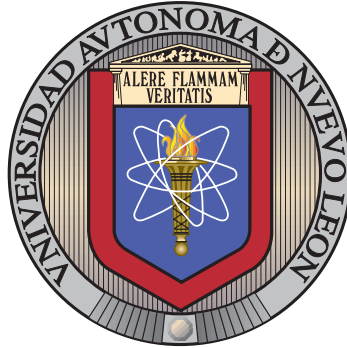


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

SUBDIRECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



ANÁLISIS NUMÉRICO DEL DESEMPEÑO DE
MECANISMOS CINÉTICOS DE COMBUSTIÓN DE
ALCOHOLES MEDIANTE SIMULACIÓN CFD EN UN
MOTOR CFR

POR

OMAR SALOMÓN BARBOSA MACHAÍN

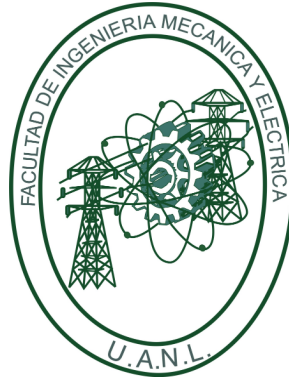
COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA
CON ORIENTACIÓN EN ENERGÍAS TÉRMICA Y RENOVABLE

ENERO 2024

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

SUBDIRECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



ANÁLISIS NUMÉRICO DEL DESEMPEÑO DE
MECANISMOS CINÉTICOS DE COMBUSTIÓN DE
ALCOHOLES MEDIANTE SIMULACIÓN CFD EN UN
MOTOR CFR

POR

OMAR SALOMÓN BARBOSA MACHAÍN

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

ENERO 2024

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica
Posgrado

Los miembros del Comité de Evaluación de Tesis recomendamos que la Tesis “Análisis numérico del desempeño de mecanismos cinéticos de combustión de alcoholes mediante simulación CFD en un motor CFR”, realizada por la estudiante Omar Salomón Barbosa Machaín, con número de matrícula 2129685, sea aceptada para su defensa como requisito parcial para obtener el grado de Maestría en Ciencias de la Ingeniería con Orientación en Energías Térmica y Renovable.

El Comité de Evaluación de Tesis

Dr. Simón Martínez Martínez
Director

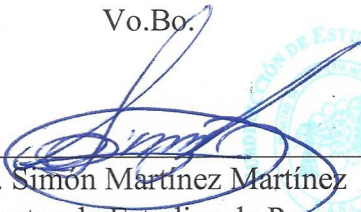
M.C. Luis Fernando Rúa Mojica
Co-Director

Dr. Arturo Morales Fuentes
Revisor

M.C. Miguel García Yera
Revisor

Dr. José Manuel Diabb Zavala
Revisor

Vo.Bo.


Dr. Simón Martínez Martínez
Subdirector de Estudios de Posgrado

Institución 190001

Programa 507507

Acta Núm. 4318

Ciudad Universitaria, a 27 de febrero de 2024.

ÍNDICE GENERAL

Agradecimientos	xii
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Estado del arte	3
1.3. Objetivos	5
1.3.1. Objetivo general	5
1.3.2. Objetivos específicos	6
1.4. Hipótesis	7
1.5. Alcance	7
1.6. Organización del Documento	8
2. Marco teórico	9
2.1. Motores de combustión interna	9
2.2. Principales emisiones contaminantes	11
2.3. Bioalcoholes	13

2.4. Investigación de alcoholes en motores de encendido provocado	15
2.5. Principios básicos de CFD	17
2.6. Configuración del software CFD	20
2.7. Mecanismos cinéticos de combustión	23
2.8. Cálculos estadísticos para análisis de resultados	26
3. Metodología	27
3.1. Instalación experimental	28
3.2. Equipo de cómputo	29
3.3. Diseño del volumen de control	30
3.3.1. RC 7.36	30
3.3.2. RC 11	30
3.4. Configuración de la malla móvil	31
3.4.1. RC 7.36	31
3.4.2. RC 11	37
3.5. Configuración de un caso de simulación	37
3.6. Validación de la configuración de simulación previa a la ignición	43
3.7. Ajuste de los parámetros de ignición	44
3.8. Matriz de pruebas	46
4. Resultados	49
4.1. Metanol	49

4.1.1. RC 7.36	50
4.1.2. RC 11	60
4.2. Etanol	69
4.2.1. RC 7.36	70
4.2.2. RC 11	79
5. Conclusiones y trabajos futuros	88
5.1. Conclusiones	88
5.2. Trabajos futuros	90

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1. Diagrama metodológico	27
3.2. Esquema de la instalación experimental	28
3.3. Medidas del pistón del motor CFR y el sensor de presión en el punto muerto superior (PMS)	31
3.4. Nombre de selecciones del CAD del motor CFR en AVL Fire	32
3.5. Diferencias porcentuales de la presión máxima con cambio en el ta- maño máximo de la malla con respecto al resultado experimental . . .	34
3.6. Diferencias porcentuales del tiempo de ejecución de la simulación con el cambio en el tamaño máximo de la malla con respecto a la malla de 1mm	35
3.7. Malla móvil con RC de 7.36 en diferentes CA	36
3.8. Curvas de presión de datos experimentales y de simulación con inyec- ción estequiométrica de etanol desde CA 574° hasta 700°	44
3.9. Curvas de presión de datos experimentales y de simulación con inyec- ción estequiométrica de etanol desde CA 574° hasta CA 860°	45
4.1. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 7.36 durante la etapa de compresión	51

4.2. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 7.36 durante la etapa de ignición	52
4.3. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 7.36 durante la etapa de expansión	53
4.4. RMSPE de los MCC, con base en la curva de presión experimental, en diferentes etapas	56
4.5. Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica	58
4.6. Tiempos de ejecución de las simulaciones	59
4.7. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 11 durante la etapa de compresión	61
4.8. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 11 durante la etapa de ignición	62
4.9. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 11 durante la etapa de expansión	63
4.10. Diferencias absolutas entre las áreas bajo las curvas de presión de los MCCs cinéticos y la curva de presión experimental	65
4.11. Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica	68
4.12. Tiempos de ejecución de las simulaciones	69
4.13. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 7.36 durante la etapa de compresión	71
4.14. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 7.36 durante la etapa de ignición	72
4.15. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 7.36 durante la etapa de expansión	73

4.16. Diferencias absolutas entre las áreas bajo las curvas de presión de los MCCs cinéticos y la curva de presión experimental	76
4.17. Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica	77
4.18. Tiempos de ejecución de las simulaciones	78
4.19. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 11 durante la etapa de compresión	80
4.20. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 11 durante la etapa de ignición	81
4.21. Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 11 durante la etapa de expansión	82
4.22. Diferencias absolutas entre las áreas bajo las curvas de presión de los MCCs cinéticos y la curva de presión experimental	85
4.23. Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica	86
4.24. Tiempos de ejecución de las simulaciones	87

ÍNDICE DE TABLAS

3.1. Características del CPU	29
3.2. Características de la RAM	29
3.3. Parámetros agregados en Fame Engine +	33
3.4. Indicadores de calidad de la malla móvil RC 7.36	36
3.5. Indicadores de calidad de la malla móvil RC 11	37
3.6. Paso temporal de la simulación dependiendo del CA alcanzado	39
3.7. Condiciones de frontera	39
3.8. Condiciones iniciales	40
3.9. Características de los MCC utilizados	46
3.10. Matriz de pruebas para la simulación de los MCC	46
3.11. Masa de aire y combustible por tipo de alcohol y relación de compresión	47
3.12. Condiciones iniciales para las pruebas de simulación	47
3.13. Fracciones másicas experimentales por tipo de alcohol en la mezcla .	48
4.1. Puntos importantes de las curvas de presión	55
4.2. Puntos importantes de las curvas de presión	64

4.3. Puntos importantes de las curvas de presión	74
4.4. Puntos importantes de las curvas de presión	83

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar me gustaría agradecer a mis asesores, el Dr. Simón Martínez Martínez y el M. C. Luis Fernando Rúa Mojica, por su apoyo y asesoramiento para para la realización de este trabajo, así como su disposición de ayudar en los problemas que se fueron presentando.

Agradezco a todos los profesores del programa por los conocimientos, de calidad y de vanguardia, que transmitieron a través de las materias.

A mis compañeros de laboratorio, Brandon, Lilia, Dionicio, Paty y Luis, por todas las pláticas interesantes que compartimos, que hicieron que mi estancia en el laboratorio fuera más amena.

Un inmenso agradecimiento a mis padres, mi hermana y mis abuelitos, quienes me apoyaron en todo momento y fueron gran parte de mi soporte emocional en estos dos años de trabajo.

A mi novia Andrea, quien me dio todo su amor, apoyo y comprensión en los buenos y los malos momentos de estos últimos dos años.

Agradezco la empresa AVL por el otorgamiento de licencias para investigación del software AST Simulation Tools Version 2021.

Al CONAHCyT por el otorgamiento de la beca con número 812753, para la realización de mis estudios de maestría.

Finalmente, agradezco a los Laboratorios de Investigación e Innovación en Tec-

nología Energética – LIITE de la FIME-UANL, por facilitar los medios e infraestructura para llevar a cabo este trabajo de investigación.

Este trabajo se realizó en los Laboratorios de Investigación e Innovación en Tecnología Energética (LIITE) del Grupo de Energías Térmica y Renovable (GETR) de la FIME-UANL.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 MOTIVACIÓN

Durante las últimas décadas se han agravado a nivel mundial problemas relacionados a la sustentabilidad, tales como la pobreza, hambruna, insalubridad, el cambio climático, entre otros; por lo que la Asamblea General de las Naciones Unidas en 2015 [1] estableció los 17 Objetivos de Desarrollo Sostenible que se pretenden alcanzar para el 2030. El séptimo Objetivo es Energía Asequible y No Contaminante, y busca solucionar la crisis energética ocasionada por el uso intensivo e irracional de las energías no renovables, cuyos efectos se perciben con el agotamiento de las fuentes de energía convencionales, principalmente combustibles fósiles, el deterioro del medio ambiente y el del clima [2]. Otro de los Objetivos es el decimotercero, Acción por el Clima, que está estrechamente relacionado con el Objetivo anterior debido a que gran parte de las emisiones de gases de efecto invernadero provienen del sector energético en sus diversas formas [3]. Con base en lo anterior, la mejora y aplicación constante de la tecnología energética de carácter renovable es necesaria para completar dos de los diecisiete grandes problemas de sostenibilidad global.

La emisión global de Gases de Efecto Invernadero (GEI) ha incrementado desde el 2010 hasta 2018, donde este último año fue el punto más alto de emisiones de

GEI en la historia de la humanidad, alcanzando 58 Gt CO_2eq ; de los cuales 8.3 Gt CO_2eq corresponden a emisiones por transporte y a su vez 6.1 Gt CO_2eq son emisiones por transporte de pasajeros y mercancía por carretera [4]. Tomando en cuenta que una parte importante de las emisiones por transporte en carretera es debido a vehículos basados en motores de encendido provocado (MEP) y, por lo tanto, que usan gasolina como combustible; se puede deducir que modificar completa o parcialmente la composición del combustible de los MEP ayudaría a reducir las emisiones de los GEI en uno de los sectores más contaminantes de los últimos años.

El uso de biocombustibles como aditivo de la gasolina para los MEP es una estrategia esencial para satisfacer las regulaciones de emisiones de contaminantes y GEI que cada vez se vuelven más rigurosas, además de que ayuda a no consumir recursos no renovables y promueve la utilización de residuos [5]. El hidrocarburo y alcohol más ligero que se ha usado como combustible renovable es el metanol (CH_3OH), que al usar como aditivo de la gasolina contribuiría a reducir las emisiones de contaminantes como los óxidos de nitrógeno (NO_x) y el monóxido de carbono (CO), que son precursores del ozono troposférico, peligroso para los humanos y que potencialmente podría causar muerte prematura [6]. Otro alcohol ligero que se puede usar como aditivo de la gasolina es el etanol, el cual es el biocombustible frecuentemente más usado debido a sus similitudes físicas y químicas con la gasolina; su uso como aditivo no implica grandes modificaciones a los motores y en comparación con la gasolina tiene una velocidad de combustión y un calor latente de vaporización más altos; ayudaría a reducir las emisiones de CO e hidrocarburos no quemados (HC) y también reduciría la cantidad de carbón depositado en los componentes del cilindro del motor [5]. Por otro lado, el butanol es un alcohol más pesado que ha demostrado tener ventajas sobre el etanol; debido a que tiene un mayor contenido de energía, menor absorción de agua, mejor capacidad de mezcla y se puede usar en motores de combustión convencionales sin modificaciones [7].

El desarrollo y utilización de la simulación computacional en conjunto con los mecanismos cinéticos de combustión (MCC) es de suma importancia, porque

pueden proporcionar comprensión sobre la propagación, ignición y extinción de las llamas; con esto se podría simular el desempeño de la combustión utilizando nuevas medidas del cilindro, estrategias de inyección y proporciones de mezclas binarias o terciarias de gasolina con biocombustibles. Derivado de lo anterior se podría mejorar la combustión en un MEP con una mezcla de gasolina y combustibles alternativos, y con ello reducir el consumo de combustible y la emisión de contaminantes [6]. Dichos MCC se pueden validar dentro de un software de dinámica de fluidos computacional (CFD) en conjunto con resultados experimentales.

A la fecha se encuentran vacíos de conocimiento en la validación, comprobación del funcionamiento y grado de precisión que los MCC presentan durante el proceso de combustión interna en un motor de encendido provocado; en el presente trabajo se pretende abordar esta necesidad al aportar información relevante del desempeño de los MCC frente a resultados experimentales obtenidos en un motor con funcionamiento controlado como el Motor CFR Waukesha F1/F2.

1.2 ESTADO DEL ARTE

En la actualidad se han propuesto diversos MCC para diferentes combustibles alternativos; dichos MCC se simulaban numéricamente y se validaron con resultados experimentales. Sy Tran y colaboradores [8] expusieron una recopilación de autores de artículos donde se validaron MCC, junto con el combustible alternativo que se utilizó, el tipo de instalación experimental y las condiciones que se usaron en los experimentos.

Para el caso del etanol como combustible alternativo se han usado instalaciones experimentales de tubos de choque, reactores de flujo y reactores de agitación a chorro, teniendo a la investigación de Leplat y colaboradores [9] como ejemplo de este último tipo de instalación experimental; en donde se variaron la temperatura, la presión y la relación de equivalencia aire/combustible.

En el caso del butanol como combustible alternativo se ha usado el mismo tipo de instalaciones experimentales, también con variación en temperatura, presión y relación de equivalencia aire/combustible, teniendo a la investigación de Black y colaboradores [10] como ejemplo de instalación experimental de tipo tubo de choque.

Christensen y colaboradores [6] muestran en su investigación una tabla similar a la de Sy Tran, pero con metanol como combustible alternativo, donde se muestra que se han usado también instalaciones experimentales de tubos de choque, reactores de flujo y reactores de agitación a chorro, teniendo a la investigación de Aranda y colaboradores [11] como ejemplo de instalación experimental de tipo reactor de flujo; cabe mencionar que en el caso de los últimos dos tipos de instalaciones no se varió la relación de equivalencia aire/combustible.

En años recientes se ha buscado reducir la cantidad de especies y reacciones en los MCC para que la simulación numérica no tome un alto tiempo de procesamiento; como es el caso de Zhang y Qi [5], quienes redujeron la cantidad de especies y reacciones de MCC ya publicados mediante un algoritmo matemático. En el caso de la mezcla sustituta para la gasolina el MCC se redujo de 1389 especies y 5935 reacciones a 110 especies y 512 reacciones; mientras que para el etanol el MCC se redujo de 57 especies y 383 reacciones a 34 especies y 171 reacciones; cabe mencionar que se validaron los MCC con un reactor de volumen constante como parte de la instalación experimental. Millán-Merino y colaboradores [12] también redujeron un MCC detallado del etanol, desde 54 especies y 268 reacciones hasta 16 especies y 14 reacciones; logrando así un procesamiento de la simulación un 93 % más rápido respecto a la simulación con el MCC detallado.

Últimamente también se ha investigado sobre la combinación de los MCC con el objetivo de simular mezclas binarias de gasolina con un combustible alternativo; Zhang y Qi [5] además de reducir MCC detallados también combinaron los MCC reducidos resultantes, de la mezcla sustituta para gasolina y de etanol, logrando un MCC combinado de 144 especies y 653 reacciones.

El descubrimiento de nuevos MCC detallados y su reducción es importante para predecir, en un tiempo aceptable, la formación de contaminantes y el comportamiento de liberación de energía bajo ciertas condiciones de presión, temperatura y relación de equivalencia aire/combustible; sin embargo, algo esencial que no se ha investigado es la validación de MCC en un proceso de combustión interna en un MEP.

En el presente trabajo se usarán resultados experimentales, de emisiones contaminantes y presión interna del cilindro, de un MEP con funcionamiento controlado, Motor CFR Waukesha F1/F2, el cual puede variar la relación de compresión (RC), la temperatura del aire de entrada y la relación de equivalencia aire/combustible; para contrastarlos con resultados que se obtendrán de una simulación numérica, del software CFD AVL-Fire, y así validar MCC, de combustibles puros, obtenidos de literatura previamente seleccionada.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 OBJETIVO GENERAL

Determinar la capacidad de predicción de un conjunto de MCC para combustibles puros, como metanol y etanol, tomados de la literatura, a través de la simulación CFD del proceso de combustión interna que ocurre en el interior de un motor tipo CFR, y derivado de lo anterior, establecer el desempeño de los MCC al ser comparados con resultados experimentales de la formación de contaminantes y el comportamiento de la presión al interior del cilindro.

1.3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Encontrar los MCC objeto de estudio mediante una revisión bibliográfica para implementarlos en el software AVL-Fire.

2. Adquirir el conocimiento necesario para el uso del software AVL-Fire mediante el aprendizaje de la técnica CFD para lograr la configuración de los casos de simulación.

3. Implementar la geometría del motor CFR en el software AVL-Fire mediante un programa CAD para generar el volumen de control para la ejecución de la simulación CFD.

4. Implementar los MCC seleccionados dentro del software AVL-Fire mediante el uso del formato CHEMKIM en la simulación numérica de las reacciones químicas que ocurren durante el proceso de combustión, para realizar la simulación CFD de cada combustible.

5. Generar la malla computacional adecuada para la correcta simulación numérica de los MCC en la geometría del motor CFR, a través del sistema de modelado del software AVL-Fire.

6. Determinar los parámetros de simulación con base en la literatura específica para el proceso de simulación requerido, mediante una búsqueda bibliográfica para la correcta simulación numérica de los MCC en la geometría del motor CFR.

7. Verificar el correcto funcionamiento del modelo numérico a través de la validación de un caso de simulación con base en información experimental obtenida en el Laboratorio de Físicoquímica de la Combustión.

8. Delimitar la matriz de pruebas mediante la revisión de la información experimental para la correcta comparación de resultados numéricos y experimentales.

9. Ejecutar las simulaciones CFD del proceso de combustión que ocurre en el

motor CFR F1/F2 con base en la matriz delimitada para lograr la comparación de los resultados numéricos frente a los experimentales.

10. Comparar los resultados numéricos frente a los resultados experimentales mediante el análisis de las variables de interés para determinar el grado desviación entre éstos.

1.4 HIPÓTESIS

Los MCC permiten predecir con precisión la formación de contaminantes y el comportamiento térmico del proceso de liberación de energía. Validar MCC publicados en la literatura por medio de un software CFD, en contraste con resultados experimentales de un MEP permite establecer estrategias de mejora en los parámetros de simulación cuando dichos MCC son utilizados, así como descartar aquellos que presenten una desviación notable.

1.5 ALCANCE

La presente tesis aborda la búsqueda bibliográfica y selección de dos MCC por cada combustible, metanol y etanol. Se realizaron simulaciones CFD del proceso de combustión en el motor CFR F1/F2, mediante el software AVL Fire Workflow Manager, bajo las RC de 7.36 y 11, en un rango de ángulo de cigüeñal (CA) de 574° a 860° , es decir, cuando las válvulas de admisión y de escape se encuentran cerradas. Una vez terminadas las simulaciones se realizaron análisis de resultados de presión y emisiones, comparando los resultados de las simulaciones con datos experimentales de cada combustible y RC mediante el uso de herramientas estadísticas, tablas y gráficos.

1.6 ORGANIZACIÓN DEL DOCUMENTO

En el primer capítulo de la presente tesis se expone la Motivación y el Estado del Arte, se definen los Objetivos, la Hipótesis y el Alcance; en el segundo capítulo se presenta el Marco Teórico; en el tercer capítulo se expone la Metodología; en el cuarto capítulo se presentan los Resultados; finalmente en el quinto capítulo se formulan las Conclusiones y trabajos futuros.

CAPÍTULO 2

MARCO TEÓRICO

2.1 MOTORES DE COMBUSTIÓN INTERNA

Un motor de combustión interna es un motor térmico que convierte la energía química de un combustible en energía mecánica, que generalmente se aprovecha en un eje de salida giratorio. De forma más detallada, la energía química se transforma en energía calorífica mediante la reacción exotérmica de óxido-reducción denominada como combustión. Posteriormente la energía liberada incrementa la presión y temperatura de los gases dentro del motor, dichos gases se expanden, y mediante los enlaces mecánicos del motor se mueve un cigüeñal giratorio que transmite la energía mecánica al uso deseado; que normalmente consiste en la propulsión de un vehículo: automóvil, camión, ferrocarril, barco o avión [13].

Los dos ciclos más usados en motores de combustión interna son el ciclo Otto y el ciclo Diesel, llamados así por los hombres acreditados a su invención. El ciclo Otto también es conocido como una combustión a volumen constante, debido a que en condiciones ideales la reacción de combustión se completaría antes del movimiento de expansión del pistón, también es llamado como el ciclo del MEP, debido a que se induce una chispa mediante voltaje para iniciar la combustión. El ciclo Diesel también se conoce como combustión a presión constante o como ciclo del motor de

encendido por compresión, debido a que la combustión ocurre de forma espontánea con una presión elevada. Los ciclos antes mencionados pueden configurarse a dos tiempos, en el que el pistón produce potencia cada corrida hacia abajo; aunque comúnmente se configuran a cuatro tiempos, donde el pistón produce potencia cada dos corridas hacia abajo [14]. Más adelante, se exponen las etapas del ciclo del MEP de cuatro tiempos:

Corrida de inducción: La válvula de entrada está abierta y el pistón se mueve hacia abajo, aspirando el combustible premezclado con aire.

Corrida de compresión: Ambas válvulas están cerradas y el pistón se mueve hacia arriba, cuando el pistón está cerca del punto muerto superior se enciende la bujía y la combustión inicia.

Corrida de expansión: La combustión se propaga, incrementando la presión y temperatura, moviendo el pistón hacia abajo, al final se abre la válvula de escape y la expansión irreversible de los gases de escape se conoce como purga.

Corrida de escape: La válvula de escape se mantiene abierta mientras el pistón sube y los gases restantes salen, al final la válvula de escape se cierra dejando gases residuales en el cilindro que se diluirán en la siguiente carga [15].

A continuación, se describen las partes de un MEP de cuatro cilindros en línea de un automóvil. Los cilindros del motor están dentro del bloque del motor, dicho bloque está hecho de hierro colado debido a su buena resistencia y bajo costo, ahí están moldeados los conductos para el agua de enfriamiento; la caja del cigüeñal suele estar integrada con el bloque de cilindros; el cigüeñal normalmente está hecho de acero forjado y se apoya en los cojinetes principales, generalmente el número máximo de cojinetes principales es uno más que el número de cilindros; la manivela tiene porciones excéntricas; los cojinetes de cabeza de biela se unen al pasador de cigüeñal en cada lanzamiento; la caja del cigüeñal está sellada en la parte inferior con un cárter de aceite de acero prensado que funciona como sistema de lubricación. Los pistones están hechos de aluminio en motores pequeños, cada pistón sella su

respectivo cilindro y transmiten la presión del gas generada por la combustión al muñón del cigüeñal a través de la biela; la biela, que generalmente es de acero, se sujeta al pistón por medio de un pasador de pistón de acero que suele ser hueco [16].

2.2 PRINCIPALES EMISIONES CONTAMINANTES

El transporte privado por medio de vehículos que funcionan con MEP hoy en día es algo cotidiano en casi cualquier país; sin embargo, derivado de lo anterior, grandes cantidades de compuestos contaminantes son liberadas a la atmósfera. A continuación se expondrán los compuestos contaminantes de interés para el caso de los MEP. Los NO_x , el CO , los HC y los compuestos orgánicos volátiles (COV, como el benceno, acetaldehído, formaldehído y 1,3-butadieno); los compuestos antes mencionados conforman las emisiones del tubo de escape, mientras que sólo los HC y los compuestos orgánicos tóxicos conforman las emisiones evaporativas. Los NO_x y el CO son formados mediante la oxidación molecular del nitrógeno y el combustible respectivamente, de una manera generalizada al interior del volumen de la cámara de combustión, mientras que los HC se producen en las regiones frías donde la llama no se propaga. El NO es formado en la combustión porque la flama de alta temperatura separa los enlaces moleculares del nitrógeno y oxígeno diatómicos y se recombinan los átomos en NO , la formación de NO_2 en MEP es despreciable, el CO se produce por la oxidación incompleta del combustible hacia CO_2 y los HC se producen por el combustible residual al paso de la llama por el cilindro [17]. Habiendo mencionado los compuestos contaminantes liberados por los MEP, posteriormente se expondrán los efectos negativos de éstos en la salud, los ecosistemas y en el calentamiento global.

La Gran Niebla de Londres de 1952 fue un incidente que cobró la vida de 12,000 personas y que en su momento fue atribuido a la combustión doméstica e industrial, pero conforme pasaron los años se descubrió un mecanismo en el que gases contaminantes reaccionan con la luz solar para formar el aún más dañino esmog fotogénico, entonces se sabe que el incidente en realidad fue provocado por los

vehículos de carretera, teniendo a los NO_x y los COV como importantes precursores del ozono troposférico [18]. Se sabe que en años recientes los vehículos de carretera siguen teniendo un impacto significativo en la formación del ozono troposférico. El informe de inventario de emisiones de la Unión Europea, publicado por la Agencia Europea de Medio Ambiente [19] muestra que el 37 % de los NO_x generados por la UE en 2020 fueron del sector de transporte en carretera, siendo el primer sector que más aportó de un total de aproximadamente 5,500 Gg de NO_x . También se expone que ese mismo año el sector de transporte en carretera produjo el 7 % de los COV sin metano, siendo el cuarto sector que más aportó de un total de aproximadamente 6200 Gg de COV. La contaminación por transporte en carretera impacta negativamente a la salud, al patrimonio cultural y a los ecosistemas. La exposición prolongada a los gases de escape se asocia a graves enfermedades respiratorias y cardiovasculares, cambios en el tejido de los pulmones, cambios en el funcionamiento del sistema nervioso y muerte prematura. El patrimonio cultural se ve afectado con el ensuciamiento de edificios históricos y el daño a las exhibiciones de arte en interiores [18]. El ecosistema se ve afectado por la lluvia ácida generada por las emisiones locales de NO_x , la lluvia ácida obstaculiza la fotosíntesis de las plantas y afecta la población de especies en tierra y cuerpos de agua, influenciando los ciclos bioquímicos del ecosistema. Además se sabe que las emisiones de CO_2 por transporte en carretera contribuyen al calentamiento global y éste a su vez provoca ondas de calor que incrementan la mortalidad de enfermedades respiratorias y cardiovasculares, como en el verano de 2003 en Europa donde murieron más de 22,000 personas por una onda de calor de dos semanas que incrementó la temperatura promedio 3.5°C de lo normal, el aumento de la temperatura promedio también provoca el incremento de la propagación de roedores y mosquitos, junto con las enfermedades que éstos transmiten [20]. En Ciudad de México se han tomado medidas para reducir la contaminación del aire generada por el transporte en carretera, como el Programa Hoy No Circula, sin embargo debido al incremento de vehículos en circulación y a las pobres opciones de transporte público dichas medidas no resultan en cambios significativos, el cambio que reducirá los efectos negativos de las emisiones por transporte en carretera sólo

vendrá con el verdadero cambio de la matriz energética [21]. Entre las medidas preventivas para la contaminación del aire por transporte en carretera se encuentra el uso de combustibles alternativos, donde se menciona el uso de alcoholes como biocombustibles [18], a continuación se expondrán las características de tres alcoholes que se han usado como biocombustibles aditivos de la gasolina en MEP, el metanol, etanol y butanol.

2.3 BIOALCOHOLES

El metanol, etanol y butanol tienen la fórmula química general $C_{(n)}H_{(2n+1)}OH$, siendo $n=1$ para metanol, $n=2$ para etanol y $n=4$ para butanol [22]. El metanol es el alcohol menos pesado, también conocido como alcohol de madera, es un líquido incoloro y con ligero olor que se puede utilizar en MEP. El metanol tiene menos poder calorífico que la gasolina, pero proporciona más potencia y aceleración debido a su alto octanaje, es menos inflamable que la gasolina y arde con una llama casi invisible; el uso del metanol ofrece importantes mejoras en las emisiones debido a que reduce la formación de NO_x y de HC. En la actualidad la mayor parte del metanol se produce a partir de gas natural, sin embargo fuentes renovables como residuos agrícolas, desechos forestales, industriales y municipales se pueden aprovechar para la producción del metanol mediante la conversión termoquímica y la gasificación. Un método biológico que es más reciente consiste en la desesterificación de los grupos carboxilo metilados del ácido galacturónico por una pectina metil esterasa. La pectina es un componente principal en las paredes celulares de las plantas, un ejemplo de esto es la pulpa de la remolacha azucarera, que contiene un 60 % de pectina en peso seco. Desde el año 2000 en EUA no existen automóviles funcionando con 100 % de metanol, pero han habido 15,000 vehículos que funcionan con una mezcla de 85 % metanol y 15 % gasolina, principalmente en California y Nueva York [23]. En el trabajo de Blume et al. [24] se pueden encontrar propiedades importantes del metanol en contraste con las de la gasolina, como la relación aire/combustible óptima, la

máxima relación de compresión en un MEP y el octanaje.

El etanol es actualmente el biocombustible más usado a nivel mundial, tiene características deseables como combustible alternativo al petróleo, por lo que ayudaría a una transición paulatina del uso del petróleo a combustibles con base biológica. A diferencia de otros bioalcoholes que están aún bajo investigación, el etanol emergió como un potencial combustible enfocado en el transporte y se ha usado como oxigenante de petróleo [22], incrementando sus niveles de oxígeno en 7.6 % [23], para reemplazar al metil tert-butil éter. Actualmente la mayoría del etanol ha sido producido con cultivos alimentarios, pero se espera que en un futuro se use materia prima derivada de residuos; el etanol se produce a partir del hidrolizado de sustrato lignocelulósico posterior al pretratamiento e hidrólisis enzimática, entonces la hexosa y la pentosa pueden ser fermentadas por el hongo *Saccharomyces cerevisiae* u otros microorganismos [22]. En EUA inicialmente se usó una mezcla de 10 % etanol y 90 % gasolina para MEP pero más recientemente se introdujo la mezcla de 85 % etanol y 15 % gasolina. Debido a que el etanol se compone en un 35 % de oxígeno, incrementa la combustión y se reducen emisiones contaminantes como los NO_x y el material particulado [23]. Debido a su alto calor latente ingresa al cilindro una corriente de aire/combustible más fría, lo que provoca una carga más densa y una mayor potencia de salida. También presenta propiedades antidetonantes ya sea que se use solo o como parte de una mezcla, los límites de inflamabilidad del etanol son más altos que los de la gasolina, por lo que se obtiene un arranque más fácil. Además el etanol no forma gomas ni carbón en el motor durante la combustión, por lo que el uso de una mezcla de etanol y gasolina mantiene el motor más limpio que el uso de solo gasolina [25]. Al igual que con el metanol, en el trabajo de Blume et al. [24] se pueden encontrar propiedades importantes del etanol en contraste con las de la gasolina.

El butanol es otro alcohol que ha sido considerado como combustible líquido debido a que tiene propiedades similares a las del etanol, pero tiene un mayor contenido energético. El butanol proporciona un mayor kilometraje y puede mezclarse

en cualquier proporción con la gasolina, es menos corrosivo que el etanol por lo que puede transportarse en sistemas de tuberías ya existentes, mientras que el etanol tiene que transportarse en camiones cisterna, ferrocarril o barcas. También es más seguro debido a que tiene mayores puntos de inflamabilidad y ebullición [23]. El butanol es menos volátil, corrosivo e higroscópico que el etanol, lo que permite un funcionamiento seguro del motor sin modificaciones. Produce menos emisiones de CO_2 que el etanol y la gasolina, además, no presenta emisiones de NO_x y óxidos de azufre (SO_x). La producción comercial actual del butanol se basa en derivados del petróleo, pero se ha estimulado el uso de fuentes renovables, como la biomasa o residuos orgánicos, como materia prima para su obtención. La fermentación de acetona-butanol-etanol es el proceso más estudiado para la obtención de n-butanol, emplea la fermentación bacteriana mediante *Clostridium* spp. para producir acetona, n-butanol y etanol a partir de carbohidratos como el almidón y la glucosa [26]. En el trabajo de Rao et al. [27] se pueden encontrar propiedades importantes del butanol en contraste con las de metanol, etanol y octano.

2.4 INVESTIGACIÓN DE ALCOHOLES EN MOTORES DE ENCENDIDO PROVOCADO

Ya se han expuesto las características y ventajas del uso de alcoholes como aditivos de la gasolina, sin embargo, también es importante llevar a cabo experimentos con el objetivo de medir el rendimiento del MEP, analizar las características de la combustión en el MEP y medir las emisiones de interés, usando mezclas de gasolina con algún alcohol. En años recientes se han publicado diversos artículos que tratan sobre los temas anteriores, en la tabla de Iodice et al. [28] se muestran 18 artículos de revisión, es decir, que compilan varios artículos, que abarcan alguno de los siguientes enfoques: el desempeño del MEP, las características de la combustión o las emisiones, al usar etanol u otro combustible como aditivo de la gasolina. A continuación, se expondrán artículos que han abarcado los tres enfoques mencionados anteriormente.

Kul y Ciniviz [29] en su artículo presentan una instalación experimental con un MEP de cuatro tiempos y un cilindro, una unidad de accionamiento y freno, termopares, un dispositivo medidor de emisiones, un tubo medidor de combustible y el sistema de filtrado y admisión tanto de aire como de combustible al MEP. Se hicieron pruebas con diferentes concentraciones de etanol, desde 5 % hasta 100 %, bajo cinco cargas de motor diferentes a la máxima velocidad de par, 2500rpm.

Mohammed et al. [30] realizaron un estudio para determinar las eficiencias térmicas y volumétricas, al igual que la cantidad de gases de escape nocivos en un MEP monocilíndrico de cuatro tiempos. Se variaron las proporciones de etanol con gasolina, usando desde 10 % hasta 40 % de etanol, también se varió la velocidad del motor desde 1,500 r.p.m. hasta 2,500 r.p.m. La instalación experimental a grandes rasgos consistió en un dinamómetro, un sistema de adquisición de datos, un analizador de gases de escape, una bureta de combustible, un cronómetro y un tacómetro.

Liu et al. [31] hicieron un experimento para explorar los efectos de diferentes proporciones de etanol-gasolina, desde 0 % hasta 100 % de etanol, con diferentes tiempos de inyección directa y tiempos de encendido en la combustión y emisiones de un MEP. La instalación de manera general consistió en un dinamómetro, sensores de presión y temperatura para el aire de entrada, un sensor de temperatura para los gases de escape, un analizador de gases de escape, un medidor de consumo de combustible y una computadora analizadora de combustión.

Dhande et al. [32] en su artículo exponen los efectos de diferentes combinaciones de etanol con gasolina, desde 10 % hasta 25 % de etanol, y diferentes velocidades del motor, desde 1,300 r.p.m. hasta 1,800 r.p.m., en el consumo del combustible, la eficiencia térmica y en las emisiones. La instalación en términos generales consiste en un MEP monocilíndrico de cuatro tiempos, un dinamómetro, termopares, un sensor de rotación y un analizador de gases de escape.

Como se mostró anteriormente, los experimentos son una forma confiable de obtener datos relevantes en el ámbito de los MEP, sin embargo, el costo de una

instalación experimental de este tipo puede ser elevado debido a los componentes ya expuestos. Las simulaciones computacionales son otra forma de obtener datos relevantes, siempre que se tengan validaciones experimentales con base en la literatura, donde los principales recursos limitantes son la capacidad de la computadora y el tiempo de las simulaciones. A continuación, se presentan artículos que han obtenido datos relevantes en el ámbito de los motores de combustión interna mediante simulación CFD.

D'Adamo et al. [33] en su artículo se aplicaron tres técnicas de modelado: LES, RANS y RANS-PDF; con el objetivo de simular la combustión y la detonación en un MEP GDI (inyección directa de gasolina) bajo condiciones de detonación segura, detonación limitada y detonación ligera. Se destacó todo el potencial del modelo RANS-PDF para el desarrollo de motores y fue posible preservar el formalismo del RANS, enriqueciendo los resultados con descripción estadística de detonación.

Ameen et al. [34] investigaron el coeficiente de variación de la presión en el cilindro y los parámetros relacionados con la velocidad de combustión en un MEP tomando en cuenta la variabilidad de ciclo a ciclo en simulaciones CFD aplicando el modelado LES. Se demostró que el enfoque de perturbación en paralelo desarrollado es capaz de dar predicciones precisas de la variabilidad de ciclo a ciclo en MEP en una décima parte del tiempo usando el enfoque convencional.

Chen et al. [35] en su investigación expusieron los efectos de la variación ciclo a ciclo de la intensidad de detonación en un MEP, principalmente la aparición de autoignición, mediante simulación CFD usando el modelado LES.

2.5 PRINCIPIOS BÁSICOS DE CFD

Las ecuaciones diferenciales de gobierno son un conjunto de ecuaciones que se utilizan para describir cómo se comporta un fluido en determinadas condiciones. Estas ecuaciones están relacionadas con la conservación de masa, de momentum y

de energía [36]. Kajishima y Taira [37] representaron las ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía en una sola ecuación, usando tensores. Más adelante se muestran la ecuación y los términos que la componen.

La Ecuación (2.1) expresa que la suma de la derivada del vector que denota las cantidades conservadas por unidad de volumen (Λ) con respecto al tiempo y la divergencia, del flux de Λ (Π), en las tres dimensiones espaciales es igual al vector resultante (Γ).

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \nabla \cdot \Pi = \Gamma \quad (2.1)$$

La Ecuación (2.2) muestra las tres cantidades conservadas, de masa, momentum y energía, respectivamente, por unidad de volumen. Las mencionadas cantidades conservadas son la densidad (ρ), el momentum por unidad de volumen (ρu) y la energía total por unidad de volumen (ρE).

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

La Ecuación (2.3) indica que la energía total por unidad de masa (E) es igual a la suma de la energía interna por unidad de masa (e) y la energía cinética por unidad de masa (k).

$$E = e + k \quad (2.3)$$

La Ecuación (2.4) expresa que la energía cinética por unidad de masa (k) es la mitad del cuadrado de la velocidad (u) absoluta.

$$k = \frac{|u|^2}{2} \quad (2.4)$$

La Ecuación (2.5) muestra que el flux del vector que denota las cantidades conservadas por unidad de volumen (Π) se compone de el momentum por unidad de volumen (ρu), el flux de momentum moviéndose a velocidad u ($\rho u u$) menos el intercambio de momentum debido al estrés en la superficie del volumen de control

(T), y el flux de energía (ρEu) menos el trabajo efectuado por el estrés ($T \cdot u$) más el flux de calor (q).

$$\Pi = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u u - T \\ \rho Eu - T \cdot u + q \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

La Ecuación (2.6) indica que el vector resultante (Γ) se compone de la velocidad de la reacción de la especie química (R), la tasa de momentum por unidad de volumen producido por unidad de tiempo (ρf), y la tasa de energía por unidad de volumen producida por unidad de tiempo ($\rho u \cdot f$). Por lo general, el valor de la ecuación de conservación de masa en Γ se considera 0, como suposición en casos donde no ocurren reacciones químicas; sin embargo, para el estudio de la combustión en MEP se requiere conocer las velocidades de reacción de las especies químicas. Patankar [36] expresa la ecuación de conservación de masa con el término de la velocidad de formación o consumo R ; mismo que, para el presente trabajo, se obtendrá para cada especie química mediante la integración de MCC a un software CFD.

$$\Gamma = \begin{bmatrix} R \\ \rho f \\ \rho u \cdot f \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

En la actualidad, resolver estas ecuaciones de forma analítica al mismo tiempo no es posible, debido a que son ecuaciones diferenciales no lineales muy complejas. Sin embargo, es posible solucionarlas numéricamente gracias a los métodos de discretización de las ecuaciones de gobierno. Anderson [38] expone los métodos de diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos (FVM por sus siglas en inglés), siendo los dos últimos los que más se han usado para CFD. Versteeg y Malalasekera [39] explicaron los pasos para la aplicación del FVM.

El primer paso (mallado) consiste en dividir el dominio de interés en volúmenes de control discretos; el conjunto total de los volúmenes discretos se conoce como malla y un elemento de malla se conoce como celda. Se ubican puntos nodales en todo el

volumen de control, de manera que cada nodo está dentro de su respectiva celda; y se definen los puntos vecinos, que se ubican en las caras de la celda.

En el segundo paso (discretización) se tienen que integrar las ecuaciones de gobierno sobre las celdas para producir ecuaciones discretizadas en cada nodo. Se requieren los coeficientes de difusión de la interfaz y los gradientes desde los nodos hasta los puntos vecinos. Por ello los valores de cada propiedad y los coeficientes de difusión son definidos y evaluados en los nodos. Para calcular los gradientes en las caras de las celdas se usan aproximaciones en la distribución de las propiedades entre los nodos.

En el tercer paso (solución de las ecuaciones) se forma un sistema de ecuaciones algebraicas lineales, con base en las ecuaciones discretizadas en cada nodo. Entonces, se soluciona el sistema para obtener la distribución de cada propiedad en los nodos, mediante alguna técnica de solución de matrices adecuada para el caso a simular.

Es de mencionar que los software CFD actuales generalmente utilizan el método de volúmenes finitos en mallas bidimensionales o tridimensionales, e incluso algunos permiten simular en mallas móviles.

2.6 CONFIGURACIÓN DEL SOFTWARE CFD

En el presente trabajo se usó el software CFD AVL Fire Workflow Manager con el objetivo de realizar simulaciones numéricas de combustión en un MEP. A continuación, se expondrán las opciones que se seleccionaron en el programa para la correcta aplicación del FVM.

Para el modelo de densidad, la opción de Gas Real (P-R) fue adecuada debido a que aplica la ecuación de estado de Peng-Robinson [40]. Este modelo tiene ventaja sobre el de Gas Ideal porque considera las fuerzas intermoleculares, que a condiciones de alta presión podrían empeorar el cálculo de la densidad. También se eligió sobre

el modelo de Gas Real (empírico) porque ha demostrado predecir con precisión el comportamiento de mezclas de gases [41].

Para la discretización se seleccionó el algoritmo iterativo con base en el Método Semi-implícito para las Ecuaciones Ligadas a la Presión (SIMPLE por sus siglas en inglés) [42]. Este método permite obtener ecuaciones de corrección de presión mediante la conversión de la forma discreta de la ecuación de continuidad; entonces las correcciones de presión se utilizan para actualizar los campos de presión y velocidad de modo que los componentes de velocidad obtenidos de la solución de las ecuaciones de momentum satisfagan la ecuación de continuidad.

En cuanto a la simulación de turbulencia se eligió el modelo $k - \zeta - f$ [43], el cual resuelve la ecuación de transporte para la relación de escalas de velocidad $\zeta = \bar{v}^2/k$ en lugar de \bar{v}^2 ; resultando en un modelo más robusto y menos sensible a las celdas no uniformes que componen la malla en comparación con el modelo $\bar{v}^2 - f$. Es de mencionar que este modelo es capaz de capturar la anisotropía de tensión turbulenta cerca de la pared y predecir la transferencia de calor con mayor fidelidad.

Se seleccionó el tratamiento de pared híbrido para la transferencia de calor en las paredes del volumen de control. Este modelo se basa en el modelo de turbulencia $k - \zeta - f$ y está validado frente a mediciones de transferencia de calor en MEP [44]. Este método combina la integración hasta la pared (condiciones de contorno exactas) con las funciones de pared de alto número de Reynolds, lo que permite condiciones de contorno bien definidas independientemente de la posición del nodo computacional más cercano a la pared [45], resultando un modelo superior al de Han-Reitz.

Los esquemas de diferenciación definen la forma en que se calculan los valores de las variables en las caras de las celdas tiene un profundo efecto en la precisión y la convergencia (estabilidad numérica) del método numérico. En la presente investigación se usaron dos esquemas estándar y uno acotado, en las ecuaciones de gobierno que se indican en el capítulo de metodología. En cuanto a los esquemas estándar Central Differencing y Upwind, de primer orden; el primero consiste en interpola-

ción lineal, con la que se obtienen los valores en las caras de las celdas de una variable escalar, y puede generar oscilaciones numéricas que producen soluciones ilimitadas y no monótonas; respecto al segundo, el valor de la cara se toma como el que prevalece en los nodos “a contra viento” (upwind en inglés), es incondicionalmente acotado y puede producir difusión numérica excesiva si el flujo no está alineado con las líneas de la malla [46]. El esquema de diferenciación acotado que se usó fue MINMOD, debido a que los esquemas acotados basados en el concepto de variación decreciente total han sido usados para capturar choques porque limitan el flux de una variable a un nivel que asegura la solución acotada. El limitador en el esquema MINMOD combina por partes los esquemas lineales Upwind de segundo orden y el Central Differencing de primer orden en cierto rango monótono [47].

Se usaron dos tipos de solucionador lineal, el Gradiente conjugado con factorización de Cholesky incompleta como preconditionador para sistemas simétricos y Bi-CGSTAB con preconditionador ILU(0) para sistemas no simétricos (GSTB por sus siglas en inglés), y el Solucionador algebraico de múltiples cuadrículas (AMG por sus siglas en inglés). Bi-CGSTAB, con preconditionamiento, es un método muy competitivo para resolver clases relevantes de sistemas lineales no simétricos [48]; mientras que AMG es recomendable para una rápida convergencia de la matriz de solución (en menos iteraciones) a costa del aumento de complejidades de la matriz, y por lo tanto mayor trabajo numérico [49].

Después de resolver el sistema de ecuaciones linealizado, los factores de subrelajación se usan para limitar qué tanto cambian los valores de las variables de la iteración anterior, y así asegurar la convergencia del proceso de solución numérico de las ecuaciones discretizadas. La subrelajación se realiza implícitamente [36]. Los factores para cada ecuación de conservación se exponen en el siguiente capítulo.

2.7 MECANISMOS CINÉTICOS DE COMBUSTIÓN

Los MCC se desarrollan constantemente para ser utilizados en investigaciones relacionadas con los motores de combustión interna. Normalmente, estos MCC se incorporan en un software CFD como archivos en formato Chemkin-II; el cual Kee y colaboradores [50] explican. El formato mencionado proporciona las tres constantes de la ecuación de Arrhenius, por cada reacción en el MCC, para el cálculo de las constantes de velocidad de reacción directa, y posteriormente las velocidades de formación de cada especie química en cada celda del volumen de control.

En la Ecuación (2.7) de Arrhenius se muestran las tres constantes; el factor pre-exponencial A_i , el exponente de la temperatura β_i y la energía de activación E_i . Con lo anterior y la temperatura se calcula la constante de velocidad de reacción directa k_{f_i} .

$$k_{f_i} = A_i T^{\beta_i} e^{\frac{-E_i}{R_c T}} \quad (2.7)$$

El siguiente paso es calcular la constante de velocidad de reacción inversa k_{r_i} mediante la Ecuación (2.8), con ayuda de la constante de equilibrio K_{c_i} ; la cual se calcula mediante la Ecuación (2.9), que involucra la temperatura, y los cambios de entalpía y entropía de los reactivos a los productos de la reacción química.

$$k_{r_i} = \frac{k_{f_i}}{K_{c_i}} \quad (2.8)$$

$$K_{c_i} = e^{\sum_{k=1}^K v_{ki} \frac{S_k^\circ}{R} - \sum_{k=1}^K v_{ki} \frac{H_k^\circ}{RT}} \left(\frac{P_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^K v_{ki}} \quad (2.9)$$

Con las constantes de velocidad de reacción directa e inversa se calcula la velocidad de reacción q_i como se muestra en la Ecuación (2.10); donde X_k son las concentraciones molares de las especies involucradas en la reacción, v'_{ki} y v''_{ki} son los coeficientes estequiométricos de cada especie en los reactivos y los productos respectivamente.

$$q_i = k_{f_i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v'_{ki}} - k_{r_i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v''_{ki}} \quad (2.10)$$

La velocidad de formación o consumo de cierta especie química en una celda dentro del volumen de control \dot{w}_k se determina mediante la Ecuación (2.11); en la que se consideran todas las reacciones que involucran la especie química, ya sea en los productos o en los reactivos. Es de mencionar que la variable \dot{w}_k se encuentra en las ecuaciones de gobierno como R , como se pudo ver en la Ecuación (2.6).

$$\dot{w}_k = \sum_{i=1}^I (v''_{ki} - v'_{ki}) q_i \quad (2.11)$$

Los MCC a menudo involucran reacciones de tercer cuerpo. Una reacción de tres cuerpos implica la reacción de dos especies A y B para producir un solo producto, la especie AB. Esta reacción requiere un tercer cuerpo M para estabilizar el producto excitado AB* por colisión [51]. También podrían incluir constantes de Arrhenius para el límite de baja presión y factores de mejora para las zonas de baja presión en ciertas especies químicas. Además de constantes de dependencia de presión mediante el uso de la fórmula de Troe, la cual es útil para la representación de datos y el modelado de sistemas de reacción complejos que implican reacciones de isomerización, disociación y recombinación [52].

El archivo chem, en formato Chemkin-II, que contiene el MCC, se complementa de un archivo thermdat, en formato del programa de Coeficientes y Propiedades de la NASA (CAP por sus siglas en inglés) [53]; el cual incluye constantes que permiten calcular propiedades termodinámicas de cada especie química mediante ajustes polinomiales, como el calor específico a presión constante $C_{P_k}^\circ$, la entalpía de estado estándar H_k° y la entropía de estado estándar S_k° . Las Ecuaciones (2.12), (2.13) y (2.14) muestran los ajustes polinomiales, en los que se usan 7 constantes en total.

$$\frac{C_{P_k}^\circ}{R} = a_{1k} + a_{2k}T + a_{3k}T^2 + a_{4k}T^3 + a_{5k}T^4 \quad (2.12)$$

$$\frac{H_k^\circ}{RT} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2}T + \frac{a_{3k}}{3}T^2 + \frac{a_{4k}}{4}T^3 + \frac{a_{5k}}{5}T^4 + \frac{a_{6k}}{T} \quad (2.13)$$

$$\frac{S_k^\circ}{R} = a_{1k} \ln T + a_{2k}T + \frac{a_{3k}}{2}T^2 + \frac{a_{4k}}{3}T^3 + \frac{a_{5k}}{4}T^4 + a_{7k} \quad (2.14)$$

El archivo `thermdat` incluye 14 constantes por especie química, porque se consideran dos conjuntos de constantes que funcionan en intervalos de temperatura alto y bajo. Propiedades termodinámicas como el calor específico a volumen constante, la energía interna y la energía libre de Gibbs pueden ser calculadas a través de las tres propiedades que se mencionaron anteriormente.

Los MCC pueden ser detallados, lo que significa que contienen un gran número de especies y reacciones, lo anterior provoca un tiempo de simulación prolongado. Para abordar este problema, se han desarrollado recientemente MCC reducidos, que contienen menos especies y reacciones. A pesar de su menor complejidad, los MCC reducidos se basan en MCC detallados y proporcionan resultados similares en simulaciones computacionales. La ventaja principal de los MCC reducidos es que permiten realizar simulaciones en un tiempo considerablemente menor.

El desarrollo de nuevos MCC detallados y su posterior reducción es de gran importancia para predecir, en un período de tiempo relativamente corto, cómo se libera la energía en condiciones específicas de presión, temperatura y relación de aire/combustible en un motor de combustión interna. Sin embargo, un aspecto importante que aún no se ha investigado es la desviación estadística que existe entre los resultados de presión en la cámara de combustión de las simulaciones computacionales empleando MCC y resultados experimentales, en procesos de combustión interna en un MEP.

2.8 CÁLCULOS ESTADÍSTICOS PARA ANÁLISIS DE RESULTADOS

Durante los capítulos de Metodología y Resultados se obtuvieron resultados de simulación, para los cuales se requieren conocer sus diferencias, de forma cuantitativa y comparable a diferentes escalas, con respecto a datos experimentales. Para lograr lo anterior se utilizaron métodos estadísticos reconocidos y ampliamente utilizados por su capacidad de evaluar las diferencias entre modelos numéricos y resultados experimentales. Shcherbakov y colaboradores [54] presentan la diferencia porcentual P_i , que se utiliza para conocer el error entre un par de datos, uno obtenido mediante un experimento y el otro mediante un modelo numérico. La Ecuación (2.15) muestra la forma de calcular P_i , donde y_i es el dato experimental y $f_i^{(m)}$ el resultado numérico.

$$P_i = \left| \frac{y_i - f_i^{(m)}}{y_i} \right| \cdot 100\% \quad (2.15)$$

Con base en la diferencia porcentual, también se expone el error porcentual cuadrático medio (RMSPE por sus siglas en inglés), el cual permite evaluar el error entre un conjunto de datos experimentales y otro conjunto de resultados numéricos. La Ecuación (2.16) muestra la forma de calcular el RMSPE, donde n es el número de elementos que contiene un conjunto de datos.

$$RMSPE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n P_i^2} \quad (2.16)$$

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA

En el presente capítulo se describen con detalle los procesos de, diseño del volumen de control, configuración de la malla móvil, definición de los parámetros de simulación y la validación de estos, y al final se presenta la matriz de pruebas de simulación. En la Figura 3.1 se muestra el diagrama de la metodología general.

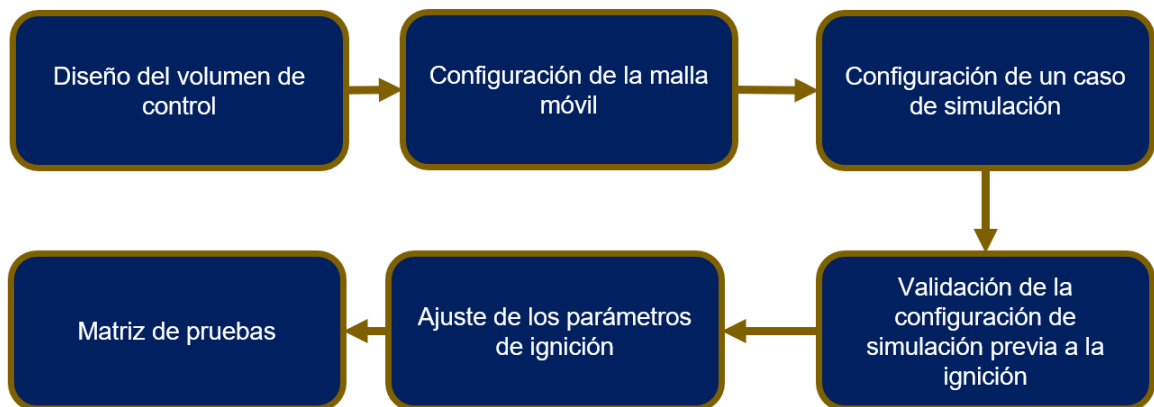


FIGURA 3.1: Diagrama metodológico

Antes de la explicación de la metodología general se expusieron las características de la instalación experimental, con la que se obtuvieron los datos experimentales de presión en la cámara de combustión y concentraciones de emisiones, y el equipo de cómputo, en el que se ejecutaron las simulaciones mediante el software CFD AVL Fire Workflow Manager.

3.1 INSTALACIÓN EXPERIMENTAL

La determinación de los datos experimentales de presión provienen de un MEP monocilíndrico tipo CFR de RC variable, con rango de 4:1 a 16:1. El circuito del motor es explicado con detalle en el trabajo de Rubio [55], el cual describe la puesta a punto de la instalación experimental. Como se puede ver en la Figura 3.2, consta de un filtro de aire, un remanso de admisión, resistencias de calentamiento, que en la presente investigación se fijaron para obtener una temperatura de aire de admisión de 38 °C, la cámara de admisión, el motor CFR, un motor eléctrico, que asegura una velocidad constante de funcionamiento de 900 r.p.m., circuitos de lubricación y refrigeración, la cámara de escape y el remanso de escape.

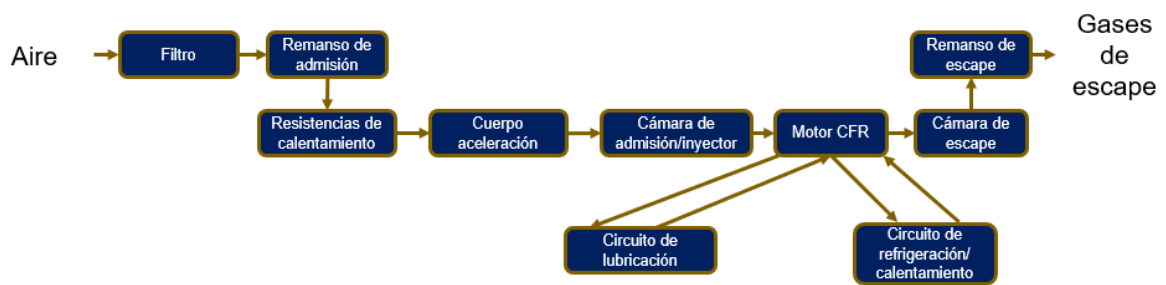


FIGURA 3.2: Esquema de la instalación experimental

En el trabajo de Gómez [56] se expone el proceso de medición para la obtención de los datos de presión de la cámara de combustión, además de las características de los equipos y el proceso de automatización. El sensor de presión utilizado es un KISTLER 6061B de la serie ThermoCOMP, con principio de funcionamiento pizoeléctrico, especialmente diseñado para la medida de presión en cámaras de combustión. El amplificador KISTLER 5010B indica un voltaje proporcional a la medida del sensor de presión, y se conecta a un sistema de adquisición de datos, la tarjeta NI9201 del CompactRIO.

Las curvas de presión, de combustión de metanol y etanol, presentadas en este trabajo se obtuvieron mediante la metodología del trabajo de Rubio [55]. Se obtiene

una curva de presión media de combustión, en cada caso, con base en las presiones de combustión de 100 ciclos.

Las concentraciones de emisiones de CO y CO_2 se obtuvieron mediante la metodología del trabajo de Rivera [57], en el que se usó un analizador de gases MAHA modelo MET 6.3. En resumen, se realiza la prueba de hermeticidad de la sonda del analizador de gases, se configura el equipo en prueba de motor a gasolina en el modo dinámico, se fija la sonda en el punto donde se toma la muestra de gases y se inicia el análisis de emisiones cuando empieza la combustión del motor CFR.

3.2 EQUIPO DE CÓMPUTO

En las Tablas 3.1 y 3.2 se muestran las características de la computadora que tienen relación directa con el tiempo de simulación de cada prueba.

Plataforma	Número de núcleos	Número de hilos	Velocidad de reloj máxima [GHz]
AMD EPYC 7B13	32	32	3.5

TABLA 3.1: Características del CPU

Factor de forma	Capacidad [GB]	Velocidad de reloj [GHz]
DIMM	128	18.756

TABLA 3.2: Características de la RAM

3.3 DISEÑO DEL VOLUMEN DE CONTROL

3.3.1 RC 7.36

Para el diseño del volumen de control, la geometría interna del cilindro y culata en el punto muerto superior ($CA=720^\circ$), fue generada a través de un diseño asistido por computadora (CAD por sus siglas en inglés) en el software SOLIDWORKS, considerando una relación de compresión de 7.36, misma que se usó para la obtención de los datos experimentales de presión previos a las pruebas. En la Figura 3.3 se pueden ver las medidas del CAD: diámetro de cámara de combustión (DCC), altura de cámara de combustión (ACC), diámetro de válvula de entrada (DVE), altura de válvula de entrada (AVE), diámetro de válvula de salida (DVS), altura de válvula de salida (AVS), diámetro del sensor de presión (DSP), altura del sensor de presión (ASP) y la altura saliente del sensor de presión (ASSP). Es de mencionar que el centro de la circunferencia del sensor de presión en el plano de la cara superior de la cámara de combustión forma parte de la circunferencia de la mencionada cara superior.

3.3.2 RC 11

En cuanto al diseño del volumen de control con RC 11, casi todas las medidas son las mismas que en el caso de RC 7.36, que se pueden ver en la Figura 3.3. El cambio se encuentra en que la ACC ($CA=720^\circ$) mide 11.86 mm en lugar de 17.96 mm.

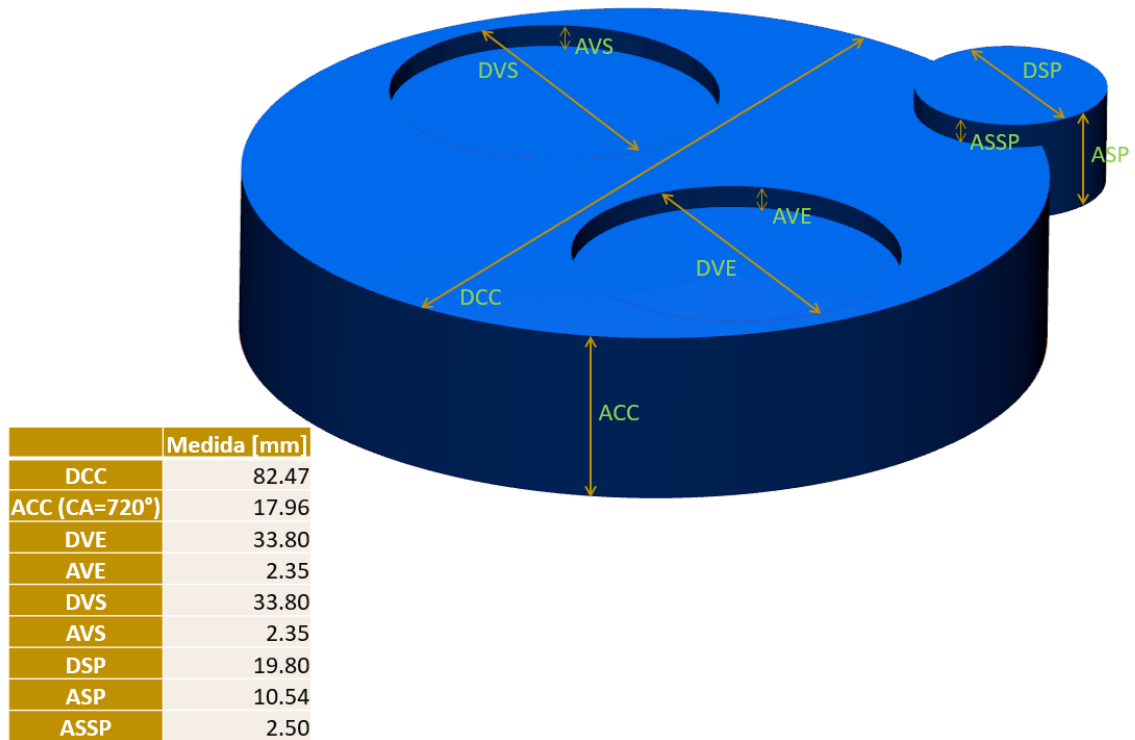


FIGURA 3.3: Medidas del pistón del motor CFR y el sensor de presión en el punto muerto superior (PMS)

3.4 CONFIGURACIÓN DE LA MALLA MÓVIL

3.4.1 RC 7.36

3.4.1.1 DECLARACIÓN DE FRONTERAS

Las simulaciones numéricas tridimensionales que involucran geometrías en movimiento, es decir, que utilizan mallas móviles, son de gran valor para la industria [58]. Se pueden emplear en simulaciones CFD para obtener resultados numéricos en máquinas que presenten expansión y compresión, como en el presente trabajo, donde se simuló un MEP. Para realizar una correcta configuración de malla móvil, es necesario importar la geometría del CAD dentro del software AVL Fire, así como

declarar las fronteras del volumen de control, donde se establecen las condiciones de frontera (o de contorno) a temperatura constante. En la Figura 3.4 se pueden ver las fronteras de volumen en el software; las cuales se indican con la nomenclatura BND, mientras que MOV indica las fronteras que presentan movimiento.

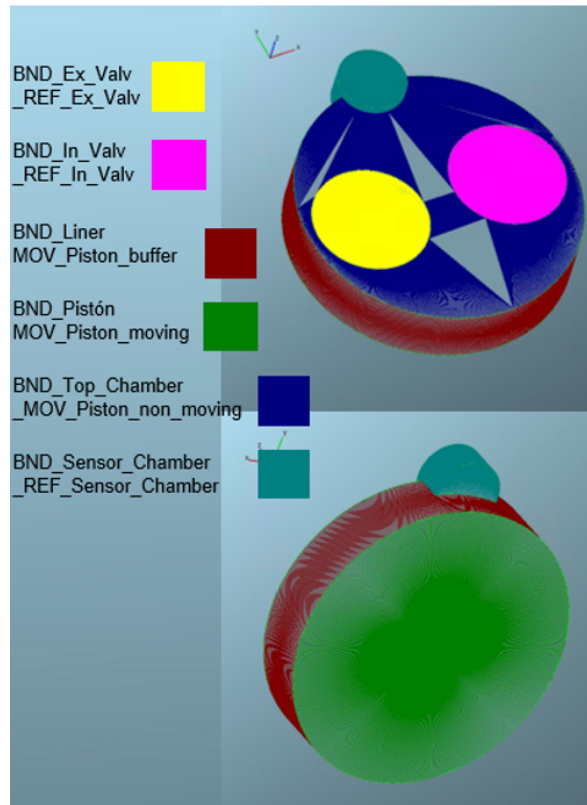


FIGURA 3.4: Nombre de selecciones del CAD del motor CFR en AVL Fire

3.4.1.2 PARÁMETROS DE MALLA MÓVIL

En la sección de Fame Engine +, el cual es un complemento del software AVL Fire para la creación de mallas móviles, se agregaron los parámetros para la creación de la malla móvil del MEP. La cual comprende los instantes de tiempo desde el inicio de la carrera de compresión hasta el término de la carrera de expansión. Dicho lapso se indicó en términos del CA, desde 574° hasta 860° . La ignición ocurre en el CA 702° y el PMS en el CA 720° . Los parámetros para la creación de la malla móvil, que se introdujeron en Fame Engine +, se encuentran en la Tabla 3.3.

Superficie en movimiento	MOV_Piston_moving
Superficie del cilindro que se deforma	MOV_Piston_buffer
Superficie fija	MOV_Piston_non_moving
Tipo de movimiento	Función de desplazamiento de pistón
Longitud de biela [m]	0.254
Longitud de recorrido del pistón [m]	0.1143
Modo del tamaño de celda	Modo tamaño máximo
Tamaño máximo [m]	0.001
	_REF_Ex_Valv (1, 0.0002),
Superficies para refinar (Nivel, Profundidad)	_REF_In_Valv (1, 0.0002),
	_REF_Sensor_Chamber (2, 0.0002)
Refinamiento en esfera (Nivel, Radio)	(3, 0.003)

TABLA 3.3: Parámetros agregados en Fame Engine +

Es de mencionar que la malla móvil es un conjunto de mallas fijas en diferentes tiempos. En el caso de la presente malla, por medio de Fame Engine +, se creó automáticamente una malla por cada paso temporal definido previamente en la herramienta, que expresado en CA son 5°, empezando por CA 574°. Entonces durante la ejecución de una simulación, cuando se requiere resolver las ecuaciones de gobierno en cierto tiempo donde no se creó una malla fija (por ejemplo, en CA 575°), el software realiza una interpolación de mallas fijas. Entonces así la malla móvil abarca cualquier tiempo de forma continua entre los intervalos inicial y final.

3.4.1.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE MALLA

Se realizó un análisis de sensibilidad de malla para comprobar si 1mm de tamaño máximo celda en la malla es adecuado, en comparación con 1.5 mm y 0.8 mm. Primero se realizaron simulaciones con combustión de etanol desde CA 574° hasta 860°, utilizando el MCC detallado de etanol (54 especies y 268 reacciones) de la Universidad de San Diego (UCSD por sus siglas en inglés) [59], y se registraron las

presiones máximas de las 3 simulaciones. A continuación en la Figura 3.5 se pueden ver las diferencias porcentuales entre la presión máxima alcanzada en el experimento del motor CFR, 4,144 kPa, y las presiones máximas alcanzadas en las simulaciones con cambio en el tamaño máximo de malla.

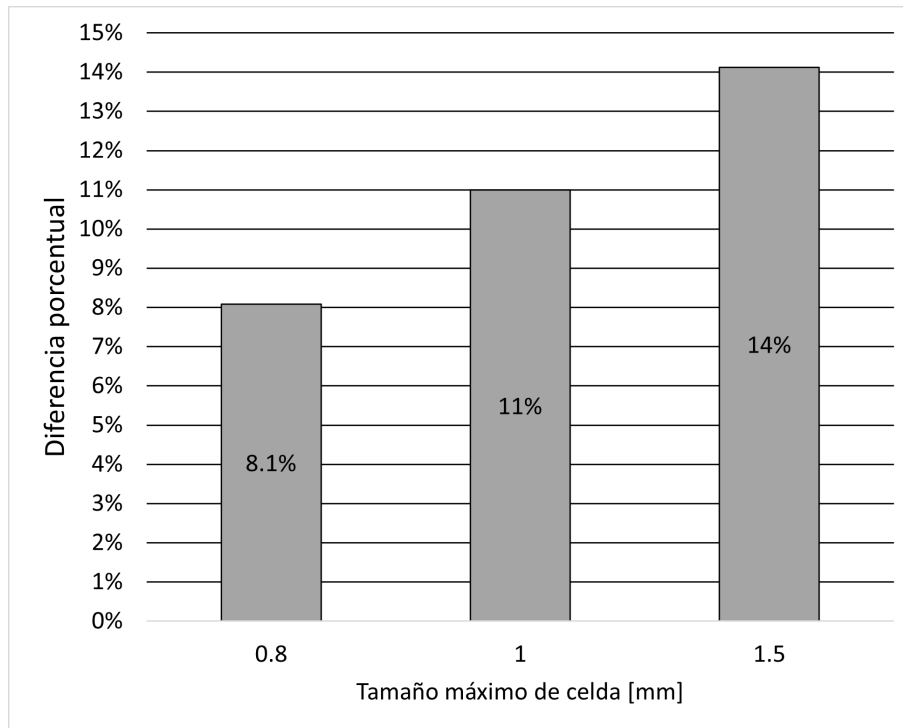


FIGURA 3.5: Diferencias porcentuales de la presión máxima con cambio en el tamaño máximo de la malla con respecto al resultado experimental

Posteriormente se registraron los tiempos de ejecución de las simulaciones y se calcularon las diferencias porcentuales con respecto a la duración del proceso con la malla de 1 mm, 4.9 h. En la Figura 3.6 se pueden ver los puntos que indican las diferencias.

Con base en los resultados anteriores se puede concluir que 1 mm de tamaño máximo de celda en la malla es adecuado porque no presenta una diferencia porcentual significativa con respecto a 0.8 mm en el análisis de sensibilidad de malla. Mientras que el tiempo de ejecución de simulación con 1mm de tamaño de malla es aproximadamente la mitad con respecto a la malla de 0.8 mm. De esta forma se

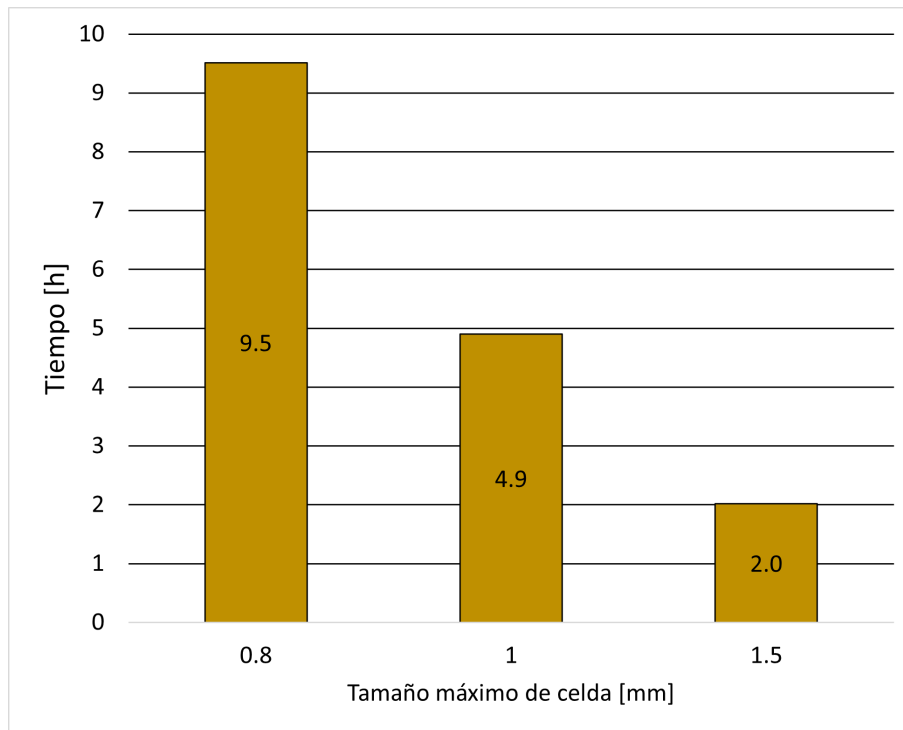


FIGURA 3.6: Diferencias porcentuales del tiempo de ejecución de la simulación con el cambio en el tamaño máximo de la malla con respecto a la malla de 1mm

puede ahorrar considerable recurso computacional sin afectar significativamente los resultados de las simulaciones.

Los indicadores de calidad que se emplearon fueron; ortogonalidad, la cual es complemento de la no-ortogonalidad, que mide la desviación de los ángulos entre las caras y aristas de las celdas; relación de aspecto, que mide la relación entre la arista más grande y la más pequeña de la celda; y la asimetría, que mide la desviación de una celda de una forma perfecta [60]. Se registraron los tres indicadores de calidad de la malla móvil en tres diferentes momentos de CA. En 574° , cuando la cámara de combustión tiene el mayor volumen en la simulación; en 720° , tiempo que corresponde al menor volumen; y en 649° , que es un ángulo intermedio entre los ángulos antes mencionados. En la Tabla 3.4 se pueden ver los indicadores.

CA [Grados]	Número de celdas	Ortogonalidad >0.8	Relación de aspecto <10	Asimetría <0.3
574	2,402,737	90 %	100 %	87 %
649	1,548,657	89 %	100 %	84 %
720	804,734	88 %	100 %	81 %

TABLA 3.4: Indicadores de calidad de la malla móvil RC 7.36

Se puede ver que la calidad de la malla móvil RC 7.36 es considerablemente buena en los tres CA mostrados. Teniendo como máximos un 12% de celdas con ortogonalidad menor o igual a 0.8, en CA 720°; un 0.0% de celdas con relación de aspecto mayor o igual a 10, en CA 720°; y un 19% de celdas con asimetría mayor o igual a 0.3, en CA 720°. En la Figura 3.7 se muestra la evolución de la malla móvil tridimensional con el cambio en CA, y además un acercamiento a las celdas cercanas a la parte superior del volumen de control.

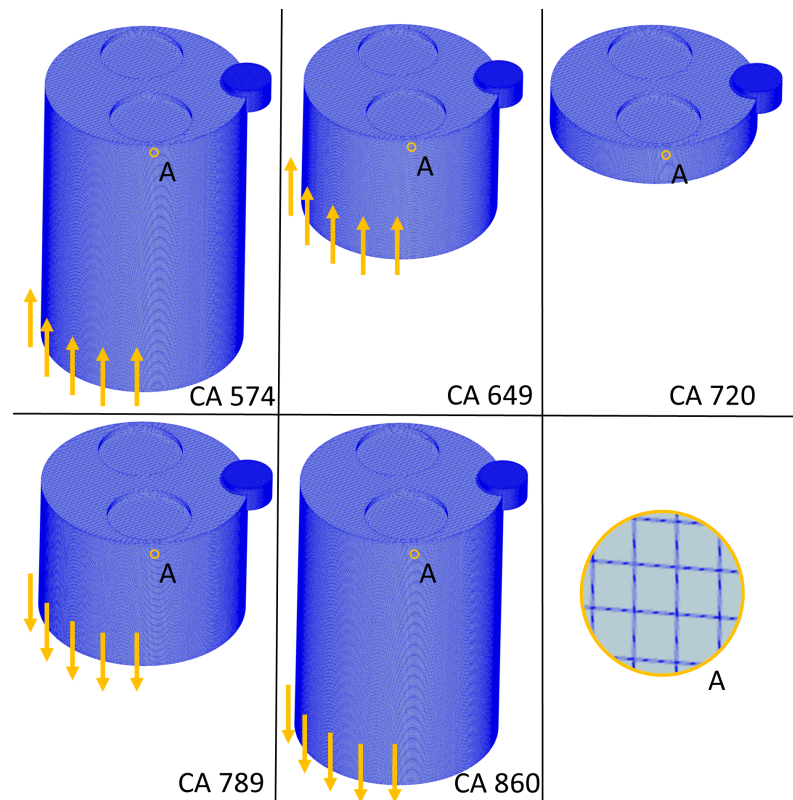


FIGURA 3.7: Malla móvil con RC de 7.36 en diferentes CA

3.4.2 RC 11

Debido a que la malla móvil RC 11, en comparación con la malla móvil RC 7.36, sólo tendría diferencia en la medida de la ACC en cada paso de CA, tanto la declaración de fronteras como la definición de los parámetros de la malla móvil se realizaron de igual manera que para el caso de RC 7.36, como se pueden ver en la Figura 3.4 y en la Tabla 3.3 respectivamente. Con base en la similitud entre los volúmenes de control RC 11 y RC 7.36 en el PMS, se puede concluir que un tamaño máximo de celda de 1 mm es adecuado para la malla móvil RC 11. Con el objetivo de verificar la calidad de la malla móvil RC 11, se registraron los indicadores de calidad que se muestran en la Tabla 3.5.

CA [Grados]	Número de celdas	Ortogonalidad >0.8	Relación de aspecto <10	Asimetría <0.3
574	2,318,495	90 %	100 %	87 %
649	1,320,535	89 %	100 %	85 %
720	695,934	87 %	100 %	79 %

TABLA 3.5: Indicadores de calidad de la malla móvil RC 11

Se puede ver que la calidad de la malla móvil RC 11 es considerablemente buena en los tres CA mostrados. Teniendo como máximos un 13% de celdas con ortogonalidad menor o igual a 0.8, en CA 720°; un 0.0% de celdas con relación de aspecto mayor o igual a 10, en CA 720°; y un 21% de celdas con asimetría mayor o igual a 0.3, en CA 720°.

3.5 CONFIGURACIÓN DE UN CASO DE SIMULACIÓN

Después del diseño de la malla móvil RC 7.36, se creó y configuró el caso de simulación de combustión de etanol. En el archivo de dirección del solucionador (SSF por sus siglas en inglés) se agregaron ciertos parámetros que se mostrarán más

adelante.

Con el objetivo de cumplir con los requisitos de estabilidad del esquema de integración temporal, se utilizó la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) [61], que se expresa con el número de Courant (C), definido en la Ecuación (3.1), donde U es la magnitud de velocidad característica en una celda, Δh es la longitud característica de la celda y Δt es el paso temporal de la simulación.

$$C = \frac{U}{\frac{\Delta h}{\Delta t}} \leq 1 \quad (3.1)$$

Un intervalo temporal de CA de 1° , equivalente a $1.85\text{E-}4$ s, que al sustituirlo como Δt en la Ecuación (3.1), y usar 1 mm de longitud máxima de celda como Δh y $1.2 \frac{m}{s}$ de velocidad de combustión máxima de metanol y etanol [62] como U , se obtiene un C de 0.22, cumpliendo la condición de la ecuación. El paso temporal mínimo se estableció como CA 1° en el intervalo de tiempo donde es presente o próxima la combustión, mientras que el paso temporal máximo se estableció como CA 5° en intervalos de tiempo donde no es presente la combustión, con el objetivo de que no se prolongue innecesariamente el tiempo de simulación.

Como se puede ver en la Tabla 3.6, se decidió usar un paso temporal, expresado en CA, de 1° desde 699° hasta 749° , debido a que ocurren cambios considerablemente rápidos justo después del encendido de la chispa, en CA 702° (RC 7.36) o en 705° (RC 11). Se indicó en el SSF el inicio y el final de la simulación, en este caso 574° y 860° respectivamente. También se estableció la velocidad del motor en 900 r.p.m., se activaron los módulos “Species transport” y “General gas phase reactions”.

Hasta CA [Grados]	Paso temporal [Grados]
699	5
749	1
859	5
860	1

TABLA 3.6: Paso temporal de la simulación dependiendo del CA alcanzado

En cuanto a las condiciones de frontera se fijaron los valores de temperatura que se pueden ver en la Tabla 3.7. Es de mencionar que se eligieron las temperaturas con base en la investigación de Pal et al. [63].

Superficie	Velocidad (x,y,z) [m/s]	Temperatura [K]
BND_Ex_Valv	(0,0,0)	520
BND_In_Valv	(0,0,0)	465
BND_Top_Chamber	(0,0,0)	525
BND_Liner	(0,0,0)	430
BND_Piston	(0,0,0)	485
BND_Sensor_Chamber	(0,0,0)	525

TABLA 3.7: Condiciones de frontera

Posteriormente en el SSF se estableció que el volumen de control esté en fase gaseosa y se seleccionó el modelo de densidad de gas real. También se indicó que los datos de masa molar, calor específico, viscosidad dinámica, conductividad térmica y el coeficiente de difusión se extraigan de archivos externos al software, al igual que MCC detallado con estructura CHEMKIN. En este caso se usaron los integrados al software AVL FIRE(TM) Workflow Manager [64]. Los archivos fueron extraídos del programa como explica el manual FIRE Example Documentation 2021 R2: Detailed Chemistry (969). Para las condiciones iniciales se usaron los datos de la Tabla 3.8, obtenidos con base en la presión inicial y la masa de aire inyectada, que son datos obtenidos del motor CFR a un CA de 574°. Considerando una mezcla estequiométrica se calcularon los datos de densidad y temperatura, aplicando la ecuación de gas ideal.

Presión [Pa]	113,455
Densidad [$\frac{kg}{m^3}$]	0.84115
Temperatura [K]	486.19
Velocidad (x, y, z) [$\frac{m}{s}$]	(0, 0, 0)

TABLA 3.8: Condiciones iniciales

Las fracciones másicas iniciales se establecieron como 0.69062 de N_2 , 0.20905 de O_2 y 0.10033 de C_2H_5OH . Con respecto a la discretización se seleccionó el algoritmo Simple, por su amplio uso en simulaciones CFD [65]. Para simular la turbulencia se eligió el modelo $k - \zeta - f$, por tener ventaja sobre el modelo $k - \varepsilon$, al ser capaz de predecir la transferencia de calor con mayor fidelidad [43]. El tratamiento de la pared se consideró híbrido, debido a que es altamente compatible con el modelo de turbulencia $k - \zeta - f$ [44], y permite condiciones de contorno bien definidas independientemente de la posición del nodo computacional más cercano a la pared [45], resultando un modelo superior al de Han-Reitz.

Los factores finales de subrelajación de las ecuaciones de conservación se establecieron de la siguiente manera: 0.6 en momentum, 0.4 en presión, energía cinética turbulenta y tasa de disipación turbulenta, 1 en energía, fuente de masa y viscosidad, finalmente 0.8 en escalar y en ecuaciones de transporte de especies. La variación de los factores de subrelajación fue una estrategia de mejora en el tiempo de simulación y la estabilidad de los residuales. La estrategia consistió en realizar pruebas de simulación con variación incremental en los factores de subrelajación de las diferentes ecuaciones de conservación hasta encontrar divergencia o inestabilidad de los residuales; de esta forma se pudieron encontrar los factores de subrelajación que permitieron un tiempo relativamente corto de simulación, evitando la divergencia o inestabilidad de los residuales.

Con relación a los esquemas de diferenciación, se utilizó “MINMOD Bounded” para la solución de conservación de momentum, “Central Differencing” para el caso de la ecuación de continuidad y “Upwind” para las ecuaciones de turbulencia,

energía y escalar. Se eligió un esquema de diferenciación acotado para la ecuación de momentum, con el objetivo de evitar lo más posible la divergencia de los residuales de las componentes de velocidad, debido a que limita el flux de una variable a un nivel que asegura la solución acotada [47]; mientras que se eligieron esquemas estándar en las demás ecuaciones de conservación para evitar una gran prolongación en el tiempo de simulación.

En el solucionador lineal se estableció "GSTB" para las ecuaciones de momentum, turbulencia, energía y escalar, mientras que "AMG" para la solución de continuidad. Las iteraciones mínimas y máximas fueron de 1 y 50 respectivamente, mientras que la tolerancia se fijó en 0.1 para todos los parámetros, excepto para continuidad, donde la tolerancia se precisó en 0.01. Se eligió el solucionador lineal GSTB porque incluye el método Bi-CGSTAB con preconditionador ILU(0), el cual es muy competitivo para resolver clases relevantes de sistemas lineales no simétricos [48]. Se seleccionó el solucionador lineal AMG para la ecuación de continuidad porque permite alcanzar una tolerancia establecida en menos iteraciones, a costa de un mayor trabajo numérico [49]; ideal para calcular con mayor precisión las tasas de formación y de consumo de especies químicas, mediante los MCC.

En el apartado del número mínimo y máximo de iteraciones por paso temporal, se indicó que fueran 10 y 100 respectivamente. Más adelante, los residuales se marcaron normalizados con un objetivo numérico de 0.0001 en presión, momentum y energía como criterio de convergencia. La variación del número máximo de iteraciones fue una estrategia de mejora en el tiempo de simulación. La estrategia consistió en identificar mediante pruebas de simulación el número de iteraciones que permite la estabilidad de los residuales y en la que, en iteraciones posteriores, no se reducen significativamente los residuales; de esta forma se encontró que un número máximo de iteraciones de 100 permite un tiempo relativamente corto de simulación, con seguridad en que los residuales no disminuirían significativamente en futuras iteraciones y evitando la inestabilidad de los residuales.

En el modelo de transporte, elegido como general, se importaron los nombres de las 54 especies químicas que aparecen en el MCC detallado de etanol exportado del software AVL FIRE(TM) Workflow Manager [64]. Después, en el apartado de dominio de región de reacción se marcó la opción de dominio completo y se consideraron fuentes de entalpía provenientes de reacciones químicas. Seguidamente, en el solucionador de ecuaciones diferenciales ordinarias se precisaron tolerancias relativa y absoluta de $1E-10$ y $1E-20$ respectivamente, así como un número máximo de iteraciones de 100,000. La variación del número máximo de iteraciones del solucionador de ecuaciones diferenciales ordinarias fue una estrategia de mejora en el tiempo de simulación. La estrategia consistió en identificar mediante pruebas de simulación el número de iteraciones que permite la estabilidad de los residuales y en la que, en iteraciones posteriores, no se reducen significativamente los residuales; de esta forma se encontró que un número máximo de iteraciones de 100,000 permite un tiempo relativamente corto de simulación, con seguridad en que los residuales no disminuirían significativamente en futuras iteraciones y evitando la inestabilidad de los residuales.

En opciones de aceleración química se estableció el modelo de multi-zonas, el cual permite reducir significativamente el tiempo de simulación mediante la clasificación de las celdas en grupos de temperatura y concentración de especies; de esta forma, la velocidad de formación o consumo de cada especie química, necesaria para la solución de la ecuación de continuidad por especie, se generaliza en rangos de temperatura y concentración en cada paso temporal, en lugar de obtener una por cada celda.

Finalmente, en el apartado de ignición, se eligió un modelo esférico con una sola región de chispa, en la coordenada (0.0413511, 0.0007, 0.03373) en metros, con el tiempo de encendido en CA 702° , el radio de ignición de 0.0048 m, el tiempo de chispa de 0.0015 s [66] y un factor de energía de 1.7.

El radio de ignición es el parámetro que controla el tamaño de una semiesfera que genera un flujo de calor al volumen de control. El tiempo de chispa es el paráme-

tro que controla la duración en que la semiesfera genera calor. Mientras que el factor de energía es el parámetro que multiplica la magnitud de la generación volumétrica de calor. La cual tiene una magnitud de $5.926E+9 \frac{W}{m^3}$, que al multiplicarla por el volumen de la semiesfera se puede obtener el valor del flujo de calor que libera la chispa en watts.

3.6 VALIDACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN DE SIMULACIÓN PREVIA A LA IGNICIÓN

Primero se llevó a cabo una simulación desde CA 574° hasta CA 700°, antes de la ignición. Con el objetivo de verificar que los parámetros que rigen la termodinámica del volumen de control son adecuados, al comparar la presión de la simulación con la experimental, ambos con inyección estequiométrica de etanol, en los rangos de CA antes mencionados. Mas adelante, en la Figura 3.8 se muestran las curvas de presión de simulación (AVL) y experimentación (CFR).

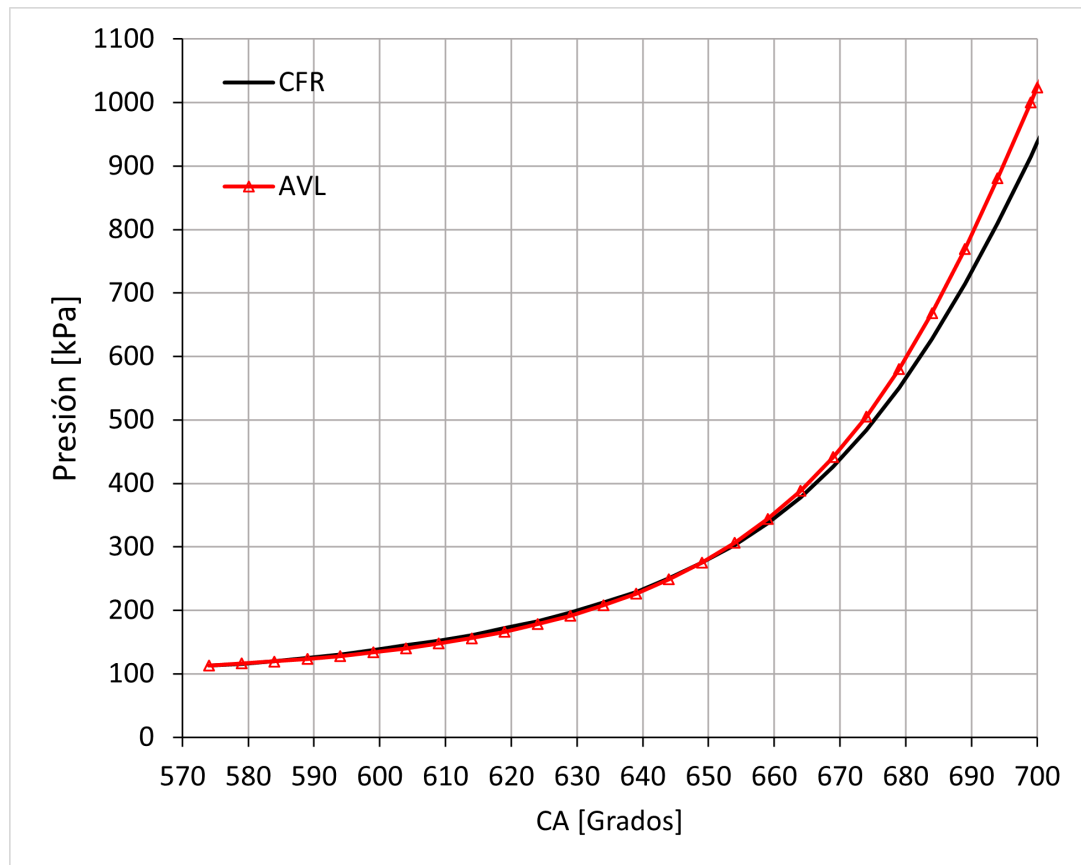


FIGURA 3.8: Curvas de presión de datos experimentales y de simulación con inyección estequiométrica de etanol desde CA 574° hasta 700°

El RMSPE de la curva de presión AVL respecto a la curva de presión CFR es de 4.3%, por lo que se puede confirmar que la definición de los parámetros que dominan la termodinámica del volumen de control fue adecuada en el rango de CA anteriormente establecido.

3.7 AJUSTE DE LOS PARÁMETROS DE IGNICIÓN

Después de comprobar que la evolución de la presión de la simulación, con solución de reacciones químicas de un MCC detallado de etanol y malla móvil, antes de la ignición es aceptable, se procedió a obtener curvas de presión por medio de simulación numérica variando el parámetro de factor de energía. Debido a que este

parámetro es uno de los tres que regula la aportación energética desde la bujía hacia la cámara de combustión. Lo anterior se llevó a cabo con el objetivo de registrar el valor de factor de energía que permite que la curva de presión calculada por simulación sea lo más parecida posible a la curva de presión experimental, evitando retrasos en la combustión, y así poder validar la configuración de la simulación, desde CA °574 hasta CA °860, para su posterior uso en la evaluación de mecanismos cinéticos de dos alcoholes, a dos relaciones de compresión cada uno. Se encontró que un factor de energía de 1.7 permite un acercamiento considerable entre las curvas de presión de simulación y experimental; consiguiendo un RMSPE de 5.2% desde un CA de 574° hasta 860°. A continuación, en la Figura 3.9 se pueden ver las curvas de presión de simulación y experimental.

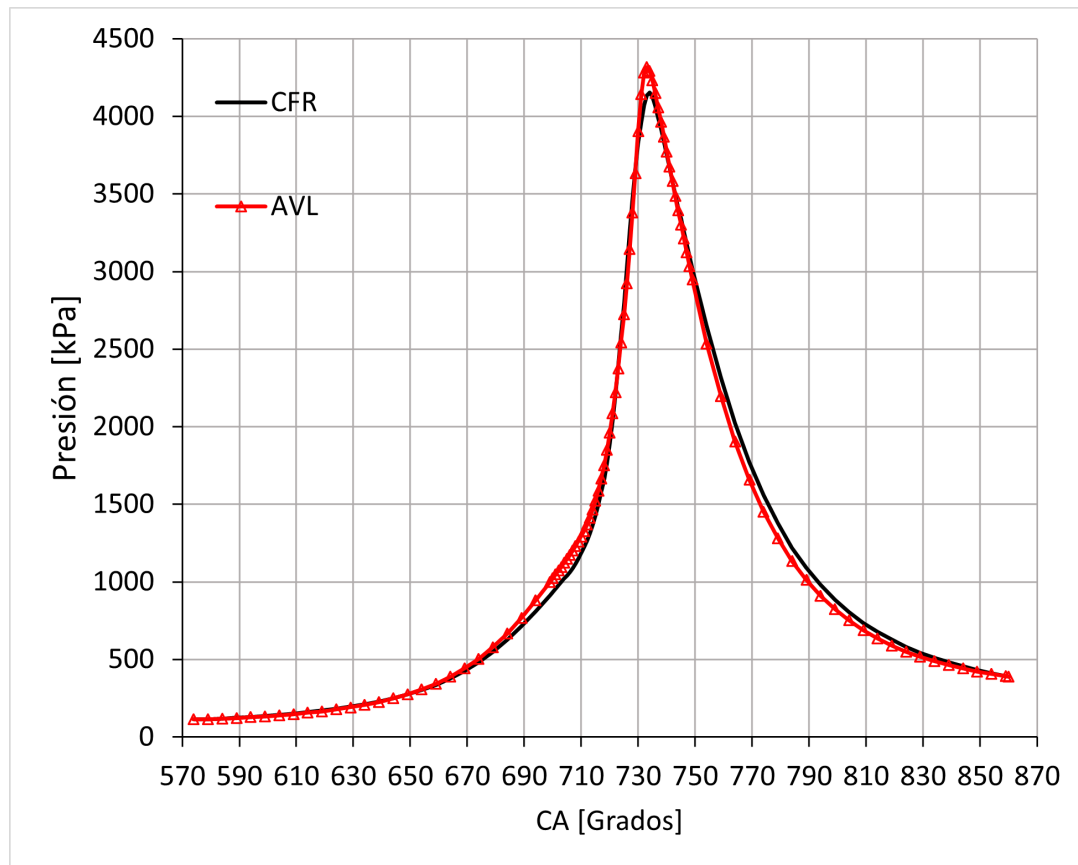


FIGURA 3.9: Curvas de presión de datos experimentales y de simulación con inyección estequiométrica de etanol desde CA 574° hasta CA 860°

3.8 MATRIZ DE PRUEBAS

Se eligieron dos combustibles para simular numéricamente en dos mallas móviles cada uno, que denotan las RC de 7.36 y 11. También se eligieron tres MCC por cada combustible. En la Tabla 3.9 se pueden apreciar los apellidos de los primeros autores de artículos indexados seleccionados, con los que se podrán identificar sus respectivos MCC desarrollados en las investigaciones; además se incluyen datos importantes de los MCC, los combustibles para los que están diseñados, las emisiones contaminantes que consideran, el número de especies y reacciones, y el tipo de MCC. Es de mencionar que se seleccionaron MCC que no superen un número de 60 especies o 300 reacciones, debido al gran costo computacional que esto implicaría.

MCC	Combustible(s)	Emisiones	Especies	Reacciones	Tipo
AVL [64]	Metanol		54	-	Detallado
	Etanol				
Zhang [67]	Metanol	CO	46	247	Detallado
Pichler [68]		CO_2	18	55	Reducido
Olm [69]	Etanol		47	251	Detallado
Millán [70]			34	69	Reducido

TABLA 3.9: Características de los MCC utilizados

En la Tabla 3.10 se pueden ver los MCC que se usarán para las pruebas de simulación, por cada combustible y relación de compresión.

Combustibles						
RC	Metanol			Etanol		
7.36	AVL [64]	Zhang [67]	Pichler [68]	AVL [64]	Olm [69]	Millán [70]
11	AVL [64]	Zhang [67]	Pichler [68]	AVL [64]	Olm [69]	Millán [70]

TABLA 3.10: Matriz de pruebas para la simulación de los MCC

Para indicar los parámetros que determinan la termodinámica del volumen de

control, se registraron las masas de aire y combustible que se usaron en los experimentos con el motor CFR. En la Tabla 3.11 se pueden ver las masas anteriormente mencionadas por cada combustible y relación de compresión.

Masas experimentales (Aire [mg], Combustible [mg])		
RC	Metanol	Etanol
7.36	(487, 75.5)	(504, 56.3)
11	(433, 67.2)	(497, 55.5)

TABLA 3.11: Masa de aire y combustible por tipo de alcohol y relación de compresión

Con base en las masas de aire y combustible anteriormente expuestas, las magnitudes de volumen de control y las presiones experimentales en CA 574°, se calcularon las densidades y las temperaturas para las pruebas de simulación de dos combustibles bajo dos RC. En la Tabla 3.12 se muestran las condiciones iniciales para las pruebas.

Condiciones iniciales	Metanol		Etanol	
	RC 7.36	RC 11	RC 7.36	RC 11
Volumen [mL]	666.61	633.84	666.61	633.84
Presión [Pa]	112,883	102,000	113,455	106,000
Densidad [$\frac{kg}{m^3}$]	0.84352	0.78909	0.84115	0.87235
Temperatura [K]	470.58	454.54	486.19	437.99
Velocidad (x, y, z) [$\frac{m}{s}$]	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)

TABLA 3.12: Condiciones iniciales para las pruebas de simulación

Se registraron las fracciones másicas, por sustancias puras, de cada tipo de mezcla dentro de la cámara de combustión dependiendo del alcohol que se inyectó en cada experimento. Con el objetivo de ingresar esos parámetros al SSF de las simulaciones. En la Tabla 3.13 se pueden ver los valores previamente mencionados.

Fracciones másicas experimentales en pruebas con:		
Especie	Metanol	Etanol
O_2	0.20116	0.20905
N_2	0.66456	0.69062
CH_3OH	0.13428	0
C_2H_5OH	0	0.10033

TABLA 3.13: Fracciones másicas experimentales por tipo de alcohol en la mezcla

Más adelante se obtuvieron las 12 curvas de presión con la configuración de simulación previamente validada y se comparó cada curva con su respectivo conjunto de datos experimentales dependiendo del combustible y relación de compresión.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

En el presente capítulo se exponen los resultados experimentales y de simulación utilizando los MCC que se indicaron en la Tabla 3.10, siendo los casos con combustibles metanol y etanol bajo las RC de 7.36 y 11 (MET-7.36, MET-11, ET-7.36 y ET-11). Los resultados consisten en curvas de presión de la cámara de combustión en el rango de CA 574° hasta 860° , es decir, cuando las válvulas de admisión y de escape se encuentran cerradas. Además se presentan los análisis estadísticos de las curvas de presión de simulación con base en el criterio RMSPE; emisiones de CO y CO_2 ; y los tiempos de ejecución de las simulaciones.

4.1 METANOL

En esta sección se presentan los resultados relacionados al metanol bajo dos relaciones de compresión; combustible que se usó en las pruebas experimentales en el motor CFR y del que se hicieron pruebas de simulación con tres MCC, AVL [64], Zhang [67] y Pichler [68].

4.1.1 RC 7.36

A continuación, se muestran la curva de presión experimental y las tres curvas de simulación bajo la RC de 7.36, las diferencias que existen entre los datos de presión experimentales y numéricos, los resultados de emisiones y los tiempos de procesamiento de las simulaciones.

4.1.1.1 CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de mostrar con detalle los gráficos, se definieron tres etapas importantes de la cámara de combustión. La primera etapa se definió como compresión, que abarca desde el CA inicial de la corrida de compresión hasta 1° CA antes de la ignición, es decir, desde CA 574° hasta 700° . Los resultados durante la etapa de compresión se pueden ver en la Figura 4.1. La segunda etapa se definió como ignición, que abarca desde el CA donde ocurre el encendido de la chispa hasta 20° CA después del PMS, cuando se asegura se consumió el combustible, es decir, desde CA 701° hasta 740° . Los resultados de la etapa antes mencionada se pueden ver en la Figura 4.2. La última etapa se definió como expansión, que abarca desde 21° CA después del PMS hasta el CA final de la corrida de expansión, es decir, desde CA 741° hasta 860° . Los resultados durante esta etapa se pueden ver en la Figura 4.3.

En la Figura 4.1 se puede observar que las curvas de presión obtenidas por simulación numérica son iguales, independientemente del MCC. También se puede ver que las presiones de simulación se empiezan a elevar con respecto a la curva experimental a partir del CA 650° .

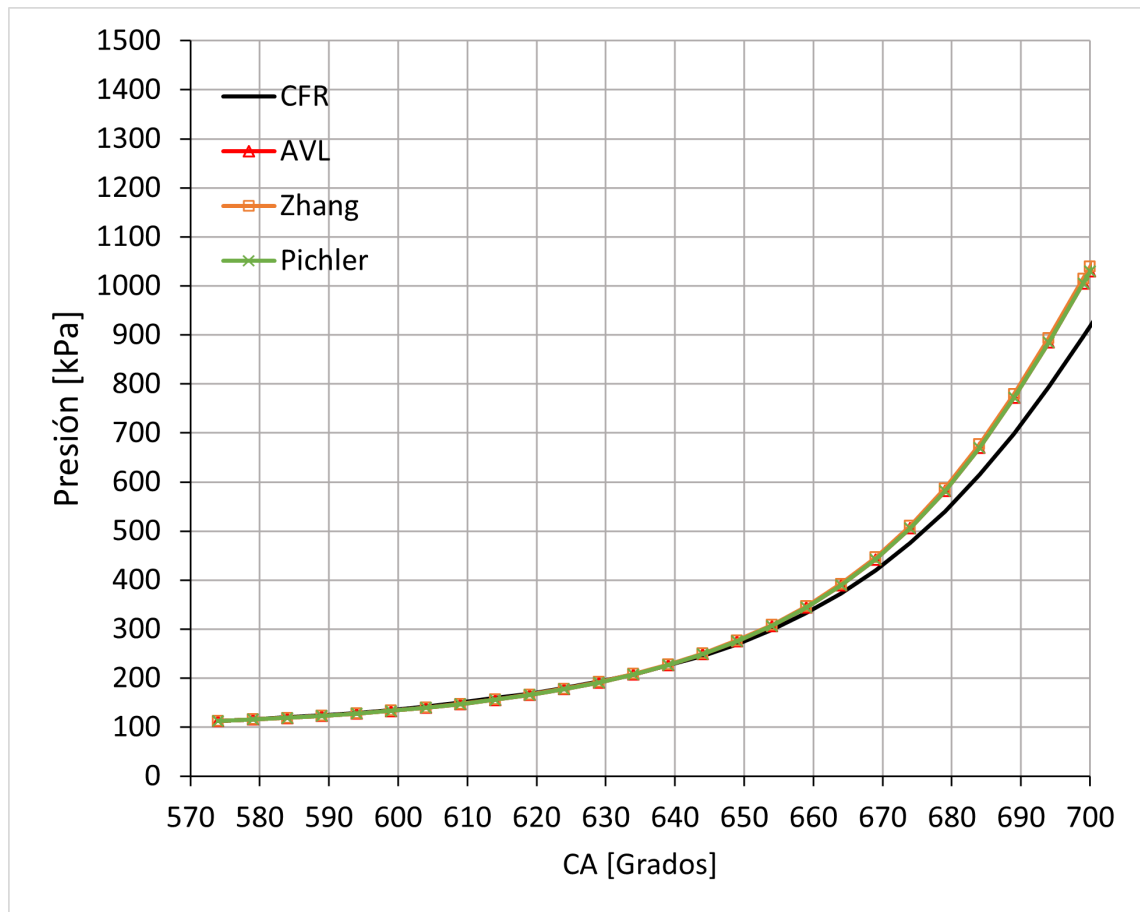


FIGURA 4.1: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 7.36 durante la etapa de compresión

En la etapa de compresión las presiones numéricas de los MCC son iguales debido a que no ocurren cambios significativos en la producción y el consumo de las especies químicas porque no se provoca la ignición en este intervalo de tiempo. Las diferencias entre los resultados numéricos y los experimentales se podrían deber a las condiciones de frontera que se están suponiendo. En la presente investigación se indicaron las condiciones de frontera de temperatura en las paredes proporcionadas por Pal y colaboradores [63], los cuales configuraron un caso de simulación de combustión de iso-octano en un motor CFR con RC de 7.55 a 600 r.p.m.; por lo tanto es posible que se deban considerar otras temperaturas de pared para esta investigación con el objetivo de tener presiones más cercanas a las experimentales.

En la Figura 4.2 se observa que las curvas de presión de simulación comienzan a tener cambios entre sí, empezando por la curva del MCC de Zhang [67] en CA 710°. También se puede notar que los máximos de presión de las tres curvas de simulación son mayores al de la curva de presión experimental, alcanzando los máximos de presión en diferentes CA.

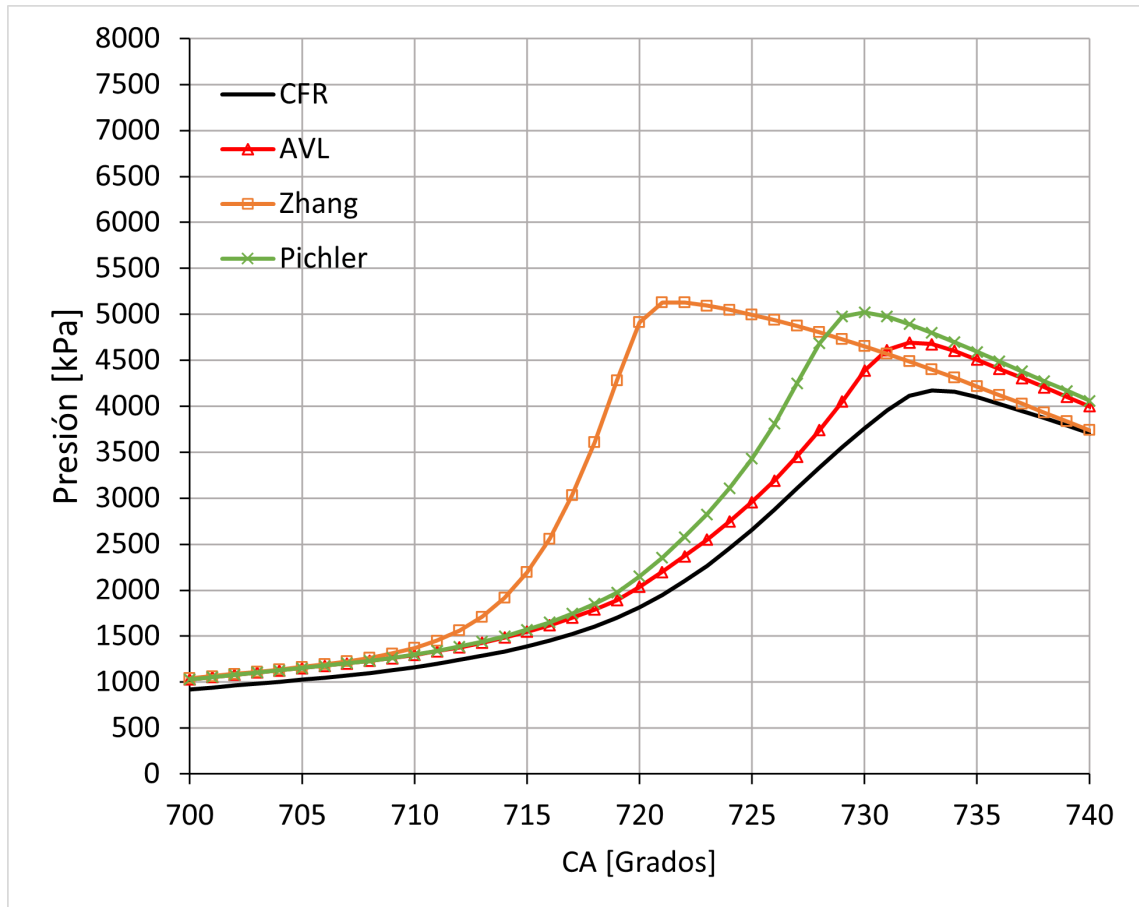


FIGURA 4.2: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 7.36 durante la etapa de ignición

Las curvas de presión de simulación de cada MCC tuvieron diferencias entre sí, debido a que en este intervalo de tiempo ocurre la ignición en CA 702°, y los MCC AVL[64], Zhang [67] y Pichler [68] consideran diferentes especies y reacciones cada uno, además de la cantidad de especies y reacciones, las cuales se pueden ver en la Tabla 3.9. Entonces la ecuación de conservación de masa por especie química en cada celda, la cual cambia dependiendo del MCC utilizado, además de las condiciones de

concentración, presión y temperatura, puede provocar diferencias considerables en las tasas de producción y consumo de especies químicas en las celdas del volumen de control; pudiendo liberar la energía proveniente de reacciones exotérmicas de forma relativamente prematura, incrementando así la temperatura y por lo tanto la presión, produciéndose diferentes máximos dependiendo del MCC.

En la Figura 4.3 se puede ver que los datos de simulación tienden a tener el mismo valor de presión que los datos experimentales, conforme se alcanza un CA mayor.

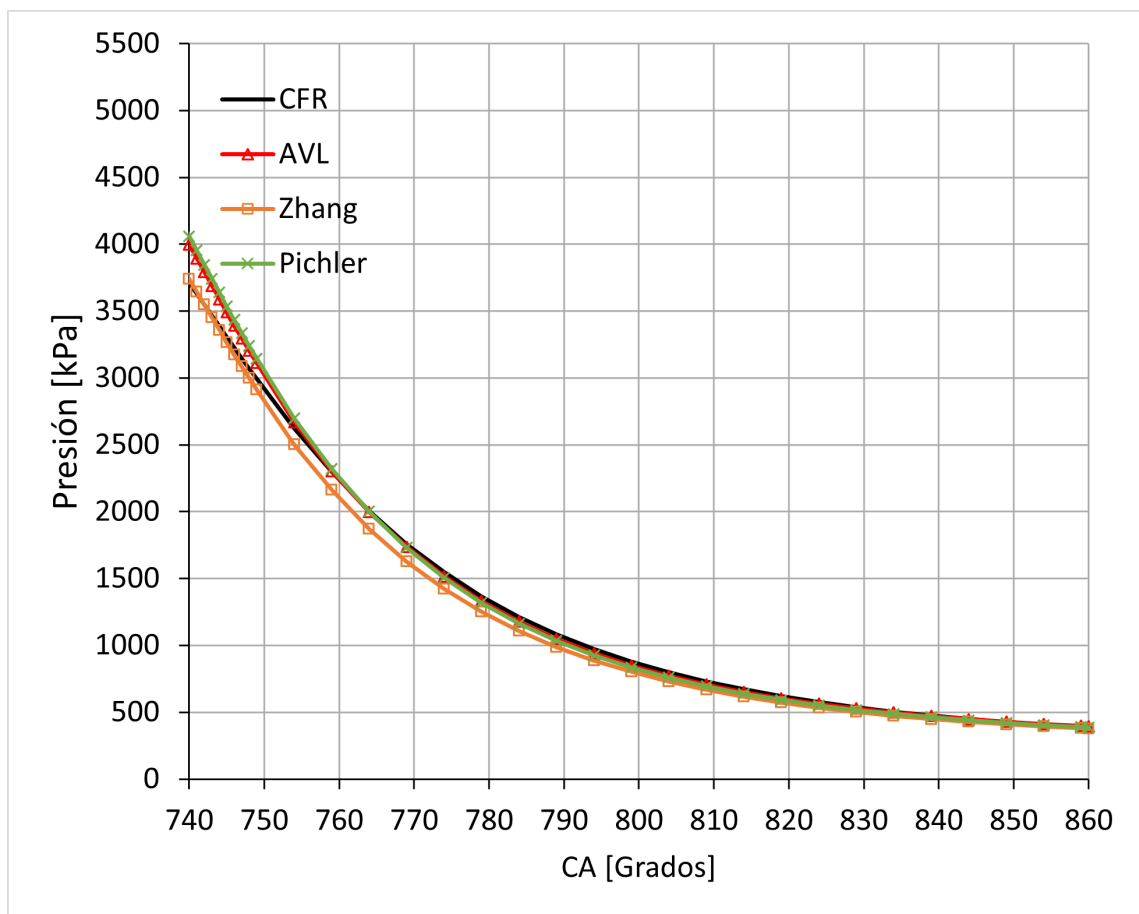


FIGURA 4.3: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 7.36 durante la etapa de expansión

En la etapa de expansión el combustible se ha consumido casi por completo, por lo que no existe liberación de energía considerable proveniente de las reaccio-

nes exotérmicas; entonces, debido a que la temperatura y la presión del volumen de control dependen en mayor medida de la magnitud del volumen en cada CA y las condiciones de frontera de temperatura en las paredes, las curvas de presión de simulación con diferentes MCC se acercan cada vez más a la curva de presión experimental conforme pasa el tiempo. Es posible que las condiciones de frontera tomadas del trabajo de Pal y colaboradores [63] permitan resultados de simulación más cercanos a los datos experimentales en presiones bajas, como se puede ver también en la Figura 4.1, considerando que las condiciones de frontera de la literatura se diseñaron para diferentes RC, r.p.m. y combustible.

A continuación, en la Tabla 4.1 se muestran coordenadas importantes de las curvas anteriormente expuestas. El punto de aceleración de la reacción se refiere al primer punto de la curva, posterior a la ignición en CA 701° , en el que la diferencia porcentual entre la pendiente actual y la pendiente de 1° antes es igual o mayor a 10 %. El punto máximo indica la máxima presión alcanzada; mientras que P en CA 860° indica la presión en el final de la corrida de expansión [71].

Se puede destacar que el MCC de Zhang [67] fue el que presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 9.0 %, con respecto a la presión del punto de aceleración de reacción de los datos experimentales. El MCC de AVL [64] fue el que tuvo la menor diferencia porcentual absoluta, de 12.5 %, con respecto a la presión del punto máximo de los datos experimentales. También se encontró que el MCC de Zhang [67] presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 0.8 %, con respecto a la presión al final de la corrida de expansión de los datos experimentales.

Curva	Punto de aceleración de la reacción (CA, P) [Grados, kPa]	Punto máximo (CA, P) [kPa]	P en CA 860° [kPa]
CFR	(707, 1069)	(733, 4173)	380
AVL	(710, 1295)	(732, 4694)	396
Zhang	(705, 1165)	(722, 5129)	377
Pichler	(710, 1298)	(730, 5021)	387

TABLA 4.1: Puntos importantes de las curvas de presión

Los parámetros anteriormente expuestos representan una forma rápida de cuantificar qué tanto se acelera el avance de la presión en la cámara de combustión por cada simulación numérica usando cierto MCC, respecto a los datos de presión experimentales, y por lo tanto ayudan a identificar qué MCC permite tener resultados numéricos más parecidos a los datos experimentales. Más adelante se usó el criterio RMSPE para calcular el error promedio entre los datos de presión numéricos y experimentales para diferentes etapas del proceso, con el objetivo de analizar de forma más completa los resultados numéricos.

4.1.1.2 DIFERENCIAS EN LAS CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de evaluar las diferencias que existen entre la curva de presión experimental y las presiones calculadas numéricamente con cada MCC, se calculó el RMSPE de los resultados numéricos con respecto a los datos experimentales. Los RMSPE se calcularon para cada etapa del proceso, compresión (574°-700°), ignición (701°-740°), expansión (741°-860°), y para el proceso completo (574°-860°). En la Figura 4.4 se pueden ver los RMSPE por cada MCC y etapa del proceso.

Se puede destacar que los MCC de AVL [64] y Pichler [68] presentaron el menor RMSPE en la etapa de compresión. Mientras que el MCC de AVL [64] tuvo el menor RMSPE tanto para la etapa de ignición como la de expansión. Es de mencionar que los RMSPE en la etapa de ignición son los que tienen mayor magnitud en contraste

con las otras dos etapas; 12 %, 68 % y 20 % en los MCC de AVL [64], Zhang [67] y Pichler [68] respectivamente. El MCC de AVL [64] resultó con el menor RMSPE en el proceso completo.

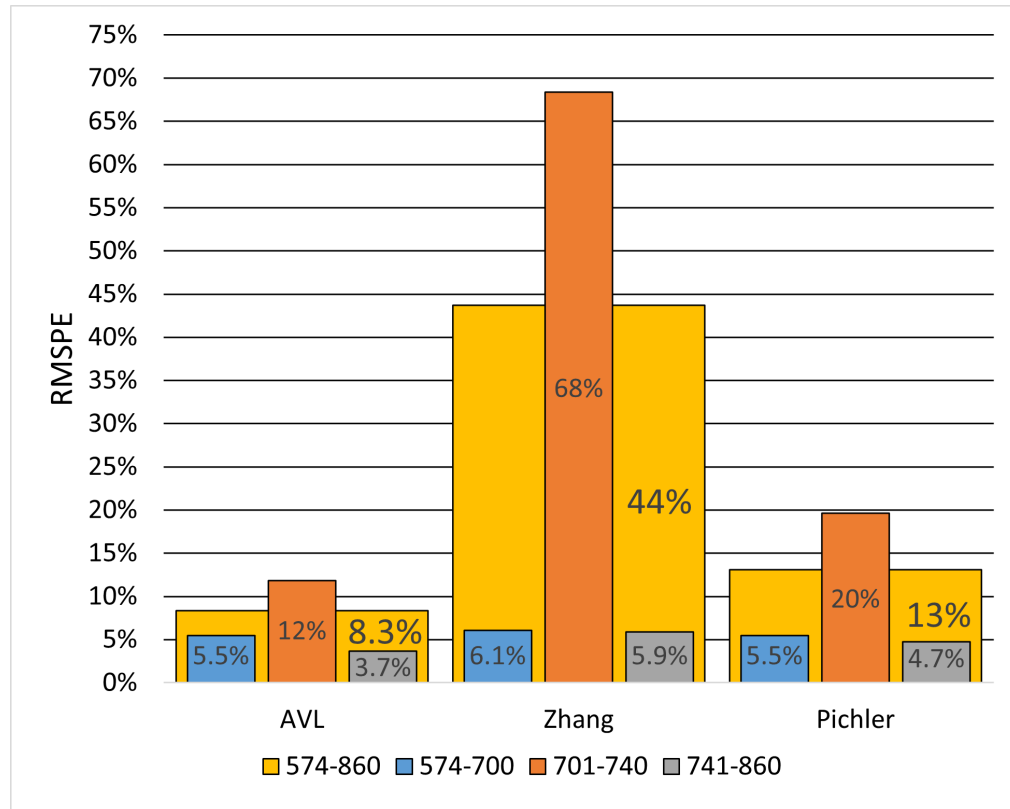


FIGURA 4.4: RMSPE de los MCC, con base en la curva de presión experimental, en diferentes etapas

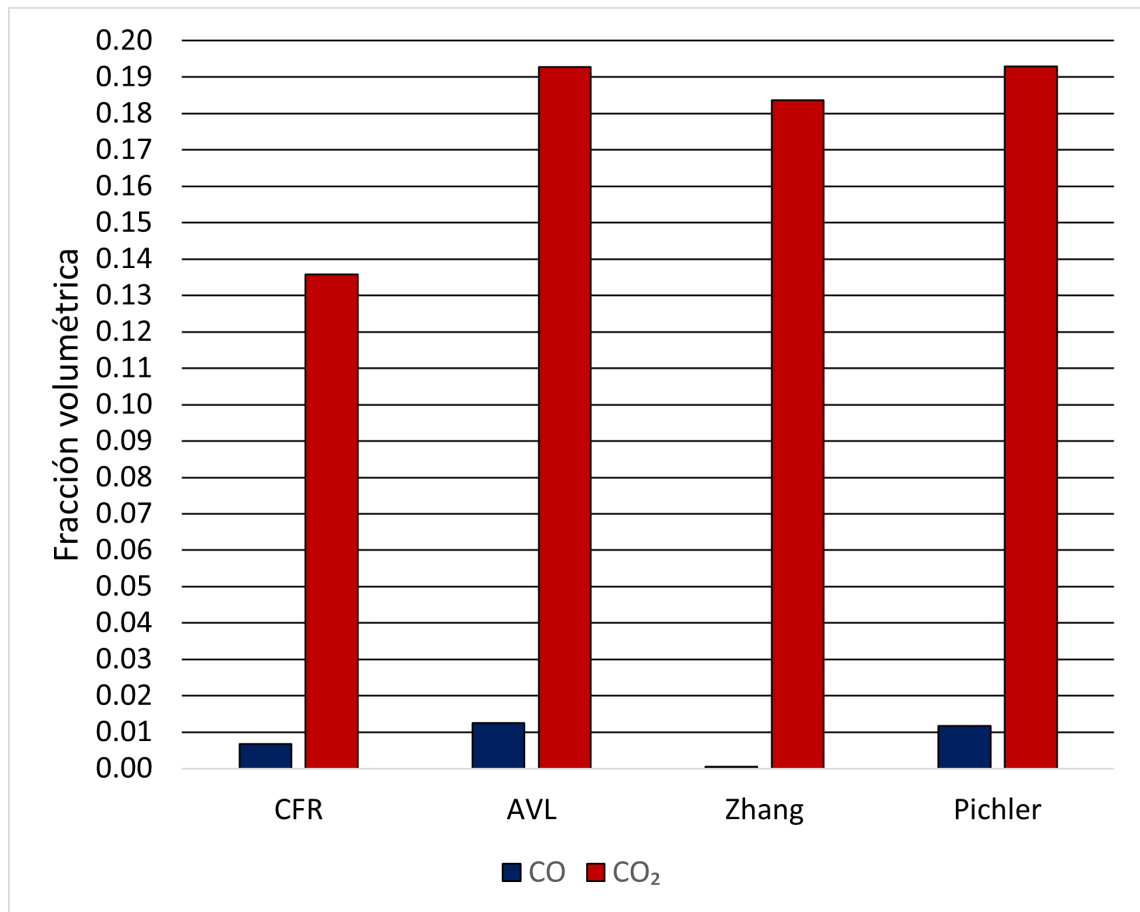
La etapa de ignición es la que presentó mayor error, bajo el criterio RMSPE. Esta tendencia se debe a que la ignición es la etapa donde los MCC determinan la evolución de la presión, derivada de la energía liberada por las reacciones exotérmicas, llegando a un máximo de presión que es considerablemente mayor a la presión durante la chispa. El MCC de AVL [64] fue el que permitió que los resultados numéricos de presión tuvieran menor error, en todo el proceso, en comparación con los datos experimentales, posiblemente debido a que es de tipo detallado y que tiene mayor cantidad de especies consideradas en comparación con los otros dos MCC, como se puede ver en la Tabla 3.9. Un MCC con menor cantidad de especies conside-

radas, o que sea reducido, es probable que tienda a producir resultados numéricos con mayor error bajo ciertas condiciones de concentración, presión y temperatura porque podrían omitir con mayor frecuencia reacciones con alta tasa de producción y consumo de especies químicas bajo dichas condiciones, en comparación con MCC detallados, o con mayor cantidad de especies consideradas.

4.1.1.3 EMISIONES

En la Figura 4.5 se pueden ver las emisiones de CO y CO_2 , obtenidas experimentalmente y numéricamente mediante tres MCC.

Se puede observar que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO con rango 0.00-0.02, en comparación con el dato experimental, que es menor a 0.01. También se puede ver que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO_2 con rango 0.18-0.20, valores mayores que el dato experimental de 0.14.

FIGURA 4.5: Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica

Los MCC que se evaluaron sólo consideran emisiones de CO y CO_2 , como se puede ver en la Tabla 3.9. Entonces, al no considerar emisiones de NO_x , COV y HC, es posible que no se calculen de forma precisa las emisiones de CO y CO_2 . Lo anterior se debe a la falta de especies y reacciones en los MCC, que permiten que la tasa de producción de CO_2 se reduzca por el efecto de tasas de producción de especies intermediarias que derivan en NO_x , COV y HC. Es de mencionar que MCC detallados para simulación de combustión alcoholes, como los de San Diego [59] y AramcoMech [72], no consideran en el MCC base las emisiones de NO_x , COV y HC, debido a que el tiempo de simulación incrementaría considerablemente para aplicaciones donde dichas emisiones serían innecesarias; dando la opción a los investigadores de añadir al MCC base los MCC complementarios, los cuales consideran emisiones adicionales, que pueden encontrar en la misma referencia o por parte de

otras investigaciones.

4.1.1.4 TIEMPO DE SIMULACIÓN

En la Figura 4.6 se muestran los tiempos de ejecución de las simulaciones para cada MCC.

Se puede apreciar que el MCC de Pichler [68] es el que tuvo menor tiempo de ejecución; mientras que el MCC de Zhang [67] es el que presentó mayor tiempo.

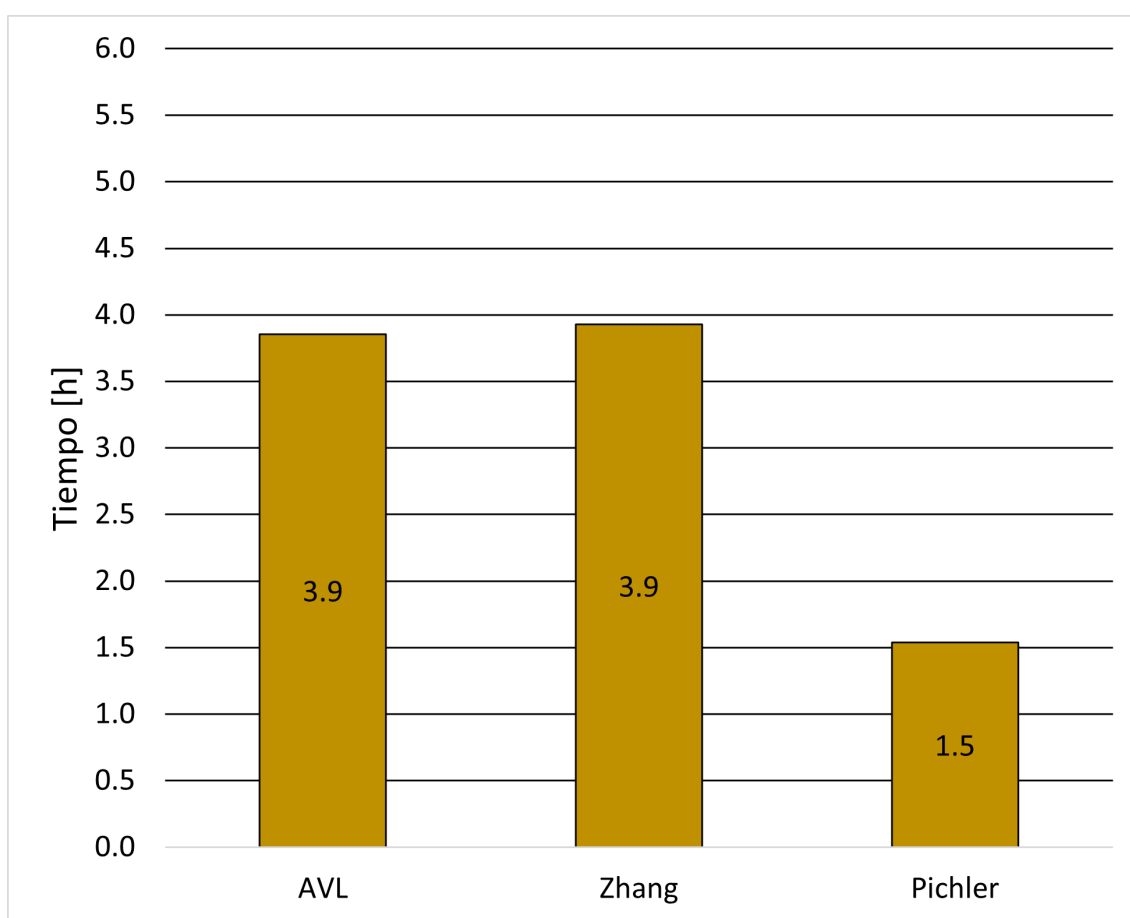


FIGURA 4.6: Tiempos de ejecución de las simulaciones

En cuanto a los tiempos de simulación, es presente la tendencia de que las simulaciones con los MCCs cinéticos de combustión con más especies toman más tiempo en completarse. Lo anterior se puede explicar con el recurso computacional;

la matriz de solución numérica, para las ecuaciones discretizadas de conservación de masa, aumenta debido a que las reacciones del MCC son un complemento para la ecuación de conservación de masa. Entonces cuando se tienen más especies en un MCC, es muy probable que se tengan más reacciones, por ello se incrementa el tamaño de la matriz de solución y se consume mayor recurso computacional.

4.1.2 RC 11

A continuación, se muestran la curva de presión experimental y las tres curvas de simulación bajo la RC de 11, las diferencias que existen entre los datos de presión experimentales y numéricos, los resultados de emisiones y los tiempos de procesamiento de las simulaciones.

4.1.2.1 CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de mostrar con detalle los gráficos, se definieron tres etapas importantes de la cámara de combustión. La primera etapa se definió como compresión, que abarca desde el CA de inicial de la corrida de compresión hasta 1° CA antes de la ignición, es decir, desde CA 574° hasta 700° . Los resultados durante la etapa de compresión se pueden ver en la Figura 4.7. La segunda etapa se definió como ignición, que abarca desde el CA donde ocurre el encendido de la chispa hasta 20° CA después del PMS, cuando se asegura se consumió el combustible, es decir, desde CA 701° hasta 740° . Los resultados de la etapa antes mencionada se pueden ver en la Figura 4.8. La última etapa se definió como expansión, que abarca desde 21° CA después del PMS hasta el CA final de la corrida de expansión, es decir, desde CA 741° hasta 860° . Los resultados durante esta etapa se pueden ver en la Figura 4.9.

En la Figura 4.7 se puede observar que las curvas de presión obtenidas por simulación numérica son iguales, independientemente del MCC. También se puede

ver que las presiones de simulación se encuentran ligeramente abajo de la curva de presión experimental entre CA 600° y 700°.

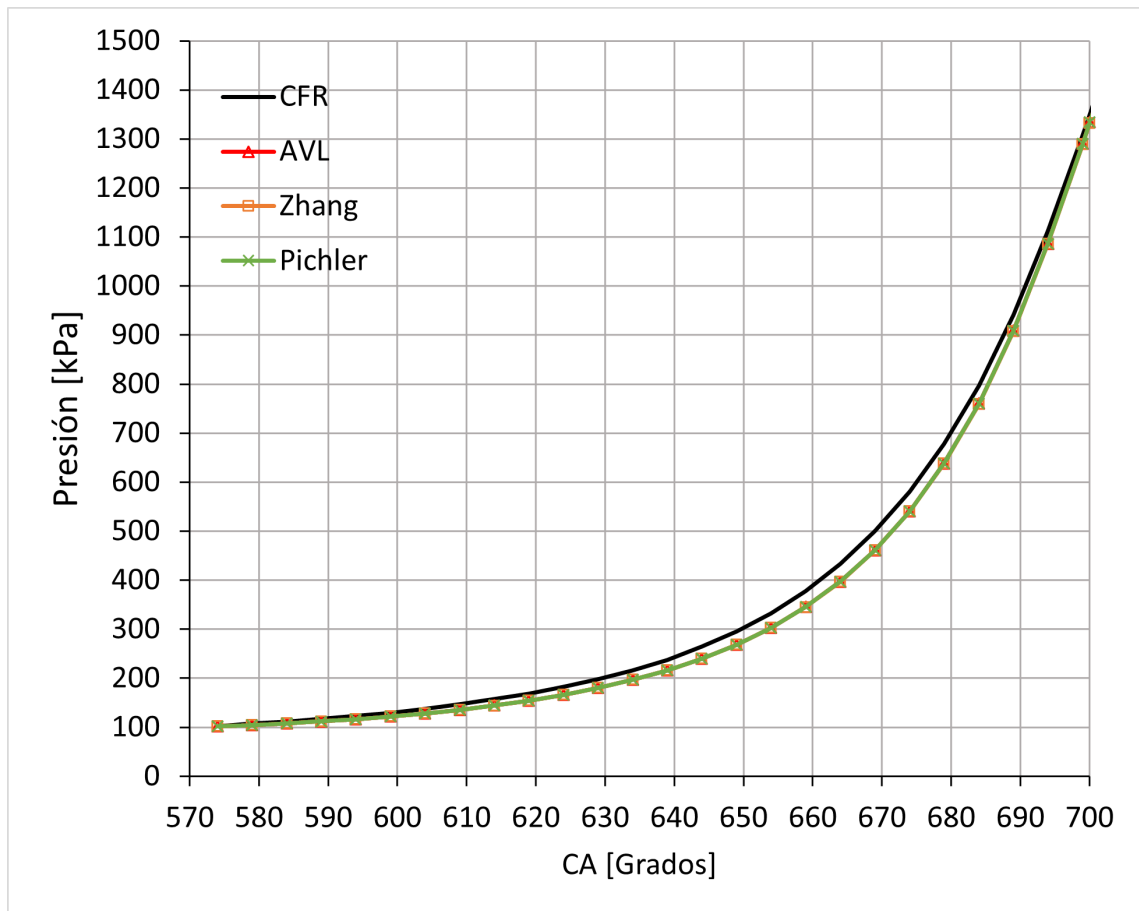


FIGURA 4.7: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 11 durante la etapa de compresión

En la etapa de compresión las presiones numéricas de los MCC son iguales debido a que no ocurren cambios significativos en la producción y el consumo de las especies químicas porque no se provoca la ignición en este intervalo de tiempo. Las diferencias entre los resultados numéricos y los experimentales se podrían deber a las condiciones de frontera que se están suponiendo, como se explicó en el caso de MET-7.36.

En la Figura 4.8 se observa que las curvas de presión de simulación comienzan a tener cambios entre sí, empezando por la curva del MCC de Pichler [68] en CA 715°. También se puede notar que los máximos de presión de las tres curvas de simulación son mayores al de la curva de presión experimental.

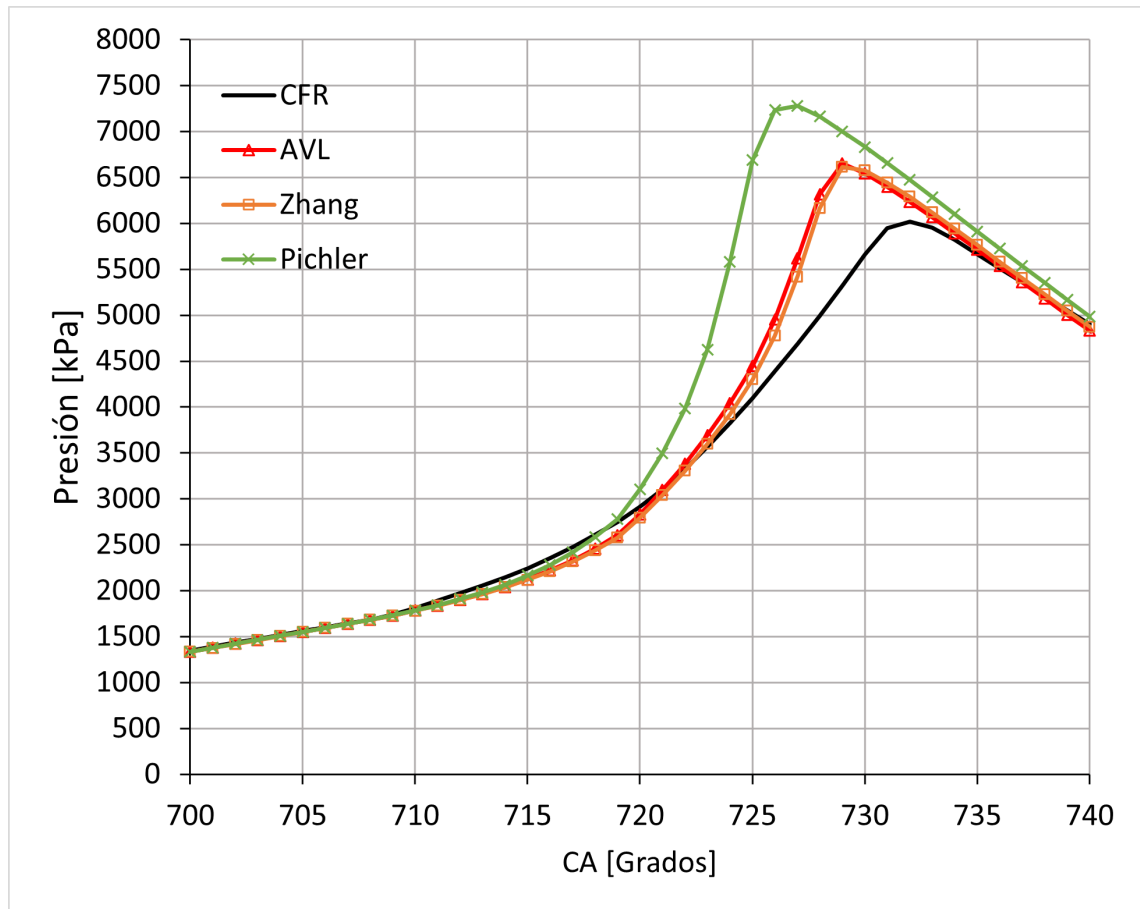


FIGURA 4.8: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 11 durante la etapa de ignición

Las curvas de presión de simulación de cada MCC tuvieron diferencias entre sí, debido a que en este intervalo de tiempo ocurre la ignición en CA 705°, y los MCC AVL[64], Zhang [67] y Pichler [68] consideran diferentes especies y reacciones cada uno, además de la cantidad de especies y reacciones, las cuales se pueden ver en la Tabla 3.9, como se explicó en el caso de MET-7.36.

En la Figura 4.9 se puede ver que los datos de simulación tienden a tener el mismo valor de presión que los datos experimentales, conforme se alcanza un CA mayor.

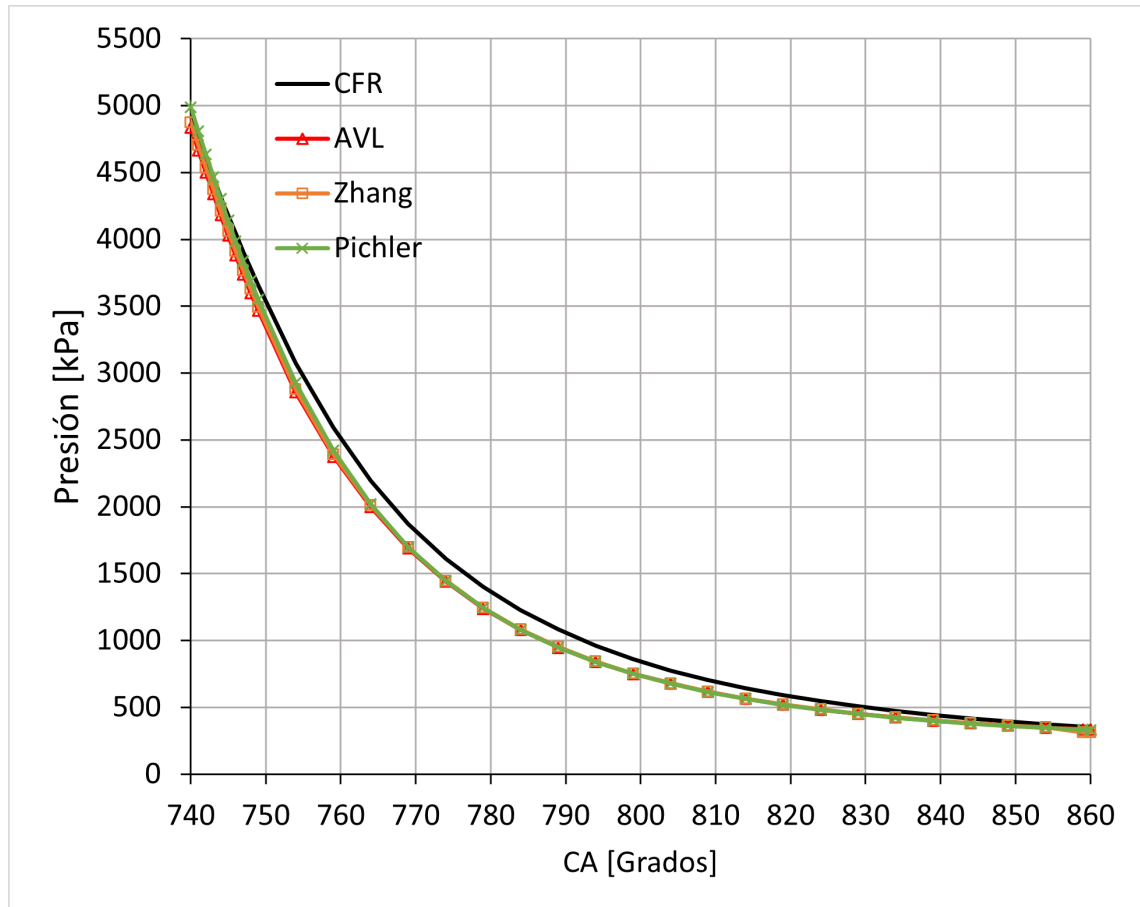


FIGURA 4.9: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de metanol con RC de 11 durante la etapa de expansión

En esta etapa el combustible se ha consumido casi por completo, por lo que no existe liberación de energía considerable proveniente de las reacciones exotérmicas; entonces, debido a que la temperatura y la presión del volumen de control dependen en mayor medida de la magnitud del volumen en cada CA y las condiciones de frontera de temperatura en las paredes, las curvas de presión de simulación con diferentes MCC se acercan cada vez más a la curva de presión experimental conforme pasa el tiempo, como se explicó en el caso de MET-7.36.

A continuación, en la Tabla 4.2 se muestran coordenadas importantes de las curvas anteriormente expuestas. El punto de aceleración de la reacción se refiere al primer punto de la curva, posterior a la ignición en CA 701°, en el que la diferencia porcentual entre la pendiente actual y la pendiente de 1° antes es igual o mayor a 10 %. El punto máximo indica la máxima presión alcanzada; mientras que P en CA 860° indica la presión en el final de la corrida de expansión.

Se puede destacar que el MCC de Zhang [67] fue el que presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 2.5 %, con respecto a la presión del punto de aceleración de reacción de los datos experimentales. El MCC de Zhang [67] fue el que tuvo la menor diferencia porcentual absoluta, de 9.9 %, con respecto a la presión del punto máximo de los datos experimentales. También se encontró que el MCC de AVL [64] presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 5.6 %, con respecto a la presión al final de la corrida de expansión de los datos experimentales.

Curva	Punto de aceleración de la reacción (CA, P) [Grados, kPa]	Punto máximo (CA, P) [kPa]	P en CA 860° [kPa]
CFR	(709, 1738)	(732, 6019)	354
AVL	(710, 1783)	(729, 6650)	334
Zhang	(710, 1782)	(729, 6617)	311
Pichler	(710, 1786)	(727, 7281)	332

TABLA 4.2: Puntos importantes de las curvas de presión

Los parámetros anteriormente expuestos representan una forma rápida de cuantificar qué tanto se acelera el avance de la presión en la cámara de combustión por cada simulación numérica usando cierto MCC, respecto a los datos de presión experimentales, y por lo tanto ayudan a identificar qué MCC permite tener resultados numéricos más parecidos a los datos experimentales. Más adelante se usó el criterio RMSPE para calcular el error promedio entre los datos de presión numéricos y experimentales para diferentes etapas del proceso, con el objetivo de analizar de forma más completa los resultados numéricos.

4.1.2.2 DIFERENCIAS EN LAS CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de evaluar las diferencias que existen entre la curva de presión experimental y las presiones calculadas numéricamente con cada MCC, se calculó el RMSPE de los resultados numéricos con respecto a los datos experimentales. Los RMSPE se calcularon para cada etapa del proceso, compresión (574° - 700°), ignición (701° - 740°), expansión (741° - 860°), y para el proceso completo (574° - 860°). En la Figura 4.10 se pueden ver los RMSPE por cada MCC y etapa del proceso.

Se puede destacar que los MCC de AVL [64] y Pichler [68] presentaron el menor RMSPE en la etapa de compresión. Mientras que el MCC de Zhang [67] tuvo el menor RMSPE para la etapa de ignición. El MCC de Pichler [68] resultó en el menor RMSPE para la etapa de expansión. El MCC de Zhang [67] tuvo el menor RMSPE en el proceso completo.

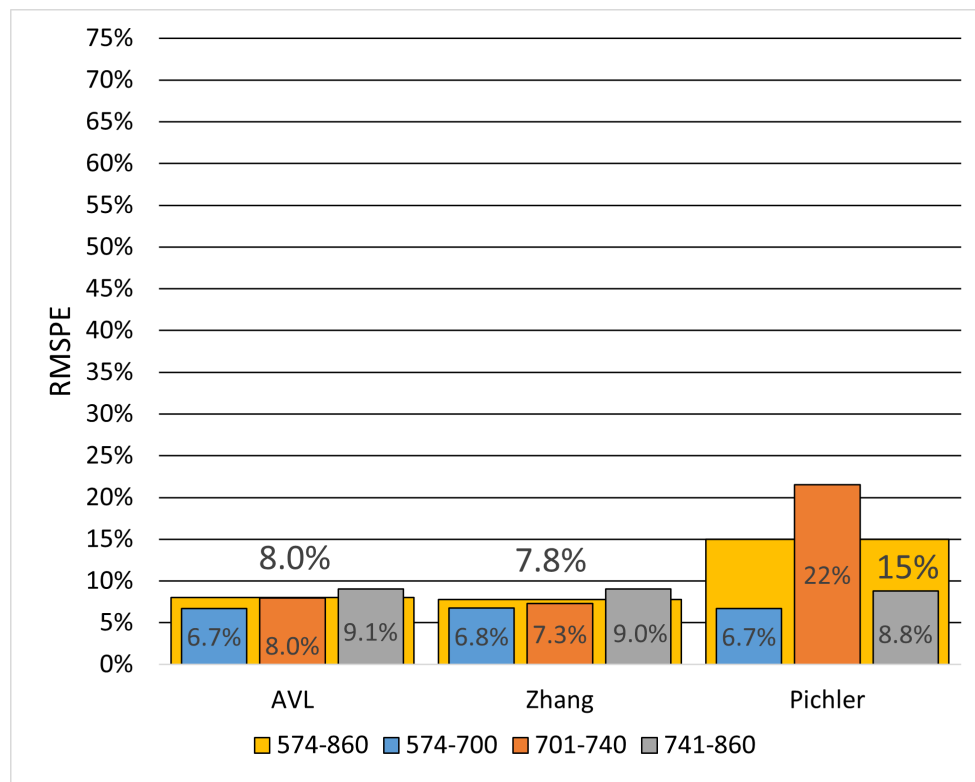


FIGURA 4.10: Diferencias absolutas entre las áreas bajo las curvas de presión de los MCCs cinéticos y la curva de presión experimental

En MET-11 la etapa de ignición no presentó el mayor error de las tres etapas en dos de los tres MCC, bajo el criterio RMSPE, en comparación con el caso MET-7.36. Lo anterior se podría deber a que los MCC de AVL [64] y Zhang [67], tienen tan poco error en todo el proceso, que los errores debido a las condiciones de frontera, es decir, en las etapas de compresión y expansión, se vuelven más relevantes que los errores debido a los MCC, aunque no con una diferencia considerable; como se puede ver en los RMSPE de las etapas de expansión e ignición de los MCC de [64] (9.1 % y 8.0 % respectivamente) y [67] (9.0 % y 7.3 % respectivamente).

El MCC de Zhang [67] fue el que permitió que los resultados numéricos de presión tuvieran menor error (RMSPE de 7.8 %), en todo el proceso, en comparación con los datos experimentales; aunque es de mencionar que el MCC de AVL [64] tuvo un desempeño parecido, con un RMSPE de 8.0 %. Es posible que, debido a que los MCC de Zhang [67] y AVL [64] son detallados y consideran un número de especies similar, en algunos casos, con condiciones de presión y temperatura diferentes, derivado de la variación de la RC, un MCC se pueda desempeñar ligeramente mejor que el otro. En el caso de MET-7.36, el desempeño de AVL [64] fue considerablemente mejor que el de Zhang [67]. Es posible que algunos MCC provoquen un error considerablemente grande bajo ciertas condiciones de presión y temperatura, a pesar de ser detallados; debido a que, en el volumen de control, durante la ignición se pueden generar zonas con magnitudes de concentración, presión y temperatura que el MCC no considera adecuadamente para algunas reacciones, o que dichas reacciones hacen falta. Este es uno de los motivos que impulsa que los MCC, detallados o reducidos, se sigan investigando y desarrollando; como los MCC detallados San Diego [59] y AramcoMech [72], los cuales tienen versiones en diferentes años.

En los casos MET-7.36 y MET-11 se tuvieron RMSPE diferentes por MCC; entonces, para definir el MCC que se desempeñó mejor en cierto combustible, es decir, que consiguió menor error con respecto a los datos experimentales, se realizó un promedio de los RMSPE en cada MCC. El resultado fue que el MCC de AVL [64] tuvo el mejor desempeño de simulación de metanol con un RMSPE promedio de

8.2%.

4.1.2.3 EMISIONES

En la Figura 4.11 se pueden ver las emisiones de CO y CO_2 , obtenidas experimentalmente y numéricamente mediante tres MCC.

Se puede observar que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO con rango 0.00-0.02, en comparación con el dato experimental, que es menor a 0.01. También se puede ver que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO_2 con rango 0.18-0.20, valores mayores que el dato experimental de 0.13.

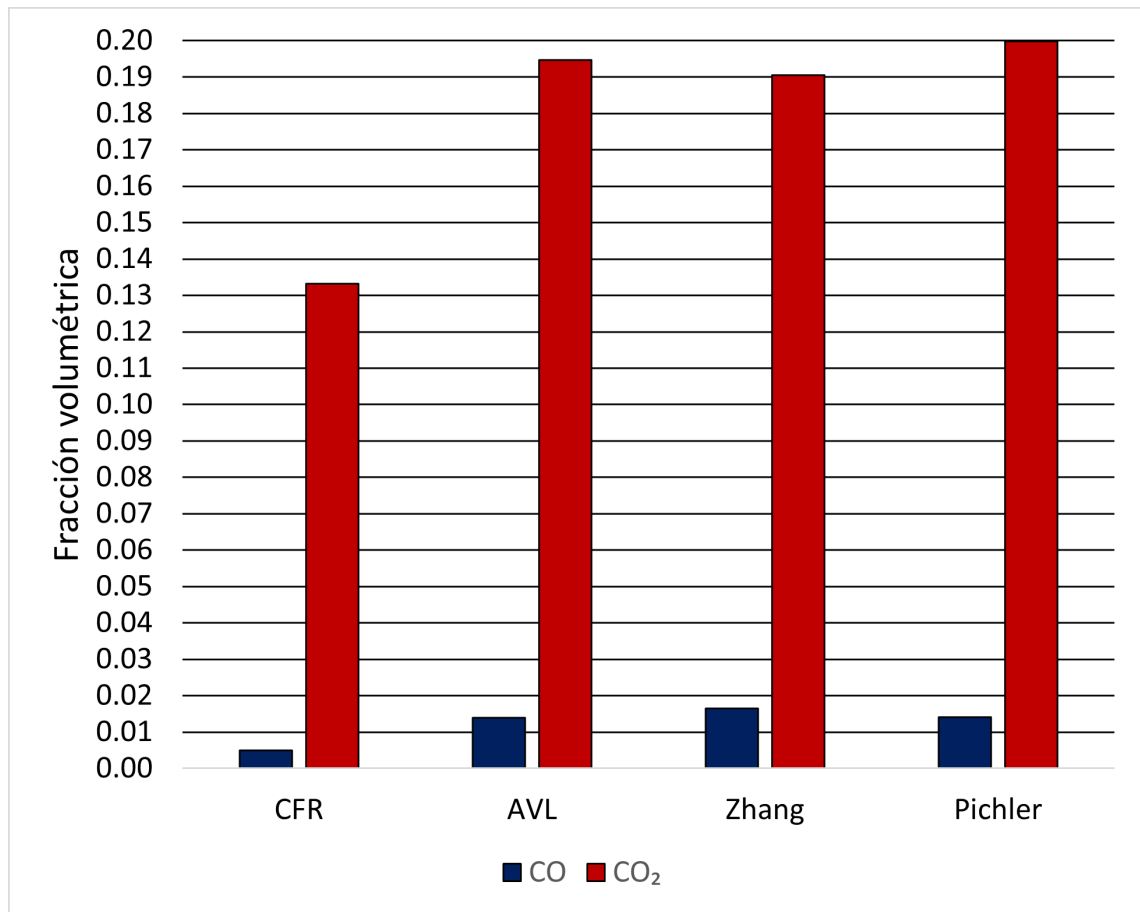


FIGURA 4.11: Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica

Los MCC que se evaluaron sólo consideran emisiones de CO y CO_2 , como se puede ver en la Tabla 3.9. Entonces, al no considerar emisiones de NO_x , COV y HC, es posible que no se calculen de forma precisa las emisiones de CO y CO_2 , como se explicó en el caso MET-7.36.

4.1.2.4 TIEMPO DE SIMULACIÓN

En la Figura 4.12 se muestran los tiempos de ejecución de las simulaciones para cada MCC.

Se puede apreciar que el MCC de Pichler [68] es el que tuvo menor tiempo de ejecución; mientras que el MCC de AVL [64] es el que presentó mayor tiempo.

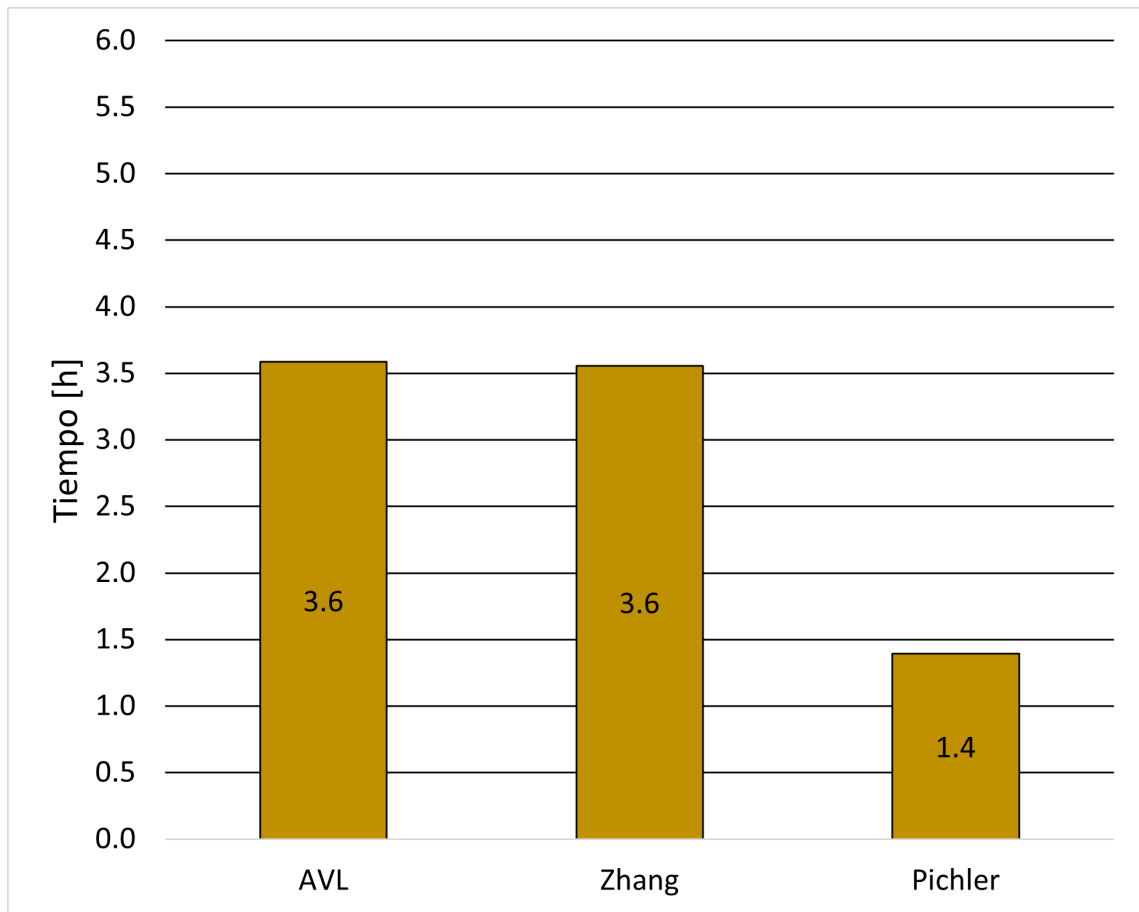


FIGURA 4.12: Tiempos de ejecución de las simulaciones

En cuanto a los tiempos de simulación, es presente la tendencia de que las simulaciones con los MCC con más especies toman más tiempo en completarse, como se explicó en el caso MET-7.36.

4.2 ETANOL

En esta sección se presentan los resultados relacionados al etanol; combustible que se usó en las pruebas experimentales en el motor CFR y del que se hicieron pruebas de simulación con tres MCC, AVL [64], Millán [70] y Olm [69].

4.2.1 RC 7.36

A continuación, se muestran la curva de presión experimental y las tres curvas de simulación bajo la RC de 7.36, las diferencias que existen entre los datos de presión experimentales y numéricos, los resultados de emisiones y los tiempos de procesamiento de las simulaciones.

4.2.1.1 CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de mostrar con detalle los gráficos, se definieron tres etapas importantes de la cámara de combustión. La primera etapa se definió como compresión, que abarca desde el CA de inicial de la corrida de compresión hasta 1° CA antes de la ignición, es decir, desde CA 574° hasta 700° . Los resultados durante la etapa de compresión se pueden ver en la Figura 4.13. La segunda etapa se definió como ignición, que abarca desde el CA donde ocurre el encendido de la chispa hasta 20° CA después del PMS, cuando se asegura se consumió el combustible, es decir, desde CA 701° hasta 740° . Los resultados de la etapa antes mencionada se pueden ver en la Figura 4.14. La última etapa se definió como expansión, que abarca desde 21° CA después del PMS hasta el CA final de la corrida de expansión, es decir, desde CA 741° hasta 860° . Los resultados durante esta etapa se pueden ver en la Figura 4.15.

En la Figura 4.13 se puede observar que las curvas de presión obtenidas por simulación numérica son iguales, independientemente del MCC. También se puede ver que las presiones de simulación se empiezan a elevar con respecto a la curva experimental a partir del CA 670° .

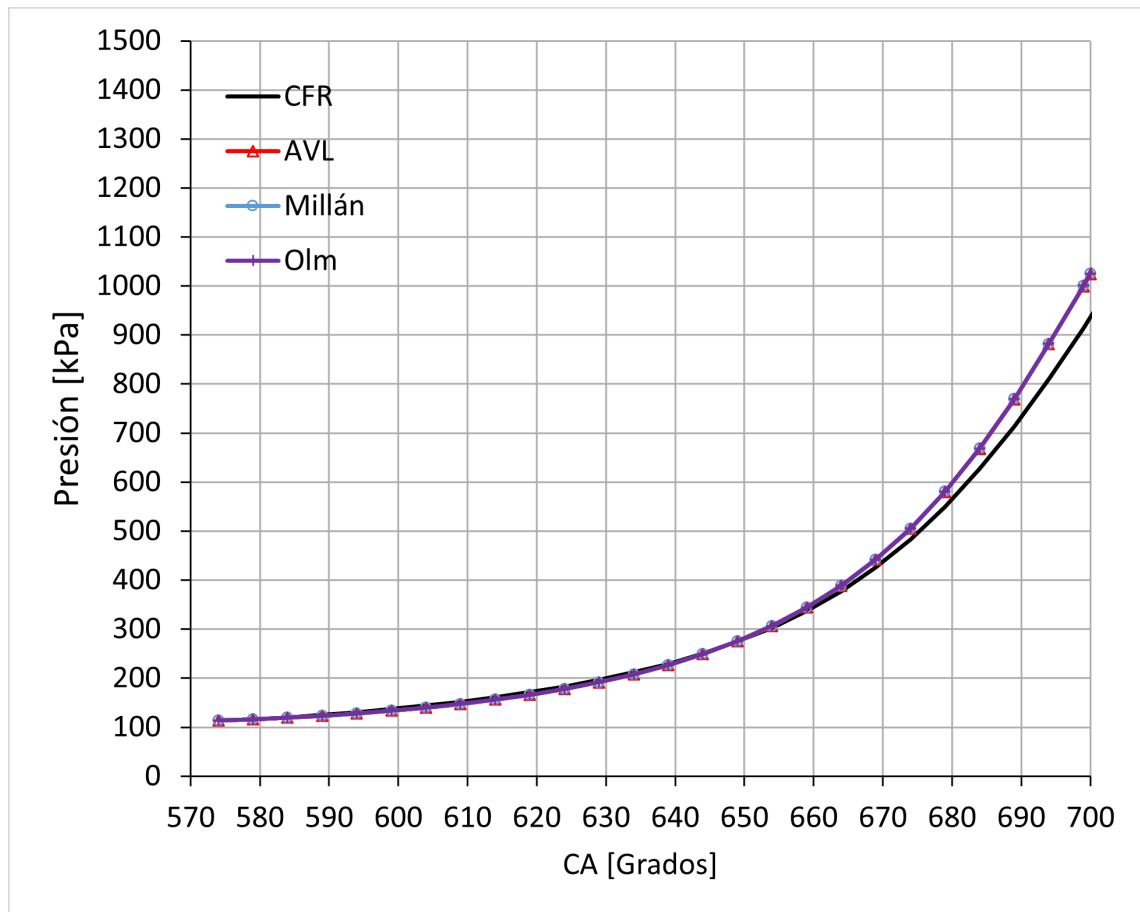


FIGURA 4.13: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 7.36 durante la etapa de compresión

En la etapa de compresión las presiones numéricas de los MCC son iguales debido a que no ocurren cambios significativos en la producción y el consumo de las especies químicas porque no se provoca la ignición en este intervalo de tiempo. Las diferencias entre los resultados numéricos y los experimentales se podrían deber a las condiciones de frontera que se están suponiendo, como se explicó en el caso de MET-7.36.

En la Figura 4.14 se observa que las curvas de presión de simulación comienzan a tener cambios entre sí, empezando por la curva del MCC de Olm [69] en CA 710°. También se puede notar que los máximos de presión de las tres curvas de simulación son mayores al de la curva de presión experimental, alcanzando los máximos de

presión en diferentes CA.

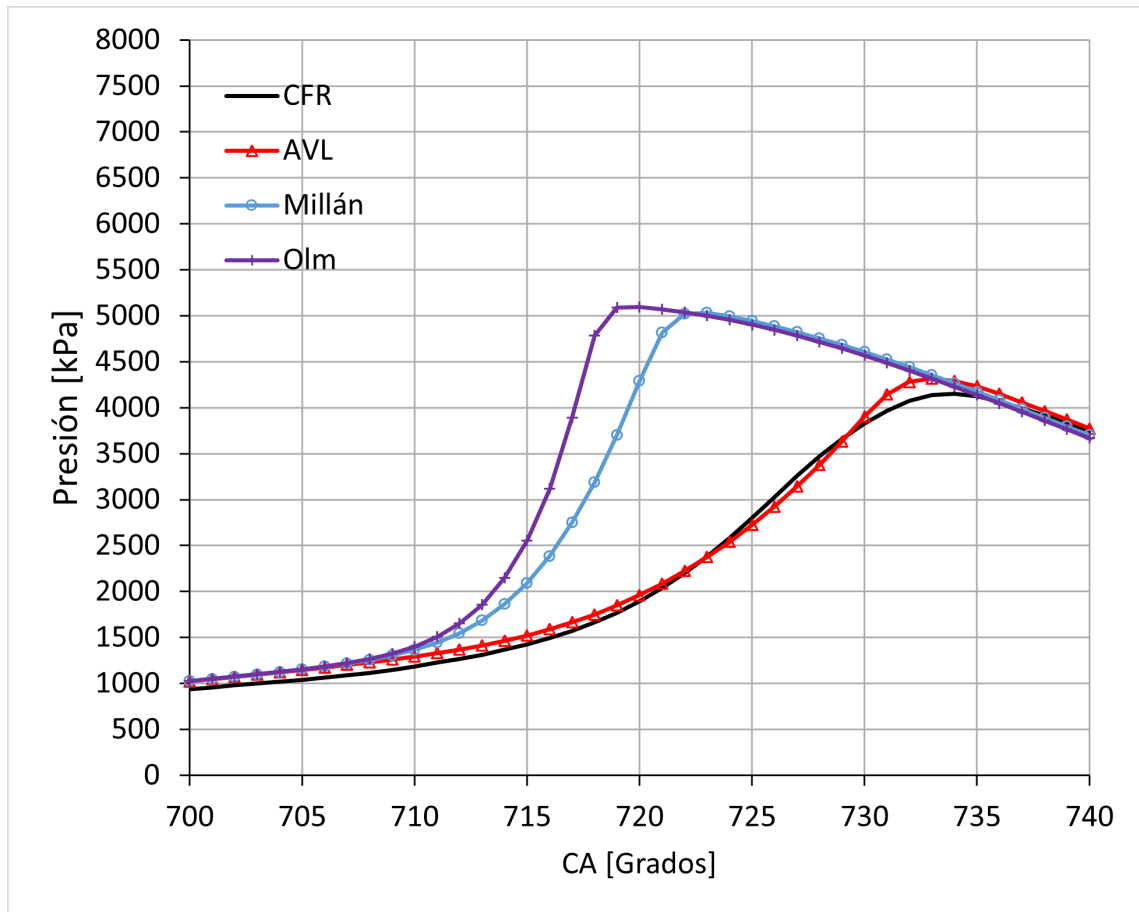


FIGURA 4.14: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 7.36 durante la etapa de ignición

Las curvas de presión de simulación de cada MCC tuvieron diferencias entre sí, debido a que en este intervalo de tiempo ocurre la ignición en CA 702°, y los MCC AVL [64], Millán [70] y Olm [69] consideran diferentes especies y reacciones cada uno, además de la cantidad de especies y reacciones, las cuales se pueden ver en la Tabla 3.9, como se explicó en el caso de MET-7.36.

En la Figura 4.15 se puede ver que los datos de simulación tienden a tener el mismo valor de presión que los datos experimentales, conforme se alcanza un CA mayor.

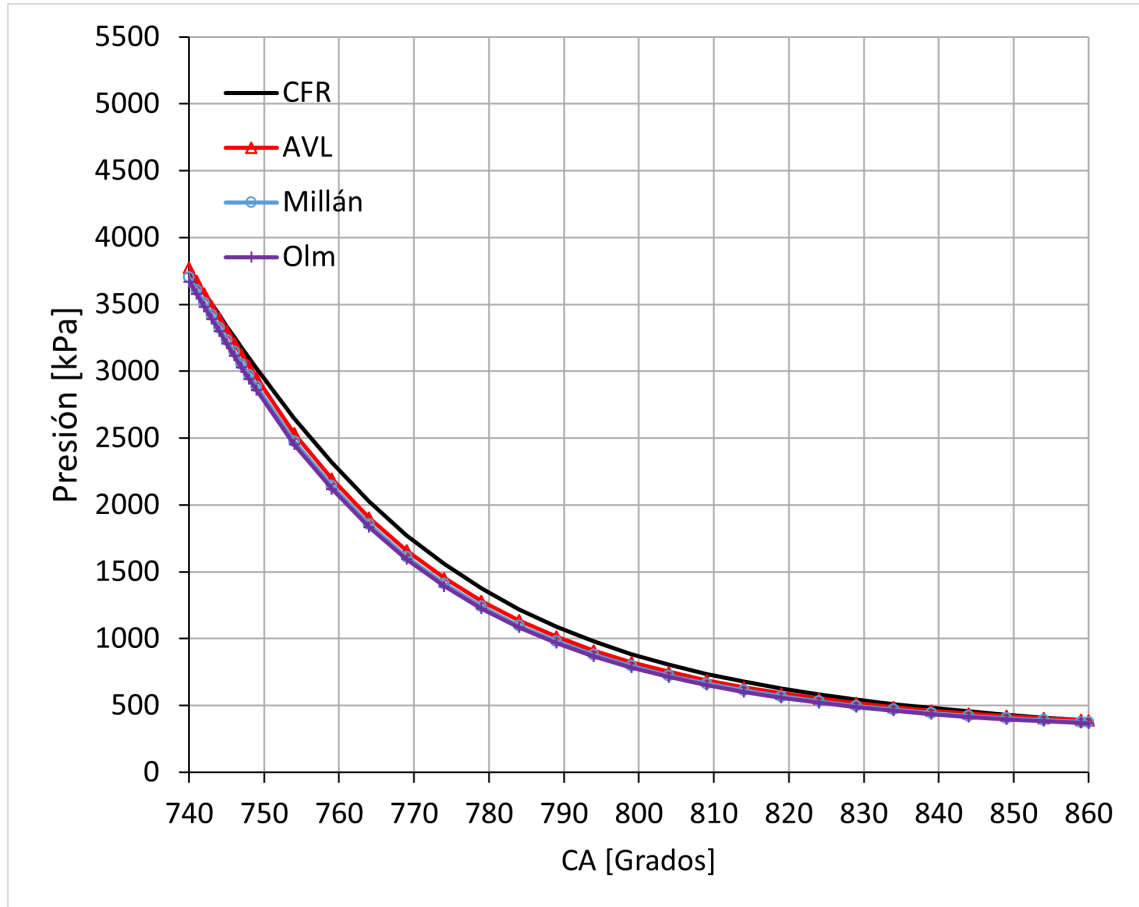


FIGURA 4.15: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 7.36 durante la etapa de expansión

En esta etapa el combustible se ha consumido casi por completo, por lo que no existe liberación de energía considerable proveniente de las reacciones exotérmicas; entonces, debido a que la temperatura y la presión del volumen de control dependen en mayor medida de la magnitud del volumen en cada CA y las condiciones de frontera de temperatura en las paredes, las curvas de presión de simulación con diferentes MCC se acercan cada vez más a la curva de presión experimental conforme pasa el tiempo, como se explicó en el caso de MET-7.36.

A continuación, en la Tabla 4.3 se muestran coordenadas importantes de las curvas anteriormente expuestas. El punto de aceleración de la reacción se refiere al primer punto de la curva, posterior a la ignición en CA 701°, en el que la diferencia porcentual entre la pendiente actual y la pendiente de 1° antes es igual o mayor a 10 %. El punto máximo indica la máxima presión alcanzada; mientras que P en CA 860° indica la presión en el final de la corrida de expansión.

Se puede destacar que el MCC de Millán [70] fue el que presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 3.4 %, con respecto a la presión del punto de aceleración de reacción de los datos experimentales. El MCC de AVL [64] fue el que tuvo la menor diferencia porcentual absoluta, de 3.9 %, con respecto a la presión del punto máximo de los datos experimentales. También se encontró que el MCC de AVL [64] presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 0.0 %, con respecto a la presión al final de la corrida de expansión de los datos experimentales.

Curva	Punto de aceleración de la reacción (CA, P) [Grados, kPa]	Punto máximo (CA, P) [kPa]	P en CA 860° [kPa]
CFR	(707, 1088)	(734, 4154)	390
AVL	(711, 1329)	(733, 4317)	390
Millán	(704, 1125)	(723, 5031)	374
Olm	(704, 1127)	(720, 5095)	367

TABLA 4.3: Puntos importantes de las curvas de presión

Los parámetros anteriormente expuestos representan una forma rápida de cuantificar qué tanto se acelera el avance de la presión en la cámara de combustión por cada simulación numérica usando cierto MCC, respecto a los datos de presión experimentales, y por lo tanto ayudan a identificar qué MCC permite tener resultados numéricos más parecidos a los datos experimentales. Más adelante se usó el criterio RMSPE para calcular el error promedio entre los datos de presión numéricos y experimentales para diferentes etapas del proceso, con el objetivo de analizar de forma más completa los resultados numéricos.

4.2.1.2 DIFERENCIAS EN LAS CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de evaluar las diferencias que existen entre la curva de presión experimental y las presiones calculadas numéricamente con cada MCC, se calculó el RMSPE de los resultados numéricos con respecto a los datos experimentales. Los RMSPE se calcularon para cada etapa del proceso, compresión (574° - 700°), ignición (701° - 740°), expansión (741° - 860°), y para el proceso completo (574° - 860°). En la Figura 4.16 se pueden ver los RMSPE por cada MCC y etapa del proceso.

Se puede destacar que el MCC de AVL [64] presentó el menor RMSPE en las etapas de compresión, ignición, expansión y el proceso completo. Es de mencionar que los RMSPE en la etapa de ignición son los que tienen mayor magnitud en contraste con las otras dos etapas; 6.2 %, 55 % y 74 % en los MCC de AVL [64], Millán [70] y Olm [69] respectivamente.

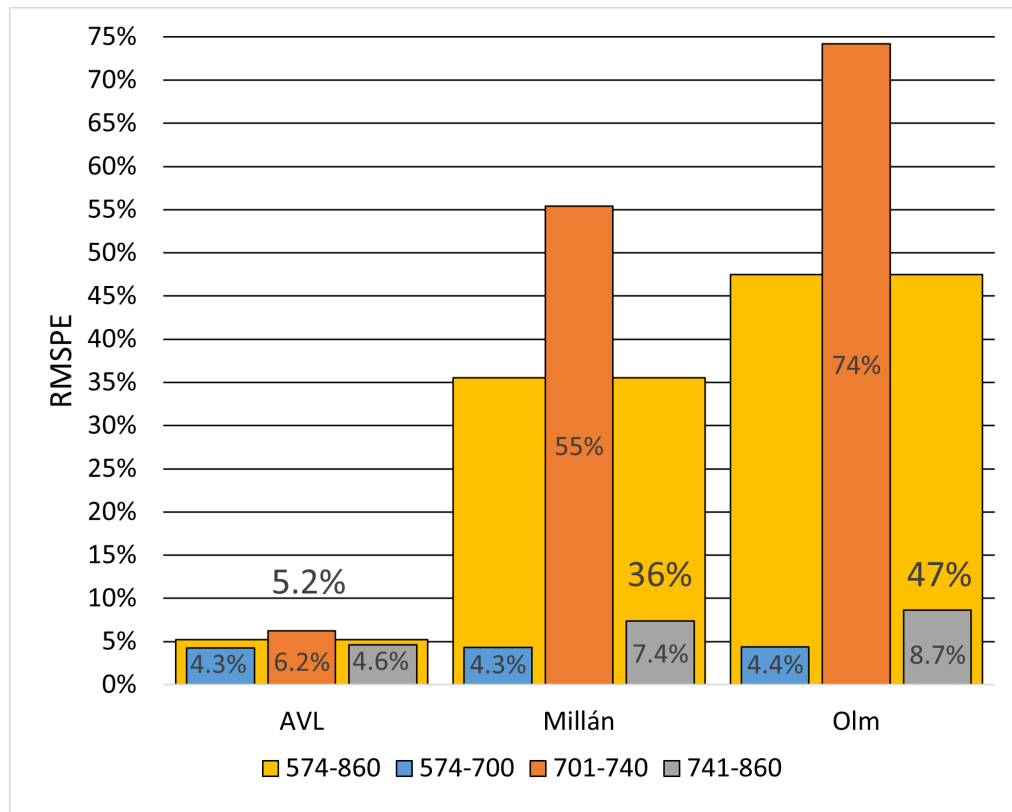


FIGURA 4.16: Diferencias absolutas entre las áreas bajo las curvas de presión de los MCCs cinéticos y la curva de presión experimental

La etapa de ignición es la que presentó mayor error, bajo el criterio RMSPE. Esta tendencia coincide con la explicada en el caso MET-7.36. El MCC de AVL [64] fue el que permitió que los resultados numéricos de presión tuvieran menor error, en todo el proceso, en comparación con los datos experimentales, posiblemente debido a que es de tipo detallado y que tiene mayor cantidad de especies consideradas en comparación con los otros dos MCC, como se expuso en el caso MET-7.36.

4.2.1.3 EMISIONES

En la Figura 4.17 se pueden ver las emisiones de CO y CO_2 , obtenidas experimentalmente y numéricamente mediante tres MCC de combustión.

Se puede observar que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas

de CO considerablemente menores a la fracción volumétrica experimental de 0.01. También se puede ver que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO_2 con rango 0.18-0.20, valores mayores que el dato experimental de 0.14.

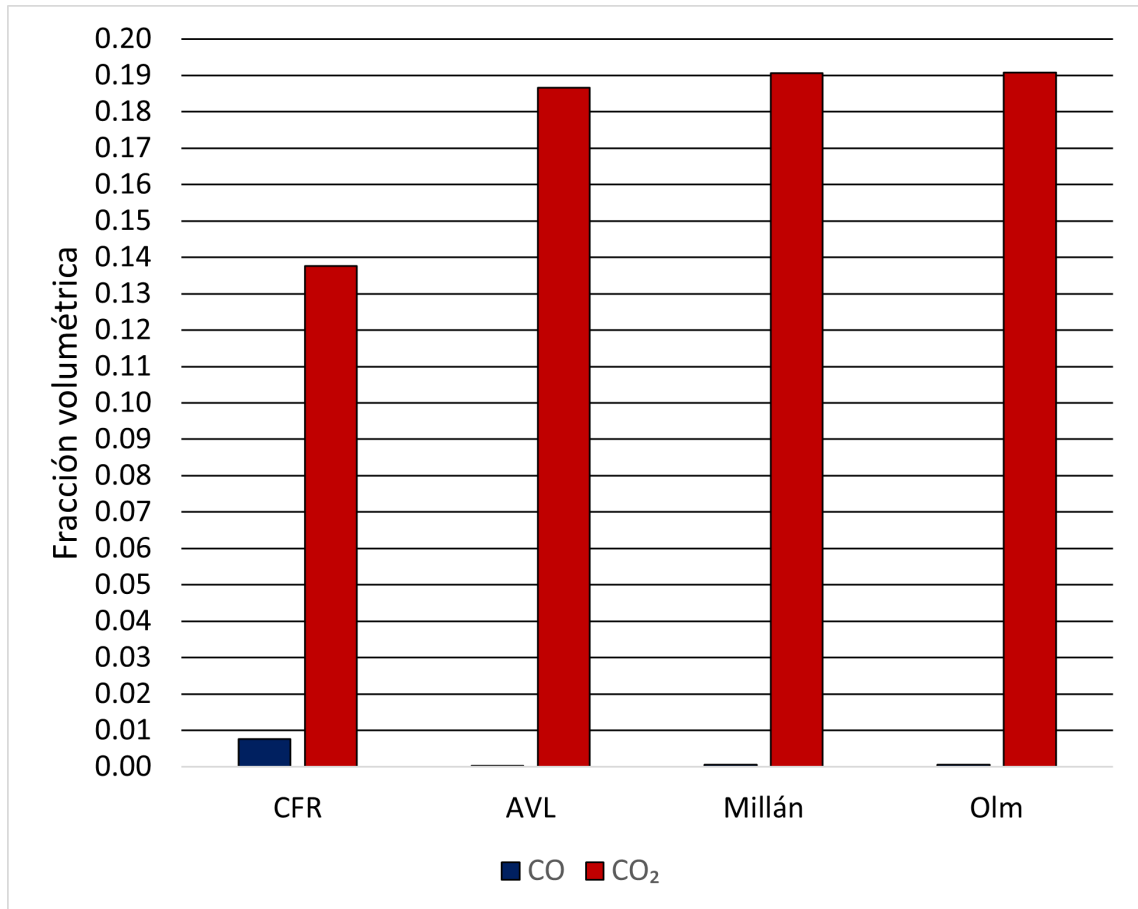


FIGURA 4.17: Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica

Los MCC que se evaluaron sólo consideran emisiones de CO y CO_2 , como se puede ver en la Tabla 3.9. Entonces, al no considerar emisiones de NO_x , COV y HC, es posible que no se calculen de forma precisa las emisiones de CO y CO_2 , como se explicó en el caso MET-7.36.

4.2.1.4 TIEMPO DE SIMULACIÓN

En la Figura 4.18 se muestran los tiempos de ejecución de las simulaciones para cada MCC.

Se puede apreciar que el MCC de Millán [70] es el que tuvo menor tiempo de ejecución; mientras que el MCC de Olm [69] es el que presentó mayor tiempo.

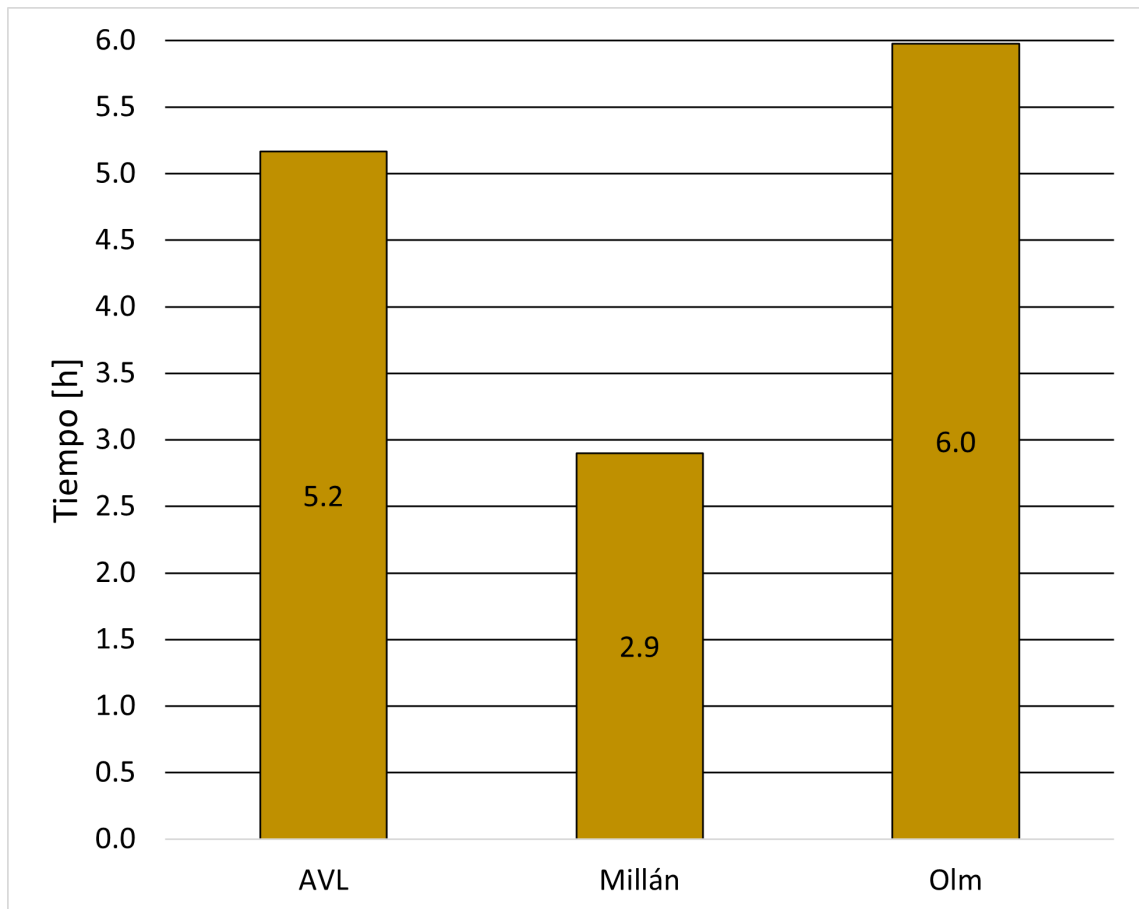


FIGURA 4.18: Tiempos de ejecución de las simulaciones

En cuanto a los tiempos de simulación, es presente la tendencia de que las simulaciones con los MCCs cinéticos de combustión con más especies toman más tiempo en completarse, como se explicó en el caso MET-7.36.

4.2.2 RC 11

A continuación, se muestran la curva de presión experimental y las tres curvas de simulación bajo la RC de 11, las diferencias que existen entre los datos de presión experimentales y numéricos, los resultados de emisiones y los tiempos de procesamiento de las simulaciones.

4.2.2.1 CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de mostrar con detalle los gráficos, se definieron tres etapas importantes de la cámara de combustión. La primera etapa se definió como compresión, que abarca desde el CA de inicial de la corrida de compresión hasta 1° CA antes de la ignición, es decir, desde CA 574° hasta 700° . Los resultados durante la etapa de compresión se pueden ver en la Figura 4.19. La segunda etapa se definió como ignición, que abarca desde el CA donde ocurre el encendido de la chispa hasta 20° CA después del PMS, cuando se asegura se consumió el combustible, es decir, desde CA 701° hasta 740° . Los resultados de la etapa antes mencionada se pueden ver en la Figura 4.20. La última etapa se definió como expansión, que abarca desde 21° CA después del PMS hasta el CA final de la corrida de expansión, es decir, desde CA 741° hasta 860° . Los resultados durante esta etapa se pueden ver en la Figura 4.21.

En la Figura 4.19 se puede observar que las curvas de presión obtenidas por simulación numérica son iguales, independientemente del MCC. También se puede ver que las presiones de simulación se encuentran ligeramente abajo de la curva de presión experimental entre CA 630° y 660° .

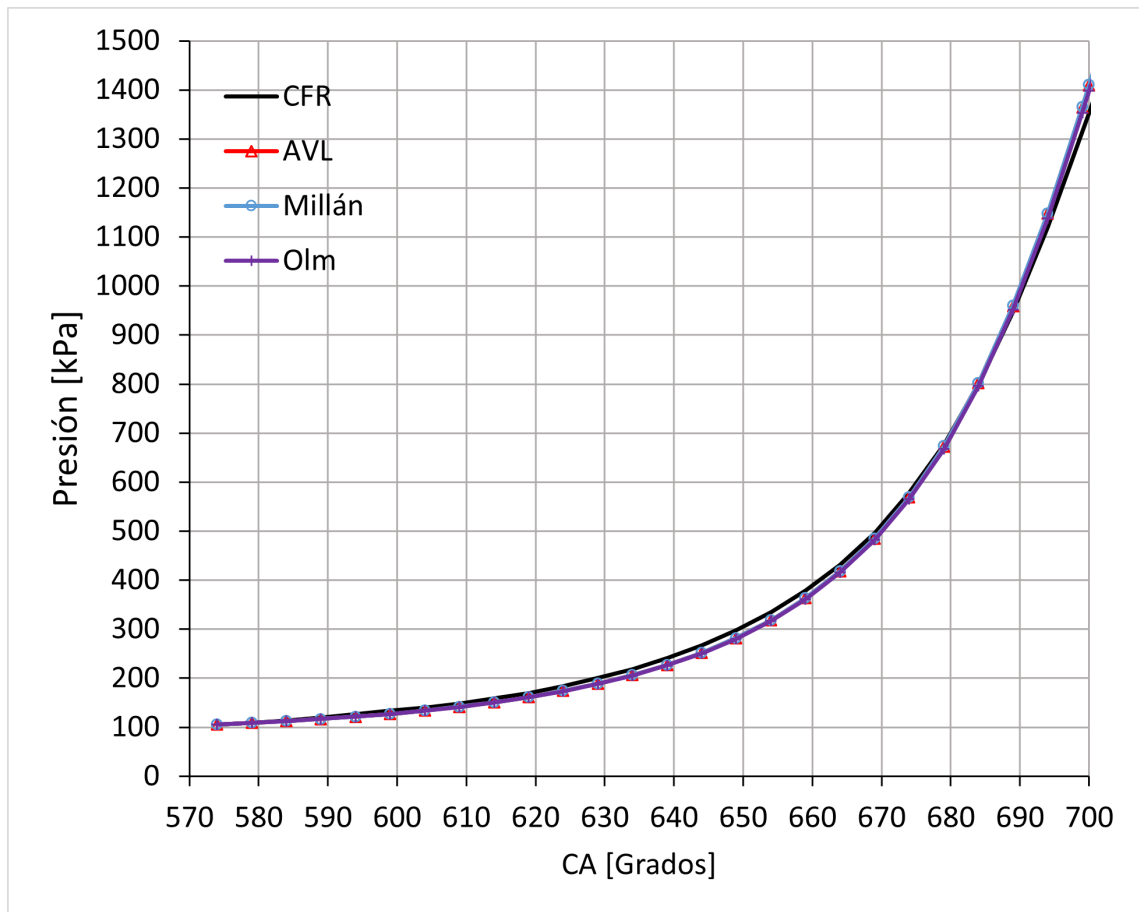


FIGURA 4.19: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 11 durante la etapa de compresión

En la etapa de compresión las presiones numéricas de los MCC son iguales debido a que no ocurren cambios significativos en la producción y el consumo de las especies químicas porque no se provoca la ignición en este intervalo de tiempo. Las diferencias entre los resultados numéricos y los experimentales se podrían deber a las condiciones de frontera que se están suponiendo, como se explicó en el caso de MET-7.36.

En la Figura 4.20 se observa que las curvas de presión de simulación comienzan a tener cambios entre sí, empezando por la curva del MCC de Millán [70] en CA 712°. También se puede notar que los máximos de presión de las tres curvas de simulación son mayores al de la curva de presión experimental, alcanzando los máximos de presión en diferentes CA.

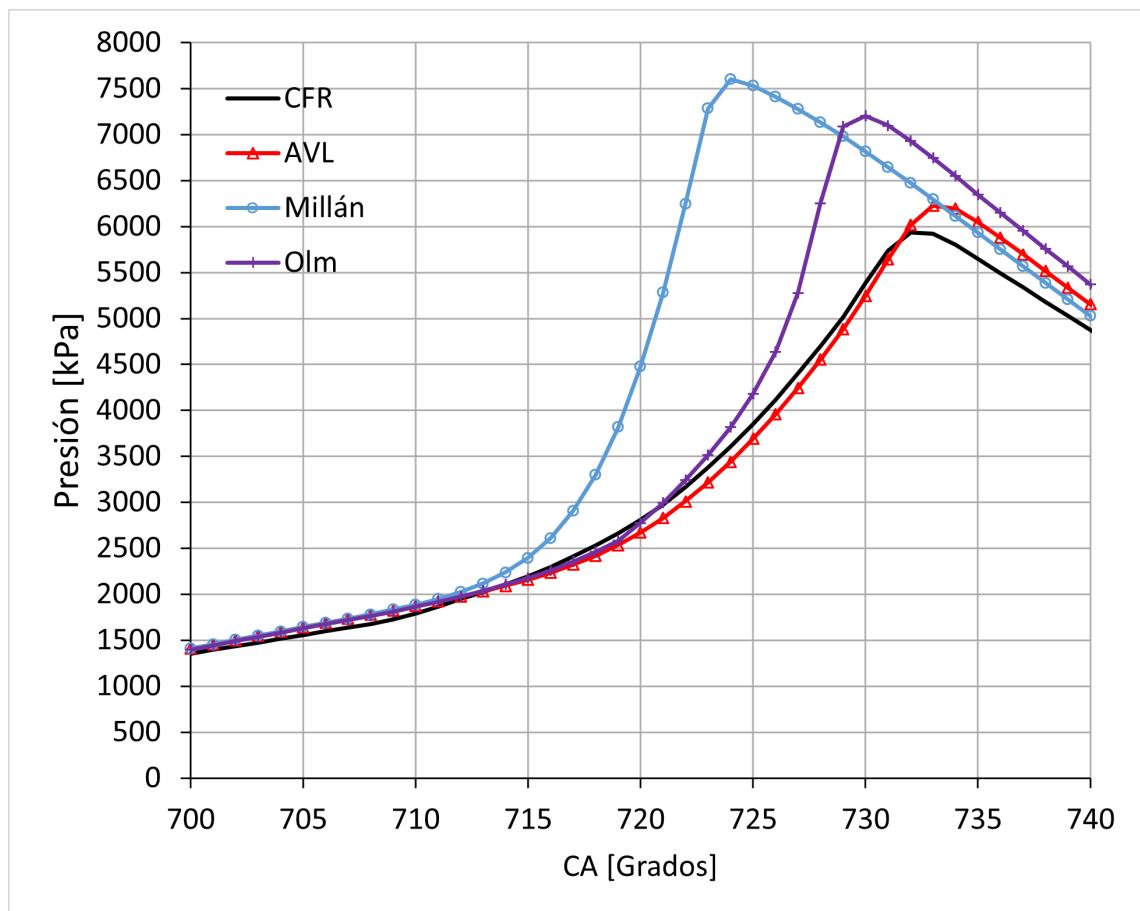


FIGURA 4.20: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 11 durante la etapa de ignición

Las curvas de presión de simulación de cada MCC tuvieron diferencias entre sí, debido a que en este intervalo de tiempo ocurre la ignición en CA 705°, y los MCC AVL [64], Millán [70] y Olm [69] consideran diferentes especies y reacciones cada uno, además de la cantidad de especies y reacciones, las cuales se pueden ver en la Tabla 3.9, como se explicó en el caso de MET-7.36.

En la Figura 4.21 se puede ver que los datos de simulación tienden a tener el mismo valor de presión que los datos experimentales, conforme se alcanza un CA mayor.

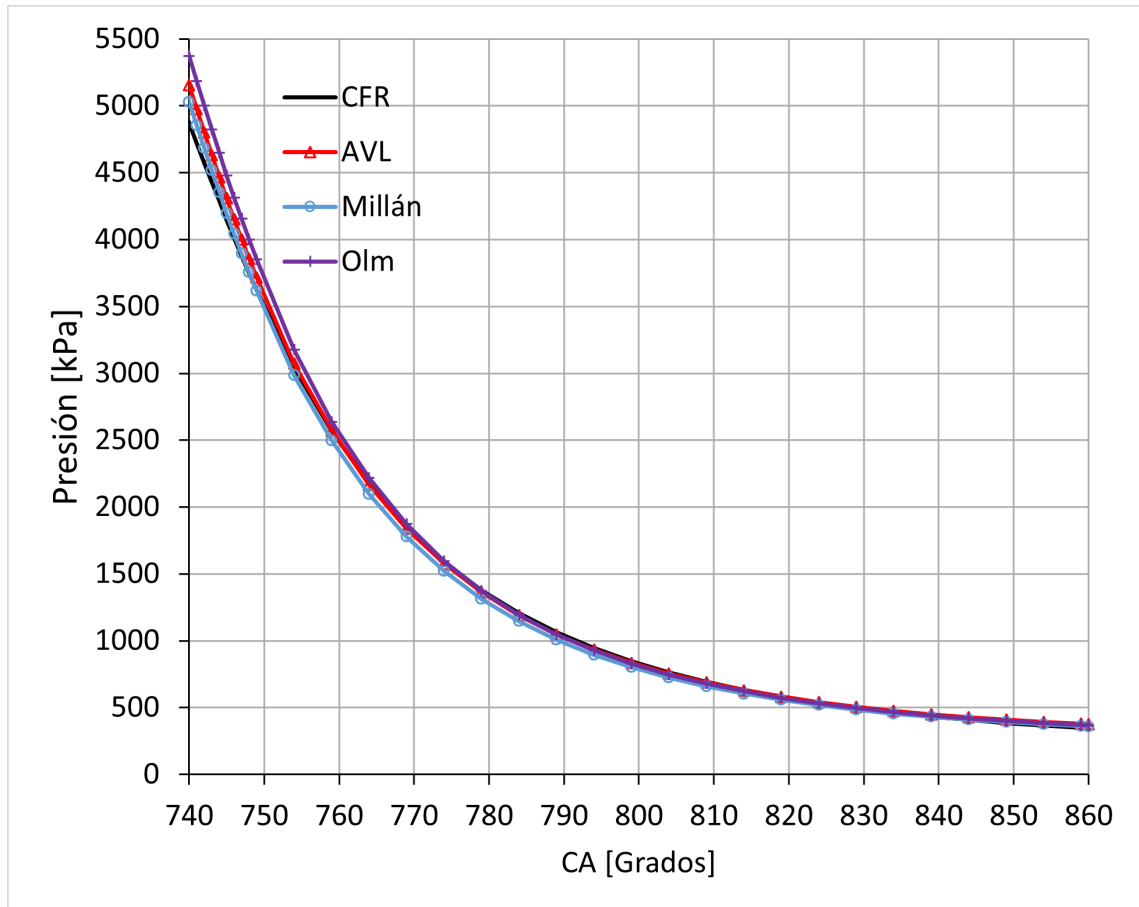


FIGURA 4.21: Datos de presión experimentales y de simulación para combustión de etanol con RC de 11 durante la etapa de expansión

En esta etapa el combustible se ha consumido casi por completo, por lo que no existe liberación de energía considerable proveniente de las reacciones exotérmicas; entonces, debido a que la temperatura y la presión del volumen de control dependen en mayor medida de la magnitud del volumen en cada CA y las condiciones de frontera de temperatura en las paredes, las curvas de presión de simulación con diferentes MCC se acercan cada vez más a la curva de presión experimental conforme pasa el tiempo, como se explicó en el caso de MET-7.36.

A continuación, en la Tabla 4.4 se muestran coordenadas importantes de las curvas anteriormente expuestas. El punto de aceleración de la reacción se refiere al primer punto de la curva, posterior a la ignición en CA 701°, en el que la diferencia porcentual entre la pendiente actual y la pendiente de 1° antes es igual o mayor a 10 %. El punto máximo indica la máxima presión alcanzada; mientras que P en CA 860° indica la presión en el final de la corrida de expansión.

Se puede destacar que el MCC de Millán [70] fue el que presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 6.3 %, con respecto a la presión del punto de aceleración de reacción de los datos experimentales. El MCC de AVL [64] fue el que tuvo la menor diferencia porcentual absoluta, de 4.9 %, con respecto a la presión del punto máximo de los datos experimentales. También se encontró que el MCC de Millán [70] presentó la menor diferencia porcentual absoluta, de 4.1 %, con respecto a la presión al final de la corrida de expansión de los datos experimentales.

Curva	Punto de aceleración de la reacción (CA, P) [Grados, kPa]	Punto máximo (CA, P) [kPa]	P en CA 860° [kPa]
CFR	(709, 1724)	(732, 5933)	345
AVL	(715, 2158)	(733, 6224)	377
Millán	(709, 1833)	(724, 7603)	359
Olm	(710, 1865)	(730, 7203)	366

TABLA 4.4: Puntos importantes de las curvas de presión

Los parámetros anteriormente expuestos representan una forma rápida de cuantificar qué tanto se acelera el avance de la presión en la cámara de combustión por cada simulación numérica usando cierto MCC, respecto a los datos de presión experimentales, y por lo tanto ayudan a identificar qué MCC permite tener resultados numéricos más parecidos a los datos experimentales. Más adelante se usó el criterio RMSPE para calcular el error promedio entre los datos de presión numéricos y experimentales para diferentes etapas del proceso, con el objetivo de analizar de forma más completa los resultados numéricos.

4.2.2.2 DIFERENCIAS EN LAS CURVAS DE PRESIÓN

Con el objetivo de evaluar las diferencias que existen entre la curva de presión experimental y las presiones calculadas numéricamente con cada MCC, se calculó el RMSPE de los resultados numéricos con respecto a los datos experimentales. Los RMSPE se calcularon para cada etapa del proceso, compresión (574° - 700°), ignición (701° - 740°), expansión (741° - 860°), y para el proceso completo (574° - 860°). En la Figura 4.22 se pueden ver los RMSPE por cada MCC y etapa del proceso.

Se puede destacar que el MCC de AVL [64] presentó el menor RMSPE en las etapas de compresión e ignición. Mientras que el MCC de Millán [70] tuvo el menor RMSPE tanto para la etapa de expansión. Es de mencionar que los RMSPE en la etapa de ignición son los que tienen mayor magnitud en contraste con las otras dos etapas; 4.7%, 43% y 13% en los MCC de AVL [64], Millán [70] y Olm [69] respectivamente. El MCC de AVL [64] resultó en el menor RMSPE en el proceso completo.

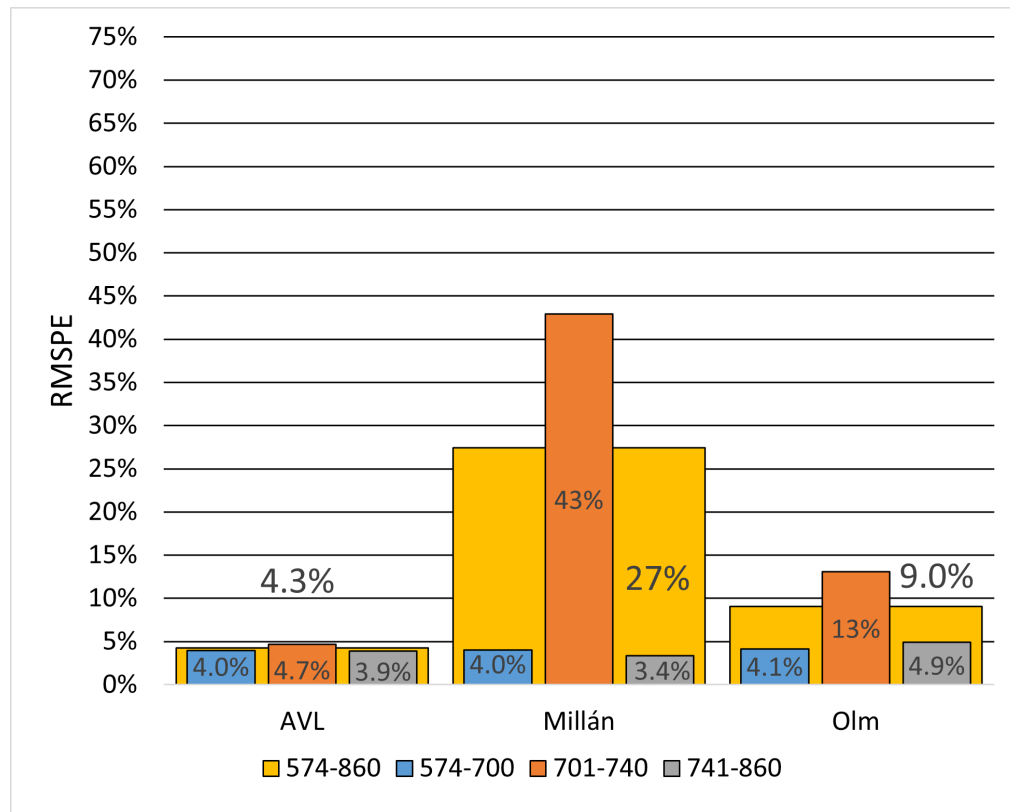


FIGURA 4.22: Diferencias absolutas entre las áreas bajo las curvas de presión de los MCCs cinéticos y la curva de presión experimental

La etapa de ignición es la que presentó mayor error, bajo el criterio RMSPE. Esta tendencia coincide con la explicada en el caso MET-7.36. El MCC de AVL [64] fue el que permitió que los resultados numéricos de presión tuvieran menor error, en todo el proceso, en comparación con los datos experimentales, posiblemente debido a que es de tipo detallado y que tiene mayor cantidad de especies consideradas en comparación con los otros dos MCC, como se expuso en el caso MET-7.36.

En los casos ET-7.36 y ET-11 se tuvieron RMSPE diferentes por MCC; entonces, para definir el MCC que se desempeñó mejor en cierto combustible, es decir, que consiguió menor error con respecto a los datos experimentales, se realizó un promedio de los RMSPE en cada MCC. El resultado fue que el MCC de AVL [64] tuvo el mejor desempeño de simulación de metanol con un RMSPE promedio de 4.8%.

4.2.2.3 EMISIONES

En la Figura 4.23 se pueden ver las emisiones de CO y CO_2 , obtenidas experimentalmente y numéricamente mediante tres MCC de combustión.

Se puede observar que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO con rango 0.00-0.02, en comparación con el dato experimental, que es menor a 0.01. También se puede ver que los tres MCC resultaron en fracciones volumétricas de CO_2 con rango 0.18-0.20, valores mayores que el dato experimental de 0.14.

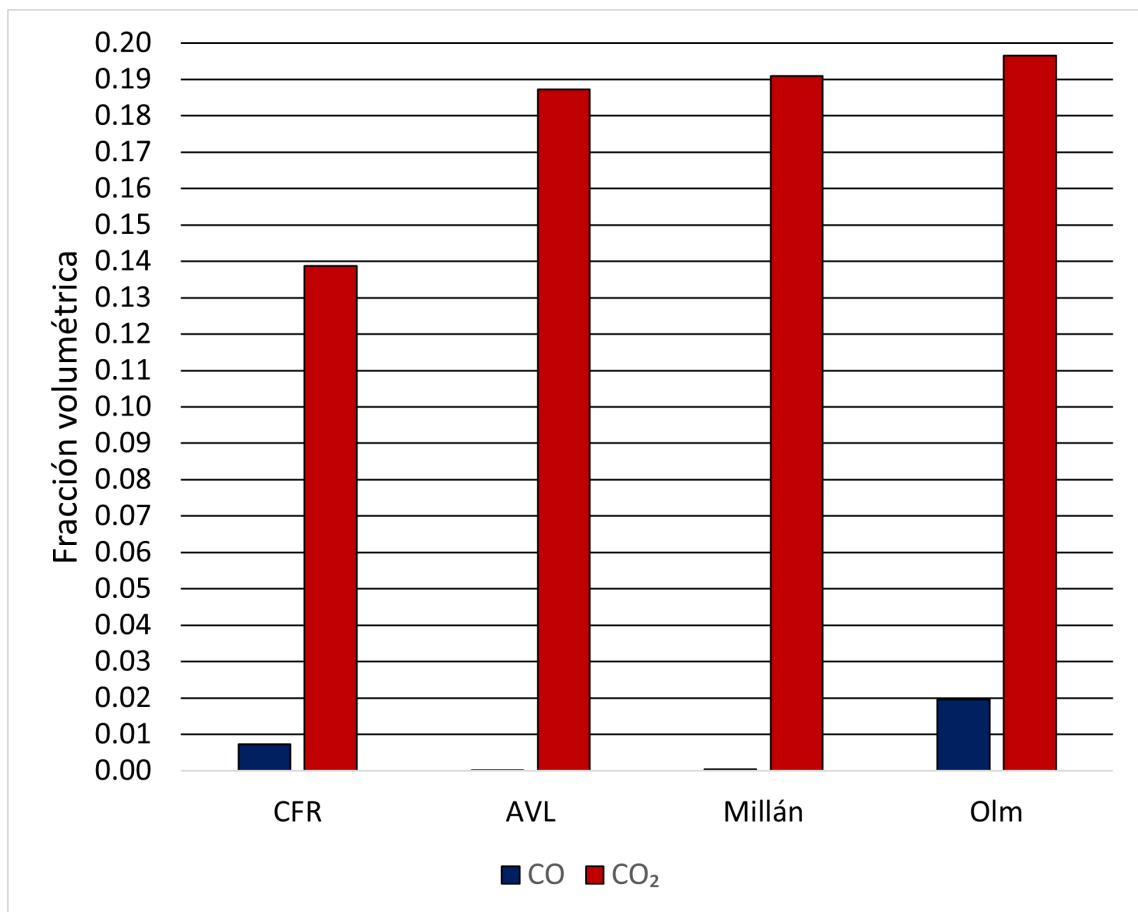


FIGURA 4.23: Emisiones de CO y CO_2 obtenidas de forma experimental y numérica

Los MCC que se evaluaron sólo consideran emisiones de CO y CO_2 , como se puede ver en la Tabla 3.9. Entonces, al no considerar emisiones de NO_x , COV y HC, es posible que no se calculen de forma precisa las emisiones de CO y CO_2 , como se

explicó en el caso MET-7.36.

4.2.2.4 TIEMPO DE SIMULACIÓN

En la Figura 4.24 se muestran los tiempos de ejecución de las simulaciones para cada MCC.

Se puede apreciar que el MCC de Millán [70] es el que tuvo menor tiempo de ejecución; mientras que el MCC de Olm [69] es el que presentó mayor tiempo.

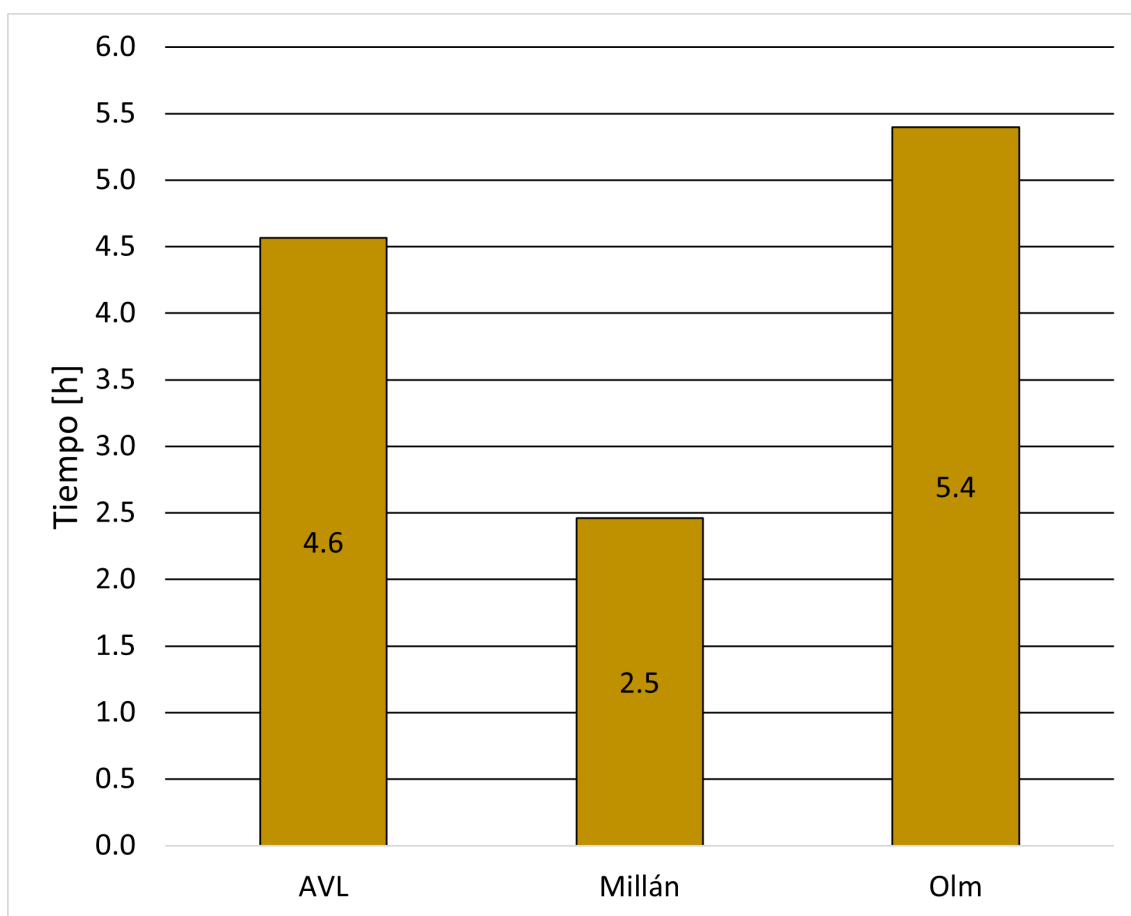


FIGURA 4.24: Tiempos de ejecución de las simulaciones

En cuanto a los tiempos de simulación, es presente la tendencia de que las simulaciones con los MCC con más especies toman más tiempo en completarse, como se explicó en el caso MET-7.36.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

En el presente capítulo se exponen dos secciones; la primera son las conclusiones con base en el análisis de resultados que se expuso anteriormente, indicando los MCC que, integrados a un software CFD y mediante resultados numéricos, pudieron aproximar con mayor precisión la presión experimental en la cámara de combustión, también se muestran las conclusiones relacionadas a las emisiones de CO y CO_2 , y los tiempos de simulación; la segunda sección son los trabajos futuros que, se podrían desarrollar con base en áreas de oportunidad de esta investigación, y los que permitirían profundizar el área de estudio de la aplicación de MCC en simulaciones CFD de MEP.

5.1 CONCLUSIONES

Con base en la metodología presentada, fue posible predecir con precisión el comportamiento térmico del proceso de liberación de energía en un MEP, mediante el análisis de resultados numéricos de presión usando diferentes MCC, para los combustibles metanol y etanol, bajo las RC de 7.36 y 11.

Con base en la metodología presentada, se encontraron áreas de oportunidad en la predicción de formación de emisiones contaminantes, mediante el análisis de resul-

tados numéricos de presión usando diferentes MCC, para los combustibles metanol y etanol, bajo las RC de 7.36 y 11.

Con base en la metodología presentada, se pudieron establecer estrategias de mejora en los siguientes parámetros de simulación: los factores de subrelajación de las ecuaciones de conservación, el número máximo de iteraciones por paso temporal, el número máximo de iteraciones del solucionador de ecuaciones diferenciales ordinarias y los parámetros de ignición.

El MCC de AVL [64] es el que mejor ha podido aproximar, en promedio, el comportamiento de presión de la cámara de combustión a los datos experimentales, para el proceso de combustión, tanto de metanol como de etanol, en un MEP bajo las relaciones de compresión de 7.36 y 11; tomando en cuenta las etapas combinadas de compresión (CA 574°-700°), ignición (CA 701°-740°) y expansión (CA 701°-860°), es decir, el tiempo en que las válvulas de admisión y escape se encuentran cerradas (CA 574°-860°); con base en el criterio RMSPE de las curvas de presión de simulación en comparación con la curva experimental.

La etapa de ignición (CA 701°-740°) es la que presenta mayor error, en promedio, al comparar el comportamiento de presión de la cámara de combustión con los datos experimentales, para el proceso de combustión de metanol y etanol en un MEP bajo las relaciones de compresión de 7.36 y 11; con base en el criterio RMSPE de las curvas de presión de simulación en comparación con la curva experimental.

Los resultados de simulación numérica usando MCC reportan mayor concentración de CO_2 al final de la etapa de expansión en los procesos de combustión de metanol y etanol en un MEP bajo RC de 7.36 y 11, en un rango de 0.18 a 0.20 de fracción másica, en comparación con los resultados experimentales, que reportan concentraciones en un rango de 0.13 a 0.14 de fracción másica.

Los resultados de simulación numérica usando MCC no reportan una tendencia de concentración de CO al final de la etapa de expansión en los procesos de combustión de metanol y etanol en un MEP bajo RC de 7.36 y 11, teniendo un rango

de 0.00 a 0.02 de fracción másica, en comparación con los resultados experimentales, que reportan concentraciones en un rango de 0.00 a 0.01 de fracción másica.

Los tiempos de simulación usando MCC reducidos fueron menores en comparación a los tiempos de simulación usando MCC detallados, en los procesos de combustión de metanol y etanol en un MEP bajo RC de 7.36 y 11, teniendo un rango de 1.4h a 2.9h en comparación con 3.6h a 6.0h respectivamente.

5.2 TRABAJOS FUTUROS

Integrar los MCC de alcoholes con MCC complementarios de emisiones contaminantes de NO_x , COV y HC, con el objetivo de comparar resultados numéricos, de presión y emisiones, de simulaciones CFD de combustión en MEP, con resultados experimentales.

Analizar el efecto en los errores, al cambiar las condiciones de frontera, con MCC, para la obtención de resultados numéricos, de presión y emisiones, de simulaciones CFD de combustión en MEP; y comparar dichos resultados con datos experimentales.

Analizar el efecto en los errores y los tiempos de simulación, al no usar opciones de aceleración química, con MCC, para la obtención de resultados numéricos, de presión y emisiones, de simulaciones CFD de combustión en MEP; y comparar dichos resultados con datos experimentales.

Analizar el efecto en los errores y los tiempos de simulación, al aplicar la técnica de modelado LES, con MCC, para la obtención de resultados numéricos, de presión y emisiones, de simulaciones CFD de combustión en MEP; y comparar dichos resultados con datos experimentales.

Desarrollar casos de simulación CFD de combustión de alcoholes con MCC, tomando en cuenta la variabilidad ciclo a ciclo, con el objetivo de comparar resultados

numéricos, de presión y emisiones, con resultados experimentales.

Comparar resultados numéricos, de presión y emisiones, de simulaciones CFD de combustión en MEP, con resultados experimentales, agregando MCC de butanol, bajo un rango más amplio de RC.

Comparar resultados numéricos, de presión y emisiones, de simulaciones CFD de combustión en MEP, con resultados experimentales, integrando MCC de alcoholes y gasolina, y preparando casos de simulación de mezclas.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Department of Economic United Nations and Social Affairs Sustainable Development. Transforming our world: the 2030 agenda for sustainable development, 2015.
- [2] Javier Dominguez, Carmen Lago, Ana Prades, and Pilar Cuevas. Energías renovables y modelo energético, una perspectiva desde la sostenibilidad. *Nimbus*, 25-26:43–64, 2010.
- [3] Xavier Labandeira, Pedro Linares, and Klaas Würzburg. Energías renovables y cambio climático. *Cuadernos Económicos del ICE*, 83:37–60, 2012.
- [4] William F Lamb, Thomas Wiedmann, Julia Pongratz, Robbie Andrew, and Monica Crippa. A review of trends and drivers of greenhouse gas emissions by sector from 1990 to 2018. *Environmental Research Letters*, 16(7):073005, 2021.
- [5] Lei Zhang and Qianhui Qi. A reduced mechanism for the combustion of gasoline-ethanol blend on advanced engine combustion modes. *Fuel*, 300:120951, 2021.
- [6] M. Christensen, E. J. K. Nilsson, and A. A. Konnov. A systematically updated detailed kinetic model for ch₂o and ch₃oh combustion. *Energy & Fuels*, 30(8):6709–6726, 2016.
- [7] Peter Dürre. Biobutanol: An attractive biofuel. *Biotechnology Journal*, 2(12):1525–1534, 2007.
- [8] Luc Sy Tran, Baptiste Sirjean, Pierre-Alexandre Glaude, René Fournet, and

- Frédérique Battin-Leclerc. Progress in detailed kinetic modeling of the combustion of oxygenated components of biofuels. *Energy*, 43(1):4–18, 2012.
- [9] N. Leplat, P. Dagaut, C. Togbé, and J. Vandooren. Numerical and experimental study of ethanol combustion and oxidation in laminar premixed flames and in jet-stirred reactor. *Combustion and Flame*, 158(4):705–725, 2011.
- [10] G. Black, H.J. Curran, S. Pichon, J.M. Simmie, and V. Zhukov. Bio-butanol: Combustion properties and detailed chemical kinetic model. *Combustion and Flame*, 157(2):363–373, 2010.
- [11] V. Aranda, J. M. Christensen, M. U. Alzueta, P. Glarborg, S. Gersen, Y. Gao, and P. Marshall. Experimental and kinetic modeling study of methanol ignition and oxidation at high pressure. *International Journal of Chemical Kinetics*, 45(5):283–294, 2013.
- [12] Alejandro Millán-Merino, Eduardo Fernández-Tarrazo, Mario Sánchez-Sanz, and Forman A. Williams. A multipurpose reduced mechanism for ethanol combustion. *Combustion and Flame*, 193:112–122, 2018.
- [13] Willard W. Pulkrabek. *Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine*. Always learning. Pearson Higher Education & Professional Group, 2013.
- [14] Allan T Kirkpatrick. *Internal combustion engines: applied thermosciences*. John Wiley & Sons, 2020.
- [15] Richard Stone. *Introduction to Internal Combustion Engines*. Bloomsbury Publishing, 2012.
- [16] John B Heywood. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill Education, 2018.
- [17] Eran Sher. *Handbook of air pollution from internal combustion engines: pollutant formation and control*. Academic Press, 1998.

-
- [18] Michael Evan Goodsite, Matthew Stanley Johnson, and Ole Hertel. *Air Pollution Sources, Statistics and Health Effects*. Springer, 2021.
- [19] European Environment Agency. *European union emission inventory report 1990-2020 under the UNECE Air Convention*. 2022.
- [20] Bhola R Gurjar, Luisa T Molina, and C Shekhar P Ojha. *Air pollution: health and environmental impacts*. CRC press, 2010.
- [21] Rais Akhtar and Cosimo Palagiano. Climate change and air pollution. *Switzerland: Springer International Publishing, AG*, 2018.
- [22] Rafael Luque, Carol Sze Ki Lin, Karen Wilson, and Chenyu Du. *Handbook of Biofuels Production*. Woodhead Publishing, 2016.
- [23] Alan H Scragg. *Biofuels: production, application and development*. Cabi, 2009.
- [24] David Blume, R.B. Fuller, and Michael Winks. *David Blume's Alcohol Can be a Gas!: Fueling an Ethanol Revolution for the 21st Century*. A Mother Earth news book for wiser living. International Institute for Ecological Agriculture, 2007.
- [25] W. Francis and M.C. Peters. *Fuels and Fuel Technology: A Summarized Manual*. Elsevier Science, 2013.
- [26] Heeyoung Choi, Jeehoon Han, and Jechan Lee. Renewable butanol production via catalytic routes. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 18(22), 2021.
- [27] Venkateswara Rao Surisetty, Ajay Kumar Dalai, and Janusz Kozinski. Alcohols as alternative fuels: An overview. *Applied Catalysis A: General*, 404(1):1–11, 2011.
- [28] Paolo Iodice, Amedeo Amoresano, and Giuseppe Langella. A review on the effects of ethanol/gasoline fuel blends on nox emissions in spark-ignition engines. *Biofuel Research Journal*, 8(4):1465–1480, 2021.

-
- [29] Bahar Sayin Kul and Murat Ciniviz. An evaluation based on energy and exergy analyses in si engine fueled with waste bread bioethanol-gasoline blends. *Fuel*, 286:119375, 2021.
- [30] Mortadha K. Mohammed, Hyder H. Balla, Zaid Maan H. Al-Dulaimi, Zaid S. Kareem, and Mudhaffar S. Al-Zuhairy. Effect of ethanol-gasoline blends on si engine performance and emissions. *Case Studies in Thermal Engineering*, 25:100891, 2021.
- [31] Ze Liu, Ping Sun, Yaodong Du, Xiumin Yu, Wei Dong, and Jiangdong Zhou. Improvement of combustion and emission by combined combustion of ethanol premix and gasoline direct injection in si engine. *Fuel*, 292:120403, 2021.
- [32] DY Dhande, Nazaruddin Sinaga, and Kiran B Dahe. The study of performance and emission characteristics of a spark ignition (si) engine fueled with different blends of pomegranate ethanol. *International Journal of Energy and Environmental Engineering*, 12:295–306, 2021.
- [33] A. d’Adamo, S. Breda, F. Berni, and S. Fontanesi. The potential of statistical rans to predict knock tendency: Comparison with les and experiments on a spark-ignition engine. *Applied Energy*, 249:126–142, 2019.
- [34] Muhsin M Ameen, Mohsen Mirzaeian, Federico Millo, and Sibendu Som. Numerical prediction of cyclic variability in a spark ignition engine using a parallel large eddy simulation approach. *Journal of Energy Resources Technology*, 140(5), 2018.
- [35] Ceyuan Chen, Pinaki Pal, Muhsin Ameen, Dengquan Feng, and Haiqiao Wei. Large-eddy simulation study on cycle-to-cycle variation of knocking combustion in a spark-ignition engine. *Applied Energy*, 261:114447, 2020.
- [36] Suhas Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Taylor & Francis, 2018.
- [37] Takeo Kajishima and Kunihiro Taira. *Computational fluid dynamics*. 2017.

- [38] J. D. Anderson. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*. McGraw-Hill International Editions: Mechanical Engineering. McGraw-Hill, 1995.
- [39] Henk Kaarle Versteeg and Weeratunge Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson education, 2007.
- [40] Donald B. Robinson, Ding-Yu Peng, and Samuel Y-K Chung. The development of the peng - robinson equation and its application to phase equilibrium in a system containing methanol. *Fluid Phase Equilibria*, 24(1):25–41, 1985.
- [41] Ismail Tosun. *The Thermodynamics of Phase and Reaction Equilibria (Second Edition)*. Elsevier, 2021.
- [42] S.V Patankar and D.B Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(10):1787–1806, 1972.
- [43] K. Hanjalić, M. Popovac, and M. Hadžiabdić. A robust near-wall elliptic-relaxation eddy-viscosity turbulence model for cfd. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 25(6):1047–1051, 2004.
- [44] Sanjin Saric and Branislav Basara. A hybrid wall heat transfer model for ic engine simulations. *SAE International Journal of Engines*, 8(2):411–418, 2015.
- [45] S. Šarić, B. Basara, and Z. Žunič. Advanced near-wall modeling for engine heat transfer. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 63:205–211, 2017.
- [46] Milovan Peric. A finite volume method for the prediction of three-dimensional fluid flow in complex ducts. <https://spiral.imperial.ac.uk/handle/10044/1/7601>. PhD Thesis, University of London, 1985. Online; accedido el 7 de mayo de 2023.
- [47] P.L Roe. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43(2):357–372, 1981.

- [48] H. A. van der Vorst. Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2):631–644, 1992.
- [49] K. Stüben. A review of algebraic multigrid. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 128(1):281–309, 2001. Numerical Analysis 2000. Vol. VII: Partial Differential Equations.
- [50] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller. Chemkin-ii: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. <https://www.osti.gov/servlets/purl/5681118>. Technical Report, U.S. Department of Energy Office of Scientific and Technical Information, 1989. Online; accedido el 7 de mayo de 2023.
- [51] Daniel J. Jacob. *Introduction to atmospheric chemistry*. Princeton University Press, 1999.
- [52] RG Gilbert, K. Luther, and J Troe. Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. ii. weak collision rate constants. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 87(2):169–177, 1983.
- [53] Michael J. Zehe, Sanford Gordon, and Bonnie J. McBride. Cap: A computer code for generating tabular thermodynamic functions from nasa lewis coefficients. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20020036214>. Technical Publication, NASA Technical Reports Server (NTRS), 2002. Online; accedido el 7 de mayo de 2023.
- [54] Maxim V. Shcherbakov, Adriaan Brebels, Anton Tyukov, Timur Janovsky, and Valeriy Anatol. A survey of forecast error measures. *World Applied Sciences Journal*, 24:171–176, 2013.
- [55] Guillermo Rubio-Gómez. Estudio de la combustión de mezclas de gasolina-bioalcohol en un motor de compresión variable cfr. Tesis de maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, 2018.

- [56] Pablo Gómez-Gordo. Desarrollo de un sistema de control automático aplicado a un motor cfr para el estudio físico-químico de la combustión. Tesis de maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, 2017.
- [57] Edgar Ulises Rivera-Flores. Evaluación de la auto-ignición de mezclas gasolina-etanol-metanol en un motor cfr de compresión variable. Tesis de maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, 2020.
- [58] Nicolas Barral and Frédéric Alauzet. Three-dimensional cfd simulations with large displacement of the geometries using a connectivity-change moving mesh approach. *Engineering with Computers*, 35(2):397–422, 2019.
- [59] Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego. Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications. <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>. Online; accedido el 1 de diciembre de 2022.
- [60] Farah Aqilah, Mazharul Islam, Franjo Juretic, Joel Guerrero, David Wood, and Farid Nasir Ani. Study of mesh quality improvement for cfd analysis of an airfoil. *IIUM Engineering Journal*, 19(2):203–212, 2018.
- [61] Richard Courant, Kurt Friedrichs, and Hans Lewy. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM journal of Research and Development*, 11(2):215–234, 1967.
- [62] Ömer L. Gülder. Laminar burning velocities of methanol, ethanol and isooctane-air mixtures. *Symposium (International) on Combustion*, 19(1):275–281, 1982. Nineteenth Symposium (International) on Combustion.
- [63] Pinaki Pal, Christopher Kolodziej, Seungmok Choi, Sibendu Som, Alberto Broatch, Josep Gomez-Soriano, Yunchao Wu, Tianfeng Lu, and Yee Chee See. Development of a virtual cfr engine model for knocking combustion analysis. *SAE International Journal of Engines*, 11(6):1069–1082, 2018.

- [64] AVL. AVL FIRE(TM) Workflow Manager Versión: 2021 R2 (212146). <http://www.avl.com>. Online; accedido el 3 de noviembre de 2021.
- [65] Hassan Khawaja and M Moatamedi. Semi-implicit method for pressure-linked equations (simple) solution in matlab. *The International Journal of Multiphysics*, 12:313, 12 2018.
- [66] T Abd-Alla, GR Pucher, MF Bardon, and DP Gardiner. Effects of spark characteristics on engine combustion with gasoline and propane. SAE Technical Paper, 2003.
- [67] Fan Zhang, Shijin Shuai, Zhi Wang, Xia Zhang, and Jianxin Wang. A detailed oxidation mechanism for the prediction of formaldehyde emission from methanol-gasoline si engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2):3151–3158, 2011.
- [68] Christoffer Pichler and Elna J. K. Nilsson. Reduced kinetic mechanism for methanol combustion in spark-ignition engines. *Energy & Fuels*, 32(12):12805–12813, 2018.
- [69] Carsten Olm, Tamás Varga, Éva Valkó, Sandra Hartl, Christian Hasse, and Tamás Turányi. Development of an ethanol combustion mechanism based on a hierarchical optimization approach. *International Journal of Chemical Kinetics*, 48(8):423–441, 2016.
- [70] Alejandro Millán-Merino, Eduardo Fernández-Tarrazo, Mario Sánchez-Sanz, and Forman A Williams. Modified multipurpose reduced chemistry for ethanol combustion. *Combustion and Flame*, 215:221–223, 2020.
- [71] Omar S. Barbosa-Machaín, Luis F. Rúa-Mojica, Daniel de la Rosa-Urbalejo, H. G. Ramírez-Hernández, and S. Martínez-Martínez. Determinación de parámetros idóneos para la simulación cfd de la combustión en un mci-cfr y evaluar mecanismos cinéticos de alcoholes. <https://somim.org.mx/memorias/>

memorias2023/articulos/M67-A4_89.pdf. Memorias del Congreso Internacional Anual de la Sociedad Mexicana de Ingeniería Mecánica, Año 2, Núm. 1, Septiembre 2023; accedido el 1 de diciembre de 2023.

- [72] University of Galway. Mechanism downloads. <https://www.universityofgalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads/>. Online; accedido el 5 de diciembre de 2023.