 4.12
Efecto del porcentaje de aire sobre el desempeño según datos
experimentales (5) y según el modelo propuesto

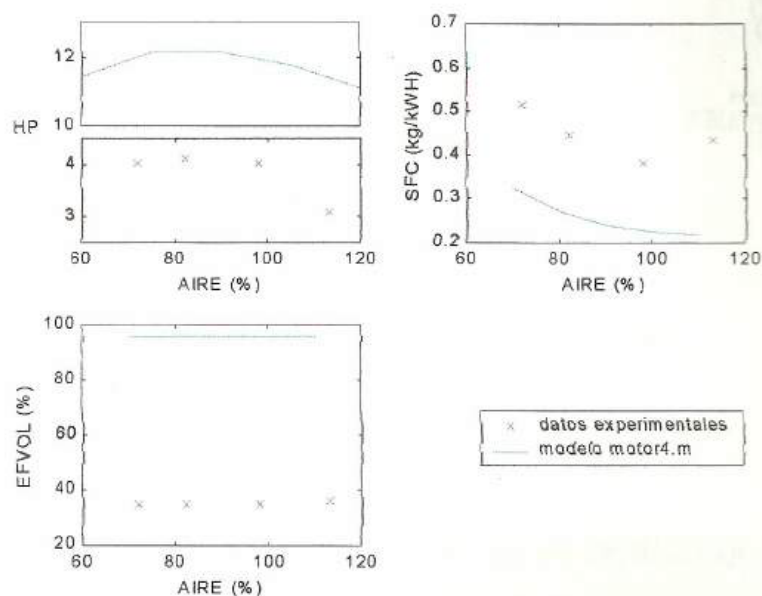
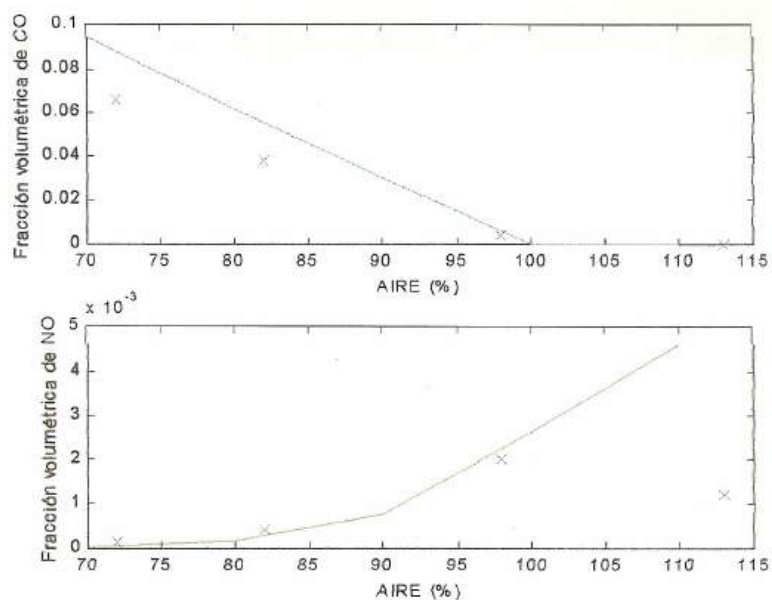


Figura 4.13
Efecto del porcentaje de aire sobre las emisiones según datos
experimentales (5) y según el modelo propuesto



CAPÍTULO 5



5 RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se analizará el desempeño de un MCIECH al variar sus características de diseño y condiciones de operación utilizando el modelo propuesto. Tal análisis ha sido realizado teórica y experimentalmente desde hace muchos años y ha sido extensamente publicado (1) (2) (3) (4) (7) (10) (11) (12) (13) (15), lo que servirá para validar las predicciones del modelo.

El desempeño de un MCIECH será determinado a partir de los siguientes parámetros de funcionamiento: potencia, consumo específico de combustible, eficiencia volumétrica, y emisiones.

A no ser que se indique otra cosa, se considerará a lo largo de este capítulo las características de diseño, condiciones de operación, y suposiciones que se muestran en la tabla 4.2.

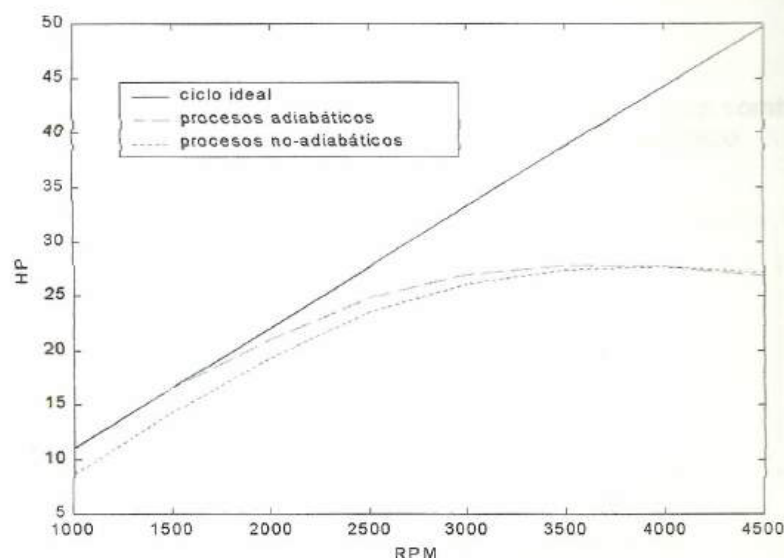
Al discutir el efecto de determinada característica de diseño o condición de operación sobre el desempeño del motor, se considerará que el resto permanece constante ("ceteris paribus").

Las figuras y tablas presentadas a lo largo de este capítulo se obtuvieron utilizando el modelo propuesto. El significado de los diversos símbolos utilizados está dado en la nomenclatura.

5.1 Mejora de las predicciones del modelo al ir aumentando su complejidad

¿Es justificable la cantidad y complejidad de cálculos realizados en el modelo propuesto al comparar sus resultados con los obtenidos por modelos más sencillos, como el basado en el ciclo Otto aire-combustible? La figura 5.1 responde claramente a esta pregunta.

Figura 5.1
Curva HP-RPM para diversos modelos

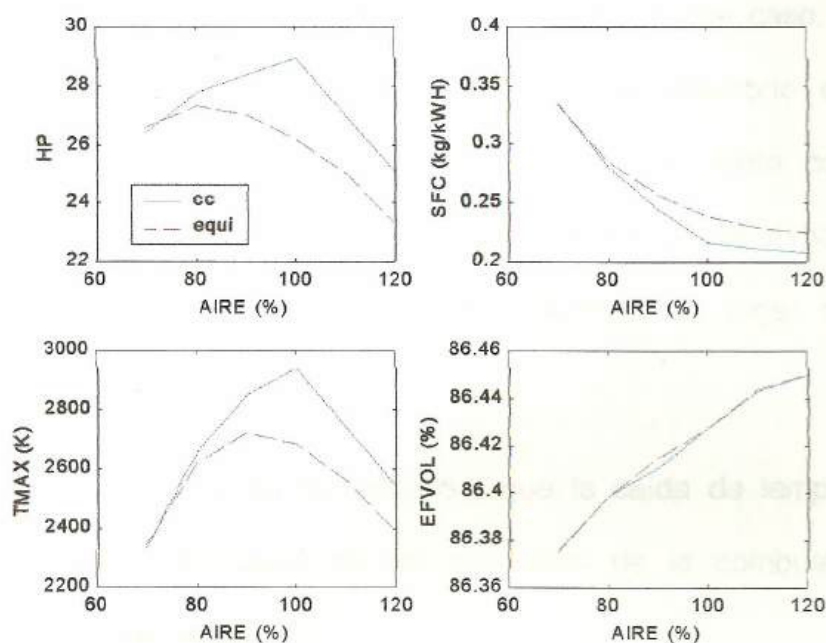


El ciclo Otto aire-combustible considera que los procesos de escape y admisión ocurren muy lentamente (secciones 1.3 y 1.4). Esta es la razón por la que los resultados del modelo con procesos adiabáticos (figura 5.1) se aproximan a los del ciclo ideal a bajas RPM ("más lento").

Nótese como en la figura 5.1, al aumentar las RPM, los resultados del modelo con procesos adiabáticos se aproximan a los del modelo con procesos no-adiabáticos. Esto se debe a que a mayor RPM, existe menor tiempo para que ocurra la transferencia de calor, por lo que la suposición de procesos adiabáticos realizada se vuelve más realista. Es una común suposición de la termodinámica el considerar

los procesos que ocurren en "muy poco tiempo" como adiabáticos (7).

Figura 5.2
Curvas HP-AIRE, SFC-AIRE, TMAX-AIRE, EFVOL-AIRE según combustión completa y según combustión en equilibrio químico



La figura 5.2 justifica la inclusión de los cálculos de equilibrio químico en el modelo. El asumir una combustión completa cc (sección 1.7), produce un máximo de potencia HP cuando la mezcla es estequiométrica, o sea 100% AIRE. Obsérvese además el "quiebre" que se produce en este punto. Esto se debe principalmente a que el CO desaparece bruscamente para mezclas mayores a la estequiométrica al asumir una combustión completa. Este "quiebre"

es suavizado por la suposición de equilibrio químico equi, que considera siempre algo de CO presente en mezclas con exceso de aire (tabla 4.1). Además, nótese que al asumir equilibrio químico el máximo de potencia ocurre en mezclas algo inferiores a la estequiométrica, aproximadamente 80% AIRE en este caso. Estos dos efectos producidos por la suposición de equilibrio químico observados realmente en MCIECH (2) (3) (13), junto con una predicción de menores potencias, muestra como mejora el modelo al asumir una combustión en equilibrio químico en lugar de una combustión completa.

Se deduce a partir de la figura 5.2 que la caída de temperatura debida a la disociación de los productos de la combustión es aproximadamente 250 K.

Otro fenómeno importante debe resaltarse al observar la figura 5.2. Al aumentar el porcentaje de aire, disminuye la temperatura máxima TMAX. A menores temperaturas, disminuye la disociación de los productos de la combustión. Por estas razones, se nota que los resultados según una combustión en equilibrio químico "convergen" hacia los de combustión completa al aumentar el porcentaje de aire. Esto justificaría el uso de un modelo de combustión completa en MCIEC por ejemplo (3), donde las mezclas se caracterizan por un

gran exceso de aire (a pesar de esto seguiría siendo mejor el modelo de combustión en equilibrio químico).

5.2 Influencia de la relación de compresión

Desde el comienzo del estudio de los MCIECH se supo que el aumento de la relación de compresión CR mejora la potencia HP y el consumo específico de combustible SFC (7). Esto se muestra en las figuras 5.3 y 5.4. Pero, ¿a qué se debe tal mejora? La tabla 4.2 muestra que al aumentar la relación de compresión, tanto la fracción de gases residuales $NX/(NM+NX)$ como la temperatura al inicio de la compresión $T1$ disminuyen. Esto aumenta la eficiencia volumétrica η_v , mejorando el desempeño del motor. También, nótese un aumento de la presión máxima del ciclo P_{MAX} , lo que también conlleva a mejoras del desempeño del motor, pero a condiciones adecuadas para la aparición de la indeseable detonación.

Figura 5.3
Curvas HP-CR, SFC-CR, TMAX-CR, EFVOL-CR

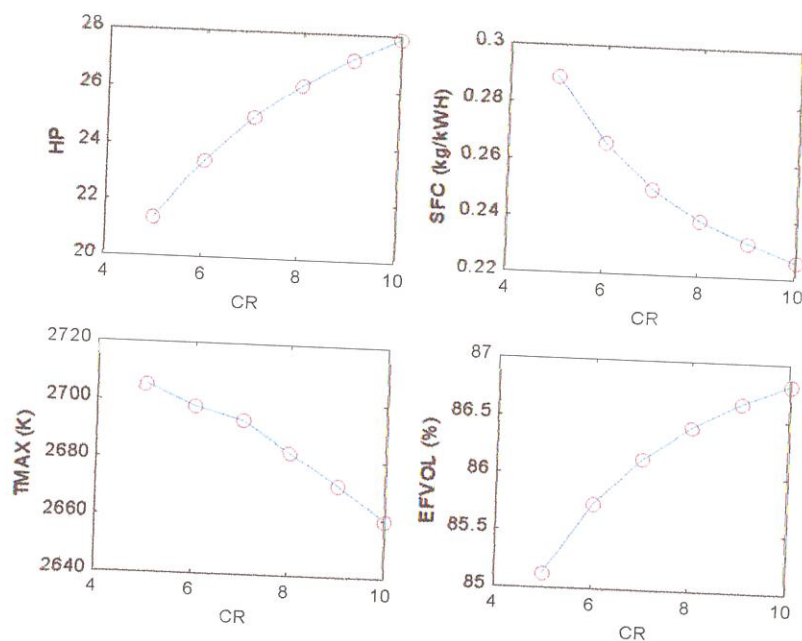


Figura 5.4
Curvas HP-RPM, SFC-RPM, HP-AIRE, SFC-AIRE para diversas relaciones de compresión

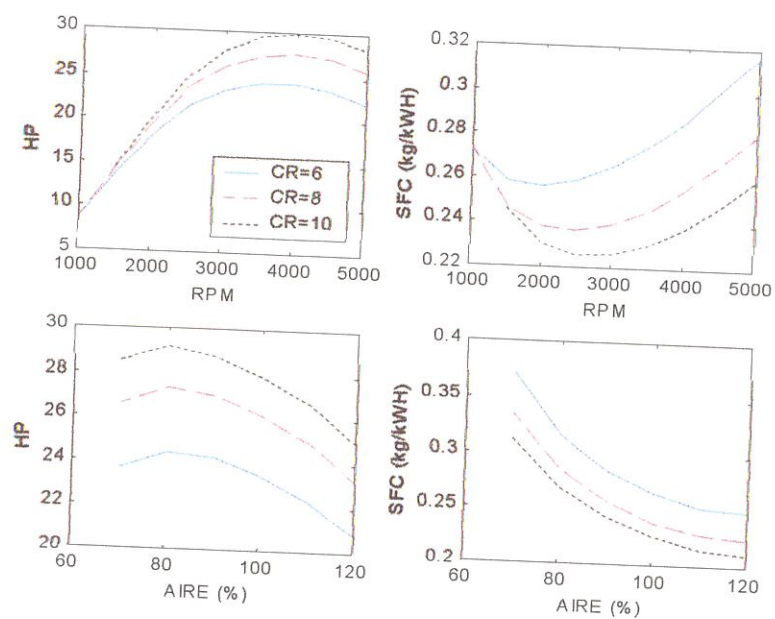


Tabla 5.1
Influencia de la relación de compresión sobre el desempeño del motor

CR	HP	SFC (kg/kWH)	P_{MAX} (atm)	T_{MAX} (K)	NX/(NM+NX) (%)	T₁ (K)	η_v (%)
5	21.39	0.29	29.66	2705.56	6.64	372.73	85.12
6	23.40	0.27	36.35	2698.29	5.66	360.71	85.74
7	25.00	0.25	43.04	2693.70	5.01	352.67	86.14
8	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43
9	27.12	0.23	56.24	2671.62	4.11	342.78	86.65
10	27.87	0.23	62.85	2659.73	3.81	339.49	86.81

El efecto de la disminución del consumo específico de combustible al aumentar la relación de compresión en MCIECH es mayor al estar el acelerador semiabierto (4). Esto es de gran importancia pues la mayoría del tiempo los MCIECH de automóviles funcionan con el acelerador semiabierto. Tal efecto es mostrado ligeramente por la figura 5.5 realizada con el modelo propuesto, donde se asumió que la presión en el colector de admisión PM es igual a 1 atm cuando el acelerador está totalmente abierto e igual a 0.8 atm cuando está semiabierto. Nótese como la mejora del consumo específico de combustible se acentúa a mayores relaciones de compresión (distancia entre ambas curvas aumenta a mayor relación de compresión).

Figura 5.5
Disminución del consumo específico al aumentar la relación de compresión es más pronunciado al estar el acelerador semiabierto

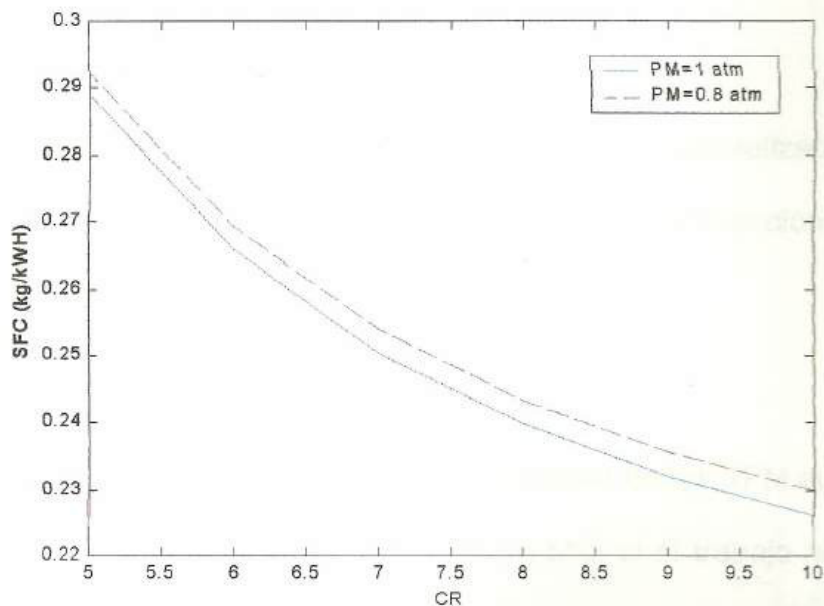
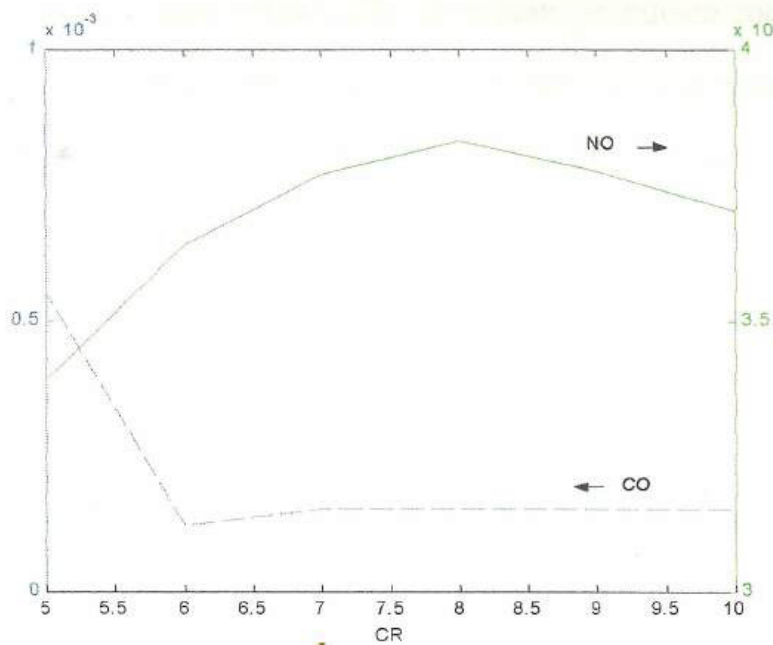


Figura 5.6
Efecto de la relación de compresión sobre las emisiones



La influencia de la relación de compresión sobre las emisiones se muestra en la figura 5.6.

5.3 Influencia de las revoluciones por minuto

Al aumentar las RPM, aumenta el número de ciclos realizados por minuto, aumentando la potencia según (ecuación 1.25 sección 1.14):

$$HP = \frac{WNET \cdot RPM}{89.5}$$

Esto llevaría a la conclusión de que el aumento de las RPM aumenta linealmente la potencia producida por un MCI si el trabajo neto del ciclo WNET no dependiera de las RPM, como lo muestra el modelo ideal en la figura 5.1. En la realidad, varias son las causas que evitan que esto suceda (3) (4) (13). El modelo propuesto considera dos de estas: combustión progresiva (sección 1.4) y el trabajo de lazo negativo WLOOP del proceso de escape-admisión. Estas causas influyen sobre WNET de tal manera que existirá una caída de potencia a elevadas RPM.

El tiempo de duración de la combustión depende de las RPM. Tal dependencia pudiera estar dada por la ecuación 3.26 de la sección 3.5.5:

$$\Delta\theta_c = 40 + 5 \cdot \left(\frac{RPM}{600} - 1 \right) + 166 \cdot \left(\frac{100}{AIRE} - 1.1 \right)^2$$

Al aumentar las RPM, aumenta la duración de la combustión en ángulo de giro del cigüeñal $\Delta\theta_c$, trayendo consigo una disminución de la potencia y eficiencia térmica (se está alejando del caso ideal: combustión instantánea).

Considérese ahora el proceso de escape-admisión. A bajas RPM, 1000 por ejemplo, habrá más tiempo para que se lleve a cabo la expulsión de gases y la admisión de la mezcla fresca que a elevadas RPM, 6000 por ejemplo. Esto se traduce en una mejor eficiencia volumétrica a bajas RPM (tabla 4.2). La figura 5.7 muestra diagramas P-V a 1000 y a 6000 RPM. Se muestra una ampliación del proceso escape-admisión. Obsérvese que a 6000 RPM existe un aumento de presión al final del proceso de escape 4-5. Este se debe a que el aumento de presión debida al movimiento del pistón (como en la compresión) es mayor que la disminución de presión debida a la salida de gases a través de la apertura de escape. Lo más importante a resaltar de esta figura es la diferencia entre los trabajos de lazo negativos (trabajo durante escape-admisión) entre ambas RPM. A 1000 RPM el trabajo de lazo negativo es casi cero

(aproximación al ciclo ideal), $W_{LOOP} / W_{NET} = 0.63\%$, y a 6000 RPM $W_{LOOP} / W_{NET} = 42\%$. Esta es la principal razón de la caída de la curva HP-RPM a elevadas RPM según el modelo propuesto (figura 5.1). Nótese también la menor presión máxima de ciclo y la menor presión al inicio de la compresión 1-1 a 6000 RPM (figura 5.7).

Figura 5.7
Diagrama P-V a diversas RPM

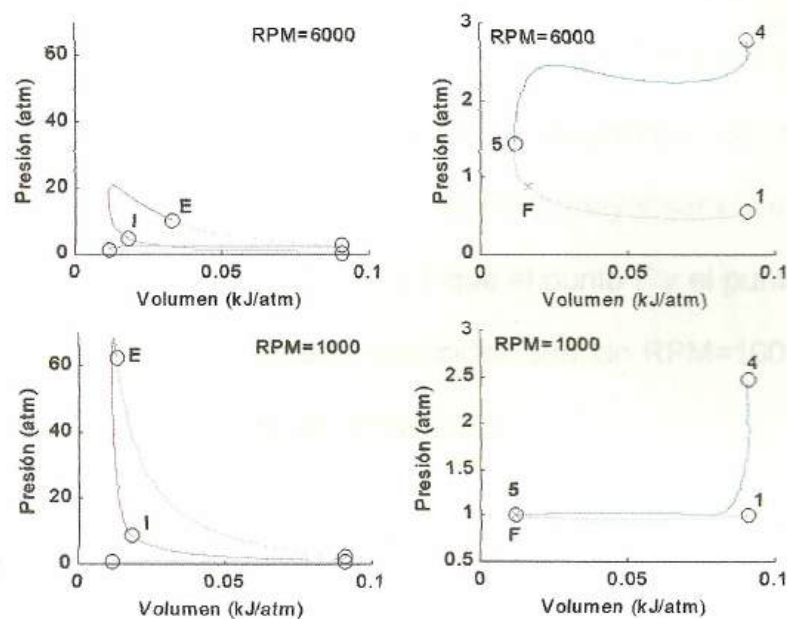


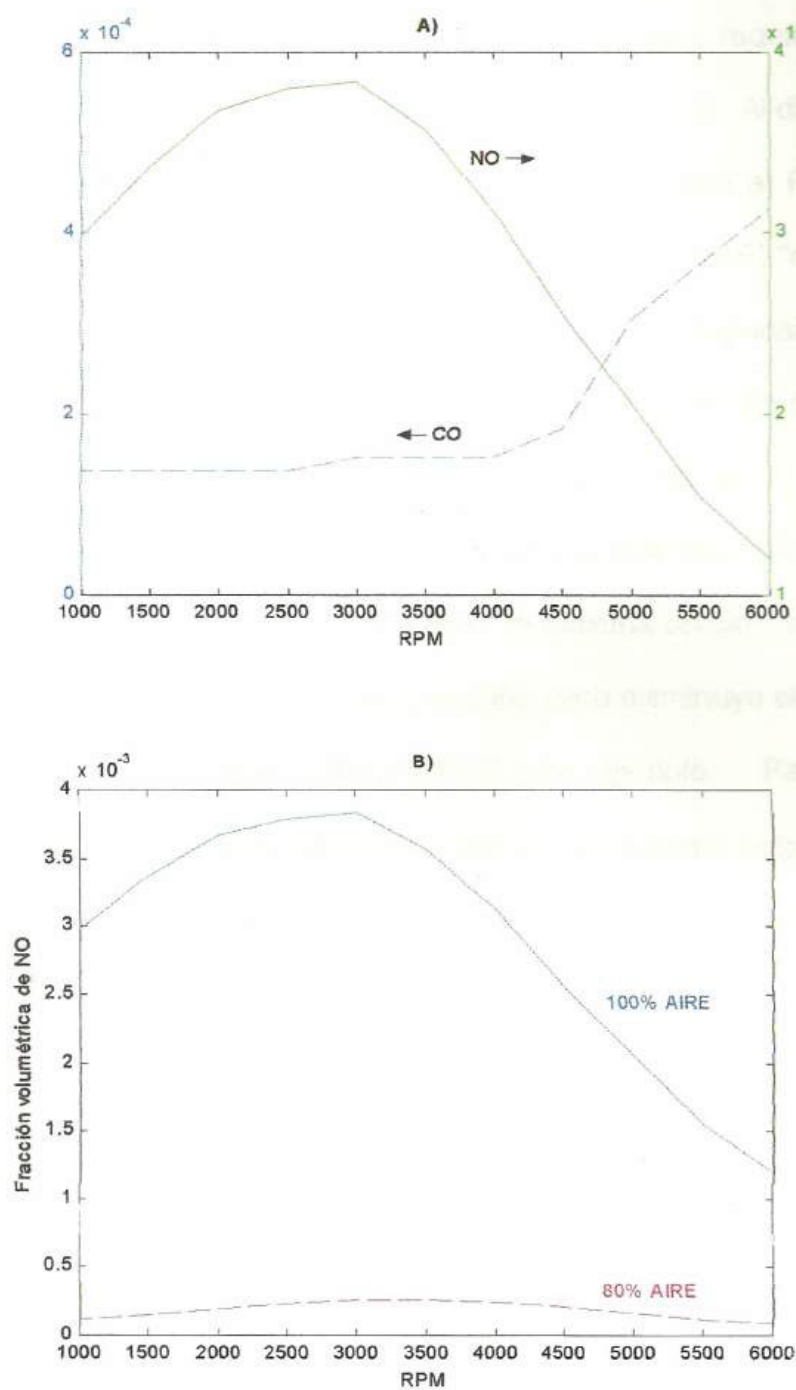
Tabla 5.2
Influencia de las RPM sobre el desempeño del motor

RPM	HP	SFC (kg/kWH)	P _{MAX} (atm)	T _{MAX} (K)	N _X /(N _M +N _X)	T ₁ (K)	η_v (%)
1000	8.74	0.27	68.69	2770.19	6.83	324.49	98.31
2000	19.33	0.24	60.83	2774.40	4.72	345.59	94.98
3000	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43
4000	27.68	0.26	37.67	2578.15	4.79	350.97	73.11
5000	25.79	0.28	27.97	2475.50	5.91	358.94	59.74
6000	22.13	0.31	20.83	2375.96	8.31	376.95	47.87

El punto F (marcado con una x roja en la figura 5.7) es el punto en que comienza la entrada de mezcla fresca (sección 3.7.5). Mientras más cerca se encuentre este punto del PMS, mayor será la eficiencia volumétrica. Nótese en la figura 5.7 que el punto F y el punto 5 (que está en el PMS) prácticamente coinciden cuando RPM=1000; no se puede decir lo mismo cuando RPM=6000.

Las RPM también influyen sobre la emisión de gases. A menor RPM, mayor tiempo existirá para la disociación de NO, produciéndose mayores emisiones (2). Esto se muestra en la figura 5.8.

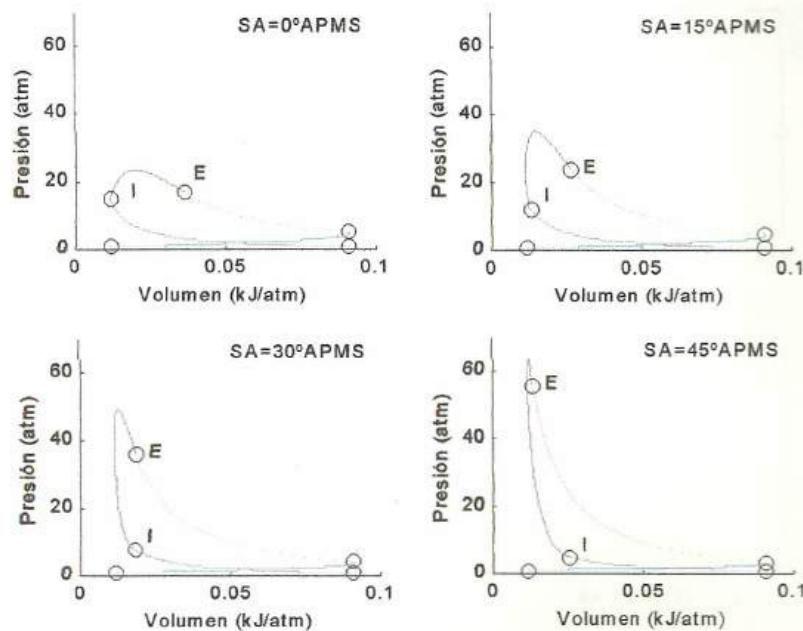
Figura 5.8
Efecto de las RPM sobre las emisiones



5.4 Influencia del adelanto de la ignición

El proceso de combustión no es instantáneo, requiere un determinado tiempo (sección 3.5.5). Véase la figura 5.9. Al disminuir el adelanto de la ignición SA (punto I se mueve hacia el PMS) el proceso de combustión (que comienza en I y termina en E) "ocupará el espacio" normalmente requerido por el proceso de expansión E-4, disminuyendo el trabajo de expansión, y por ende el trabajo neto del ciclo. Esto ocurriría cuando $SA=0^\circ APMS$ por ejemplo. Nótese también la disminución de la presión máxima al disminuir SA. Si SA es excesivo (punto I se aleja del PMS), la máxima presión aumenta (condiciones propicias para la detonación), pero disminuye el trabajo neto del ciclo. Véase $SA=45^\circ APMS$ por ejemplo. Para una determinada duración de la combustión $\Delta\theta_c$, la máxima potencia se obtiene cuando la combustión se divide equitativamente entre los periodos antes y después del PMS (3). En otras palabras, el punto E está justo encima del punto I en el diagrama P-V, como lo muestra el diagrama de mayor trabajo de ciclo, $SA=30^\circ APMS$, de la figura 5.9. En la práctica, lo que se busca es que la máxima presión ocurra de 5 a $20^\circ DPMS$ (13).

Figura 5.9
Diagrama P-V para diversos adelantos de la ignición



En la tabla 4.2 y en la figura 5.10 se puede ver el efecto de SA sobre el desempeño del motor. Para los valores dados en la tabla 4.2 se encuentra que la duración de la combustión es $\Delta\theta_c=61.66^\circ$. Nótese que los valores óptimos de potencia y consumo específico de combustible ocurren a $SA=30 \approx 61.66/2$. La variación de SA no influye mucho sobre los procesos de escape y admisión; nótese que la eficiencia volumétrica es casi constante.

Figura 5.10
Curvas HP-SA, SFC-SA, TMAX-SA, EFVOL-SA

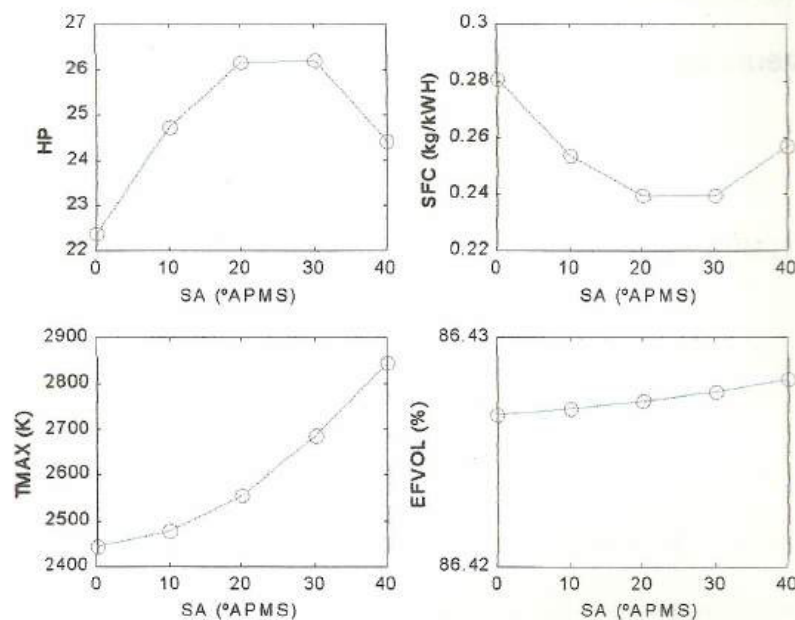


Tabla 5.3
Influencia del adelanto de la ignición sobre el desempeño del motor

SA (°APMS)	HP	SFC (kg/kWH)	PMAX (atm)	TMAX (K)	NX/(NM+NX)	T1 (K)	η_v (%)
0	22.40	0.28	23.45	2446.00	3.80	349.49	86.43
10	24.74	0.25	30.70	2478.48	3.85	348.82	86.43
20	26.18	0.24	39.69	2557.43	4.20	348.05	86.43
30	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43
40	24.42	0.26	59.34	2844.97	4.10	345.53	86.43

La duración de la combustión en ángulo de giro del cigüeñal $\Delta\theta_c$ aumenta con las RPM (ecuación 3.26). Se mencionó previamente que se logran máximas potencias cuando $SA \approx \Delta\theta_c/2$. Por tal razón, es una práctica generalizada en MCIECH aumentar SA a medida que

aumentan las RPM (12). La figura 5.11 (1) muestra una variación común en MCIECH de automóvil. La mejora del desempeño general del motor al variar SA con las RPM ($SA=F(RPM)$) se muestra en la figura 5.12.

Figura 5.11
Variación típica del adelanto de la ignición con las RPM (1)

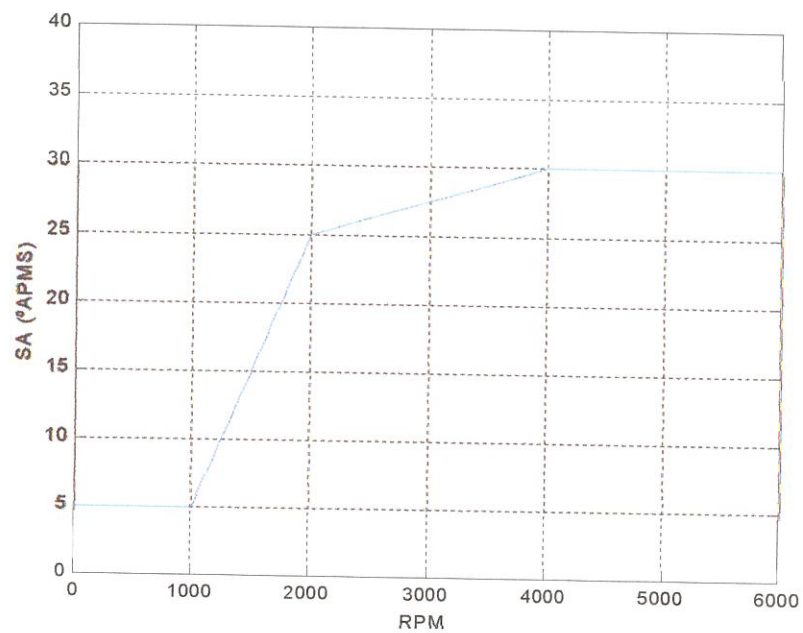
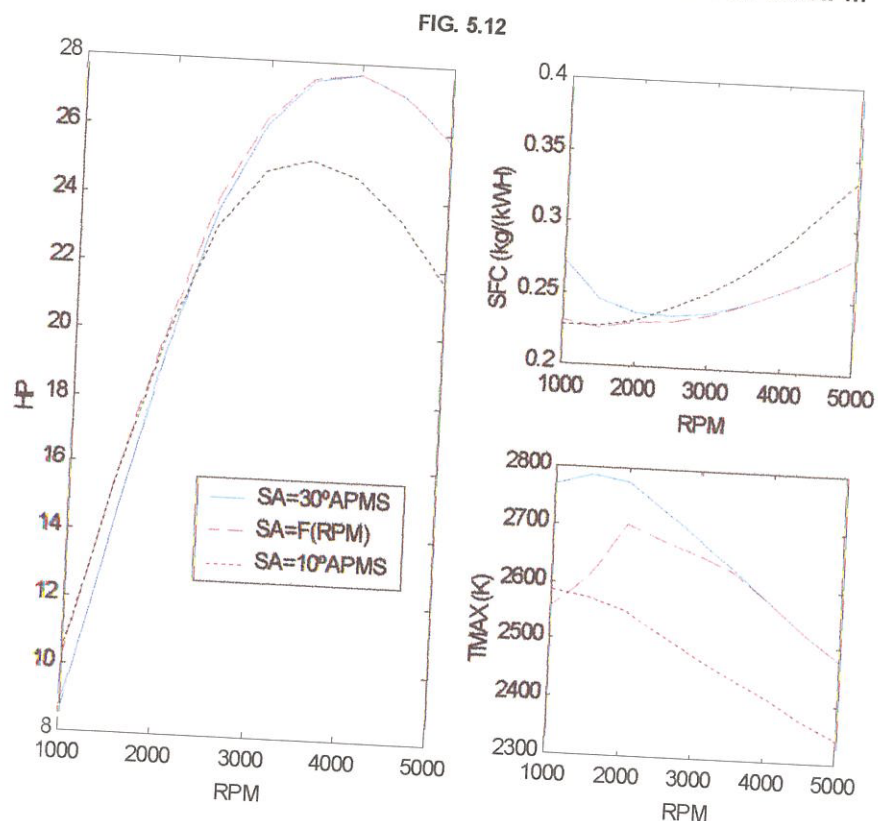


Figura 5.12
Efecto de la variación del adelanto de la ignición con las RPM

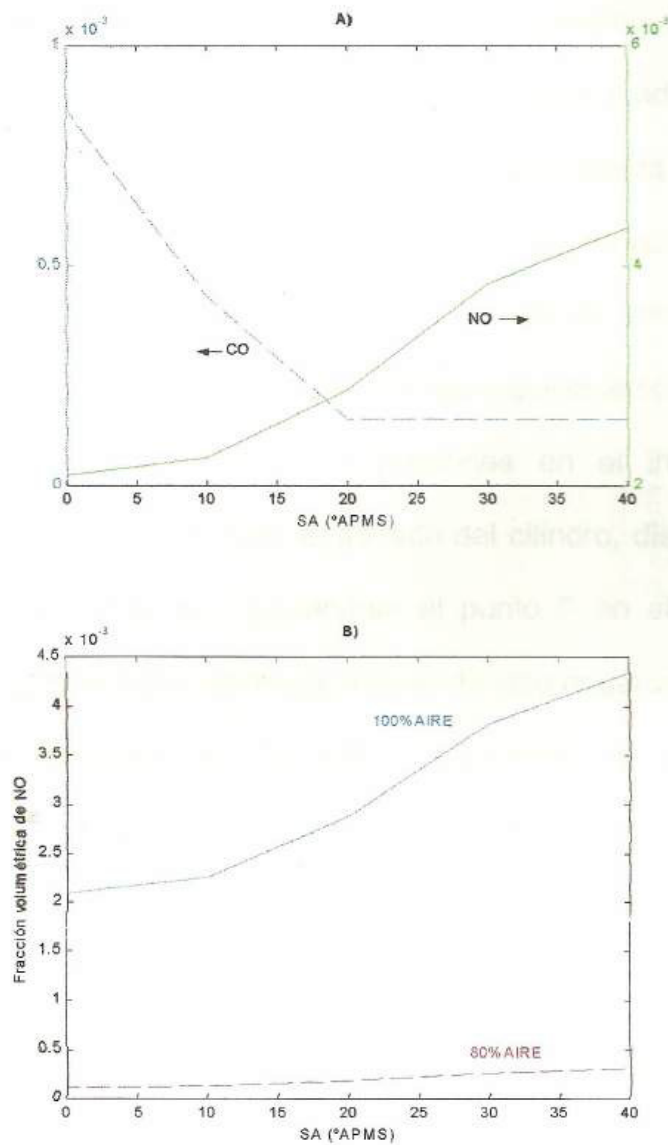


Cualquier reducción de la presión del colector de admisión disminuye la potencia. Una forma de compensar esto, es modificar SA a medida que disminuye la presión del colector de admisión PM. El efecto es análogo al producido al variar SA con las RPM. Se detallará esto en la sección 5.7.

El adelanto de la ignición, aumenta las presiones y temperaturas máximas del ciclo (figura 5.9). Se esperaría entonces, que el adelanto de la ignición aumentaría las emisiones de NO (2).

Recuérdese que a mayores temperaturas, mayor disociación. La figura 5.13 muestra este fenómeno.

Figura 5.13
Efecto del adelanto de la ignición sobre las emisiones



5.5 Influencia del tamaño de las válvulas

Obsérvese la figura 5.14. Se ha considerado que las válvulas de admisión y escape tienen el mismo diámetro. Cuando el diámetro de la válvula de escape DVE es pequeño, el aumento de presión durante el escape debido al movimiento del pistón puede igualar o llegar a ser mayor que la disminución de presión debida a la salida de gases por la apertura de escape, análogo a lo ocurrido a elevadas RPM en la figura 5.7. Un diámetro de válvula de admisión DVA pequeño producirá un mayor efecto de estrangulamiento durante la admisión, llegándose a menores presiones en el inicio de la compresión. Además, dificulta el llenado del cilindro, disminuyendo la eficiencia volumétrica. Obsérvese el punto F en el diagrama. Como resultado se tiene un mayor trabajo de lazo negativo cuando el tamaño de válvulas es pequeño, reduciendo la potencia y aumentando el consumo específico de combustible. Véase la tabla 4.2.

Figura 5.14
Diagrama P-V para diversos tamaños de válvulas (DVA=DVE)

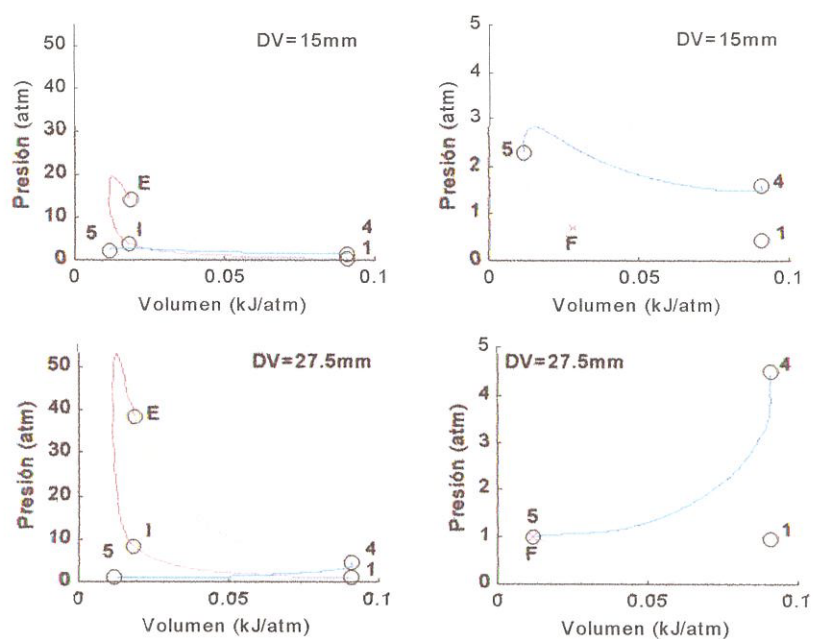


Tabla 5.4
Influencia del tamaño de las válvulas sobre el desempeño del motor

DV (mm)	HP	SFC (kg/kWH)	PMAX (atm)	TMAX (K)	NX/(NM+NX)	T1 (K)	η_v (%)
15	6.56	0.34	19.69	2563.76	18.73	424.03	30.46
17.5	11.33	0.30	27.67	2618.11	10.46	377.48	46.20
20	17.09	0.27	36.86	2655.71	6.12	353.97	63.69
22.5	22.20	0.25	44.29	2672.14	4.93	349.34	77.03
25	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43
27.5	28.87	0.23	52.95	2683.76	4.28	344.48	92.40

Se concluye, a partir de la discusión previa, que un tamaño grande de válvulas es el más deseado. La limitante de esto es el espacio disponible. Se aprovecha mejor este espacio utilizando dos válvulas

de diámetro pequeño en lugar de una válvula de diámetro grande. Esto logra además válvulas con mayor rigidez (12). Otra forma de utilizar mejor el espacio disponible es utilizar válvulas de admisión de mayor tamaño que las de escape, pues, una caída de presión durante la admisión es más negativa sobre la potencia producida que una caída de presión durante el escape (13). Las figuras 5.15 y 5.16 confirman lo mencionado. La capacidad de alojar válvulas de mayor tamaño es una ventaja de los motores con mayor relación calibre/carrera (1).

Figura 5.15
Diagrama P-V para diversos tamaños de válvulas (DVA≠DVE)

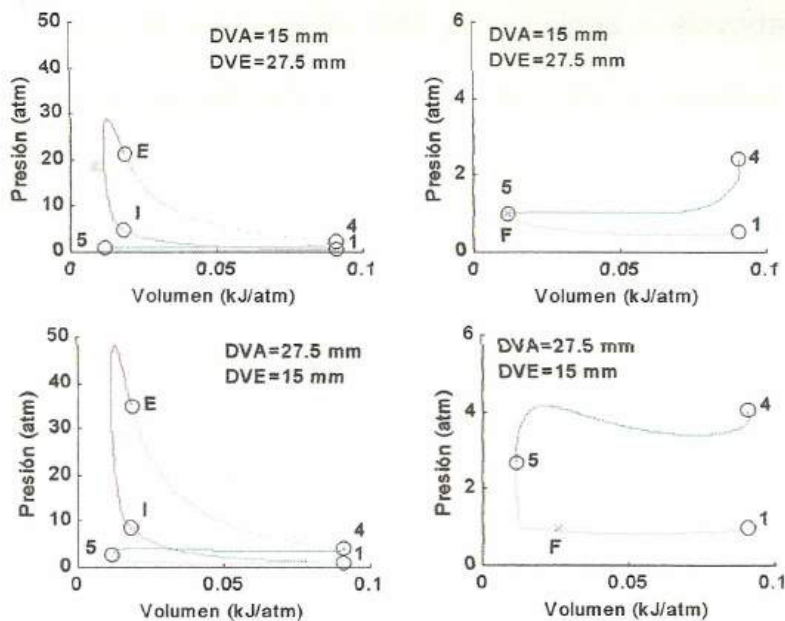
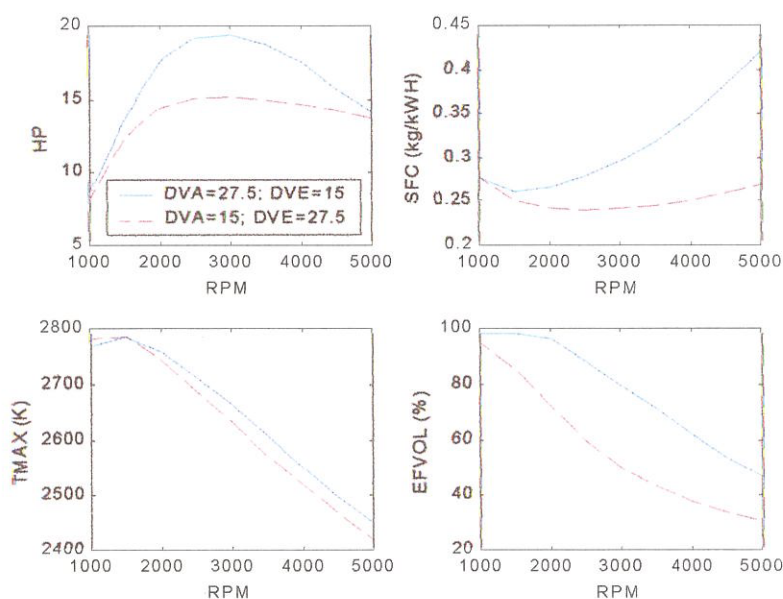


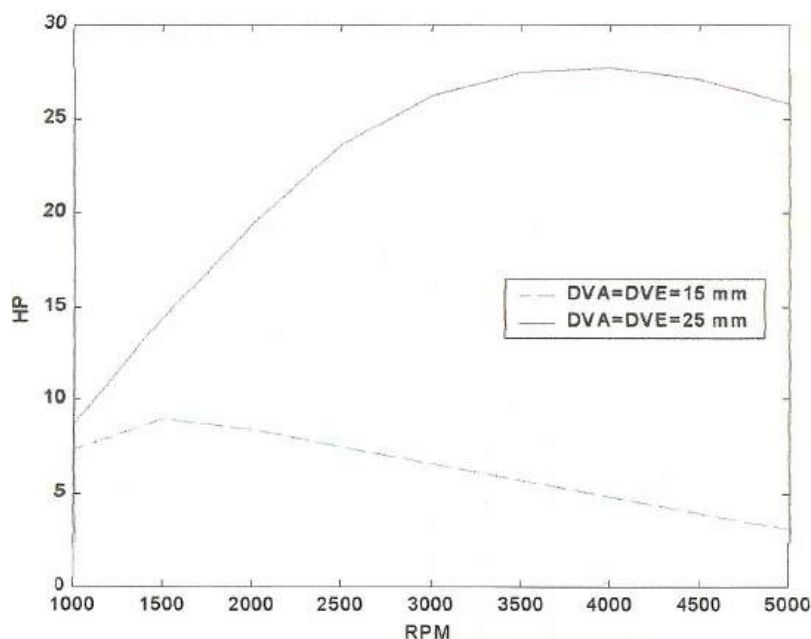
Figura 5.16
Utilización de válvulas de admisión de mayor tamaño que las de escape mejora la potencia producida



La figura 5.17 muestra que la mejora de la potencia al utilizar un mayor tamaño de válvulas es más pronunciada a elevadas RPM. Esta es una de las razones por las que algunos fabricantes utilizan un sistema de cuatro válvulas por cilindro de las cuales, funcionan solamente dos (una de admisión y otra de escape) a bajas RPM, mientras que en altas RPM se activan las cuatro por medio de un sistema hidráulico (1).



Figura 5.17
Mejora de la potencia al utilizar un mayor tamaño de válvulas es más pronunciada a elevadas RPM



5.6 Influencia de los ángulos de apertura de la válvula de escape y del ángulo de cierre de la válvula de admisión

La tabla 4.2 muestra el efecto de la influencia del ángulo de apertura de la válvula de escape θ_{ex} y el ángulo de cierre de la válvula de admisión θ_{in} sobre la potencia y la eficiencia volumétrica. Se ha considerado que $\theta_{ex}=\theta_{in}$ (por comodidad solamente pues realmente esto no ocurre). Puede notarse que al aumentar las RPM, mayores ángulos θ_{ex} y θ_{in} son recomendables. Un MCIECH de automóvil de carreras, que funciona a elevadas RPM, debería funcionar con mayores ángulos θ_{ex} y θ_{in} que un MCIECH de automóvil convencional

(1). Lo más adecuado sería que a bajas RPM los ángulos θ_{ex} y θ_{in} sean pequeños, y a elevadas RPM sean grandes. Esto se logra en los motores modernos mediante sistemas de distribución variables (1).

Tabla 5.5
Influencia del ángulo de apertura de la válvula de escape y del ángulo de cierre de la válvula de admisión sobre el desempeño del motor

	RPM				
	1000	2000	3000	4000	5000
$\theta_{ex}=0^\circ$ $\theta_{in}=0^\circ$	8.70 (98.46%)	19.03 (94.14%)	24.92 (82.70%)	26.12 (69.25%)	24.18 (56.36%)
$\theta_{ex}=15^\circ$ $\theta_{in}=15^\circ$	8.70 (97.63%)	19.31 (94.47%)	26.89 (88.00%)	28.65 (74.93%)	26.77 (61.53%)
$\theta_{ex}=30^\circ$ $\theta_{in}=30^\circ$	8.50 (95.08%)	19.34 (92.94%)	28.15 (89.74%)	31.61 (79.67%)	30.33 (66.78%)
$\theta_{ex}=45^\circ$ $\theta_{in}=45^\circ$	8.03 (90.33%)	18.74 (89.83%)	27.83 (87.17%)	33.55 (81.94%)	33.70 (71.19%)
$\theta_{ex}=60^\circ$ $\theta_{in}=60^\circ$	7.35 (83.31%)	17.55 (84.67%)	26.46 (82.93%)	32.91 (79.93%)	35.03 (73.22%)

A partir de datos como los presentados en la tabla 4.2, se pudiera diseñar (como trabajo didáctico solamente) un perfil de leva variable con las RPM, que es uno de los varios tipos de sistemas de distribución variable (1).

5.7 Influencia de las condiciones externas

La potencia de un MCIECH, con carburador o sistema de inyección, es controlada mediante una válvula mariposa de estrangulación en el sistema de admisión. Esta estrangulación varía la presión en el colector de admisión PM. A mayor estrangulación (mayor cierre de

válvula mariposa), menor PM. También, a menor presión atmosférica, menor PM. Se logra entonces un mayor trabajo de lazo negativo y una menor presión máxima, como lo muestra la figura 5.18, resultando un menor trabajo neto de ciclo. El efecto de una menor PM se muestra también en la tabla 4.2, entre los cuales resaltan un aumento del porcentaje de gases residuales y una disminución de la eficiencia volumétrica (véase el punto F en la figura 5.18).

Figura 5.18
Diagrama P-V al variar la presión del colector de admisión

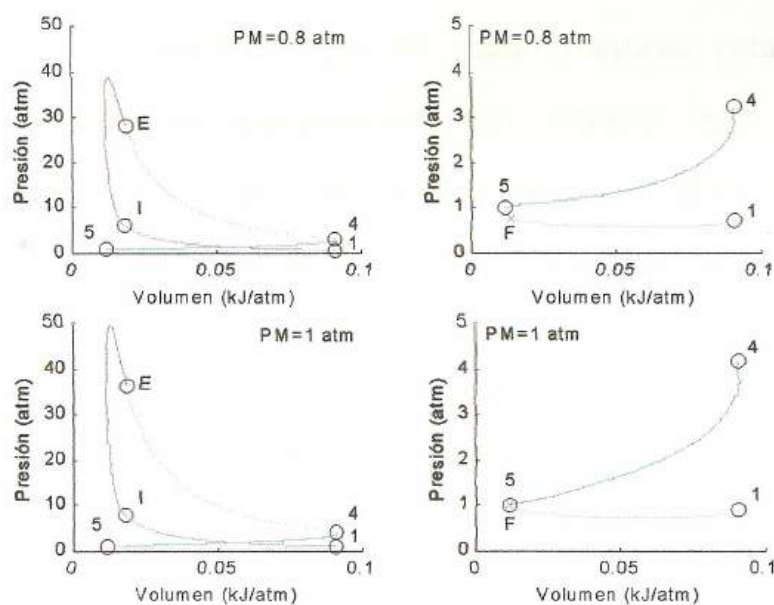


Tabla 5.6
Influencia de la presión del colector de admisión sobre el desempeño del motor

PM (atm)	HP	SFC (kg/kWH)	P _{MAX} (atm)	T _{MAX} (K)	N _X /(N _M +N _X)	T ₁ (K)	η_v (%)
0.8	20.07	0.24	38.79	2664.44	5.52	353.25	84.01
0.85	21.60	0.24	41.50	2670.82	5.22	351.45	84.69
0.9	23.16	0.24	44.26	2671.95	4.95	349.24	85.52
0.95	24.66	0.24	46.93	2680.10	4.7	348.36	85.89
1	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43

Nótese como al disminuir PM, disminuye las temperaturas y presiones máximas de ciclo. Se producen entonces condiciones mas propicias para que no ocurra la detonación, pero la potencia es sacrificada. Una forma de mejorar la potencia, como lo muestra la figura 5.19, es modificar SA cuando disminuye la presión atmosférica. Obsérvese que se logran mayores potencias a PM=0.85 atm en comparación con PM=0.8 atm cuando SA=40°APMS, pero, si para PM=0.8 atm, se coloca SA en 30°APMS se acerca más la curva HP-RPM hacia la de PM=0.85 atm. Debe aclararse que el efecto de SA dependerá también de las RPM. Véase la figura 5.20 (13).

Figura 5.19
Mejora de la potencia a determinada presión del colector de admisión al
modificar el adelanto a la ignición

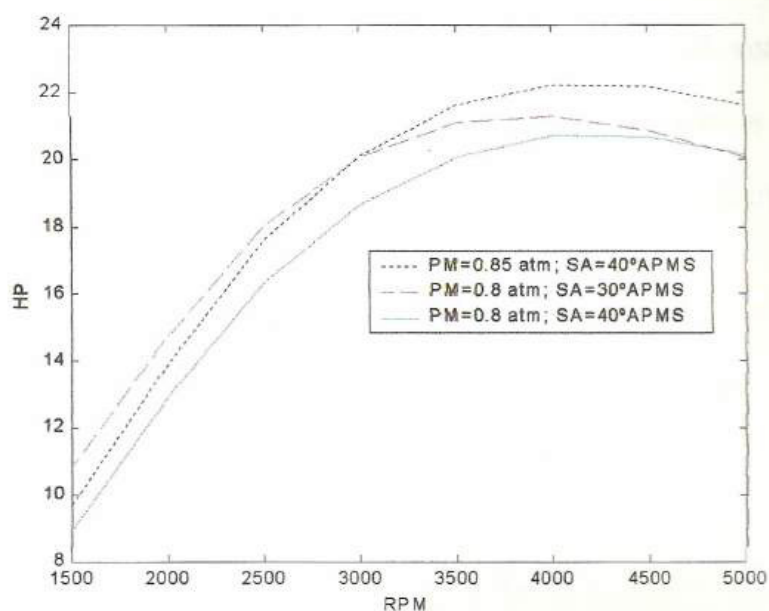
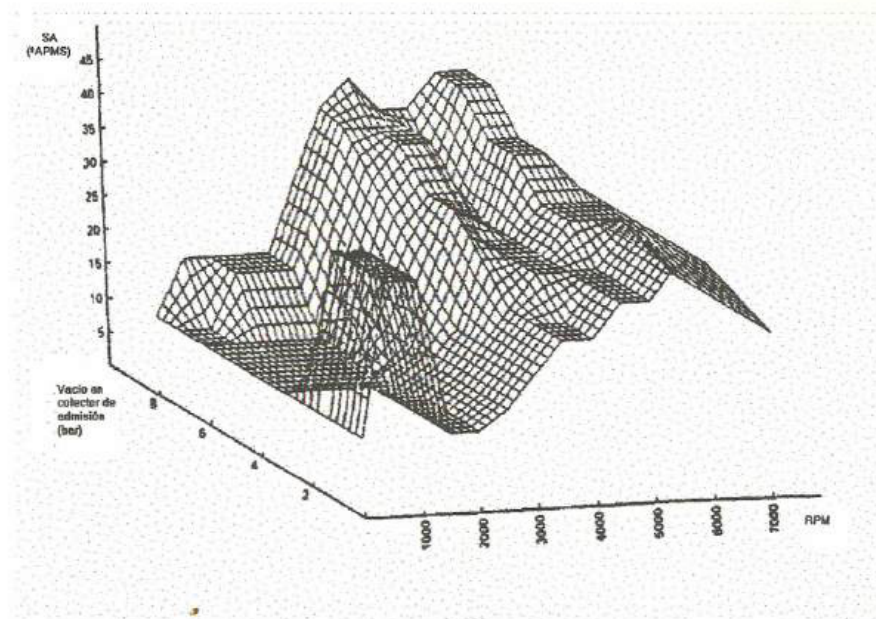


Figura 5.20
Variación del adelanto de la ignición con las RPM y la presión del colector de
admisión (13)



Un aumento de la presión en el colector de escape PO , llamada también contrapresión, disminuye la potencia (4). Tal aumento pudiera deberse, por ejemplo, a obstrucciones en el sistema de escape o la inclusión de un convertidor catalítico. Nótese como al aumentar PO aumenta el trabajo negativo de lazo y disminuye la presión máxima, figura 5.21.

Figura 5.21
Diagrama P-V al variar la presión del colector de escape

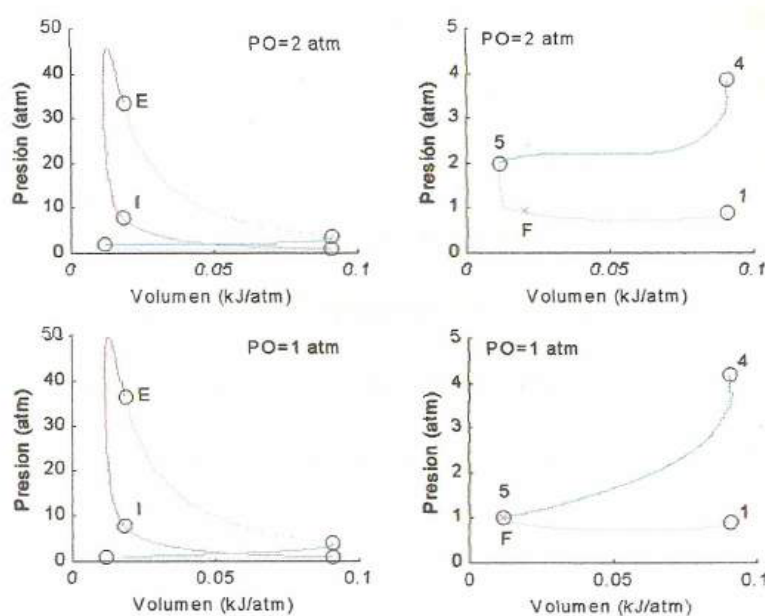


Tabla 5.7
Influencia de la presión del colector de escape sobre el desempeño del motor

PO (atm)	HP	SFC (kg/kWH)	P _{MAX} (atm)	T _{MAX} (K)	NX/(NM+NX)	T1 (K)	η_v (%)
1	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43
1.2	25.43	0.24	48.83	2676.98	5.28	352.10	84.51
1.4	24.70	0.24	48.13	2675.64	6.04	356.89	82.69
1.6	23.81	0.25	47.29	2672.29	6.81	362.80	80.69

PO (atm)	HP	SFC (kg/kWH)	P _{MAX} (atm)	T _{MAX} (K)	N _X /(N _M +N _X)	T ₁ (K)	η_v (%)
1.8	22.92	0.25	46.57	2668.88	7.57	368.26	78.91
2	22.05	0.25	45.93	2665.06	8.31	372.66	77.32

Es de resaltar que la variación de PM y PO no influye mucho en el consumo específico de combustible (4). Véanse las tablas 5.7 y 5.8.

5.8 Influencia del porcentaje de aire

El porcentaje de aire AIRE influye principalmente en el proceso de combustión. Esto puede verse al revisar la expresión 3.26 y la figura 3.5 de la sección 3.5.5; nótese que la poca influencia del porcentaje de aire sobre el proceso escape-admisión queda clara al revisar la variación de la eficiencia volumétrica en la tabla 5.8. Además de la tabla 5.8, revísese también la figura 5.2 para observar el efecto del porcentaje de aire sobre el desempeño del motor. Nótese que la máxima potencia se logra con mezclas algo menores a la estequiométrica, donde la eficiencia térmica no es la mejor (2) (3) (11) (13).

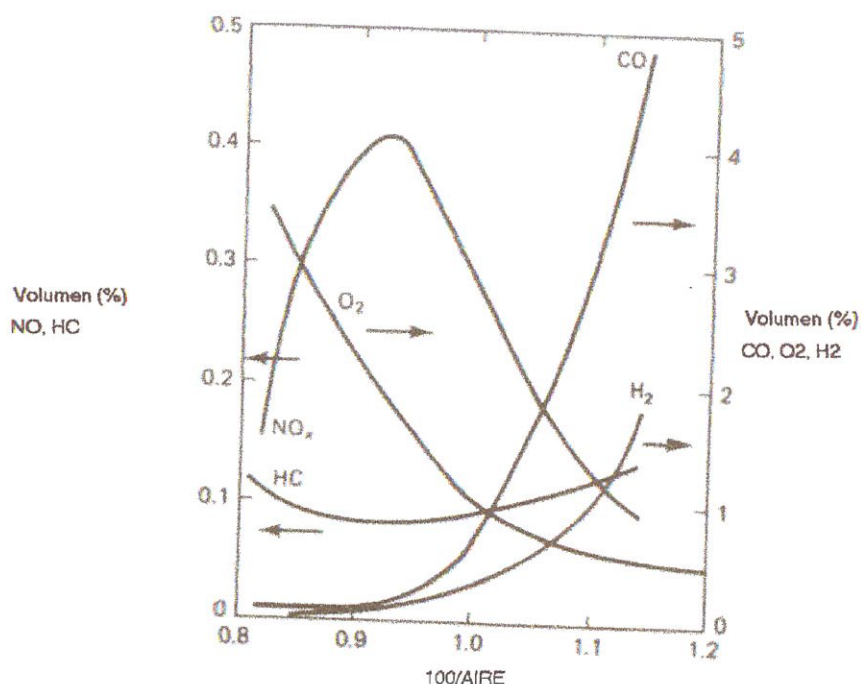
Tabla 5.8
Influencia del porcentaje de aire sobre el desempeño del motor

AIRE (%)	HP	SFC (kg/kWH)	P _{MAX} (atm)	T _{MAX} (K)	N _X /(N _M +N _X)	T ₁ (K)	η_v (%)
70	26.57	0.33	40.67	2341.90	4.56	347.61	86.38
80	27.33	0.29	49.66	2622.53	4.61	347.12	86.40
90	27.01	0.26	51.95	2723.88	4.59	346.95	86.41
100	26.18	0.24	49.64	2683.04	4.50	346.98	86.43

AIRE (%)	HP	SFC (kg/kWH)	P _{MAX} (atm)	T _{MAX} (K)	N _X /(N _M +N _X)	T ₁ (K)	η_v (%)
110	24.99	0.23	45.26	2559.75	4.51	347.18	86.44
120	23.31	0.23	40.29	2389.80	4.51	347.14	86.45

Las emisiones son afectadas principalmente por el porcentaje de aire. Esto se mostró en la figura 1.6, que se repite a continuación.

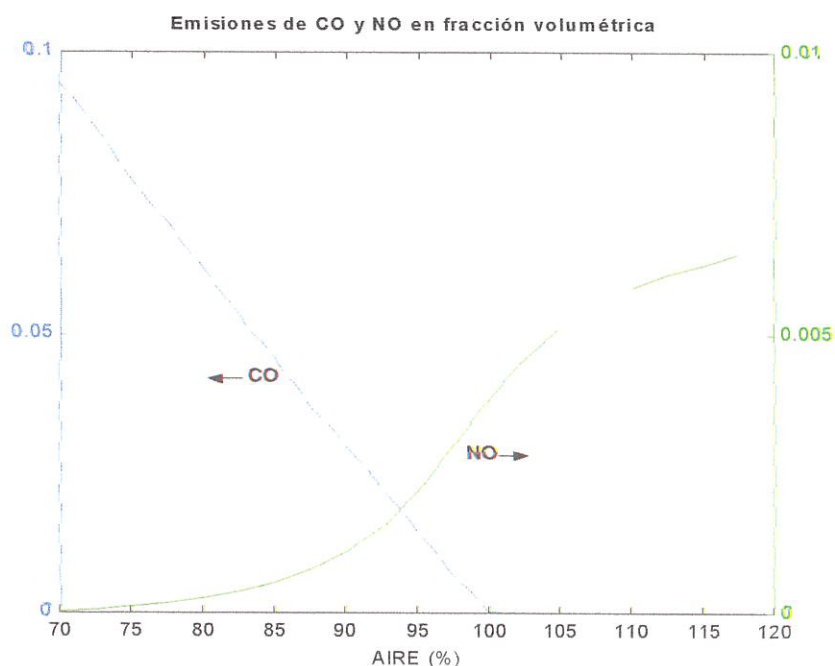
Figura 1.6 (Repetición)
Emisiones típicas de un MCIECH al variar la relación aire-combustible



La figura 5.22 muestra la variación de las emisiones de CO con el porcentaje de aire. Obsérvese la caída brusca de la concentración de CO al aproximarse la mezcla al 100% de aire. Para reducir las emisiones de CO, el motor deberá funcionar con exceso de aire y

pérdida de potencia; o dispositivos deberán ser añadidos al sistema de escape para oxidar el CO, aumentando la contrapresión.

Figura 5.22
Efecto del porcentaje de aire sobre las emisiones

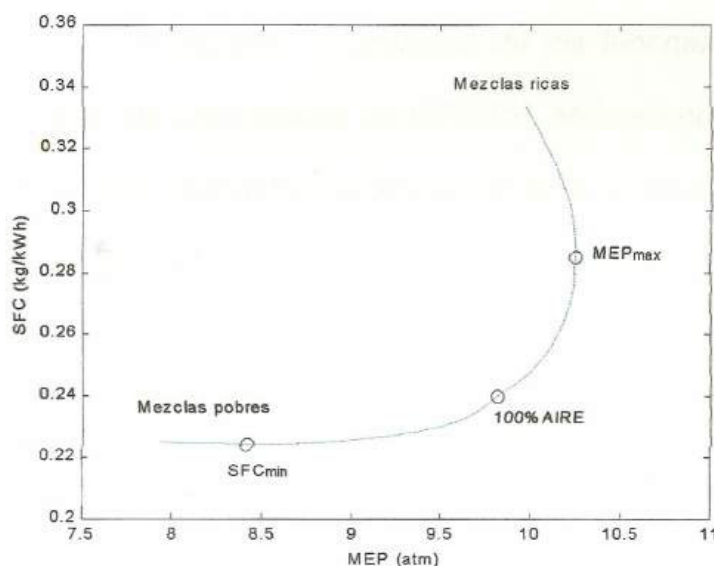


La variación de las emisiones de NO con el porcentaje de aire se muestra en las figuras 5.8, 5.13, y 5.22. Nótese que se logra una adecuada emisión de NO en mezclas algo menores a la estequiométrica, donde la potencia producida es máxima. La emisión de NO aumenta con el porcentaje de aire, hasta determinado punto en que cae bruscamente (1) (2) (13). Nótese que la curva NO-AIRE de la figura 5.22 se rompe en AIRE=105%. Realmente es a partir de este punto en que la emisión de NO empieza a decaer.

Problemas numéricos del algoritmo de equilibrio químico (secciones 2.3 y 2.4) no permiten observar este fenómeno. La predicción de las emisiones de NO realizadas por el modelo propuesto es válida hasta este punto.

La curva de Hook es construida al variar el porcentaje de aire de la mezcla. Constituye una forma muy utilizada de visualizar el comportamiento del motor. La figura 5.23 muestra la curva de Hook del motor. La forma de la curva producida por el modelo propuesto concuerda con aquellas típicas de MCIECH (2) (3) (11) (13).

Figura 5.23
Curva de Hook



CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Se desarrolló un modelo cero-dimensional de un MCIECH trabajando con gasolina con el objetivo de predecir la variación de los parámetros de funcionamiento del MCIECH con sus características de diseño y condiciones de operación.

1. A pesar de la considerable complejidad de los fenómenos físicos que ocurren durante los procesos de un MCIECH, se logró predecir con éxito la variación de los parámetros de funcionamiento de un MCIECH con sus características de diseño y condiciones de operación (capítulos 4 y 5). La "forma" de varias curvas de operación del motor predichas por el modelo propuesto resultó ser la misma que la de aquellas curvas obtenidas por un modelo más complejo y por experimentación. El realizar tal predicción de la "forma" de las curvas de operación del motor era lo que se buscaba en este trabajo, no una exacta predicción de los parámetros de funcionamiento del motor. La siguiente tabla muestra una comparación

entre las predicciones del modelo propuesto motor4.m y un modelo más sofisticado llamado AIRCYCLE (para el MCIECH de la tabla 4.2).

Parámetro	motor4.m	AIRCYCLE
MEP (atm)	9.7	6
EFT (%)	33	26
EFVOL (%)	85	65

2. La inclusión del efecto de la disociación en el modelo requirió la utilización de cálculos de equilibrio químico. Esto complicó más el modelo, pero los resultados obtenidos fueron más realistas (sección 5.1), especialmente en condiciones donde la mezcla aire-combustible era cercana a la estequiométrica (punto de funcionamiento del MCIECH).
3. El método de la formulación de las constantes de equilibrio presentó problemas numéricos cuando el porcentaje de aire era excesivo (sección 2.4). Esto no permitió calcular las emisiones de NO en tales circunstancias (sección 5.8). El uso del método, más complejo, de la minimización de la energía libre de Gibbs solucionaría este problema.
4. El modelo puede ser fácilmente modificado para simular el uso de diversos combustibles en un MCIECH.

5. La inclusión del efecto de la transferencia de calor es notable a bajas RPM (sección 5.3). A elevadas RPM, el uso de un modelo con procesos adiabáticos es bastante adecuado.
6. La inclusión de la cinética de las reacciones de formación de NO mejoraron mucho la predicción de las emisiones de NO (sección 3.10). Esto se debe a que la rapidez de reacción de las reacciones químicas del mecanismo térmico de formación de NO es mucho más lenta que la de otras reacciones que ocurren durante la combustión y expansión.

Se sugieren las siguientes modificaciones para mejorar el modelo propuesto:

- Uso de coeficientes de descarga en los cálculos del proceso de escape-admisión
- Variación del área de paso de gases en el proceso de escape-admisión de acuerdo a la forma de la leva
- Utilización de un modelo de combustión más sofisticado
- Inclusión del efecto de los múltiples de admisión y escape

APENDICES

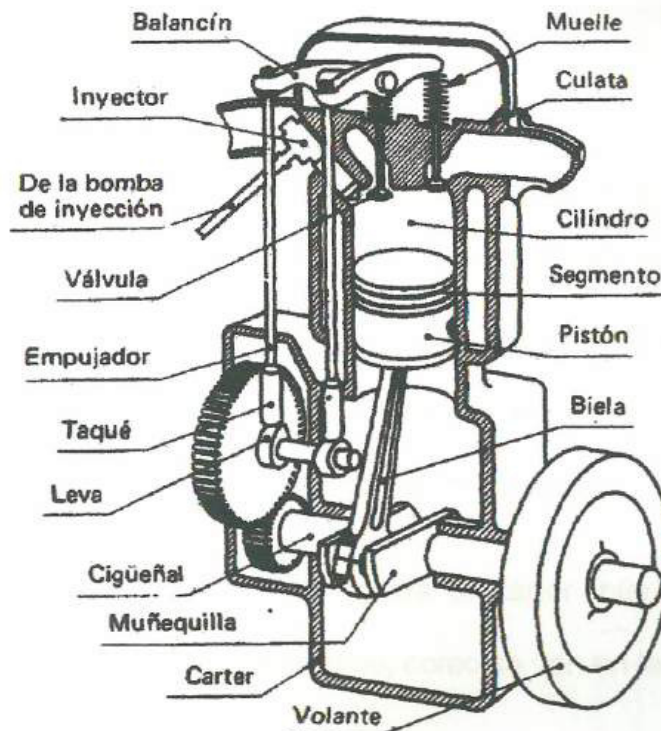
APÉNDICE A

REPASO DE MCIECH (1)

Componentes básicos del motor

En la figura A1 (1) se representan esquemáticamente los componentes esenciales de un MCIECH monocilíndrico, en el que el cilindro recibe en su interior al pistón, que se ajusta perfectamente a sus paredes por medio de unos aros o segmentos, que evitan posibles fugas de gases entre el pistón y la pared del cilindro.

Figura A1
Componentes esenciales de un MCIECH (1)



Al pistón se le une la biela por mediación de un eje, de manera que pueda bascular en él. El extremo inferior de la biela se acopla al codo del cigüeñal, que se apoya sobre unas bancadas, y recibe por un extremo al volante de inercia. Cuando gira el cigüeñal, obliga a deslizarse al pistón en el interior del cilindro, en sucesivos movimientos ascendentes y descendentes.

El cilindro se cierra por su parte superior por mediación de la culata, en la que se alojan dos válvulas: una de ellas se llama de admisión y abre o cierra un conducto que comunica con el carburador; la otra se llama de escape, y

abre o cierra un conducto que comunica al cilindro con el exterior. Ambas válvulas van mandadas por un mecanismo accionado por el cigüeñal, de manera que sus movimientos de apertura y cierre corresponden a posiciones determinadas del giro.

También en la culata se aloja, roscada a ella, una bujía, que ha de producir la chispa que inflamará los gases comprimidos en el interior del cilindro y, mas concretamente, en el espacio de su zona alta comprendido entre la culata y el pistón, cuando éste ocupa la posición más alta de su recorrido ascendente. Este espacio recibe el nombre de cámara de combustión.

En la parte inferior del cilindro se acopla el cárter inferior. El cigüeñal atraviesa esta unión por ambos extremos, como se ven en la figura A1.

Con el giro del cigüeñal, el codo va describiendo una circunferencia y, por tanto, el pistón, por medio de la biela, va subiendo y bajando en el interior del cilindro, de manera que cuando el codo del cigüeñal está en la parte más alta de su recorrido giratorio, el pistón alcanza el nivel más elevado de su movimiento ascendente, llamándose este nivel punto muerto superior (PMS), y cuando el codo ocupa el punto más bajo de su recorrido giratorio, el pistón alcanza el nivel más bajo de su movimiento descendente, llamándose a este nivel punto muerto inferior (PMI). La distancia entre el PMS y el PMI se llama carrera. El pistón efectúa una carrera ascendente y otra descendente en una

vuelta completa del cigüeñal. La carrera, como puede deducirse, equivale al diámetro de la circunferencia descrita por el codo del cigüeñal.

El volumen comprendido entre el PMS y el PMI se llama cilindrada.

Ciclos operativos teóricos del MCIECH de cuatro tiempos

Admisión.- El ciclo de operación del motor de cuatro tiempos empieza con el pistón en el PMS y la válvula de admisión abierta. La rotación del cigüeñal hace que el pistón descienda por el cilindro con movimiento lineal durante su primera carrera. Esto aumenta el volumen del cilindro que queda sobre el pistón, creando un vacío parcial que es llenado de inmediato con una mezcla de gasolina y aire impelida por la presión atmosférica. La mezcla continúa entrando en el cilindro hasta que el pistón llega al PMI. Aproximadamente en esta posición se cierra la válvula de admisión.

Carrera de compresión.- El cigüeñal giró ya media revolución (180°) y la biela bajo al PMI durante la carrera de admisión. La segunda mitad de la revolución del cigüeñal en su segundo tiempo provoca un movimiento ascendente del pistón. El espacio que queda sobre el pistón ahora está sellado debido al cierre de la válvula de admisión y a que la válvula de escape sigue cerrada. Este movimiento ascendente del pistón hace que se comprima la mezcla de gasolina y aire, siendo el resultado un aumento en la presión y temperatura de la mezcla. Al final del segundo tiempo, la mezcla es comprimida en la parte alta del cilindro (en la cámara de combustión), en

un espacio aproximadamente ocho o nueve veces menor que el espacio existente al principio de la carrera. La mezcla se vuelve sumamente combustible y sólo necesita una chispa para inflamarse. Esta chispa es producida por una descarga de alto voltaje que salta a través del entrehierro (separación entre los electrodos) de la bujía, la cual está convenientemente situada en la cámara de combustión. Ahora el cigüeñal ha girado 360° .

Carrera de potencia.- Al principio del tercer tiempo del ciclo de operaciones, el pistón está otra vez en el PMS, habiendo girado el cigüeñal una revolución completa. En esta etapa de la operación, la mezcla de gasolina y aire se está quemando porque la chispa eléctrica desencadenó el proceso de combustión (encendido por chispa). Mientras tiene lugar esta rápida combustión del gas, se presenta un gran aumento de temperatura junto con un incremento de presión. Este incremento de presión es tan grande que ejerce sobre la parte superior del pistón una fuerza suficiente para empujarlo a todo lo largo del cilindro.

Carrera de escape.- Ahora con el pistón en el PMI y con todos los gases quemados, es importante eliminarlos del cilindro en la cuarta y última fase del ciclo de operaciones. Esto se logra abriendo la válvula de escape y expulsando los gases quemados con el pistón en ascenso. Esos gases circulan por el colector de escape y luego son conducidos al sistema de escape y de allí a la atmósfera. Cuando el pistón llega aproximadamente al

Ciclos operativos prácticos del MCIECH de cuatro tiempos

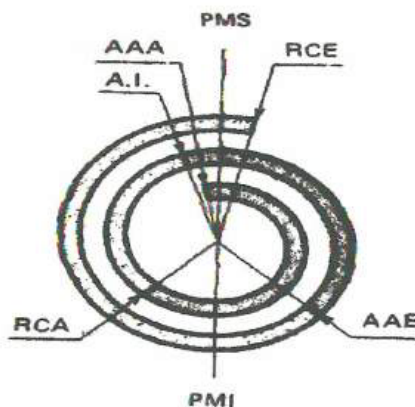
Un poco antes de llegar el pistón al PMS en el tiempo de compresión, salta la chispa, para permitir el inicio de la combustión aprovechando la turbulencia creada por el pistón en la última fase de su recorrido ascendente. En la figura A2 (1) se muestra el diagrama de presiones en el interior del cilindro, en el que A corresponde al momento de la ignición y, por tanto al inicio de la

combustión. Desde el punto B al C el pistón se encuentra bajando en el tiempo de combustión. La presión creada empuja al pistón hacia el PMI, pero un poco antes de llegar a él (punto D), se abre la válvula de escape (avance a la apertura del escape AAE), en cuyo momento, comienzan a salir de ella los gases quemados, con lo cual, al empezar a subir el pistón (punto E), no es frenado por la presión de los gases en el interior del cilindro, pues ésta ha desaparecido casi por completo.

Durante el tiempo de escape, la presión en el interior del cilindro es prácticamente constante y un poco mayor que la atmosférica. Un poco antes de llegar el pistón al PMS efectuando el escape (punto G), se abre la válvula de admisión (avance a la apertura de la admisión AAA), estando abierta todavía la de escape, con lo cual, la velocidad adquirida por estos gases al salir, arrastra a los de admisión, favoreciéndose el llenado del cilindro.

Al comenzar a bajar el pistón en el tiempo de admisión, la presión descende en el interior del cilindro por debajo de la atmosférica, debido a la depresión creada por el pistón.

Figura A3
Diagrama de distribución (2)



Un momento después (punto F), se cierra la válvula de escape (retraso al cierre del escape RCE) y el vacío creado por el pistón al bajar, provoca la entrada de gases frescos al cilindro. El retraso al cierre del escape permite una mejor evacuación del cilindro y un barrido del mismo por parte de los gases frescos que entran por la admisión, que limpian al cilindro de gases quemados, impidiendo que parte de ellos queden dentro, ocupando el lugar que debiera disponerse para los de admisión.

Hay, por tanto, un tiempo en que las dos válvulas están abiertas, llamado traslape o solapo, que contribuye al mejor llenado del cilindro.

Cuando el pistón comienza a subir en el tiempo de compresión (punto H), la válvula de admisión todavía está abierta un cierto tiempo (retraso al cierre de la admisión RCA), para aprovechar la entrada de gases frescos debido a la inercia y obtener un mejor llenado del cilindro. A continuación se cierra la

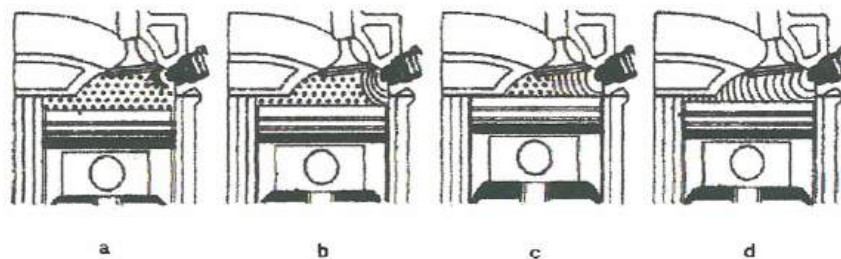
válvula de admisión (punto I) y los gases van siendo comprimidos cada vez más, como consecuencia de la subida del pistón. Llegado al punto A, salta la chispa en la bujía y vuelven a ocurrir las operaciones explicadas.

Los momentos de aperturas y cierres de las válvulas, pueden representarse mediante el diagrama de la distribución (figura A3 (1)), en el que pueden verse cada una de las modificaciones de las aperturas y cierres con respecto al ciclo teórico de cuatro tiempos, mediante las cuales, se consigue un mayor rendimiento en los motores.

Combustión en MCIECH

En la figura A4 (1) se representa de forma esquemática el desarrollo de una combustión normal, donde las partículas de combustible se van quemando a medida que son alcanzadas por el frente de llama y, en consecuencia, la presión obtenida a causa de la dilatación de los gases sube progresivamente, alcanzando su valor máximo cuando la mezcla se ha inflamado totalmente.

Figura A4
Combustión en MCIECH



La rapidez con que se propaga el frente de llama en la cámara de combustión depende de la velocidad de combustión y de otra llamada velocidad de traslación. La primera se refiere a la velocidad con que se producen las reacciones químicas de oxidación que corresponden a una combustión; mientras que la segunda se refiere al movimiento físico del frente de llama con respecto a las paredes de la cámara, que se originan por la diferencia de presiones entre el gas quemado en un instante determinado y el que todavía está sin quemar. En el inicio de la combustión (figura A4 b), la velocidad del frente de llama es relativamente baja, pues la cantidad de gases quemados es pequeña y, en consecuencia, la presión originada es todavía baja, con lo que la propagación de la inflamación se verifica fundamentalmente en virtud de las reacciones químicas (velocidad de combustión). A medida que se quema mayor cantidad de combustible, la presión desarrollada por los gases quemados aumenta rápidamente, lo que conlleva a un aumento importante de la velocidad del frente de llama, que se ve favorecido por la turbulencia que adquieren los gases en esta zona y que facilita su inflamación (figura A4 c). En cuanto la llama alcanza la zona de mayor turbulencia, progresa rápidamente con velocidad más bien constante.

En el rendimiento del ciclo, son de gran importancia el momento en que comienza la combustión y el tiempo que dura ésta, lo que a su vez depende de la velocidad con que se propague el frente de llama y de la longitud del recorrido que ha de efectuar, por cuya causa son de suma importancia la

forma y dimensiones de la cámara de combustión y la posición que en ella ocupa la bujía.

APÉNDICE B

LÍNEAS DE PROGRAMACIÓN DE ALGUNOS ALGORITMOS UTILIZADOS EN EL MODELO

Nombre del algoritmo	Escrito en	Función	Otros algoritmos que utilice
constant.m	Matlab	Determina la constante de equilibrio K_p de una reacción química dada la temperatura utilizando la ecuación 2.21	
propied.m	Matlab	Determina varias propiedades de un gas dada su temperatura utilizando formulas dadas en (3)	
mix1.m	Matlab	Determina varios parámetros característicos de una mezcla aire+combustible+residuos (mezcla hasta con dos combustibles)	

Nombre del algoritmo	Escrito en	Función	Otros algoritmos que utilice
equiv10.m	Matlab	Determina las condiciones de equilibrio químico de una mezcla de 10 gases (CO_2 , CO , O_2 , O , NO , N_2 , H , H_2 , OH , H_2O) dada su temperatura y volumen	constant.m
tfaeq.m	Matlab	Determina la temperatura de flama adiabática de una mezcla aire+combustible+residuos. Combustión ocurre a volumen constante y en equilibrio químico.	propied.m, mix1.m y equiv10.m
motor4a.m	Matlab	Este es el modelo cero-dimensional de un MCIECH monocilíndrico trabajando con gasolina propuesto en este trabajo	mix1.m, equiv10.m, tfaeq.m, entre otros



constant.m

```
% Funcion constant.m --- Determina la constante de equilibrio Kp
% de una reaccion quimica dada la temperatura utilizando una formula
function [k]=constant(nr,t)
% IN --> # de la reaccion "nr", temperatura de reaccion "t"
%
%
%      +-----+
%      | nr | reaccion
%      +-----+
%      1 | CO+.5O2=CO2
%      2 | 2O=O2
%      3 | O2+N2=2NO
%      4 | 2H=H2
%      5 | O+H=OH
%      6 | H2+.5O2=H2O
%      7 | 2N=N2
%
%
% OUT --> constante de equilibrio quimico de la reaccion "k"
% RESTRICCION --> "t" debe estar entre 1600 y 6000 K
% VARIABLES --> k, nr, t, coefk, a, b, c, d
% PROGRAMA PROBADO CON TABLAS DE CONSTANTES DE EQUILIBRIO
% Validacion de datos
if (t<1600 | t>6000)
    disp('T FUERA DE RANGO PARA PODER CALCULAR K EN CONSTANT.M');
    t
end
% Matriz con datos
coefk=[...
1  33805      0.7422  165.8      -16.5739
2  57126      -0.01      599      -16.3201
3 -14096 -0.6893 -1375.3  9.668
4  33587      0.5604  3327      -20.8683
5  44216      -0.1319  1298      -13.1303
6  42450      -1.074  -2147      3.2515
7  108142 -1.744  -3558.2  0.595
];

% Coeficientes de la formula
a=coefk(nr,2); b=coefk(nr,3); c=coefk(nr,4); d=coefk(nr,5);

% Valor de Kp dado por formula
k=exp((a/t)+(b+c/t)*log(t)+d);
```

propied.m

```
% Funcion propied.m --- Determina varias propiedades de una gas
% dada su temperatura utilizando formulas
function [cv,u,o]=propied(ng,t)
% IN --> # del gas "ng", temperatura del gas "t"
% OUT --> capacidad calorifica a vol cte "cv", energia interna "u",
%         funcion "o" para calcular la entropia del gas  $s=o-R*\ln(p)$ 
% RESTRICCION --> "ng" entre 1 y 10, "t" debe estar entre 400 y 6000 K
% VARIABLES --> cv, o, d, ng, t, coefcvu1, coefcvu2, a, b, c, d
% PROGRAMA PROBADO CON TABLAS DE U
% Matrices con datos
coefcvu1=[...
1  56835      66.27      -11634 -200
2  299180  37.85      -4571.9 -31.1
3  43388      42.27      -6635.4 -55.15
4  265120  24.6      -2729.2  13.86
5  111050  37.81      -2874.8 -15.7
6  31317      37.46      -4559.3 -34.82
7  357070  20.79      -7.9 -3.9
8  326490  40.35      -8085.2 -121
9  217810  37.36      -5561.4 -44.06
10 88923      49.36      -7940.8 -117
];
coefcvu2=[...
1  93048      68.58      -16979 -220.4
2  309070  39.29      -6201.9 -42.77
3  127010  46.25      -18798 -92.15
4  298360  23.17      -6910.3  21.81
5  138670  39.92      -7061.8 -33.9
6  44639      39.32      -6753.4 -50.24
7  357010  20.79      0 -3.82
8  461750  46.23      -27649 -176.6
9  298750  42.86      -17695 -92.24
10 154670  60.43      -19212 -204.6
];

% Coeficientes "a", "b", "c", "d" de las formulas de las propiedades
if (t>=400 & t<=1600)
    a=coefcvu1(ng,2); b=coefcvu1(ng,3);
    c=coefcvu1(ng,4); d=coefcvu1(ng,5);
elseif (t>1600 & t<=6000)
    a=coefcvu2(ng,2); b=coefcvu2(ng,3);
    c=coefcvu2(ng,4); d=coefcvu2(ng,5);
else
    disp('T ESTA FUERA DE RANGO PARA PODER CALCULAR CV-U-O EN PROPIED.M');
    t
end

% Resultado
cv=b-8.314+c/t;
u=a+(b-8.314)*t+c*log(t);
o=b*log(t)-c/t+d;
```

mix1.m

```
% Funcion mix1.m --- Determina varios parametros caracteristicos
% de una mezcla aire+combustible+residuos (mezcla con dos combustibles)
% Aire+combustibles+residuos estan a la misma temperatura al estar
% dentro del cilindro
% Se considera propiedades del combustible en estado gaseoso. El
% combustible se vaporizara en el proceso de carburacion
% Vale resaltar que los calores de reaccion hrp, urp son
% aproximadamente independientes de la temperatura
% Se considera que el numero de moles de cada especie de los
% residuos corresponde a productos de una combustion completa. Esto
% es valido pues temperatura es baja
```

```
function[cvac,uac,cvres,ures,urp,y,ac,ah,ao,an]...
=mix1(nc1,nc2,por1,por2,aire,tr)
```

```
% IN --> # del combustible 1 "nc1", # del combustible 2 "nc2",
% porcentaje volumetrico combustible 1 "por1", porcentaje
% volumetrico combustible 2 "por2", porcentaje de aire "aire",
% temperatura de los reactivos (temperatura mezcla
% aire+combustible+residuos) "tr"
% OUT --> calor especifico de aire+combustible "cvac",
% energia interna de aire+combustible "uac",
% calor especifico de residuos "cvres",
% energia interna de residuos "ures", calor de reaccion a
% volumen constante del combustible "urp", moles de oxigeno
% reactivo "y", cantidades de C, H, O, N en
% reactivos para un mol de combustible reactivo: "ac",
% "ah", "ao", "an"
% RESTRICCION --> y>ymin (ver mas adelante), "tr" entre 298 y 900,
% no se puede calcular "ures" bajo 400 K (se
% dara un valor no valido de cero)

% A pesar de que lo correcto es el rango de 298<tr<900 se lo modificara
% para poder incluir condiciones extremas: temperaturas altas para
% hallar energia interna de mezcla aire+combustible+residuos en la
% determinacion de temperatura de flama adiabatica y temperaturas bajas
% para incluir efecto de carburacion
if (tr<240 | tr>1100)
    disp('TR FUERA DE RANGO EN MIX1.M');
    tr
end
% Matrices con datos
comb=[...
1 1 4 0 -797570 16 20.10.0052
2 2 6 0 -141990 30 52.30.104
3 3 8 0 -2032800 44 25.30.162
4 8 18 0 -5089100 114 38.40.429
5 10 22 0 -6312300 142 38.10.656
6 1 4 1 -851840 32 8.370.126
7 2 6 1 -1541000 46 18.80.159
8 6 6 0 -3433400 78 27.20.218
];
gas=[...
1 28.80.028 44
2 27.40.0058 28
3 27 0.0079 32
6 27.60.0051 28
8 28.30.0019 2
```


10 30.50.0103 18

];

% Parte de Aire-combustible

% Cantidades de C, H, O en el combustible "mc", "mh", "mo"

por1=por1/100; por2=por2/100;

mc=por1*comb(nc1,2)+por2*comb(nc2,2);

mh=por1*comb(nc1,3)+por2*comb(nc2,3);

mo=por1*comb(nc1,4)+por2*comb(nc2,4);

% Calor de reaccion a presion constante del combustible "hrp"

hrp=por1*comb(nc1,5)+por2*comb(nc2,5);

% Determinacion de coeficientes "p" y "q" de la formula

% $cp = p + q \cdot T$ para combustibles y gases

pc1=comb(nc1,7); qc1=comb(nc1,8);

pc2=comb(nc2,7); qc2=comb(nc2,8);

pco2=gas(1,2); qco2=gas(1,3);

pco=gas(2,2); qco=gas(2,3);

po=gas(3,2); qo=gas(3,3);

pn=gas(4,2); qn=gas(4,3);

ph2o=gas(6,2); qh2o=gas(6,3);

% Moles de oxigeno requeridas "y"

aire=aire/100;

ycc=mc+mh/4-mo/2;

ymin=ycc-mc/2;

y=aire*ycc;

if y<ymin

aire

disp('% DE AIRE MUY BAJO EN MIX1.M');

end

% Cantidades de C, H, O, N en la mezcla aire+combustible

% "ac", "ah", "ao", "an"

ac=mc; ah=mh; ao=mo+2*y; an=2*3.76*y;

% Calor de reaccion a volumen constante del combustible "urp" urp=hrp-2480*(mc+mh/2-1-ycc);

% Energia interna del combustible a tr=298 K "uc"

uc=6886*mc+54838*mh/2-urp-ycc*14722;

%

X=por1*pc1+por2*pc2+po*y+pn*3.76*y-8.314*(1+4.76*y);

Y=por1*qc1+por2*qc2+qo*y+qn*3.76*y;

Z=(X*tr+Y/2*tr^2)-(X*298+Y/2*298^2);

% Resultado aire-combustible

cvac=(X+Y*tr)/(1+4.76*y);

uac=(uc+64740*y+Z)/(1+4.76*y);

% Parte de Residuos

% Numero de moles de cada especie gaseosa en residuos "N" N=[0 0 0 0 0 0 0 0];

CV=[0 0 0 0 0 0 0 0];

U=[0 0 0 0 0 0 0 0];

if (y>ymin & y<=ycc)

N(1)=2*(y-ymin);

N(2)=2*(ycc-y);

N(3)=0;

N(6)=3.76*y;


```

        N(10)=mh/2;
elseif (y>ycc)
    N(1)=mc;
    N(2)=0;
    N(3)=y-ycc;
    N(6)=3.76*y;
    N(10)=mh/2;
end
% Determinacion de calor especifico de residuos "cvres" y % energia interna de residuos "ures" if
(tr<400)
    CV(1)=N(1)*(pco2+qco2*tr-8.314);
    CV(2)=N(2)*(pco+qco*tr-8.314);
    CV(3)=N(3)*(po+qo*tr-8.314);
    CV(6)=N(6)*(pn+qn*tr-8.314);
    CV(10)=N(10)*(ph2o+qh2o*tr-8.314);
elseif (tr>=400)
    for i=1:10
        [cv,u,o]=propied(i,tr);
        CV(i)=N(i)*cv;
        U(i)=N(i)*u;
    end
end
% Resultado residuos
cvres=sum(CV)/sum(N);
ures=sum(U)/sum(N);

```

equiv10.m

```
% Funcion equiv10.m --- Determina las condiciones de equilibrio quimico
% de una mezcla de 10 gases (CO2, CO, O2, O, NO, N2, H, H2, OH, H2O)
% La solucion se encuentra mediante el metodo half-interval-search
% Utiliza las funciones: constant.m
function [N]=equiv10(v,t,ac,ah,ao,an)
% IN --> volumen corregido "v" ( v=(volumen real en kJ/atm)*(# moles de
% mezcla para un mol de combustible)/(# moles mezcla) ),
% temperatura de la mezcla "t", cantidades de C, H, O, N: "ac",
% "ah", "ao", "an" para un mol de combustible
% OUT --> número de moles de cada especie gaseosa en equilibrio
% quimico "N"
% RESTRICCION --> Programa no funciona si ao=0 o ah=0 o ac=0
% "ao" debe ser mayor a "ac"
% "t" entre 1600 y 6000 K
% Si "ao" es excesivo PROGRAMA PUEDE TRABARSE
% VARIABLES -->
% PROGRAMA PROBADO CON STANJAN

% Se verifican algunas restricciones
if (ao==0|ah==0|ac==0|ao<ac|t<1600|t>6000)
    disp('EQUIV10.M NO FUNCIONA CON TALES DATOS');
    break
end
% "pn" determina precision del resultado. Puede modificarse pn=0.001;
% "cont" es un contador. Evitara bucles infinitos cuando % resultado no converja % "lim" es el maximo
% permitido de iteraciones. Puede modificarse cont=0; lim=1000;
% "x" es operador logico
x=1;

% Determinacion del valor de constantes de equilibrio quimico "k#"
% y variables "w#"
k1=constant(1,t);
k2=constant(2,t);
k3=constant(3,t);
k4=constant(4,t);
k5=constant(5,t);
k6=constant(6,t);

w1=k1*(8.314*t/v)^0.5;
w2=k2*(8.314*t/v);
w3=k3;
w4=k4*(8.314*t/v);
w5=k5*(8.314*t/v);
w6=k6*(8.314*t/v)^0.5;

% Valores iniciales de algunas variables
Z=[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];
N=[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];
j=0;
N(1)=ac/2;
ac1=ac; ac2=ac; ac3=ac; ac4=ac;

% Busqueda del resultado "N"
while(x==1)
% cont
j=j+1;
N(2)=ac-N(1);
N(3)=(N(1)*N(2)/w1)^2;
```

```

N(4)=(N(3)/w2)^0.5;
N(5)=w3*N(3)/4*(-1+(1+8*an/w3/N(3))^0.5);
N(6)=N(5)^2/w3/N(3);
c=ao-ah/2-2*N(1)-N(2)-2*N(3)-N(4)-N(5);

if (c>0)
    ac4=ac;
    if j>20
%        disp('j>20 en c')
        ca=ac-N(1);
        N(1)=ac-ca/2;
        j=1;
    ac1=ca;
    end
    N(1)=N(1)+ac1/2^(j+1);
else
    ac1=ac;
    b=0.5*(1-w5*N(4));
    N(7)=(-b+(b^2-4*c*w4)^0.5)/2/w4;
    N(8)=w4*N(7)^2;
    N(9)=w5*N(4)*N(7);
    N(10)=(ah-N(7)-N(9))/2-N(8);

    if (N(10)<0)
        ac4=ac;
        if j>20
%            disp('j>20 en N(10)')
            ca=ac-N(1);
            N(1)=ac-ca/2;

            j=1;
            ac2=ca;
        end
        N(1)=N(1)-ac2/2^(j+1);
    else
        ac2=ac;
        if (abs((N-Z)/sum(N)))<pn
            x=0;
        else
            Z=N;
            w61=N(10)/N(8)/N(3)^0.5;
            if w61<w6
                ac4=ac;
                if j>20
%                    disp('j>20 en w61<w6')
                    ca=ac-N(1);
                    N(1)=ac-ca/2;

                    j=1;
                    ac3=ca;
                end
                N(1)=N(1)-ac3/2^(j+1);
            else
                ac3=ac;
                if j>20
%                    disp('j>20 en w61>w6')
                    ca=ac-N(1);
                    N(1)=ac-ca/2;

                    j=1;
                    ac4=ca;
                end
            end
        end
    end
end

```

```

        N(1)=N(1)+ac4/2^(j+1);
    end
    end
end
end
cont=cont+1;
if cont>lim
    x=0;
end
end
% Advertencia de bucle infinito
% Casi siempre (a veces no) ocurre bucle infinito cuando la cantidad
% de aire es excesiva. En tales casos la aproximacion del resultado
% con equiv6.m es muy buena
if (cont>lim)
    N=equiv6(v,t,ac,ah,ao,an);
    disp('BUCLE INFINITO EN EQUIV10.M')
    disp('RESULTADO DADO POR EQUIV6.M')
% cont
% t
end

```


tfaeq.m

```
% Funcion tfaeq.m --- Determina la temperatura de flama adiabatica
% -tfa- de una mezcla aire+combustible+residuos
% Combustion a volumen constante
% Modelo de combustion en equilibrio quimico
% La solucion se encuentra mediante el metodo half-interval-search
% Utiliza las funciones: propied.m, mix1.m y equiv6.m o equiv10.m

function [t,N]=tfaeq(nc1,nc2,por1,por2,aire,tr,v,nm,nx)
% IN --> # del combustible 1 "nc1", # del combustible 2 "nc2",
%         porcentaje volumetrico combustible 1 "por1", porcentaje
%         volumetrico combustible 2 "por2", porcentaje de aire "aire",
%         temperatura de los reactivos o mezcla
%         aire+combustible+residuos "tr", volumen "v", numero de
%         moles de la mezcla "nm", numero de moles de residuos "nx"
% OUT --> temperatura de los productos de la combustion asumiendo
%         combustion adiabatica "t", numero de moles de cada especie
%         gaseosa de los productos de combustion en equilibrio
%         quimico "N"
% RESTRICCION --> debidas a equiv10.m o equiv6.m
% PROGRAMA PROBADO CON STANJAN
% Los siguientes parametros determinan precision del resultado. % A mayor "delt", mas rapido. A
% mayor "jmax", mas precision % Pueden modificarse, pero no es recomendable (para delt=100 no %
% funciona bien por ejemplo) delt=10; jmax=15;
% Es de esperar que "t" se encuentre entre "tr" y "tlim"
t=2500;

% "tlim" evitara bucles infinitos
tlim=5000;

% "x1" y "x2" son operadores logicos
x1=1; x2=1;

% Se determina energia interna de mezcla aire+combustible+residuos "ur"
[cvac,uac,cvres,ures,urp,y,ac,ah,ao,an]=...
    mix1(nc1,nc2,por1,por2,aire,tr);
ur=nm*uac+nx*ures;
% Matriz que almacenara dato "u"
U=[0 0 0 0 0 0 0 0 0];

% Muy importante
% volumen corregido=
% (volumen real)*(# moles de mezcla para una
% mol de combustible)/(# moles mezcla)
vc=v*(1+4.76*y)/(nm+nx);

% Busqueda del resultado
while(x1==1)
    t=t+delt;
    N=equiv10(vc,t,ac,ah,ao,an);
    for i=1:10
        [cv,u,o]=propied(i,t);
        U(i)=u*N(i);
    end
    if (sum(N)~=0)
% Maña
        cm=nm/(1+4.76*y)+nx/sum(N);
        up=cm*sum(U);
    else
```

```

        up=0;
    end
    f=up-ur;
    if (f>0)
        x1=0;
    end
    if (t>tlim)
        x1=0;
        x2=0;
        disp('BUCLE INFINITO EN TFAEQ.M')
        disp('RESULTADO DE TFAEQ.M NO VALIDO')
    end
end
t=t-delt/2;
j=2;

while(x2==1)
    N=equiv10(vc,t,ac,ah,ao,an);
    for i=1:10
        [cv,u,o]=propied(i,t);
        U(i)=u*N(i);
    end
    if (sum(N)~=0)
        % Maña
        cm=nm/(1+4.76*y)+nx/sum(N);
        up=cm*sum(U);
    else
        up=0;
    end
    f=up-ur;
    if (f>0)
        t=t-delt/2^j;
    else
        t=t+delt/2^j;
    end
    if (j==jmax)
        x2=0;
    else
        j=j+1;
    end
end
end
N=N*cm;

% Advertencia
if (sum(N)==0)
    disp('RESULTADO DE TFAEQ.M NO VALIDO')
end
end

```

motor4a.m

```
% motor4a.m
%
% Simulacion de los procesos de un motor de combustion
% interna encendido por chispa
%
% Incluye efecto de combustion progresiva
%
% Escape y admision considerando movimiento del piston y
% flujo a traves de valvulas sin considerar efecto de los
% multiples de admision y escape
%
% Se consideran efectos de la transferencia de calor del
% fluido de trabajo hacia las paredes del cilindro
%
% Prediccion de la emision de NO y CO
```

% CALCULOS

```
% Variables del motor calculadas a partir de datos
C=100/(CR-1);
VDISP=pi*B^2*S/4000;
VDISP=VDISP/9870;
VTDC=VDISP*C/100;
VBDC=VDISP+VTDC;
AROE=3.14*DVE^2/400;
AROI=3.14*DVA^2/400;
%AROI=AROE;

% Carburacion
if OPCARB==1
    DT=carbu(NCOMB1,NCOMB2,POR1,POR2,AIRE,TA);
    TM=TA-DT;
end

% Variacion del adelanto a la ignicion con las RPM
%SA=sarpm(RPM)

% Valores de primera iteracion
P1=PM;
V1=VBDC;
T1=TM;
NX=0;

% Ciclo de calculos
for i=1:numite

    % Numero de ciclo
    i

    % Numero de moles de mezcla fresca en 1 "NM"
    NM=P1*V1/8.314/T1-NX;

    % Calculo de "KR" en 1
    [cvac,uac,cvres,ures,URP,Y,ac,ah,ao,an]...
    =mix1(NCOMB1,NCOMB2,POR1,POR2,AIRE,T1);
    CVR=(NM*cvac+NX*cvres)/(NM+NX);
    KR=(CVR+8.314)/CVR;
```

```

% Punto 2
P=P1;
V=V1;
T=T1;
A=ADD;
% Intervalo de integracion en grados "dA"
dA=1;
while A<180
    dt=dA/6/RPM;
    a=A*pi/180;
    dV=0.5*V*DISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-(sin(a))^2)^0.5-...
        sin(a))*pi/180*dA;
    dP=(-KR*P1*V1^KR/(V^(KR+1)))*dV;
    dPtc=trcalor(TW,T,P,A,VDISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,2,OPFORMTRC);
    dP=dP+dPtc;
    P=P+dP;
    A=A+dA;
    V=vol(A,VDISP,CR,L,S);
    T=P*V/8.314/(NM+NX);
end
P2=P;
T2=T;
%P2=P1*(V1/VTDC)^(KR);
%T2=T1*(V1/VTDC)^(KR-1);

% COMPRESION - COMBUSTION

% Punto 3
% Hallar temperatura de flama adiabatica "T3"
if OPCOMB==1
    [T3,N3]...
        =tfacc(NCOMB1,NCOMB2,POR1,POR2,AIRE,T2,NM,NX);
elseif OPCOMB==2
    [T3,N3]...
        =tfacq(NCOMB1,NCOMB2,POR1,POR2,AIRE,T2,VTDC,NM,NX);
end
P3=P2*(T3/T2)*sum(N3)/(NM+NX);

% Calculo de "KP" en 3
CVP=0;
for j=1:10
    [cv,u,o]=propied(j,T3);
    CVP=CVP+N3(j)*cv;
end
CVP=CVP/sum(N3);
KP=(CVP+8.314)/CVP;

% Angulo ignicion "AI"
AI=180-SA;
% Formula empirica de duracion de la combustion "ADC"
% Valida para gasolina y diametro de cilindro de alrededor de 100 mm
ADC=40+5*(RPM/600-1)+166*(100/AIRE-1.1)^2;
% Angulo fin de combustion "AE"
AE=AI+ADC;

% Matriz con datos para graficar "PVCOMP"
% 1ra fila-->angulo, 2da fila-->volumen, 3ra fila-->presion
PVCOMP=zeros(3,1);

```



```

j=1;

% Variacion P-V durante compresion
P=P1;
V=V1;
T=T1;
A=ADD;
WCOMP=0;
% Intervalo de integracion en grados "dA"
dA=1;
while A<AI
    dt=dA/6/RPM;
    a=A*pi/180;
    dV=0.5*VDISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-(sin(a))^2)^0.5-...
        sin(a))*pi/180*dA;
    dP=(-KR*P1*V1^KR/(V^(KR+1)))*dV;
    dPtc=trcalor(TW,T,P,A,VDISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,2,OPFORMTRC);
    dP=dP+dPtc;
    P=P+dP;
    A=A+dA;
    V=vol(A,VDISP,CR,L,S);
    T=P*V/8.314/(NM+NX);
    PVCOMP(1,j)=A;
    PVCOMP(2,j)=V;
    PVCOMP(3,j)=P;
    WCOMP=WCOMP+(P+dP/2)*dV;
    j=j+1;
end

% Punto I
PI=P;
VI=vol(AI,VDISP,CR,L,S);
TI=T;

% Matriz con datos para graficar "PVCOMB"
% 1ra fila-->angulo, 2da fila-->volumen, 3ra fila-->presion
% 4ta fila-->temperatura
PVCOMB=zeros(4,1);

% Variacion P-V durante combustion
P=PI;
V=VI;
T=TI;
WCOMB=0;
% Intervalo de integracion en grados "dA"
dA=ADC/steps;
for j=1:(steps+1)
    A=AI+dA*(j-1);
    PVCOMB(1,j)=A;
    PVCOMB(2,j)=V;
    PVCOMB(3,j)=P;
    PVCOMB(4,j)=T;
    if OPFORMN==1
        n=(A-AI)/ADC;
        dn=1/steps;
    elseif OPFORMN==2
        n=((A-AI)/ADC)^2;
        dn=2/steps*(A-AI)/ADC;
    elseif OPFORMN==3

```

```

n=0.5*(1-cos(pi*(A-AI)/ADC));
dn=pi/2/steps*sin(pi*(A-AI)/ADC);
elseif OPFORMN==4
n=1-exp(-5*((A-AI)/ADC)^3);
dn=15/steps*((A-AI)/ADC)^2*exp(-5*((A-AI)/ADC)^3);
end
a=A*pi/180;
dV=0.5*V DISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-(sin(a))^2)^0.5-...
sin(a))*pi/180*dA;
K=KR+(KP-KR)*n;
if OPFORMAP==1
dP=-P*K*dV/V+(P3-P2)*VTDC/V*dn;
elseif OPFORMAP==2
dP=-P*K*dV/V+1/0.95*(0.95*P3-0.7*P2)*VTDC/V*dn;
end
dt=dA/6/RPM;
dPtc=trcalor(TW,T,P,A,V DISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,3,OPFORMTRC);
dP=dP+dPtc;
P=P+dP;
V=vol(A+dA,V DISP,CR,L,S);
% Maña
% Diferencia entre numero de moles totales en punto 3 y
% punto E es minima en caso de equilibrio quimico. Nula en
% caso de combustion completa
T=P*V/8.314/sum(N3);
WCOMB=WCOMB+(P+dP/2)*dV;
end

% EXPANSION

% Punto E
PE=PVCOMB(3,steps+1);
VE=vol(AE,V DISP,CR,L,S);
TE=PE*VE/8.314/sum(N3);
if OPCOMB==1
NE=N3;
elseif OPCOMB==2
VCE=VE*(1+4.76*Y)/(NM+NX);
NE=equiv10(VCE,TE,ac,ah,ao,an);
NE=NE*(NM/(1+4.76*Y)+NX/sum(NE));
end

% Calculo de "KP" en E
CVP=0;
for j=1:10
[CV,u,o]=propied(j,TE);
CVP=CVP+NE(j)*CV;
end
CVP=CVP/sum(NE);
KP=(CVP+8.314)/CVP;

% Matriz con datos para graficar "PVEXP"
% 1ra fila-->angulo, 2da fila-->volumen, 3ra fila-->presion
% 4ta fila-->temperatura
PVEXP=zeros(4,1);
j=1;

% Variacion P-V durante la expansion
P=PE;

```

```

V=VE;
T=TE;
A=AE;
WEXP=0;
% Intervalo de integracion en grados "dA"
% dA=0.5;
dA=(360-EXA-AE)/steps;
while A<(360-EXA)
    dt=dA/6/RPM;
    a=A*pi/180;
    dV=0.5*V DISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-(sin(a))^2)^0.5-...
        sin(a))*pi/180*dA;
    dP=(-KP*PE*VE^KP/(V^(KP+1)))*dV;
    dPtc=trcalor(TW,T,P,A,V DISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,3,OPFORMTRC);
    dP=dP+dPtc;
    P=P+dP;
    A=A+dA;
    V=vol(A,V DISP,CR,L,S);
    % Maña - Asumir que suma de numero de moles de cada especie
    % gaseosa en equilibrio quimico en cualquier punto de expansion
    % es igual que en punto E (comprobado)
    T=P*V/8.314/sum(NE);
    PVEXP(1,j)=A;
    PVEXP(2,j)=V;
    PVEXP(3,j)=P;
    PVEXP(4,j)=T;
    WEXP=WEXP+(P+dP/2)*dV;
    j=j+1;
end

% Punto 4
AEX=-EXA;
P4=P;
V4=vol(AEX,V DISP,CR,L,S);
T4=T;
if OPCOMB==1
    N4=NE;
elseif OPCOMB==2
    VC4=V4*(1+4.76*Y)/(NM+NX);
    if T4>1600
        N4=equiv10(VC4,T4,ac,ah,ao,an);
    else
        % Maña - Asumir numero de moles de cada especie
        % gaseosa en 4 como equilibrio a baja temperatura
        % cuando T4<1600 (limite de equivX.m)
        N4=equiv10(VC4,1600,ac,ah,ao,an);
    end
    N4=N4*sum(NE)/sum(N4);
end

% Calculo de "KP" en 4
CVP=0;
for j=1:10
    [cv,u,o]=propied(j,T4);
    CVP=CVP+N4(j)*cv;
end
CVP=CVP/sum(N4);
KP=(CVP+8.314)/CVP;

```

```
% Combinacion de matrices "PVCOMB" Y "PVEXP"
% en "PVCOMBEXP"
PVCOMBEXP=cat(2,PVCOMB,PVEXP);
```

```
% ESCAPE
```

```
% Valores de primera iteracion
```

```
P=P4;
V=V4;
M=masa(N4);
T=T4;
A=AEX;
WE=0;
WI=0;
```

```
% Matriz con datos para graficar "PVESC"
% 1ra fila-->angulo, 2da fila-->volumen, 3ra fila-->presion
PVESC=zeros(3,1);
j=1;
```

```
% Variacion P-V durante escape
```

```
dtmax=1/6/RPM;
dPmax=(P-PO)/50;
while (A<180)
    CRIT=((KP+1)/2)^(KP/(KP-1));
    ARE=AROE*sin(abs(pi*(A+AEX)/(180+AEX)))^(1/3);
    R1=sum(N4)*8.314/masa(N4);
    if (P/PO<CRIT)
        dMdt=-0.3203*ARE*PO*(2*KP/R1/T/(KP-1)*...
            (P/PO)^((KP-1)/KP)*((P/PO)^((KP-1)/KP)-1))^0.5;
    else
        dMdt=-0.3203*ARE*P*(KP/R1/T*(2/(KP+1))^((KP+1)/(KP-1)))^0.5;
    end
    dAdt=6*RPM;
    a=A*pi/180;
    dVdt=0.5*V DISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-(sin(a))^2)^0.5-...
        sin(a))*pi/180*dAdt;
    Q=KP*P*(dMdt/M-dVdt/V);
    if (Q<0)
        if (-dPmax/Q>dtmax)
            dt=dtmax;
            dP=Q*dt;
        else
            dP=-dPmax;
            dt=dP/Q;
        end
    elseif (Q==0)
        dP=0;
        dt=dtmax;
    elseif (Q>0)
        if (dPmax/Q<dtmax)
            dP=dPmax;
            dt=dP/Q;
        else
            dt=dtmax;
            dP=Q*dt;
        end
    end
end
```



```

dPtc=trcalor(TW,T,P,A,VDISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,1,OPFORMTRC);
dP=dP+dPtc;
P=P+dP;
A=A+dAdt*dt;
V=vol(A,VDISP,CR,L,S);
M=M+dMdt*dt;
T=P*V/M/R1;
PVESC(1,j)=A;
PVESC(2,j)=V;
    PVESC(3,j)=P;
j=j+1;
WE=WE+(P+dP/2)*dVdt*dt;
% Maña
if (P<PO)
    P=PO;
end
end

% Punto 5
P5=P;
V5=V;
M5=M;
T5=T;
NX=P5*V5/8.314/T5;

```

% ADMISION

```

% Matriz con datos para graficar "PVADM"
% 1ra fila-->angulo, 2da fila-->volumen, 3ra fila-->presion
PVADM=zeros(3,1);
j=1;

```

```

% Angulo que indica fin de admision "AIN"
AIN=360+ADD;

```

```

% Variacion P-V durante admision
% Sigue expulsion de residuos, P>PM
dtmax=0.5/6/RPM;
dPmax=0.05;
while (P>PM)
    CRIT=((KP+1)/2)^(KP/(KP-1));
    ARI=AROI*sin(abs(pi*(A-AIN)/(180-AIN)))^(1/3);
    R1=sum(N4)*8.314/masa(N4);
    if (P/PM<CRIT)
        dMdt=-0.3203*ARI*PM*(2*KP/R1/T/((KP-1)*(P/PM)^((KP-1)/KP)*...
            ((P/PM)^((KP-1)/KP)-1))^0.5;
    else
        dMdt=-0.3203*ARI*P*(KP/R1/T*(2/(KP+1))^((KP+1)/(KP-1)))^0.5;
    end
    dAdt=6*RPM;
    a=A*pi/180;
    dVdt=0.5*VDISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-sin(a)^2)^0.5-...
        sin(a))*pi/180*dAdt;
    Q=KP*P*(dMdt/M-dVdt/V);
    if (Q<0)
        if (-dPmax/Q>dtmax)
            dt=dtmax;
            dP=Q*dt;
        else

```



```

        dP=-dPmax;
        dt=dP/Q;
    end
elseif (Q==0)
    dP=0;
    dt=dtmax;
elseif (Q>0)
    if (dPmax/Q<dtmax)
        dP=dPmax;
        dt=dP/Q;
    else
        dt=dtmax;
        dP=Q*dt;
    end
end
dPtc=trcalor(TW,T,P,A,VDISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,1,OPFORMTRC);
dP=dP+dPtc;
P=P+dP;
A=A+dAdt*dt;
V=vol(A,VDISP,CR,L,S);
M=M+dMdt*dt;
T=P*V/M/R1;
PVADM(1,j)=A;
PVADM(2,j)=V;
PVADM(3,j)=P;
j=j+1;
Wl=Wl+(P+dP/2)*dVdt*dt;
end

% Variacion P-V durante admision
% Admision de residuos y mecla fresca, P<PM
dtmax=1/6/RPM;
dPmax=(PM-P);
if dPmax<5e-4
    %disp('dPmax<5e-4')
    dPmax=5e-4;
end
MM=1;
while (A<AIN)
    if M<M5
        K1=KP;
        R1=sum(N4)*8.314/masa(N4);
    else
        K1=KR;
        R1=0.287;
        T=TM;
    end
    CRIT=((K1+1)/2)^(K1/(K1-1));
    ARI=AROI*sin(abs(pi*(A-AIN)/(180-AIN)))^(1/3);
    if (P<PM)
        if (PM/P<CRIT)
            dMdt=0.3203*ARI*P*(2*K1/R1/T/(K1-1)*(PM/P)^((K1-1)/K1)*...
                ((PM/P)^((K1-1)/K1)-1))^0.5;
        else
            dMdt=0.3203*ARI*PM*(K1/R1/T*(2/(K1+1))^((K1+1)/(K1-1)))^0.5;
        end
    else if (P>PM & A>360)
        if (P/PM<CRIT)
            dMdt=-0.3203*ARI*PM*(2*K1/R1/T/(K1-1)*(P/PM)^((K1-1)/K1)*...

```

```

        ((P/PM)^((K1-1)/K1)-1))^0.5;
    else
        dMdt=-0.3203*ARI*P*(K1/R1/T*(2/(K1+1))^(K1+1)/(K1-1)))^0.5;
    end
end
dAdt=6*RPM;
a=A*pi/180;
dVdt=0.5*VDISP*(0.5*sin(2*a)/((2*L/S)^2-sin(a)^2)^0.5-...
    sin(a))*pi/180*dAdt;
if M<M5
    Q=K1*P*(dMdt/M-dVdt/V);
else
    Q=K1*(R1*TM/V*dMdt-P/V*dVdt);
end
if (Q<0)
    if (-dPmax/Q>dtmax)
        dt=dtmax;
        dP=Q*dt;
    else
        dP=-dPmax;
        dt=dP/Q;
    end
elseif (Q==0)
    dP=0;
    dt=dtmax;
elseif (Q>0)
    if (dPmax/Q<dtmax)
        dP=dPmax;
        dt=dP/Q;
    else
        dt=dtmax;
        dP=Q*dt;
    end
end
dPtc=trcalor(TW,T,P,A,VDISP,CR,B,L,S,RPM,T1,P1,V1,dt,1,OPFORMTRC);
dP=dP+dPtc;
P=P+dP;
A=A+dAdt*dt;
V=vol(A,VDISP,CR,L,S);
M=M+dMdt*dt;
if (M>M5 & M<MM)
    MM=M;
    PF=P;
    VF=V;
    AF=A;
end
T=P*V/M/R1;
PVADM(1,j)=A;
PVADM(2,j)=V;
PVADM(3,j)=P;
j=j+1;
Wt=Wt+(P+dP/2)*dVdt*dt;
% Maf
e=abs(PM-P);
if (e<0.01*PM & A>360)
    P=PM-e;
end
end
end

```

% Trabajo durante escape y admision
WLOOP=WE+WI;

% Trabajo del ciclo "WNET"
WNET=WEXP+WCOMB+WCOMP+WLOOP;

% Punto 1
P1=P;
V1=V;
M1=M;
T1=T;
end

% RESULTADOS

% Presion media efectiva en [atm]
MEP=WNET/VDISP;

% Eficiencia termica [%]
EFT=WNET*(1+4.76*Y)/(-URP)/NM*100

% Potencia
KW=WNET*RPM/120;
HP=WNET*RPM/89.5

% Consumo especifico de combustible [kg/(kw*h)]
COMB=[...

1	1	4	0	-797570	16	20.10.0052
2	2	6	0	-141990	30	52.30.104
3	3	8	0	-2032800	44	25.30.162
4	8	18	0	-5089100	114	38.40.429
5	10	22	0	-6312300	142	38.10.656
6	1	4	1	-851840	32	8.370.126
7	2	6	1	-1541000	46	18.80.159
8	6	6	0	-3433400	78	27.20.218

];
QL=abs((POR1/100)*COMB(NCOMB1,5)/COMB(NCOMB1,6)+...
(POR2/100)*COMB(NCOMB2,5)/COMB(NCOMB2,6));
SFC=3600/(EFT/100)/QL

% Presion maxima del ciclo [atm]
[PMAX,IPMAX]=max(PVCOMB(3,:));
PMAX;
APMAX=PVCOMB(1,IPMAX);

% Temperatura maxima del ciclo [K]
TMAX=0;
for i=1:(steps+1)
T=PVCOMB(2,i)*PVCOMB(3,i)/8.314/sum(N3);
if T>TMAX
TMAX=T;
ITMAX=i;
end
end
TMAX;
ATMAX=PVCOMB(1,ITMAX);

% Porcentaje molar de mezcla fresca [%]

PORMF=NM/(NM+NX)*100

% Eficiencia volumetrica [%]

EFVOL=(M1-M5)*0.287*TM/PM/VDISP*100

% Punto 1

P1

T1

%if OPVY==9

% Emisiones de NO

if OPCOMB==1

NOEMIS=N4(5)/sum(N4);

elseif OPCOMB==2

[NOA,NOEMIS]=nocalc(PVCOMBEXP,RPM,Y,NM,NX,sum(NE),ac,ah,ao,an);

end

NOEMIS

% Emisiones de CO

COEMIS=N4(2)/sum(N4)

%end

BIBLIOGRAFIA

1. ALONSO, J; "Técnicas del Automóvil - Motores"; Editorial Parainfo, 1984
2. BENSON & WHITEHOUSE; "Internal Combustion Engines"; Volúmenes 1 y 2; Pergamon Press, 1983
3. CAMPBELL, A; "Thermodynamic Analysis of Combustion Engines"; Robert E. Krieger Publishing Company, 1985
4. CEVALLOS, F; "Folleto del Curso de Motores de Combustión Interna"; ESPOL
5. CHAVEZ, W; "Análisis de los Efectos del Proceso de Combustión en Motores a Gasolina sobre la Formación de Contaminantes"; Tesis de Grado ESPOL, 1983
6. DANESHYAR & WATFA; "Formation of nitric monoxide (NO), carbon monoxide (CO), and unburnt hydrocarbons (HC) in SI engines"; The Institution of Mechanical Engineers, 1976

7. FAIRES & SIMMANG; "Thermodynamics"; Macmillan Publishing Company, 1970
8. KAUZMANN, W; "Teoría Cinética de los Gases"; Editorial Reverté, 1970
9. KUO, K; "Principles of Combustion"; John Wiley & Sons, 1986
10. OBERT, E; "Internal Combustion Engines"; International Textbook Company, 1968
11. PLINT & MARTYR; "Engine Testing – Theory and Practice"; SAE International, 1999
12. SCHNEIDER; "Motores Térmicos"; Ediciones Urmo, 1981
13. STONE, R; "Introduction to Internal Combustion Engines"; SAE International, 1999
14. <http://www.combdyn.com/sstate.htm>
15. <http://www.engr.colostate.edu/~allan/engines.html>
16. <http://www.me.umn.edu/courses/me5461/index.htm>
17. <http://naca.larc.nasa.gov/reports/1940/naca-tn-787/index.cgi?page0004.gif>
18. <http://www.simcar.com/products.htm>
19. <http://www.mrgasketsoftware.com/desktopsoftware/dyno2000.htm>