



**UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA**

**DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE UNA
METODOLOGÍA SECUENCIAL CFD-CINÉTICA
QUÍMICA DETALLADA PARA EL ANÁLISIS DE
LA COMBUSTIÓN HCCI Y SUS PRINCIPALES
EMISIONES EN MOTORES ESTACIONARIOS**

Autor

Sebastián Heredia Quintana

Universidad de Antioquia

Facultad de Ingeniería

Medellín, Colombia

2020



Desarrollo e implementación de una metodología secuencial CFD-cinética química
detallada para el análisis de la combustión HCCI y sus principales emisiones en motores
estacionarios

Sebastián Heredia Quintana

Informe de investigación
como requisito para optar al título de:
Magíster en Ingeniería

Asesor

Iván Darío Bedoya Caro
Ingeniero Mecánico, PhD.

Universidad de Antioquia
Facultad de Ingeniería
Medellín, Colombia
2020.



GASURE

Grupo de ciencia y tecnología del gas
y uso eficiente y racional de la energía

Sebastián Heredia Quintana

Ingeniero Mecánico

**DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE UNA
METODOLOGÍA SECUENCIAL CFD-CINÉTICA
QUÍMICA DETALLADA PARA EL ANÁLISIS DE LA
COMBUSTIÓN HCCI Y SUS PRINCIPALES
EMISIONES EN MOTORES ESTACIONARIOS**

Informe final de tesis para optar al título de:
Magister en Ingeniería, Énfasis en Energética

Director:

Iván Darío Bedoya Caro

Ingeniero Mecánico, PhD.

Maestría en Ingeniería
Grupo de Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Eficiente y Racional de la
Energía (GASURE)
Facultad de Ingeniería
Universidad de Antioquia
2020

Índice General

Índice de figuras	III
Índice de Tablas	IX
Resumen	1
1. Introducción	3
1.1. Objetivos	8
1.1.1. Objetivo General	8
1.1.2. Objetivos Específicos	8
2. Marco Teórico y Estado del Arte	9
2.1. Estrategias para Implementar la Combustión HCCI en MCIA	11
2.1.1. Modificación de la Temperatura de Admisión de la Carga y de la Temperatura del Refrigerante	11
2.1.2. Modificación de la Relación de Compresión	11
2.1.3. Estrategias para la Inyección de Combustible	12
2.1.4. Incremento de la Presión en la Admisión (Turbocargador y Supercargador)	12
2.1.5. Uso de Gases Recirculados (EGR)	12
2.2. Modelado de la Combustión HCCI en MCIA	13
2.2.1. Modelos Cero-dimensionales o de Una Zona	13
2.2.2. Modelos Multizona	14
2.2.3. Modelos Multizona Acoplados con Dinámica de Fluido Computacional (CFD)	15
2.3. Cinética Química	17
2.3.1. Mecanismos de un Solo Paso	17
2.3.2. Mecanismos Detallados y Reducidos	18
2.3.3. Autoignición en la Combustión HCCI	19
2.4. Modelado de un MCIA en una Metodología Secuencial	20
2.4.1. Ecuaciones Gobernantes para el Campo de Flujo	20
2.4.1.1. Modelado de la Turbulencia	22
2.4.2. Ecuaciones Gobernantes en Reactores Perfectamente Mezclados	24
3. Metodología	27
3.1. Metodología Experimental	27
3.1.1. Montaje Experimental	27
3.1.2. Diagnóstico de la Combustión	30
3.1.3. Variables de Respuesta	34

3.1.4.	Procedimiento Experimental	35
3.2.	Metodología Numérica	36
3.2.1.	Generación de la Malla	37
3.2.2.	Configuración de los Casos para las Simulaciones CFD e Independencia de Mallado	41
3.2.2.1.	Configuración de las Mallas Móviles	41
3.2.2.2.	Configuración de las Ecuaciones Gobernantes y las Condiciones de Frontera	43
3.2.3.	Configuración de los Casos para las Simulaciones de Cinética Química Detallada	51
4.	Resultados y Análisis	57
4.1.	Resultados Experimentales	57
4.2.	Estratificación Térmica y Másica de la Carga durante la Carrera de Compresión	65
4.2.1.	Descripción de los Campos de Flujo Obtenidos Durante el Cruce de Válvulas	65
4.2.2.	Evolución de los Campos de Flujo Durante la Carrera de Compresión . .	74
4.2.3.	Variaciones de la Estratificación Térmica y Másica de la Carga durante la Carrera de Compresión con Cambios en la Temperatura de Admisión y el Dosado Relativo	80
4.3.	Resultados Numéricos en las Simulaciones Multizona con Cinética Química Detallada	86
4.3.1.	Efecto del Ángulo de Transición entre CFD-Cinética Química Detallada .	86
4.3.1.1.	Resultados a Diferentes Condiciones de Dosado Relativo y Temperatura en la Admisión	92
4.3.2.	Efecto del Esquema de Transferencia de Calor	93
5.	Conclusiones y Futuros Trabajos	99
	Bibliografía	103

Índice de Figuras

1.1.	Evolución de los estándares de emisión europeos para vehículos diesel.	4
1.2.	Tasa de conversión vs temperatura de gases de escape para un catalizador envejecido.	4
1.3.	Desarrollo de la combustión en MCIA para tecnologías MEP, MEC y HCCI. . .	6
2.1.	Régimen de operación de tecnologías MEP, MEC y LTC.	10
2.2.	Modelo de tres zonas para simulaciones de motores operando con combustión HCCI. Interacción entre un núcleo de gases adiabáticos, una capa límite térmica y la región de <i>crevice</i>	14
2.3.	Distribución de temperatura en el cilindro para 10 zonas, incluyendo la zona de “crevices” en el dominio computacional. Posición del pistón: 5 ° aPMS.	15
2.4.	Transcripción del mecanismo de 9 especies y 19 reacciones para la combustión de $H_2 - O_2$ en formato de <i>Chemkin</i>	19
2.5.	Patrones de flujo característicos en MCIA. <i>Squish</i> (a), <i>Swirl</i> (b) y <i>Tumble</i> (c). .	22
2.6.	Visualización de los <i>eddies</i> en la descarga de un jet.	23
3.1.	Esquema del montaje experimental.	29
3.2.	Código de diagnóstico de combustión en línea. (a) Gráficas P-V y presión en el cilindro vs ángulo de giro de cigüeñal; (b) Diferentes variables asociadas al diagnóstico de la combustión.	30
3.3.	Balance de energía al interior del cilindro.	30
3.4.	Curvas de tasa de liberación de calor y calor liberado. Condiciones de operación del motor: Combustible= 60 % GN-40 % CO_2 ; $\phi = 0.38$; $T_{ad} = 318^\circ C$; $p_{ad} = 0.84 bar$; 1800 rpm.	33
3.5.	Perfiles de fracción de calor liberado global (Ecuación 3.10) experimental y normalizada. Condiciones de operación del motor: Combustible= 60 % GN-40 % CO_2 ; $\phi = 0.38$; $T_{ad} = 318^\circ C$; $p_{ad} = 0.84 bar$; 1800 rpm.	33
3.6.	Curva presión-volumen de un motor HCCI. Condiciones de operación del motor: Combustible= 60 % GN-40 % CO_2 ; $\phi = 0.38$; $T_{ad} = 318^\circ C$; $p_{ad} = 0.84 bar$; 1800 rpm.	34
3.7.	(a-b)Vistas isométricas del CAD usado para modelar la cámara de combustión y los ductos de admisión y escape del motor. (c) Detalle de la geometría de las válvulas.	38
3.8.	Forma de los ductos de admisión y escape de un motor perteneciente a la misma serie del motor usado en la investigación (imagen extraída del manual de servicio, Lombardini ®).	38

3.9. Regiones en la que se descompone la geometría de un motor de válvulas rectas en el programa <i>Workbench-ANSYS</i> . El caso mostrado corresponde a un pistón con <i>bowl</i> , donde la cabeza del pistón está representado por el borde inferior de la zona 1, mientras que el cilindro está representado por los bordes izquierdos de la zona 2 y 7.	38
3.10. Zonas en las que se divide la geometría previo al mallado.	40
3.11. Perfiles de levantamiento de las válvulas. Líneas: valores interpolados; Puntos: valores medidos. 0°C corresponde al PMS al inicio de la carrera de expansión.	40
3.12. Geometría mallada. (a) Vista isométrica (b) Vista de corte.	40
3.13. Principales condiciones de frontera del dominio computacional.	44
3.14. Resultado de independencia de mallado durante el intervalo de válvulas cerradas para las condiciones de motor arrastrado: (izq) resultados en el intervalo de válvulas cerradas, (der) ampliación de los resultados cerca al PMS. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.	45
3.15. Resultado de independencia de mallado durante el intervalo de válvulas cerradas para las condiciones de motor arrastrado. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.	46
3.16. <i>Razón de Aspecto</i> en el PMS de la malla utilizada en la investigación.	46
3.17. <i>Calidad Ortogonal</i> en el PMS de la malla utilizada en la investigación.	46
3.18. <i>Skewness</i> en el PMS de la malla utilizada en la investigación.	47
3.19. Comparación de los resultados obtenidos con los modelos de turbulencia durante el intervalo de válvulas cerradas para las condiciones de motor arrastrado. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.	47
3.20. Resultados de la energía cinética turbulenta obtenidos para ambos modelos de turbulencia evaluados.	48
3.21. Resultados de la tasa de disipación de la turbulencia obtenidos para ambos modelos de turbulencia evaluados.	48
3.22. Esquema geométrico del modelo de masa de fugas.	49
3.23. Representación en forma de red para solución del modelo de masa de fugas.	50
3.24. Masa al interior del cilindro con y sin modelo de masa de fugas a través de los anillos del pistón obtenidos en la simulación. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.	50
3.25. Resultados finales de la malla a utilizarse en la investigación. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.	51
3.26. Curvas de motor arrastrado experimentales y numéricas (modelo 0D) a diferentes condiciones de temperatura en la admisión.	52
3.27. Pico de H_2O_2 predicho por los mecanismos <i>GRI 3.0</i> y <i>San Diego</i> , y los valores experimentales de CA10 para diferentes puntos de operación. Motor operando con gas natural a 1800 rpm; 0°=PMS.	53
3.28. Pico de H_2O_2 predicho por los mecanismos <i>GRI 3.0</i> y <i>San Diego</i> , y los valores experimentales de CA10 para diferentes puntos de operación. Motor operando con biogás: 60 % GN - 40 % CO_2 ; 1800 rpm; 0°=PMS.	54
3.29. Distribución de temperatura al interior de la cámara de combustión 45° aPMS para (a) cuarenta zonas y (b) doce zonas bajo la metodología de reducción de zonas. Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	55

4.1. Curvas de presión en el cilindro para diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	57
4.2. Curvas de temperatura en el cilindro para diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	58
4.3. Valores del CA50 para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	58
4.4. Curvas de tasas de liberación de calor global a diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	59
4.5. Curvas de fracción de calor liberado a diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	60
4.6. Duración de la combustión para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	60
4.7. Fracción de gases residuales promedio estimados para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	61
4.8. Presión media efectiva neta (IMEP _{net}) para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	62
4.9. Coeficiente de Variación de la IMEP _{net} para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % gas natural - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	62
4.10. Intensidad de ringing para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	63
4.11. Eficiencia indicada para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	63
4.12. Emisiones de NOx en base seca para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	64
4.13. Emisiones de CO en base seca para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO ₂ ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.	64
4.14. Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el PMS y el EVO: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	66
4.15. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el PMS y el EVO: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	66
4.16. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el PMS y el EVO: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	67
4.17. Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el EVO y EVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	68
4.18. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el EVO y EVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	69
4.19. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el EVO y EVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	70
4.20. Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	71
4.21. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	72
4.22. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	73

4.23. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVO y IVC para un plano de corte paralelo al eje de desplazamiento del cilindro: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	74
4.24. Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	75
4.25. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	75
4.26. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS en un plano perpendicular: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	76
4.27. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	76
4.28. Campo de velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	76
4.29. Distribución de temperatura al interior de la cámara de combustión a diferentes ángulos de giro de cigüeñal. Combustible=60% GN - 40% CO ₂ ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	77
4.30. Perfiles de Temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	78
4.31. Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	78
4.32. Perfiles de temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para un dominio 3D que incluye el período de cruce de válvulas (izquierda, correspondiente a la Figura 4.30) y para un dominio 2D durante el período de válvulas cerradas (derecha): $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	79
4.33. Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para un dominio 3D que incluye el período de cruce de válvulas (izquierda, correspondiente a la Figura 4.31) y para un dominio 2D durante el período de válvulas cerradas (derecha): $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	79
4.34. Comparación de perfiles de masa obtenidos a partir de la simulación CFD para un dominio 3D que incluye el período de cruce de válvulas y para un dominio 2D durante el período de válvulas cerradas. Zonas frías (izquierda) zonas calientes (derecha): $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	80
4.35. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	81
4.36. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	82
4.37. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	83
4.38. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	83
4.39. Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$ (izquierda); $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$ (derecha).	84
4.40. Perfiles de temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$ (izquierda); $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$ (derecha).	84
4.41. Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	85
4.42. Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.	85
4.43. Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$: $\phi = 0.28$ (izquierda); $\phi = 0.42$ (derecha).	86

4.44. Perfiles de temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$: $\phi = 0.28$ (izquierda); $\phi = 0.42$ (derecha).	86
4.45. Comparación entre la presión en el cilindro experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	87
4.46. Comparación entre la temperatura promedio experimental y numérica para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	88
4.47. Evolución de la fracción molar de diferentes radicales de interés en la ignición y la combustión: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	88
4.48. Comparación entre la tasa de liberación de calor global experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	89
4.49. Comparación entre la fracción de masa quemada experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	89
4.50. Evolución de la fracción molar de CO y CO_2 para los diferentes ángulos de transición evaluados: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	90
4.51. Evolución de la temperatura en las diferentes zonas: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; ETC= 4.	91
4.52. Razón entre el valor numérico y experimental para diferentes variables: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	92
4.53. Comparación entre la presión en el cilindro experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 330\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; ETC= 4.	93
4.54. Comparación entre la temperatura en el cilindro experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 330\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5\text{ }^{\circ}$ dPMS; ETC= 4.	93
4.55. Comparación entre los resultados experimentales y numéricos multizona para diferentes esquemas de transferencia de calor: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; AT= 0.2 ° dPMS.	94
4.56. Comparación entre los resultados experimentales y numéricos multizona para diferentes esquemas de transferencia de calor: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 330\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; AT= 2.5 ° dPMS.	95
4.57. Evolución de la fracción molar de diferentes radicales de interés en la ignición y la combustión: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; AT= 0.2 ° dPMS.	96
4.58. Evolución de la fracción molar de CO y para los diferentes esquemas de transferencia de calor evaluados: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; $T_{ad} = 325\text{ }^{\circ}\text{C}$; 1800 rpm; AT= 0.2 ° dPMS.	97

Índice de Tablas

3.1. Características técnicas del motor.	28
3.2. Propiedades de los combustibles.	28
3.3. Diseño factorial experimental para validación de la metodología.	36
3.4. Precisión e incertidumbre asociada a las variables medidas.	36
3.5. Características de las relaciones de compresión evaluadas.	37
3.6. Cantidad de celdas de las mallas usadas en la independencia de mallado.	41
3.7. Comparación entre las relaciones de compresión del motor y la usada para las simulaciones de cinética química detallada.	51
3.8. Especies y reacciones en común entre los mecanismos.	52
3.9. Parámetros de pruebas con gas natural usadas para seleccionar el mecanismo de reacción detallado.	53
3.10. Parámetros de pruebas con biogás usadas para seleccionar el mecanismo de reacción detallado.	54
4.1. Variación de la distribución de la masa con el ángulo de transición.	87
4.2. Área de transferencia de calor equivalente por zona según el esquema implementado para: $\phi = 0.28$, $T_{ad} = 325^\circ C$ y $AT = 0.2^\circ$ dPMS.	94
4.3. Área de transferencia de calor equivalente por zona según el esquema implementado para: $\phi = 0.42$, $T_{ad} = 330^\circ C$ y $AT = 2.5^\circ$ dPMS.	95

Resumen

En este trabajo se presentan los resultados de la estructuración de una metodología secuencial para el análisis de la combustión HCCI y sus principales emisiones. La metodología consistió en la simulación del período de cruce de válvulas, la carrera de admisión y la carrera de compresión del motor mediante el programa *ANSYS-Fluent*. A partir de los anteriores resultados, el campo de temperatura obtenido durante la carrera de compresión en cada paso temporal fue discretizado en cuarenta zonas definidas por el valor máximo y mínimo de temperatura obtenido, implementándose una estrategia de reducción de zonas para describir la evolución de la temperatura y la distribución de la masa al interior del cilindro con sólo doce zonas, las cuales se usaron en el programa *ChemkinPro*, para describir la evolución de reactores cero-dimensionales de volumen variable que permiten modelar la ignición y el proceso de combustión (enfoque multizona), incluyendo un mecanismo de cinética química detallada para dar cuenta de las transformaciones químicas de la carga y la tasa a la cual se libera la energía contenida en el combustible.

Para validar la metodología se modelaron diferentes condiciones de operación (dosado relativo y temperatura de admisión de la carga) del motor HCCI desarrollado por el grupo *GASURE* operando con biogás simulado a partir de mezclas 60 % gas natural - 40 % dióxido de carbono (porcentajes volumétricos). Los resultados numéricos fueron contrastados con los resultados experimentales, comparando tanto parámetros indicados como concentración de especies en las emisiones: monóxido de carbono, óxidos de nitrógeno y oxígeno. Así mismo, durante las simulaciones multizona se variaron algunos parámetros de interés que tienen gran influencia sobre los resultados numéricos con el fin de identificar tendencias que permitieran definir la forma en que deben modificarse dichos parámetros para tener una mejor ajuste de los resultados numéricos. A partir de las simulaciones de dinámica de fluidos computacional se logró observar el efecto de las variaciones de dosado relativo y de temperatura en la admisión sobre el campo de velocidades durante el proceso de admisión y compresión de la carga, teniéndose un efecto relevante sobre la forma en que se distribuye la carga durante la carrera de compresión. En relación con los resultados de la simulación multizona, se tiene buenos ajustes en los picos de presión y la predicción de los niveles de óxidos de nitrógeno, sin embargo, en la mayoría de los casos simulados se tiene una combustión mucho más corta y menores tasas de quemado del combustible, lo cual limita la precisión en la estimación de algunos parámetros indicados y en los niveles de emisiones de monóxido de carbono.

Palabras claves: Combustión HCCI, Simulación numérica, Cinética química, Biogás, Emisiones.

Capítulo 1

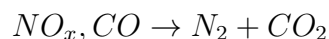
Introducción

Los efectos del cambio climático sobre el entorno y el incremento en la demanda de energía son temas actualmente debatidos. El incremento en la oferta y la demanda de energía trae consigo la construcción de estrategias que permitan sostener la oferta y la autosuficiencia energética. El gobierno nacional, desde hace más de quince años ha venido diseñando planes de diversificación energética y últimamente viene impulsando el uso de energías renovables y de tecnologías que la aprovechen [1]. En relación a los combustibles gaseosos y su uso, las tecnologías existentes garantizan un correcto funcionamiento sólo para combustibles con poca variedad en su composición, lo cual limita las posibilidades de la masificación de los combustibles renovables. Por otro lado, en cuanto a sistema de baja potencia se refiere (menores a 75 o 50 kW), las tecnologías tradicionales presentan bajas eficiencias (en el caso de los motores de combustión interna alternativos, MCI) o altos costos de adquisición (en el caso de micro-turbinas).

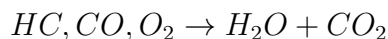
Ahora bien, los MCI son las principales fuentes de generación de emisiones contaminantes globales (como lo es el dióxido de carbono, CO_2) y locales (óxidos de nitrógeno, NO_x ; material particulado, PM; monóxido de carbono, CO) [2]. Por esta razón, se ha originado una transición hacia una legislación cada vez más rigurosa para el control de las emisiones generadas por los MCI, los motores de encendido provocado (MEP) y los motores de encendido por compresión (MEC). La **Figura 1.1** presenta la evolución de los estándares de emisión en los vehículos diesel desde los estándares de emisión *EURO 1* a *EURO 6* respecto a la generación de PM y NO_x .

En las tecnologías convencionales se han presentado desarrollos que permiten reducir notablemente muchas de las emisiones contaminantes de mayor interés y las vigiladas por la legislación mediante sistemas de pos-tratamiento. En el caso de los MEP, los catalizadores de tres vías (o *TWC* por sus siglas en inglés) permiten disminuir hasta en un 90 % las emisiones de hidrocarburos sin quemar (HC), CO y NO_x mediante reacciones de reducción y oxidación que se dan al interior de este:

Reacciones de Reducción



Reacciones de Oxidación



En estos catalizadores se usa como agente activo metales preciosos tales como el platino, el paladio y el rodio. La máxima eficiencia se logra alrededor de la operación estequiométrica, mientras que las condiciones que propician la generación de hollín tienden a reducir su eficiencia al saturar la superficie del catalizador.

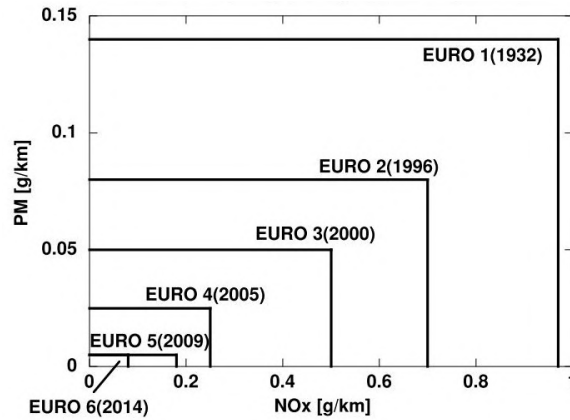


Figura 1.1: Evolución de los estándares de emisión europeos para vehículos diesel. Modificada de DieselNet [3].

En el caso de los MEC, existen los sistemas de oxidantes catalíticos, los cuales se emplean para oxidar los HC y el CO generados tras el quemado incompleto del combustible. La tasa de conversión (u oxidación) en estos sistemas depende de la temperatura de los gases de escape, **Figura 1.2**, requiriéndose muy altas temperaturas para obtener altas tasas de oxidación de las principales especies en los HC, por lo cual, la operación en condiciones de dosados pobres conlleva a la disminución de la eficiencia de estos sistemas.

Por otro lado, están los filtros de partículas (*DFP* por sus siglas en inglés) los cuales permiten reducir hasta en un 80 % las emisiones de PM y de hollín.

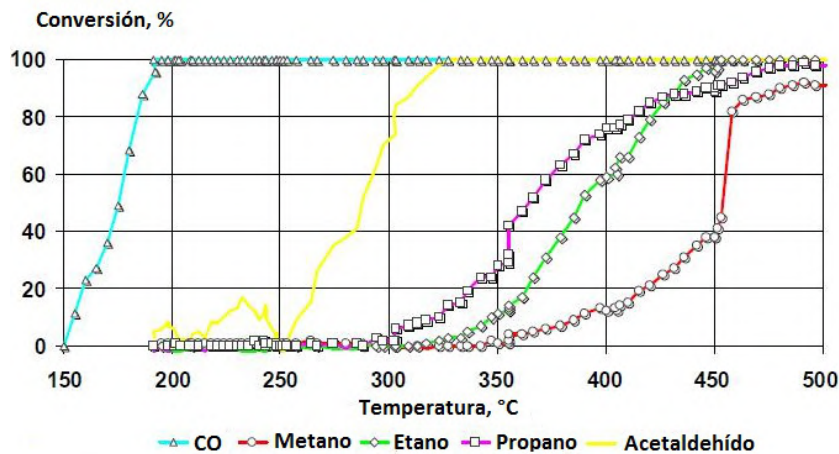


Figura 1.2: Tasa de conversión vs temperatura de gases de escape para un catalizador envejecido. Modificada de AVL MTC [4].

Además de requerir condiciones de operación muy precisas para alcanzar altas tasas de conversión de emisiones, los sistemas de pos-tratamiento presentan el inconveniente de altos costos de instalación, operación y mantenimiento, lo que los hace poco atractivos, aún más cuando existe una legislación laxa (en el caso colombiano) en el control de emisiones. Así, frente a este panorama se puede generar la siguiente pregunta: ¿Qué alternativas desde la ingeniería se pueden plantear para la producción de energía a bajas potencias y que puedan aprovechar la variedad potencial de combustibles fósiles y de origen renovable del país? Bajo este escenario, la combustión de carga homogénea de encendido por compresión (en inglés *Homogeneous Charge Compression Ignition*, HCCI) es una opción atractiva para solucionar los problemas asociados

al proceso de ignición y desarrollo de la combustión en las tecnologías convencionales frente a composiciones variables, ya que en esta tecnología la ignición es controlada o ajustada en función de las propiedades de la mezcla y el desarrollo de la combustión no depende del transporte de radicales y calor al interior de la cámara de combustión. Así mismo, este tipo de tecnología presenta altas eficiencias térmicas (del orden de las de un MEC) y significativas reducciones en la producción de emisiones contaminantes, especialmente NOx y PM, dos de los contaminantes que más afectan la atmósfera de las grandes urbes y que más se limitan en las reglamentaciones de control de calidad del aire [5].

Pese a estos beneficios, los altos niveles de generación de CO y HC, así como problemas como el arranque en frío, la sincronización y centrado de la combustión, o el estrecho rango de operación, han limitado la masificación de esta tecnología; pese a lo anterior, ha habido una introducción al mercado de motores que incorporan la tecnología HCCI mediante sistemas de combustión híbridos tales como el *Mercedes E320 CDI* en 2004 (un sistema híbrido MEC-HCCI) y el *Vauxhall Vectra 2.2* en 2009 (un sistema híbrido MEP-HCCI). Diversos estudios, a partir de diferentes enfoques, se han llevado a cabo para explorar soluciones a los anteriores problemas y lograr un mejor entendimiento de la combustión HCCI [6]. En paralelo con la investigación experimental, el uso de la simulación numérica o modelado computacional ofrece un enfoque efectivo en costos (respecto a la inversión de equipos, insumos, personal y tiempo) y eficiente en la generación de información para explorar la combustión HCCI en motores bajo diferentes condiciones de operación y la predicción de las condiciones necesarias para la ocurrencia de la auto-ignición y el desarrollo de la combustión bajo condiciones estables y seguras.

El proceso de combustión HCCI en motores tiene como base el encendido por compresión de una pre-mezcla homogénea. Al generarse la auto-ignición de la pre-mezcla, la cual se aproxima a un encendido simultáneo de esta al interior de la cámara de combustión, se producen altas tasas de liberación de calor y por ende, de la tasa a la cual se incrementa de la presión, dada la corta duración de la combustión [7]. Este tipo de combustión permite obtener altas eficiencias térmicas, pero también limita el rango de operación estable del motor, ya que ciertas condiciones de preparación de la carga o dosados conllevan a tasas de incremento de la presión que pueden comprometer la estructura física del motor. Por ende, la simulación numérica, como herramienta de predicción de las condiciones a las cuales se obtiene la combustión HCCI, presenta la ventaja de disminuir los riesgos de daño de la infraestructura de medición, así como acortar los tiempos de investigación experimental, lo cual conlleva a reducir costos en un proyecto y permite que el investigador pueda invertir más tiempo en el análisis de la información.

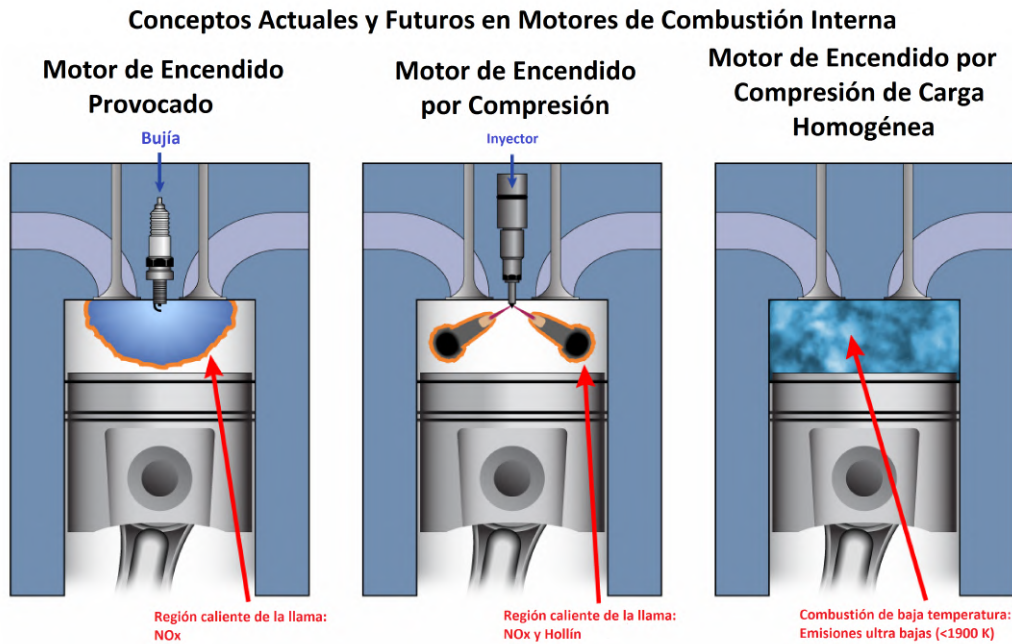


Figura 1.3: Desarrollo de la combustión en MCIA para tecnologías MEP, MEC y HCCI. Adaptado de [8].

En años recientes se han propuesto diferentes modelos y estrategias de simulación para predecir el desempeño de los motores HCCI y la generación de emisiones en estos. Idealmente, un modelo de combustión HCCI en motores debería tener una alta resolución, un modelo fluido dinámico de tridimensional acoplado con cinética química detallada. Por lo tanto, es deseable un modelo o metodología que ofrezca los beneficios de confiabilidad en la simulación del desempeño del motor y la predicción de las emisiones a un relativo bajo costo computacional.

Los modelos que acoplan el análisis CFD y la cinética química mediante modelos multizona [6, 9, 10, 11] han permitido profundizar en los fenómenos que permiten la ocurrencia de la combustión HCCI y las condiciones que favorecen la generación de ciertas especies en las emisiones contaminantes. Los modelos multizonas tienen la capacidad de predecir y estimar las principales variables de combustión y de desempeño del motor, ya que simulan una combustión secuencial de la carga, la cual se aproxima a la combustión HCCI. Sin embargo, la precisión depende de la cantidad de zonas en que se divide el dominio computacional, ya que de esta depende los gradientes de temperatura que se obtienen en la cámara de combustión y que definen la forma en que se desarrolla la cinética química de la mezcla. Además del efecto de los gradientes de temperatura, la precisión en la estimación de las emisiones de CO y HC también se relaciona con la capacidad del modelo multizona de incorporar los procesos de transferencia de calor y masa entre las zonas.

Otra dificultad asociada a esta metodología de simulación es el intervalo del ciclo termodinámico simulado en el código CFD, así como las condiciones iniciales de la carga y de frontera usados. Bedoya y colaboradores [12] usaron el programa *ANSYS-Fluent* para resolver la fluido-dinámica durante la carrera de compresión, comparando los resultados con los obtenidos con el programa *KIVA* (usado a menudo en estudios numéricos de la combustión HCCI en motores), obteniendo mejoras significativas sobre la evolución de los perfiles de temperatura (reducción en la diferencia de la temperatura entre las zonas, capacidad del programa para estimar la estratificación de la carga, entre otros) de cada una de las zonas, previas a la ignición y desarrollo de la combustión, mostrando cómo los algoritmos de los códigos CFD para resolver la fluido-dinámica en el “core” de la cámara de combustión y en la región cercana a las paredes tienen un efecto significativo sobre los perfiles de temperatura de cada una de las zonas y por

ende de las tasas de reacción durante los cálculos que involucran la cinética química, en especial de las reacciones involucradas en la oxidación del CO.

Si bien la metodología secuencial ha sido ampliamente abordada en la década pasada y actual, existen múltiples elementos que no han sido tratados y que pueden dar origen a mejores estimaciones de las variables de operación, combustión y emisiones sin incurrir en elevados costos computacionales; además, en el contexto nacional son pocos los trabajos que se han desarrollado en relación al uso de enfoques numéricos para el estudio de combustión avanzada en motores [12, 13], y sólo se analiza el proceso de compresión después del cierre de la válvula de admisión, incluso en trabajos recientes [14]. La carrera de admisión tiene una fuerte influencia sobre las condiciones de la mezcla en el retraso al cierre de la admisión (IVC por sus siglas en inglés), especialmente para combustibles que requieren altas temperaturas en puerto para alcanzar las condiciones de auto-ignición previas al punto muerto superior, como es el caso del biogás o algunos combustibles de origen renovable en motores de aspiración natural; éstas altas temperaturas generan gradientes importantes en el campo de flujo del motor debido a las menores temperaturas a las cuales se encuentra los gases residuales y las paredes de la cámara de combustión durante la carrera de admisión y durante la compresión previo al cierre de válvulas, lo cual afecta el nivel de homogeneidad de la mezcla en el IVC y la generación de turbulencia, lo cual influencia fuertemente la estratificación de la carga al final de la carrera de compresión [10]. Así mismo, el uso de mecanismos de levantamiento variable de las válvulas y sistemas de adelante y retraso de la apertura y cierre de éstas son estrategias usados ampliamente en la obtención e implementación de nuevos modos de combustión avanzada en MCIAs [15], y que sólo pueden ser analizados vía CFD al incorporar la carrera de admisión y el período de cruce válvulas.

Finalmente, en las metodologías secuenciales se ha usado el ángulo asociado al CA10 (ángulo donde se libera el 10 % de la energía) como el punto de transición entre las simulaciones fluidodinámicas y de cinética química, sin embargo, esto se ha realizado en función de la búsqueda de un mejor ajuste con la forma y magnitud de las curvas de presión en cámara y de tasa de liberación de calor experimentales, pero no se ha abordado su efecto sobre las emisiones, especialmente el CO y el HC. Así mismo, existe poca información en éste tipo de metodologías sobre cómo se afectan los cálculos de cinética química al variar las áreas equivalentes de transferencia de calor en cada una de las zonas, lo cual puede ser una variante a la inclusión de cálculos complejos sobre el intercambio de calor y especies entre zonas, incrementando el costo computacional, para mejorar la predicción de las emisiones contaminantes. Bajo éste panorama, se hace notable la vigencia de avanzar en estrategias de mejoras de metodologías secuenciales, y a su vez, de estudios a nivel nacional que permitan reducir el rezago en relación al estado del arte internacional respecto a los modelos numéricos para el estudio de la combustión avanzada en motores. Por lo tanto, se propone realizar un estudio numérico de la combustión HCCI en motores a partir de una metodología secuencial CFD-cinética química en la cual se buscará dar respuesta a las siguientes preguntas de investigación:

- ¿La inclusión del período de cruce de válvulas y de la carrera de admisión tiene un efecto importante sobre la forma en varía la distribución de la masa y la temperatura durante la carrera de admisión?
 - Durante las simulaciones multizona ¿existe un efecto significativo del cambio del ángulo de giro de cigüeñal en el que se detiene el análisis CFD y se prosigue con la simulación de cinética química detallada sobre las variables de combustión y las principales emisiones?
 - Durante las simulaciones multizona ¿existe un efecto significativo del esquema de transferencia de calor, basado en la distribución de la masa en las zonas, sobre las variables de combustión y las principales emisiones?
-

De este modo, los objetivos propuestos son los siguientes:

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo General

Desarrollar e implementar estrategias numéricas que permitan predecir las variables de combustión y principales emisiones en un motor HCCI estacionario operando con biogás a través de una metodología secuencial CFD -cinética química.

1.1.2. Objetivos Específicos

1. Determinar las condiciones de la mezcla en el IVC a partir de la simulación CFD del cruce de válvulas y de la admisión usando el programa *ANSYS-Fluent*.
2. Analizar el efecto del cambio en el ángulo de transición CFD-Cinética química detallada sobre las variables de combustión y principales emisiones mediante el uso de un modelo multizona en el programa *ChemkinPro*.
3. Realizar un análisis paramétrico del efecto de diferentes esquemas de transferencia de calor, en un modelo de cinética química multizona para el estudio de la combustión HCCI, sobre las variables de combustión y las principales emisiones.

Capítulo 2

Marco Teórico y Estado del Arte

La combustión HCCI fue explorada inicialmente por Onishi y colaboradores [16] como un modo de combustión alternativo para atenuar la contaminación generada por los MCIAs de dos tiempos. En dicho estudio se encontraron importantes reducciones en las emisiones y un mejoramiento en el consumo de combustible cuando se crean las condiciones que conllevan a la ignición espontánea de la carga en el cilindro. Noguchi y colaboradores [17], mediante estudios ópticos, detectaron que la ignición reportada en el trabajo de Onishi y colaboradores tomaba lugar en múltiples puntos a través de la cámara de combustión del motor, sin observarse el desarrollo y propagación de un frente de llama. A través de técnicas espectroscópicas, se detectó la presencia de especies intermedias y radicales antes y después de la ignición, especies y radicales ligeramente diferente a los observados en la combustión de motores de encendido provocado (MEP).

En relación a los trabajos pioneros en motores de cuatro tiempos, el trabajo de Najt y Foster [18] mostró las primeras evidencias de que la combustión HCCI es controlada por la cinética química del combustible y el sistema se asemeja a un reactor mezclado encendido por compresión, evidencias basadas en el uso de mecanismos cinéticos simplificados y el uso de análisis de la tasa de liberación de calor a partir de la presión en el cilindro.

Los trabajos pioneros de la combustión HCCI en motores mostraron el potencial de éste modo de combustión en la reducción de emisiones contaminantes, tales como el material particulado (PM, por sus siglas en inglés: *Particulate Matter*) y los NO_x, así como la obtención de altas eficiencias, similares a la de los motores de encendido por compresión (MEC) a altas cargas.

Los motores HCCI son una tecnología que combina las cualidades de los MEP y los MEC; la premezcla aire-combustible ingresa en el cilindro (como en los MEP) y se enciende debido a las condiciones de presión y temperatura en éste (como en los MEC), por lo que no hay un elemento de control externo para la ignición. Al ser éste tipo de combustión cuasi-instantánea [17], se obtienen altas tasas de liberación de calor y con ello incrementos súbitos en la presión, los cuales pueden afectar la estructura del motor, lo que conlleva a que el motor funcione con bajos dosados relativos. Dado que los bajos dosados conllevan a mayor resistencia a la auto-ignición, existen diferentes estrategias para alcanzar las condiciones de ignición cerca del punto muerto superior (PMS), estrategias que se explorarán en una sección posterior. La **Figura 2.1** presenta diferentes regímenes de operación de modos de combustión en MCIAs, en relación con el rango de dosado relativo en los cuales operan y las temperaturas máximas que se alcanzan al interior de la cámara de combustión, lo cual da cuenta del potencial de generación de emisiones de NO_x y hollín.

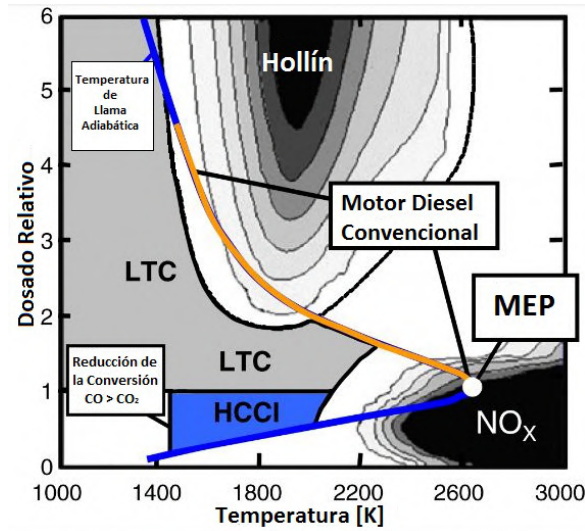


Figura 2.1: Régimen de operación de tecnologías MEP, MEC y LTC.
Adaptado de [5].

Dado que la cinética química que domina la ignición HCCI (cinética de baja y media temperatura) es similar para los diferentes combustibles comúnmente usados en MCIA [19], los motores que operan con éste tipo de combustión tienen una alta flexibilidad respecto al tipo de combustible, pudiendo operar con combustibles líquidos y gaseosos tradicionales, alcoholes, hidrógeno, biodiesel y biogás, entre otros [20, 21, 22, 23]. Pese a las ventajas de incrementos de eficiencia a carga parcial, reducción de emisiones (NO_x y PM), así como una alta flexibilidad en el uso de combustibles sin requerir complejas modificaciones en el motor, la combustión HCCI presenta múltiples retos que limitan su masificación comercial.

Uno de los principales retos se asocia a la falta de un elemento externo que controle directamente la ignición (como es el caso de las bujías en los MEP y los inyectores en los MEC), lo cual afecta el centrado de la combustión, lo que a su vez genera problemas de estabilidad de la combustión (y del motor), fluctuaciones en la generación de emisiones y en la tasa de liberación de calor. Aún para pequeñas variaciones en la temperatura a la cual se da la ignición (del orden de 10°C), se pueden obtener altas variaciones en el ángulo de giro de cigüeñal (en inglés *Crank Angle Degree*, CAD) donde se da la auto-ignición. Si la ignición ocurre mucho antes de que el pistón alcance el PMS, se obtienen altas tasas de liberación de calor, conllevando a altas tasas de incremento de la presión y altas presiones, lo cual puede afectar estructuralmente el motor; así mismo se pueden obtener altas temperaturas (mayores a 1900 K) lo cual favorece la formación de NO_x . Si la ignición ocurre mucho después del PMS, la combustión se da a temperaturas que favorecen la ocurrencia de quemado parcial del combustible y ciclos apagados, lo cual afecta la estabilidad del motor.

Otro problema asociado a los motores que operan con combustión HCCI es la corta duración de la combustión y las altas tasas de incremento de la presión, en comparación con los MEP, asociados a la ignición multi-punto. Si el motor opera con dosados ricos, la velocidad a la cual se dan las reacciones químicas puede conllevar a un fenómeno similar al *knock* (que ocurre en los MEP) denominado *ringing* [24], lo cual puede afectar estructuralmente el motor y se convierte en el fenómeno limitante de la operación HCCI a altas cargas. Si el motor opera con bajos dosados, para evitar los fenómenos asociados a la corta duración de la combustión, problemas de ciclos apagados y de arranque en frío se presentan, siendo los factores que limitan la operación a bajas cargas. Lo anterior conlleva a que los motores que operan con combustión HCCI funcionen en un rango estrecho de dosados relativos, en el rango de dosados pobres.

Por último, la ausencia de un frente de llama y la operación con dosados relativos pobres con-

lleva a bajas temperaturas de combustión (en comparación con las tecnologías tradicionales), del orden de 1600 a 1800 K. Lo anterior genera un alto contenido de HC y CO en los gases de combustión, así como una baja temperatura de éstos gases, lo cual reduce la eficiencia de los sistemas de pos-tratamiento de gases que se encuentran actualmente en el mercado.

Diferentes enfoques se han empleado para superar los retos de operación que afrontan los motores que operan con combustión HCCI, procurando extender los rangos de operación del motor (tanto en régimen de giro como en potencia-dosado relativo) y reducir las emisiones contaminantes. Las estrategias más comunes asociadas a estos enfoques se presentan a continuación.

2.1. Estrategias para Implementar la Combustión HCCI en MCIA

Existen múltiples estrategias que han sido desarrolladas para facilitar la masificación de los motores que operan con combustión HCCI con el fin de obtener motores de alta eficiencia (bajo consumo de combustible) y baja generación de emisiones contaminantes (especialmente HC y NO_x), de modo que éstas tecnologías sean competitivas en costo y dimensiones respecto a las tecnologías MEP y MEC. A continuación se explorarán algunas de éstas.

2.1.1. Modificación de la Temperatura de Admisión de la Carga y de la Temperatura del Refrigerante

Elevar la temperatura de la carga en la admisión puede conducir a un incremento de la temperatura durante la carrera de compresión y con ello facilitar y avanzar la auto-ignición del combustible. Ésta ha sido la estrategia por excelencia para obtener y controlar la combustión HCCI desde el trabajo pionero de Najt y Foster [18]. El incremento de la temperatura en la admisión se puede dar mediante calentadores eléctricos que elevan la temperatura del aire de carga, el uso de gases residuales y gases externos recirculados o mediante sistemas que usan metodologías conocidas como *Fast Thermal Management* [25], en el cual se usa la energía térmica contenida en los gases de escape y del refrigerante para calentar el aire admitido en el motor, controlando la cantidad de energía transferida al aire mediante intercambiadores de calor y válvulas de control de flujo.

El control del inicio y desarrollo de la combustión también se puede realizar a través del ajuste de la temperatura del refrigerante a la entrada del motor. Milovanovic y colaboradores [26] reportaron que el rango superior de operación de un motor HCCI puede extenderse en un 14% al reducir la temperatura del refrigerante, mientras que el rango inferior puede extenderse en un 28% si la temperatura es incrementada.

2.1.2. Modificación de la Relación de Compresión

El uso de altas relaciones de compresión (mayores de 10 : 1 o del orden de los MEC) es la estrategia más efectiva para alcanzar y sincronizar la auto-ignición de la mezcla en todas las tecnologías de combustión avanzada. Incrementar la relación de compresión permite reducir la temperatura de la carga en la admisión, incrementar la densidad de ésta y por ende incrementar la potencia generada [27, 28, 29]. Sin embargo, el uso de una elevada relación de compresión limita el uso de múltiples modos de combustión que permitan operar el motor en un amplio rango de operación de manera eficiente y con baja generación de emisiones; éste es el caso de

las tecnologías que operan en modo HCCI a bajas cargas y en modo MEP a medias y altas cargas. Por otro lado, Haraldsson y colaboradores [30] han encontrado que las emisiones de CO se incrementan con el uso de altas relaciones de compresión debido a la reducción del tiempo de reacción de la carga asociado a rápidos procesos de expansión.

2.1.3. Estrategias para la Inyección de Combustible

La distribución térmica y del combustible-dosado relativo al interior del cilindro son parámetros claves en el control del inicio de la combustión HCCI. Las estrategias de inyección del combustible y generación de la mezcla tienen el potencial de controlar el inicio y desarrollo de la combustión mediante la modificación de la concentración local del combustible. El uso de inyección en puerto (PFI) es la estrategia más común de preparación de la mezcla para motores que operan con gasolina o combustibles gaseosos, sin embargo no hay un control efectivo de la distribución de temperatura y del combustible al interior del cilindro; además, es una estrategia limitada para combustibles de bajos puntos de ebullición, ya que en combustibles como el diesel, se pueden presentar problemas de incrementos en el consumo de combustible asociados a una pobre vaporización e impregnación de éste en las paredes del cilindro, generando incrementos de HC y PM.

La implementación de inyección directa (DI) del combustible en el cilindro permite un mayor potencial de control de la combustión y reducción del consumo de combustible, sin estar limitada por el tipo de combustible. Morimoto y colaboradores [31] implementaron ésta estrategia en un motor HCCI operado con gas natural, demostrando la posibilidad de controlar la sincronización de la combustión mediante la modificación del pulso de inyección.

2.1.4. Incremento de la Presión en la Admisión (Turbocargador y Supercargador)

El uso de turbo o supercargadores es una práctica común en MEC y de manera reciente en MEP [32]. Incrementar la presión permite incrementar la presión media efectiva indicada del motor (IMEP) al reducir las pérdidas de bombeo, reducir la temperatura requerida en la admisión del aire de carga y extender el rango superior de operación de los motores HCCI al incrementar la dilución de la mezcla, asociado al incremento de la cantidad de aire que se ingresa por ciclo. Christensen y colaboradores [33] evaluaron el efecto de operar un motor HCCI con tres diferentes combustibles y tres diferentes condiciones de presión en la admisión: aspiración natural, 1 bar y 2 bar. Los autores encontraron que al supercargar el motor se incrementa ostensiblemente la IMEP del motor, y obtuvieron IMEP de 14 bar para una presión de 2 bar en la admisión en un motor con relación de compresión de 17 : 1. Olsson y colaboradores [34] alcanzaron una presión media efectiva al freno (BMEP) de 16 bar en un motor de camión de seis cilindros operando en modo dual (etanol y n-heptano) e implementando un turbocargador. Sin embargo, dadas las altas presiones que se pueden generar en el cilindro, la implementación de ésta estrategia está limitada por la resistencia estructural del motor y el rango de ruido tolerable generado por la combustión.

2.1.5. Uso de Gases Recirculados (EGR)

Los gases de escape del motor contienen importantes cantidades de energía térmica, la cual puede usarse para controlar la temperatura de la carga en los motores HCCI. Así mismo, dicho

control se puede realizar enfriando los gases y aprovechando el CO_2 y el N_2 presente en éstos para incrementar la dilución de la carga. A éste proceso se le conoce como Recirculación de Gases de Escape (EGR), siendo el más utilizado en el caso de los motores HCCI la recirculación externa (porción de los gases de escape mezclado con el aire de carga).

Zhao y colaboradores [35] desarrollaron un conjunto de estudios numéricos y experimentales sobre el efecto del EGR externo frío y caliente sobre el inicio de la combustión (auto-ignición), la duración de la combustión y la tasa de liberación de calor. Los autores encontraron que el uso de EGR caliente permite avanzar el tiempo de auto-ignición y reducir la duración de la combustión. En el caso del uso de EGR frío, se tiene una duración mayor de la combustión debido a los efectos de dilución pero no se encontró efecto alguno sobre el tiempo de ignición. No se encontró un efecto químico significativo asociado a las especies presentes en los gases recirculados sobre la combustión. Por último, los autores lograron operar el motor con porcentajes de EGR de hasta el 70%. Narayanaswamy y Rutland [36] a través de estudios numéricos, donde acoplaron un modelo multizona con el programa *GT-Power*®, para estudiar los efectos del EGR externo sobre la operación de un motor HCCI con diesel, obtuvieron resultados similares a los obtenidos por Zhao y colaboradores. Bajas tasas de EGR caliente permite avanzar el inicio de la combustión, sin embargo, a altas tasas el efecto de almacenamiento de energía térmica del CO_2 y N_2 empieza a ser más significativo que el calentamiento de la carga admitida y tiende a retrasar el inicio de la combustión. El efecto del EGR frío varía según el dosado relativo y el porcentaje de gases recirculados.

2.2. Modelado de la Combustión HCCI en MCIA

El desarrollo de nuevas tecnologías en el campo de los MCIA o el desarrollo de mejoras en las tecnologías tradicionales, con el fin de alcanzar una alta economía de combustible y bajas generaciones de emisiones contaminantes, requiere de un alto grado de entendimiento del proceso de combustión que ocurre al interior del cilindro. Las metodologías de simulación numérica permiten estudiar o tener una aproximación a dichos fenómenos, y son indispensables cuando los costos experimentales son demasiados altos o cuando no es posible dar cuenta, de manera experimental, de la interacción entre fenómenos que se dan durante la combustión [37]. En éste orden de ideas, múltiples metodologías de simulación se han desarrollado para estudiar la combustión HCCI en MCIA, así como el efecto de las diferentes estrategias de control y sincronización de la combustión sobre el desempeño del motor. Éstas metodologías se suelen agrupar según las simplificaciones realizadas, la complejidad del modelo químico, el uso de códigos *Dinámica de Fluido Computacional* (CFD) y el número de zonas en las cuales se divide la cámara de combustión del motor [6, 38]. A continuación se explorarán algunas de éstas metodologías.

2.2.1. Modelos Cero-dimensionales o de Una Zona

Son los modelos más simples en relación a la capacidad de cómputo requerida. Estos modelos se fundamentan sobre la hipótesis de que la carga se comprime y enciende en la cámara de combustión de manera homogénea y por ende se puede asumir que en toda la cámara se tiene la misma temperatura y presión en un instante de tiempo dado. Estos modelos son compatibles con modelos químicos simples o detallados, permitiendo en el caso de éstos últimos, evaluar diferentes mecanismos de reacción y los regímenes de oxidación de algunos combustibles. Dado que la combustión HCCI depende principalmente de la química del combustible, el uso de modelos de una zona que incorporan una cinética química detallada permite predecir diferentes

variables de interés en el desempeño de motores HCCI con aceptable precisión o explorar el efecto de las condiciones de presión, temperatura y composición de la carga sobre el inicio de la combustión [18, 35]. Sin embargo, dado que éstos modelos ignoran los gradientes de temperatura y fracción másica del combustible (especialmente en las zonas cercanas a las paredes y *crevices*), se sobrepredice la tasa de liberación de calor y los picos de presión, entre otras variables.

2.2.2. Modelos Multizona

En respuesta a la deficiencia de los modelos de una zona, los modelos multizona se han desarrollado con el fin de tomar en cuenta los gradientes de temperatura y fracción másica de combustible en la cámara de combustión, dividiendo esta en zonas computacionales que corresponden a diferentes regiones físicas. Los modelos pueden ir desde dos, para el caso de gases frescos y gases quemados, hasta 40 zonas [39, 40]. Los modelos multizonas pueden acoplarse con simulaciones de dinámica de gases (admisión de carga y evacuación de gases de combustión) con el fin de obtener condiciones iniciales más reales. Así mismo, la cantidad de zonas y las características geométricas incorporadas en éstas permiten generar resultados más precisos en relación con la tasa de liberación de calor, la eficiencia térmica y las emisiones generadas, entre otras variables. La **Figura 2.2** presenta la topología de un modelo de tres zonas.

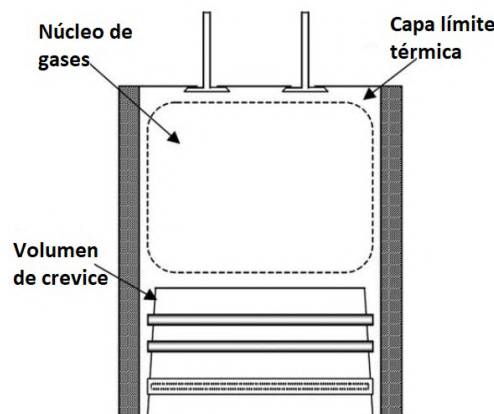


Figura 2.2: Modelo de tres zonas para simulaciones de motores operando con combustión HCCI. Interacción entre un núcleo de gases adiabáticos, una capa límite térmica y la región de *crevice*. Modificada de Fiveland y Assanis [39].

Easley y colaboradores usaron un modelo de cuatro zonas para explorar la fuente de emisiones de NO_x, HC y CO en un motor HCCI bajo diferentes condiciones de operación [41]. Los autores dividieron la cámara de combustión en una zona central, una zona externa que envolvía a la anterior, una zona asociada al volumen de *crevice* y una última zona asociada a una capa límite térmica de espesor constante, en contacto con las paredes del cilindro. Sjoberg y colaboradores [42] usaron modelos multizona para explorar el potencial de la estratificación térmica y la combustión retrasada como estrategias para expandir el rango de operación de un motor HCCI. Además de modelos de dinámica de gases, los modelos multizona también son susceptibles de incorporar un modelo de masa de fugas a través de los anillos [39], lo que permite analizar el efecto del cambio de la masa al interior del cilindro y del espesor de la capa límite térmica por este efecto. La incorporación de éste modelo permite predecir con mayor precisión los hidrocarburos sin quemar en los gases quemados; por otro lado, el uso de éste modelo y el incremento de zonas en las regiones cercanas a las paredes tiene un fuerte impacto en la predicción de las emisiones de CO [43]. Pese a las mejoras en la predicción de las variables de combustión y de

desempeño del motor de los modelos multizonas, respecto a los modelos cero-dimensionales o de una zona, estos aún asumen que cada zona es homogénea, descrita por una temperatura y composición media, además no permite capturar los efectos de estrategias de preparación de la mezcla o de cambio en las condiciones fluido-dinámicas sobre el inicio y desarrollo de la combustión, al menos que estos sean ingresados como esquemas de distribución de masa y temperatura por parte del usuario.

2.2.3. Modelos Multizona Acoplados con Dinámica de Fluido Computacional (CFD)

Las simulaciones numéricas mediante CFD y cinética química detallada acoplada han sido una de las estrategias más prometedoras para el estudio de la combustión HCCI en MCIA ya que los modelos CFD permiten capturar los patrones de flujo, y a su vez el efecto de la geometría de la cámara de combustión sobre la turbulencia, y a su vez, sus efectos sobre la distribución de la temperatura y de la masa, obteniéndose una mejor representación del proceso de combustión. La **Figura 2.3** presenta la agrupación del dominio computacional en zonas según la distribución de temperaturas, teniendo la zona más caliente en el centro de la cámara de combustión y la zona más fría en la zona de *crevices*.

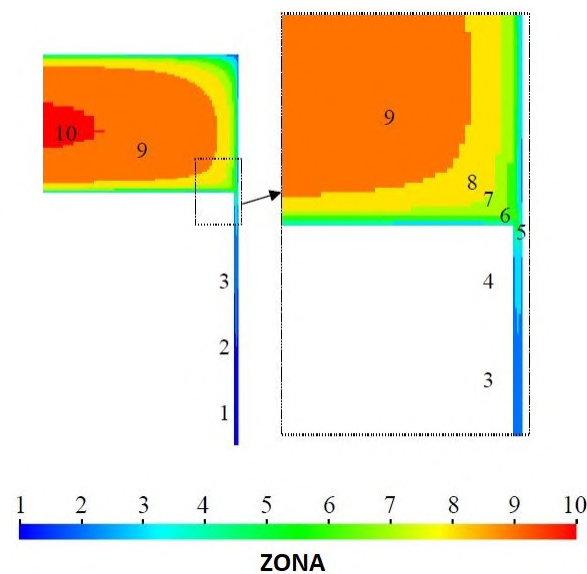


Figura 2.3: Distribución de temperatura en el cilindro para 10 zonas, incluyendo la zona de “crevices” en el dominio computacional. Posición del pistón: 5 ° aPMS.

Modificada de Aceves y colaboradores [9].

Trabajos como el de Kong y colaboradores [11, 44, 45] han demostrado la capacidad de este tipo de metodología para obtener una buena representación de la combustión HCCI en MCIA, alcanzando mejoras en la predicción de las emisiones generadas. En los trabajos de Kong y colaboradores se usa el programa *KIVA* como código CFD y *CHEMKIN* como código para la cinética química; en los trabajos primarios se suponía que la tasa de conversión neta de cada especie era afectada por un tiempo químico laminar (asociado a condiciones de alta temperatura), un tiempo químico de ignición (asociada a condiciones de baja temperatura) y un tiempo de mezclado turbulento. Sin embargo, el alto costo computacional asociado a la solución de una cinética química detallada en cada celda de la malla han limitado la posibilidad de desarrollar plenamente esta metodología, generalmente reduciéndose a geometrías 2D y a casos donde la

simulación se realiza sólo durante el intervalo de válvulas cerradas.

Bajo la hipótesis de que durante el intervalo central de la duración de la combustión, la turbulencia tiene un efecto despreciable dada la corta duración de esta respecto a las escalas de turbulencia que dominan los patrones de flujo a escala global, se han desarrollado metodologías de simulación secuencial o simultáneas CFD-cinética química detallada, las cuales aprovechan todas las ventajas de las simulaciones CFD a un relativamente bajo costo computacional. Aceves y colaboradores [9] desarrollaron una metodología de simulación secuencial CFD-cinética química para la predicción de las principales variables de combustión y emisiones contaminantes, la cual consistía en simular la carrera de compresión del motor a partir del IVC hasta un punto representativo previo al PMS en donde la tasa de liberación de calor, y por ende la cinética química, empieza a ser significativa en la evolución de la presión al interior del cilindro; en este punto cesa el análisis CFD y a partir de los perfiles de temperatura obtenidos se divide la cámara de combustión en zonas definidas según un rango de temperaturas y una cantidad determinada de masa.

La información de estas zonas se ingresa a un código de cinética química (usando como mecanismo de reacción el GRI) donde el ciclo del motor se sigue analizando hasta el EVC. Esta metodología parte del supuesto que en el IVC la carga es homogénea e isotérmica y que el punto de transición entre los cálculos de CFD y de cinética química detallada está definido por el CA05 experimental (ángulo donde se ha quemado el 5% del combustible), además los cálculos de cinética química detallada solo tienen en cuenta interacciones de trabajo (por cambio en el volumen) entre las zonas adyacentes. La metodología presentó una buena predicción de las principales variables de combustión, sin embargo, en relación a las emisiones contaminantes, se obtuvo una sub-estimación de los HC entre un 15% y un 55% respecto a los datos experimentales, y entre el 75% y el 98% para el CO; por otro lado, la metodología permite identificar las principales zonas de generación de HC y las especies químicas que dominan el proceso de ignición en la combustión HCCI, tales como el peróxido de hidrógeno (H_2O_2). Pese a las bondades ya expuestas de la metodología, esta presenta dos falencias. La primera se asocia a la estimación de masa dentro de cada una de las zonas, la cual no partía de principios físicos sino de un ajuste que permitiera aproximarse a los resultados experimentales. La segunda se asocia a la evolución de los perfiles de temperatura de las diferentes zonas con el ángulo de giro de cigüeñal, los cuales presentaban algunas inconsistencias con la física del problema.

Dadas las ventajas de la metodología propuesta por Aceves y colaboradores, esta fue mejorada por trabajos posteriores. Uno de estos trabajos [46] encontró que la correlación de transferencia de calor o los esquemas usados para simular este proceso no tienen un efecto significativo sobre las principales variables de combustión, sin embargo, la predicción de emisiones contaminantes (especialmente el CO), son fuertemente afectadas dado que el efecto de la transferencia de calor sobre la temperatura de las zonas es significativa y por ende afecta la cinética química. Flowers y colaboradores [47] evaluaron la sensibilidad de la metodología respecto al número de zonas, encontrando que diez zonas eran suficientes para una predicción adecuada de los HC, mientras que la precisión del CO era proporcional al número de zonas, sin embargo, la distribución de masa y temperatura en éstas afectan dicha precisión. Por otro lado, se encontró que en algunas zonas intermedias la presencia de radicales OH es significativa en intervalos de ángulo de giro de cigüeñal posteriores al evento principal de liberación (hasta 40 CAD después de este) lo cual es suficiente para que la difusión actúe y haya un transporte de esta especie desde y hacia las zonas vecinas, lo cual puede afectar la predicción final de las emisiones. Estos efectos del mezclado de especies entre zonas fue evaluado por Flowers y colaboradores [48] usando una técnica de *Mapping-Remapping* para generar zonas individuales de acuerdo con la distribución de temperatura obtenidas a partir del CFD, resolviendo la cinética química asociada mediante mecanismos de reacción simplificados, retornando luego la evolución de especies y el calor liberado a los cálculos de CFD. Esta metodología presentó mejores predicciones en las emisiones de

HC y CO, con sub-estimaciones del 30 % y el 40 %, respectivamente, en relación con resultados experimentales; sin embargo, algunas variables de la combustión, como la presión máxima y la duración de la combustión, fueron sobrepredichas, esto asociado al mecanismo simplificado usado y la técnica en cuestión. Un estudio similar fue realizado por Barths y colaboradores [49] en el cual se evaluaron dos modelos de mezcla, obteniendo una versión de la metodología mucho más eficiente.

La limitante de mejoras a este tipo de metodologías está asociada a los altos costos computacionales cuando la cinética química se modela con mecanismos de reacción robustos o se intenta una mayor integración de los cálculos CFD y de cinética química. Por lo tanto, algunos autores han propuesto diferentes estrategias para abordar metodológica y computacionalmente la forma en que las ecuaciones gobernantes en los cálculos CFD se acoplan con los modelos multizona de química detallada, de forma que se reduzcan los tiempos de cálculo y puedan integrarse y ser mejor modelados los fenómenos de transferencia de calor y masa entre las zonas, permitiendo una mejor captura de la estratificación másica y térmica. Se destacan los trabajos de Zhang y colaboradores [50], y de Maroteaux y colaboradores [51], en los cuales el uso de funciones de densidad de probabilidad permite reducir el costo computacional asociado al efecto de la turbulencia sobre el campo de flujo y su interacción con la cinética química durante el principal evento de la combustión y su etapa tardía.

Otro enfoque que ha sido explorado y que ha mostrado un gran potencial de aplicaciones para diferentes modos de combustión avanzada en motores, es el uso de *Modelos de Reactores Estocásticos* (o SRM por sus siglas en inglés) con el fin de estudiar las heterogeneidades en la mezcla sin requerir modelos CFD demasiado complejos. Uno de los trabajos más destacados bajo este enfoque ha sido el de Cao y colaboradores [52], en el cual se acopló de manera secuencial cálculos CFD para una geometría 3-D con un SRM; este último daba cuenta de la cinética química, la transferencia calor y el micro-mezclado asociado a la turbulencia. A partir del CFD se obtenían mapas de temperatura-dosado relativo los cuales alimentaban los esquemas de agrupación de partículas usados en el SRM. El enfoque mostró importantes reducciones en el costo computacional y mejoras en la predicción de especies en las emisiones, comparado con el acople directo de cálculos CFD y cinética química.

2.3. Cinética Química

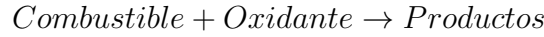
Como ya se ha visto en secciones anteriores, dado que la combustión HCCI está dominada por la cinética química durante el evento principal de la combustión, la predicción del inicio de la combustión y de la tasa de liberación de calor se ve significativamente afectada por el modelo químico utilizado. Bajo ciertos enfoques, el proceso de combustión en el cilindro se puede dividir en tres etapas: auto-ignición, evento principal de la combustión y final de la combustión. Cada una de estas etapas involucra diferentes tipos de reacciones dominantes y especies que rigen el desarrollo de la combustión [53, 54, 55].

Los modelos químicos varían en niveles de detalle según los fenómenos asociados a las etapas de combustión que se desean estudiar y de la capacidad computacional disponible. A continuación se abordará de manera breve tres tipos de mecanismos: mecanismos de un solo paso, mecanismos detallados y mecanismos reducidos.

2.3.1. Mecanismos de un Solo Paso

Este tipo de mecanismos no incluye información acerca la cinética química elemental del proceso de ignición y combustión, mientras que la tasa de reacción está dada por una tasa global

de numerosas reacciones intermedias. En este tipo de mecanismo se intenta describir todo el comportamiento químico de la mezcla aire/combustible mediante una o dos ecuaciones con sus respectivos coeficientes y tasas de reacción, definidas a partir de funciones de ajustes generadas por datos experimentales. Los mecanismos de un solo paso siguen la reacción:



De este modo, la tasa a la cual se quema el combustible (siguiendo una forma de Arrhenius) está dada por:

$$k_{global} = AT^{\beta}[\text{Combustible}]^a[\text{Oxidante}]^b \exp(-E_a/RT) \quad (2.1)$$

Donde A es la constante pre-exponencial, β es el coeficiente de la temperatura, a y b son coeficientes asociados a la concentración del combustible y del oxidante, respectivamente, y E_a es la energía de activación global [56].

La mayor limitante de estos mecanismos es la agrupación de todas las reacciones elementales en una sola, por lo tanto, solo es posible estimar las condiciones a las cuales se da la auto-ignición o, de forma general, la duración de la combustión después de la ignición. No se tiene una aproximación completa hacia el proceso de combustión o a la generación de emisiones contaminantes.

2.3.2. Mecanismos Detallados y Reducidos

Este tipo de mecanismos permiten predecir tanto la auto-ignición como el proceso de combustión sobre un amplio rango de operación, al incluir una información completa acerca de los diferentes tipos de reacciones: iniciación, ramificación, intermedias y terminación. La complejidad de los mecanismos detallados depende del combustible, el rango de operaciones que cubre (presión, temperatura y dosado relativo), así como de la cantidad de especies intermedias que son tenidas en cuenta. Un mecanismo simple, tal como el usado para modelar la cinética química del hidrógeno, puede contener menos de diez especies y unas cuantas decenas de reacciones. Un mecanismo complejo, tales como los de los hidrocarburos y los combustibles actualmente usados, pueden contener centenas de especies y reacciones dentro de la descripción de su cinética química [19, 57].

En este tipo de mecanismo, las constantes de la tasa de reacción se suelen modelar bajo la *Ley de Arrhenius*:

$$k_{R,i} = A_{R,i} T^{\beta_i} \exp(-E_i/RT) \quad (2.2)$$

Donde $A_{R,i}$ es la constante pre-exponencial, β_i es la constante de la temperatura y E_i es la energía de activación para la reacción- i . Un ejemplo de un mecanismo de reacción se presenta en la **Figura 2.4**:

```

ELEMENTS
H O N
END
SPECIES
H2 O2 OH O H H2O HO2 H2O2 N2
END
REACTIONS
H2+O2=OH+OH          1.700E13    0.0    47780.
H2+OH=H2O+H          1.170E09    1.30    3626.
H+O2=OH+O            5.130E16   -0.816   16507.
O+H2=OH+H            1.800E10    1.0     8826.
H+O2+M=HO2+M         2.100E18   -1.0     0.
  H2/3.3/ O2/0./ N2/0./ H2O/21.0/
H+O2+O2=HO2+O2       6.700E19   -1.42    0.
H+O2+N2=HO2+N2       6.700E19   -1.42    0.
OH+HO2=H2O+O2        5.000E13    0.0    1000.
H+HO2=OH+OH          2.500E14    0.0    1900.
O+HO2=O2+OH          4.800E13    0.0    1000.
OH+OH=O+H2O          6.000E08    1.3     0.
H2+M=H+H+M           2.230E12    0.5    92600.
  H2/3./ H/2./ H2O/6.0/
O2+M=O+O+M           1.850E11    0.5    95560.
H+OH+M=H2O+M         7.500E23   -2.6     0.
  H2O/20.0/
HO2+H=H2+O2          2.500E13    0.0     700.
HO2+HO2=H2O2+O2      2.000E12    0.0     0.
H2O2+M=OH+OH+M       1.300E17    0.0    45500.
H2O2+H=H2+HO2        1.600E12    0.0     3800.
H2O2+OH=H2O+HO2      1.000E13    0.0     1800.
END

```

Figura 2.4: Transcripción del mecanismo de 9 especies y 19 reacciones para la combustión de $H_2 - O_2$ en formato de *Chemkin*

[58].

A pesar de que la inclusión de mecanismos cinéticos detallados incrementa la complejidad de los modelos y el costo computacional, estos son esenciales para la simulación de la combustión HCCI en motores, especialmente cuando se requiere una predicción más precisa sobre las emisiones generadas.

Los mecanismos reducidos se obtienen a partir de los mecanismos detallados, conteniendo solo las especies y reacciones más importante según la aplicación o las condiciones de operación de interés, existiendo múltiples técnicas para su obtención [59], siendo una de las más utilizadas la *aproximación de estado estacionario para especies intermedias*, en la cual se asume que las tasas de consumo y producción de especies intermedias están tan cercanas que la tasa de producción neta de estas son cero, esto permite desacoplar muchas de las reacciones que calculan la concentración de dichas especies del mecanismo original, ya que su efecto sobre la tasa del proceso global es despreciable. Entre más se reduce un mecanismo, más se limita su rango de aplicabilidad.

2.3.3. Autoignición en la Combustión HCCI

A diferencia del desarrollo de la combustión en otros dispositivos térmicos tales como calderas, hornos y quemadores, el desempeño y la generación de emisiones de los MCI operando con combustión HCCI está íntimamente relacionado con la ignición de la mezcla aire/combustible, de ahí que un adecuado análisis y modelado de éste fenómeno, permite explicar la forma en que se desarrolla la combustión y el desempeño del motor. La ignición está asociada a la ocurrencia de reacciones de ramificación que dominan el estado químico y desarrollo del sistema estudiado en un período corto de tiempo, período en el cual el sistema experimentará un incremento exponencial tanto en la temperatura como en la generación de algunos radicales (y en algunos casos, un consumo significativo del combustible) [19]. En la oxidación de hidrocarburos, los

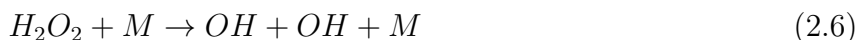
radicales que se usan para definir la ocurrencia de la ignición suelen ser átomos tales como el H y el O, o especies tales como el OH, CH₃ y el HO₂, ya que su aparición e incremento en su concentración suelen ser el preámbulo para la ocurrencia de las altas tasas de consumo de combustible y liberación de energía, es decir, del inicio y desarrollo de la combustión.

Ahora bien, estudios han identificado dos regímenes principales de reacciones de ramificación [60], una asociada a la ignición a alta temperatura con un mecanismo basado en la reacción entre átomos de hidrógeno y oxígeno molecular:



La **reacción 2.3** usualmente describe la ignición de sistemas que están por encima de los 1200 K.

A temperaturas entre 850 K y 1200 K, la **reacción 2.3** es muy lenta para generar la tasa suficiente de generación de radicales para la ignición. En éstos casos la ocurrencia de la ignición es descrita por la descomposición térmica del peróxido de hidrógeno, H₂O₂, a través de las siguientes reacciones:



Donde RH es un alcano, R es un radical alquil y M es un tercer cuerpo. Las **reacciones 2.4**, **2.5** y **2.6** describen la ignición de baja y media temperatura.

En el caso de la combustión HCCI en motores, el H₂O₂ se forma durante la carrera de compresión y permanece relativamente inerte, ésta especie se acumula hasta que se alcanza una temperatura alrededor de los 1000 K, temperatura a la cual inicia una rápida descomposición de dicha especie y se promueve la rápida generación de la especie OH. De este modo, se asume que la ignición ocurre cuando la zona central de la mezcla aire/combustible al interior de la cámara de combustión alcanza la temperatura de descomposición del H₂O₂.

2.4. Modelado de un MCIA en una Metodología Secuencial

2.4.1. Ecuaciones Gobernantes para el Campo de Flujo

La metodología secuencial inicia con la solución del campo de flujo al interior del cilindro mediante simulaciones CFD, en las cuales se resuelven las *Ecuaciones de Navier-Stokes* en el dominio computacional mediante la discretización obtenida a partir del *Método de Volúmenes Finitos*, es decir, el dominio computacional se divide en pequeños volúmenes (volúmenes de control)/celdas, resolviendo las *Ecuaciones de Navier-Stokes* en cada uno de estos, obteniendo así un sistema de ecuaciones algebraicas que se resuelven según el esquema numérico a implementar, el cual depende de las características del campo de flujo a resolver [61]. Para resolver el campo de flujo al interior del cilindro de un MCIA se requiere incorporar los efectos del

movimiento de las fronteras, pistón y válvulas, sobre el campo de flujo. Para un sistema con fronteras móviles, la forma integral de las ecuaciones de conservación para una propiedad tensorial, ϕ , definida por unidad de masa en un volumen V limitado por una superficie cerrada S es [62]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \oint_S d\mathbf{S} \cdot \rho \phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_b) = - \oint_S d\mathbf{S} \cdot \rho \mathbf{q}_\phi + \int_V S_\phi dV \quad (2.7)$$

Donde:

- ρ es la densidad del fluido.
- \mathbf{u} es la velocidad del fluido.
- \mathbf{u}_b es la velocidad de la frontera.
- \mathbf{q}_ϕ y S_ϕ son la fuente de la propiedad ϕ en la superficie y el volumen, respectivamente.

El primer término de la **Ecuación 2.7** es la tasa de cambio de la propiedad ϕ . El segundo término representa el transporte convectivo de la propiedad ϕ debido al campo de velocidades en el fluido. El tercer término representa el transporte difusivo, debido a los gradientes de la propiedad ϕ . Por último, el cuarto término representa la producción/destrucción (término fuente) local de la propiedad ϕ . Las *Ecuaciones Gobernantes* del campo de flujo que se desprenden de la **Ecuación 2.7**, en su forma diferencial, son:

- **Ecuación de Continuidad:** Governa la conservación de la masa y establece que la tasa de cambio de la masa en el volumen de control es igual al flujo de masa neto a través de las fronteras del volumen de control.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.8)$$

- **Ecuación de Momentum:** Governa la conservación del momentum lineal y angular, y se expresa de acuerdo con la *Segunda Ley de Newton*, según la cual, la tasa de cambio de momentum sobre una partícula del fluido es igual a la suma de fuerzas que actúan sobre esta:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \rho g + \nabla \cdot \sigma \quad (2.9)$$

La **Ecuación 2.9** sólo considera la fuerza de gravedad como fuerzas de cuerpo que actúan sobre las partículas de fluido y σ es el tensor de esfuerzos.

- **Ecuación de Energía:** Governa la conservación de la energía y se expresa de acuerdo con la *Primera Ley de la Termodinámica*, según la cual, la tasa de cambio de la energía total¹ en el volumen de control es igual a la tasa neta de calor y trabajo que atraviesa las fronteras del volumen de control.

$$\frac{\partial \rho E_T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} E_T) = -\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{u}) + \rho \sum_{k=1}^K Y_k \mathbf{F}_k (\mathbf{u} + \mathbf{v}_k) \quad (2.10)$$

¹la sumatoria de todas las formas de energía: interna, cinética, química, etc.

E_T es la energía total, \dot{q} es la tasa volumétrica de calor añadido por unidad de masa, Y_k es la fracción másica de la especie-k presente en el fluido, \mathbf{F}_k son las fuerzas de volumen que actúan sobre la especie-k presente en el fluido y \mathbf{v}_k es la velocidad de difusión de la especie-k presente en el fluido.

El primer término a la derecha del igual en la **Ecuación 2.10** representa el calor transferido a través de las fronteras del volumen de control, el segundo término representa el trabajo realizado por las fuerzas de superficie y los esfuerzos cortantes, y el último término es la energía transportada por el movimiento de las especies al interior del volumen de control.

En la **Ecuación 2.10** se ha omitido cualquier fuente de calor o calor liberado por reacciones químicas, debido a que se asume que durante el período simulado, el flujo se considera no-reactivo.

Las anteriores ecuaciones conforman un sistema indeterminado (más incógnitas que ecuaciones) y por lo tanto deben incluirse un conjunto de relaciones para *cerrar* el sistema, lo cual se da mediante el uso de modelos para los esfuerzos, ecuaciones de estado, la ley de Fourier para la conducción de calor, entre otros.

2.4.1.1. Modelado de la Turbulencia

La turbulencia es un fenómeno presente en diferentes flujos de interés y aplicaciones en ingeniería. En la combustión HCCI en MCIA es de especial interés, ya que en conjunto con los patrones de flujo, **Figura 2.5**, este fenómeno es un factor clave en la estratificación térmica/transferencia de calor y másica de la carga al interior del cilindro tras el cierre de la válvula de admisión, parámetros que influyen fuertemente la auto-ignición y el inicio de la combustión.

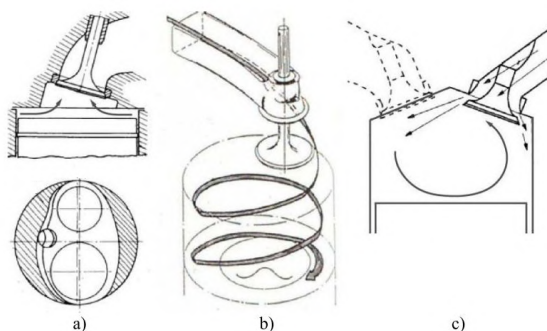


Figura 2.5: Patrones de flujo característicos en MCIA. *Squish* (a), *Swirl* (b) y *Tumble* (c). Adaptado de [63].

Un flujo turbulento se caracteriza por ser un flujo con líneas de corriente irregulares y aleatorias; las características aleatorias del fluido pueden ser modeladas a partir de describir el flujo como un flujo en estado continuo de inestabilidad, donde todas las propiedades del campo de flujo pueden ser separadas en una componente promedio y una componente que da cuenta de las fluctuaciones. La turbulencia está asociada con los *eddies* (vórtices), **Figura 2.6**, los cuales afectan el campo de flujo y los valores medios de las propiedades de este; el efecto de estos *eddies* sobre los valores medios de las propiedades del flujo se suelen relacionar con las dimensiones de estos, dimensiones que se distribuyen en escalas, desde los *eddies* más pequeños caracterizados en la *micro-escala de Kolgomorov* hasta los *eddies* que tienen dimensiones comparables al tamaño de la geometría que acoge el flujo.



Figura 2.6: Visualización de los *eddies* en la descarga de un jet.
Tomado de [64].

De acuerdo con el modelo de cascada de energía turbulenta [65], los *eddies* extraen su energía del flujo medio y lo transfieren a los *eddies* más pequeños en un proceso de cascada. En relación a los *eddies* más pequeños (micro-escala de Kolgomorov), en su campo de flujo prevalecen las fuerzas disipativas, por lo tanto, la energía cinética es destruida por el efecto de las fuerzas viscosas, generando efectos viscosos y de disipación que afectan las diferentes escalas. Este proceso de cascada, desde los *eddies* más grandes hasta los más pequeños, ocurre sobre un espectro amplio de escalas de longitud, por lo que la captura de este proceso requiere de mallas muy finas con el fin de capturar las interacciones entre los *eddies* más pequeños y el flujo; así mismo, se requiere una buena resolución temporal dada la característica transitoria del fenómeno [66]. Los requerimientos de mallas finas y alta resolución temporal para la obtención de una solución válida del campo de flujo para flujos turbulentos conlleva a altos costos computacionales, costos que se elevan exponencialmente cuando también se involucran fenómenos de combustión, dadas las no-linealidades que se generan entre las relaciones de las variables del campo de flujo y los parámetros de los modelos de combustión. Lo anterior ha llevado al uso difundido de métodos estadísticos con el fin de simular flujos turbulentos.

El uso de métodos estadísticos implica que los valores locales de las variables de campo de flujo se separan en su valor medio y la fluctuación alrededor de dicho valor, con lo cual se obtienen expresiones menos complejas para las ecuaciones de transporte de las variables medias. Los métodos más difundidos son los *métodos de promediación*, de los cuales se tienen dos versiones, el *método de promediado de Reynolds* (*Reynolds averaging*) y el *método de promediado Favre mediante densidad ponderada* (*density-weighted Favre averaging*) [67]. Cuando estos métodos de promediado se aplican a las *Ecuaciones de Navier-Stokes* se genera un término atípico denominado el *tensor de esfuerzos de Reynolds*; lo anterior lleva a un sistema de ecuaciones compatibles determinado, donde el problema se convierte en un problema de completitud del sistema (*closure problem* en inglés) en el cual se requiere de un modelo que relacione las variables del campo de flujo con el *tensor de esfuerzos de Reynolds* para “cerrar el sistema”. Un método ampliamente usado para “cerrar el sistema” es el uso de la *Aproximación o Hipótesis de Boussinesq* los esfuerzos de Reynolds se relacionan con la velocidad media del fluido:

$$\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (2.11)$$

Ésta hipótesis permite “cerrar el sistema” a un bajo costo computacional y con una buena aproximación en muchos problemas de ingeniería, especialmente en fluidos donde dominan los esfuerzos cortantes. La *Hipótesis de Boussinesq* también lleva consigo el supuesto de que la viscosidad turbulenta es una cantidad escalar isotrópica, de ahí que no es un enfoque válido para fluidos con altos niveles de *swirl*, entre otros.

A partir de éste enfoque y del análisis de la turbulencia como una cascada de transferencia de

energía entre los *eddies* de diferentes escalas se han construido diferentes modelos que permiten abordar la turbulencia desde un enfoque numérico, uno de los modelos ampliamente usado es el modelo $k - \epsilon$, en el cual la turbulencia se modela a partir de ecuaciones de transporte que describen la relación de la energía cinética turbulenta (k) y su tasa de disipación (ϵ) con el campo de flujo [68].

La forma canónica de las ecuaciones de transporte para ambas variables son:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(C_{te_a} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \epsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(C_{te_b} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1,\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3,\epsilon} G_b) - C_{2,\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (2.13)$$

Donde C_{te_a} y C_{te_b} están asociadas en la forma en que se relaciona la viscosidad y el número de Prandtl turbulento; G_k representa la generación de energía turbulenta debido a los gradientes de la velocidad media, G_b es la generación de energía cinética turbulenta debido a la flotabilidad, Y_M representa la contribución de la dilatación fluctuante en la turbulencia compresible a la tasa global de disipación, $C_{1,\epsilon}$, $C_{2,\epsilon}$ y $C_{3,\epsilon}$ son constantes del modelo; y S_k y S_ϵ son los términos fuentes de ambas variables.

2.4.2. Ecuaciones Gobernantes en Reactores Perfectamente Mezclados

En la simulaciones de cinética química detallada, el volumen del cilindro se divide en un número de zonas imaginarias de acuerdo con la distribución de una variable, normalmente la temperatura. Cada una de las zonas se modela como un reactor perfectamente mezclado donde la masa se conserva. Dentro de las suposiciones usadas para modelar cada una de las zonas y el sistema de manera global se tiene:

- La presión no varía espacialmente dentro de la cámara de combustión, luego la presión se asume constante en cada una de las zonas.
- El volumen total de las zonas es igual al volumen instantáneo calculado a partir de la ecuación-función del ángulo de giro de cigüeñal y la geometría del mecanismo pistón-biela-manivela [37]:

$$\frac{V_{inst}}{V_c} = 1 + \frac{1}{2}(r_c - 1)[R + 1 - \cos\theta - (R^2 - \text{sen}^2\theta)^{\frac{1}{2}}] \quad (2.14)$$

Donde V_{inst} es el volumen instantáneo, θ es el ángulo de giro de cigüeñal, V_c es el volumen mínimo, r_c es la relación de compresión y R es la relación entre el diámetro del cilindro y la carrera del pistón.

- No hay transferencia de calor ni de especies entre las zonas y la única interacción entre estas es a través del trabajo ejercido por la presión.
- El calor transferido entre el gas y las paredes del cilindro es la suma de las tasas de calor transferido de cada zona. El calor transferido por cada zona se calcula de acuerdo con la *Ley de Enfriamiento de Newton* como:

$$\dot{Q}_{pared} = \lambda_{FASZ} h_{pared}^i A_{transf} (T^i - T_{pared}) \quad (2.15)$$

Donde λ_{FASZ} es un parámetro conocido como la *Fracción de Área de Superficie de la Zona*, el cual es una constante (durante toda la simulación) que toma en cuenta la participación de cada zona en la transferencia de calor entre el gas y las paredes del cilindro, h_{pared}^i es el coeficiente de transferencia de calor convectivo de la zona-i, A_{transf} es el área de transferencia de calor global, la cual incluye el área superficial del cilindro, el área superficial de la culata y de la cabeza del pistón (estas dos últimas áreas se toman iguales); T^i es la temperatura de la zona-i y T_{pared} es la temperatura de la pared del cilindro, la cual es una constante durante toda la simulación.

Bajo las anteriores suposiciones, las ecuaciones gobernantes a resolver son la *Ecuación de Especies* y la *Ecuación de Energía*, esta última en su versión de la *Ecuación de Energía basada en la Temperatura del Gas*. La *Ecuación de Especies* a resolver es:

$$\rho^i \frac{d(Y_k)^i}{dt} = \dot{\omega}_k^i W_k \quad (2.16)$$

Donde ρ es la densidad de la mezcla contenida en la zona, Y_k es la fracción másica de la especie-k en la zona-i, $\dot{\omega}_k$ es la tasa de producción/consumo molar de la especie-k en la zona-i y W_k es el peso molecular de la especie-k en la zona-i.

La temperatura en la zona se calcula, inicialmente y hasta el ángulo de transición (θ_t), de acuerdo con los perfiles ingresados a partir de los cálculos de CFD. Después del ángulo de transición, la *Ecuación de Energía basada en la Temperatura del Gas* es:

$$\rho^i c_v^i \frac{dT^i}{dt} = - \sum_{k=i}^K \dot{\omega}_k^i W_k u_k^i - \frac{P^i dV^i}{V^i dt} - \frac{h_{pared}^i (T^i - T_{pared}) A_{transf}^i}{V^i} \quad (2.17)$$

Donde P , T y V son la presión, temperatura y volumen de la zona-i, respectivamente; c_v es el calor específico a volumen constante de la mezcla en la zona-i y u_k es la energía interna de la especie-k en la zona-i.

La presión se calcula de acuerdo con la *Ecuación de Estado de Gas Ideal*. La forma en que se acopla el volumen de cada zona y la presión del sistema a través de una variable que actúa como un volumen acumulado de la zona ponderada por dicha presión como:

$$G^i = G^{i-1} + \rho^i V^i R T^i \left(\sum_{k=i}^K \frac{Y_k^i}{W_k} \right) \quad (2.18)$$

Luego, la presión en el sistema se calcula como:

$$P = \frac{G^{zona-K}}{V_{inst}} \quad (2.19)$$

Donde G^{zona-K} es la variable de acople de la última zona (zona más fría).

Capítulo 3

Metodología

3.1. Metodología Experimental

3.1.1. Montaje Experimental

Las validaciones de las simulaciones desarrolladas se realizaron a partir de resultados experimentales obtenidos en las instalaciones del grupo de investigación. Para esto se usó un motor diesel de inyección directa de dos cilindros, de cuatro tiempos y refrigerado por aire. La cámara de combustión de este motor fue modificada para facilitar la obtención de la combustión HCII; se pasó de un pistón con *bowl* a un pistón de cabeza plana. Lo anterior conlleva a que se eliminen ciertos patrones de flujo en la cámara de combustión cerca del PMS, con lo cual se reduce la transferencia de calor por convección del gas hacia las paredes de la cámara, facilitando el alcance de las condiciones de auto-ignición de la mezcla. Las pruebas se desarrollaron a 1800 rpm, para lo cual se usó un motor eléctrico (*WEG PG020183CSA* de 15 kW) para arrastrar el motor de combustión interna, motor eléctrico controlado con un variador de velocidad (*Schneider ATV-312HD15M3*) con el fin de asegurar el régimen de giro. La **Tabla 3.1** presenta las características técnicas del motor.

El motor fue operado con una mezcla simulada de biogás, para la cual se usó gas natural (GN) y dióxido de carbono en una proporción aproximada de 60 % GN y 40 % CO₂ (en base molar). El gas natural (valores reportados por la central de distribución de Sebastopol, Antioquia) usado tiene una composición aproximada de 83.658 % CH₄, 9.325 % C₂H₆, 3.415 % C₃H₈, 1.164 % C₄+, 0.687 % N₂ y 1.751 % CO₂ (base molar). La **Tabla 3.2** presenta las propiedades más importantes del biogás usado en las pruebas experimentales.

En la **Figura 3.1** se presenta el esquema del montaje experimental donde se desarrollaron las pruebas experimentales.

El combustible gaseoso fue suministrado vía cilindros comprimidos y el flujo controlado a partir de un medidor de flujo sónico, el cual a través de transductores electrónicos de presión manométrica (*NOVUS NP-430D*) permitían ajustar la presión de descarga de cada gas (y por ende la cantidad de flujo) a partir de las condiciones de presión y temperatura en la admisión, teniendo así un control abierto-*en línea* de la proporción requerida en los flujos para mantener la composición y del dosado relativo.

Las condiciones de auto-ignición al interior del cilindro se alcanzaron mediante el calentamiento del aire de carga, para la cual se empleó un calentador eléctrico *Oshram-Sylvania* de 6 kW de 1 – 1/4". El control de la temperatura del aire de carga se realizó mediante un lazo abierto, donde el control en lazo cerrado del valor de los pulsos de corriente y el ancho de estos se realizó mediante un control PID a partir de la temperatura del aire justamente a la salida

del calentador. Las condiciones de presión y temperatura en la admisión se midieron con un transductor de presión absoluta (*Wika A-10*) y con un termocupla tipo-K, respectivamente.

Tabla 3.1: Características técnicas del motor.

Motor	Motor diésel de inyección directa y cuatro tiempos, Lombardini 25LD425/2, de dos cilindros, refrigerado por aire
Aspiración de la carga	Natural
Cilindrada (cm ³)	851
Relación de compresión original	19 : 1
Relación de compresión modificada	17.2 : 1
Diámetro cilindro x Carrera (mm)	85x75
Longitud entre centros de la biela (mm)	117.5
Cantidad de válvulas: admisión, escape	1, 1
Avance a la apertura de la admisión: ángulos de giro de cigüeñal antes del PMS	10
Retraso al cierre de la admisión: ángulos de giro de cigüeñal antes del PMS	115
Avance a la apertura del escape: ángulos de giro de cigüeñal después del PMS	120
Retraso al cierre del escape: ángulos de giro de cigüeñal antes del PMS	15
Duración e intervalo del cruce válvulas	36° - [20° aPMS, 16° dPMS]
Potencia máxima (kW @ 3600 rpm)	14
Torque máximo (Nm @ 2400 rpm)	40.5
Cámara de combustión original	Con <i>bowl</i>
Cámara de combustión modificada	Plana

Tabla 3.2: Propiedades de los combustibles.

Propiedad	Gas Natural	Biogás
Poder calorífico inferior (MJ/kg)	47.264	18.511
Factor de aireación estequiométrico (kg _{aire} /kg _{combustible})	16.13	6.31
Índice inferior de Woobe (kWh/Nm ³)	16.39	6.31
Número de Metano*	71.74	-**

*Calculado de acuerdo a las ecuaciones 3 y 4 de la investigación de Kubesh y colaboradores [69].

**Debido a la alta concentración de CO₂, no es posible calcular el número de metano con las ecuaciones de la investigación de Kubesh y colaboradores.

La presión en el cilindro se midió a partir de un sensor piezoeléctrico (*Kistler 6125C*), el cual fue conectado a un amplificador de carga (*Kistler 5064*) integrado en un acondicionador de señal (*Kistler SCP 2853*). La posición angular del cigüeñal se obtuvo mediante un encoder (*Nord 8.5820.0H40.1024.5093.0015*) con una resolución de 3600 pulsos por giro.

Para la adquisición de la información generada por los diferentes sistemas de medición presente en la **Figura 3.1** se usó un conjunto de tarjetas y módulos de adquisición *National Instruments*, siendo la información de la presión al interior en el cilindro recolectada a una tasa de 250 kHz, con resolución de 16 bits. Si bien en la **Figura 3.1** se presentan otros sistemas de medición y periféricos diferentes a los ya descritos, estos no son abordados por no ser de interés en el desarrollo de este trabajo de investigación y no haberse utilizado durante la fase experimental. Durante la experimentación se usó de un código de diagnóstico de la combustión basado en el *Heat Release Analysis* [37, 70] para tener información del proceso de combustión en línea, usando el programa *LabVIEW*. En este código fueron supervisadas diferentes variables (presión media indicada, CA10, CA50, ángulo de giro de cigüeñal de la presión máxima, intensidad de ringing, entre otros) para definir los puntos experimentales a usarse en la validación de la metodología numérica, **Figura 3.2**.

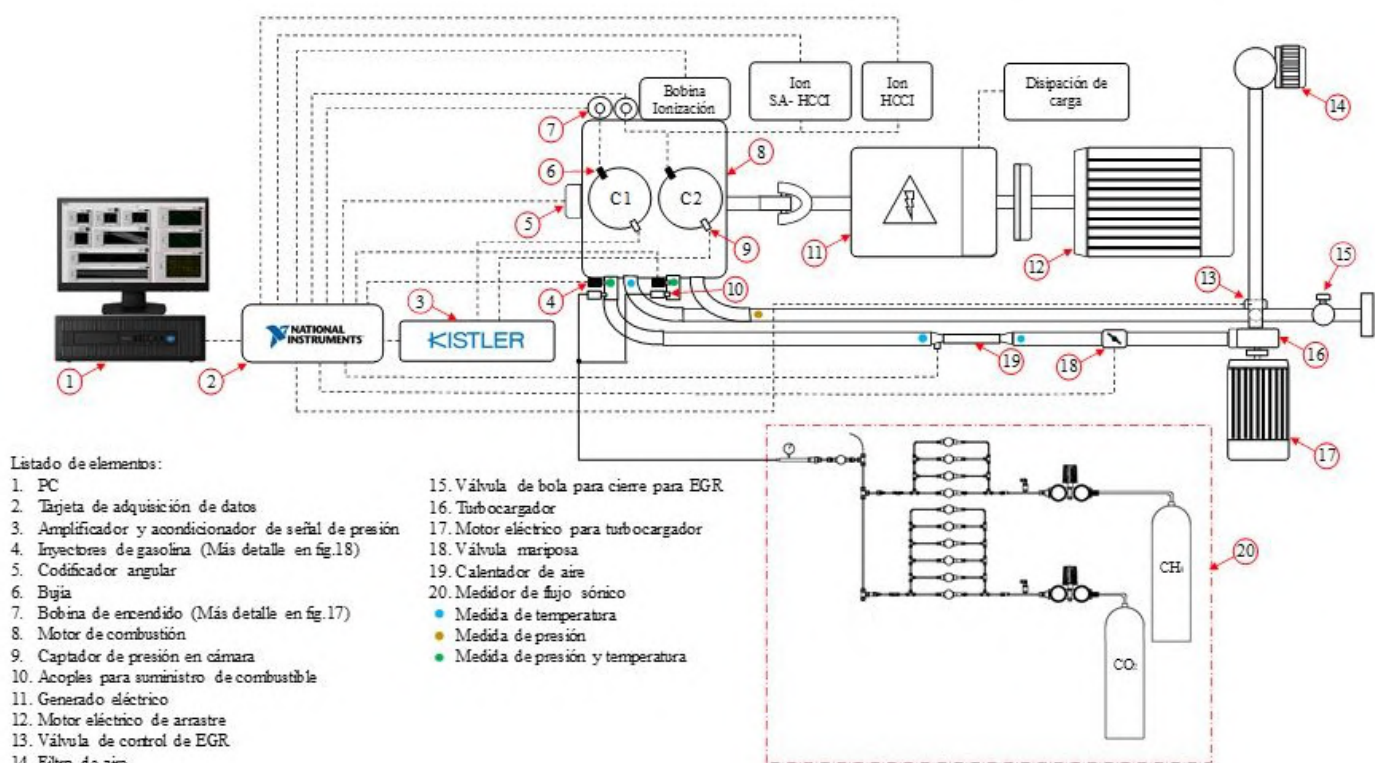
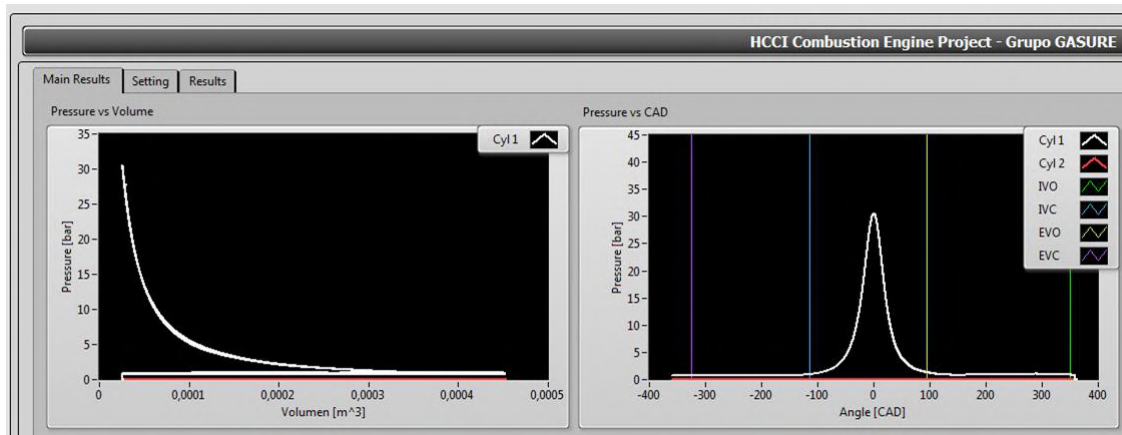
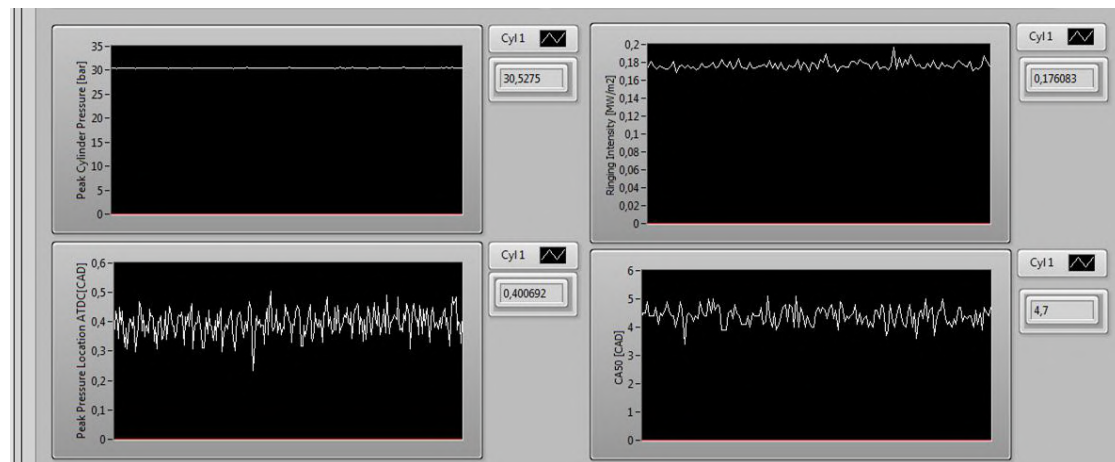


Figura 3.1: Esquema del montaje experimental.



(a)



(b)

Figura 3.2: Código de diagnóstico de combustión en línea. (a) Gráficas P-V y presión en el cilindro vs ángulo de giro de cigüeñal; (b) Diferentes variables asociadas al diagnóstico de la combustión.

3.1.2. Diagnóstico de la Combustión

Para el diagnóstico de la combustión, se usó la metodología del *Heat Release Analysis* [37, 70], así como otros parámetros para el análisis de la estabilidad de la combustión y la operación del motor en un rango seguro (baja dispersión cíclica y ausencia de ringing). El diagnóstico de la combustión se basa en el balance de energía al interior del cilindro durante el período de válvulas cerradas:

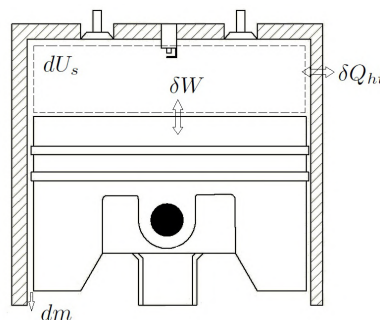


Figura 3.3: Balance de energía al interior del cilindro.

Bajo diferentes hipótesis, tales como:

- La presión en la cámara de combustión es uniforme.
- El fluido de trabajo se asume como una mezcla de gases ideales que se encuentra en equilibrio químico.
- La composición del fluido es homogénea espacialmente.
- Las propiedades termodinámicas del fluido de trabajo son funciones de la temperatura, siendo ésta la temperatura promedio obtenida mediante la ecuación de gases ideales a partir de la presión medida en el cilindro y el volumen basado en la geometría del mecanismo pistón-biela-manivela [37].
- La transferencia de calor hacia las paredes de la cámara de combustión se realiza a través de relaciones semi-empíricas.
- La masa contenida en el cilindro que se fuga hacia el cárter a través de los anillos, se modela como un flujo isentrópico unidimensional.

De este modo, la energía química liberada por el combustible y las diferentes interacciones de energía (en el dominio del ángulo de giro de cigüeñal) se puede expresar como:

$$\frac{dQ_{ch}}{d\theta} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma - 1} V \frac{dp}{d\theta} + h_{cr} \frac{dm_{cr}}{d\theta} + \frac{dQ_{ht}}{d\theta} \quad (3.1)$$

Donde Q_{ch} representa la “energía química” liberada durante la combustión [J], γ es la relación de calores específicos [-], p es la presión al interior del cilindro [Pa], V es el volumen instantáneo desplazado por el pistón [m³], h_{cr} es la entalpía específica de la masa que se fuga a través de los anillos, la cual se calcula a las condiciones al interior del cilindro [J/kg], m_{cr} es el flujo de masa que sale de la cámara de combustión hacia la zona de “crevice” y posteriormente al cárter [kg], y Q_{ht} es la transferencia de calor entre el gas y las paredes de la cámara de combustión [J].

El volumen instantáneo desplazado por el pistón se calcula como:

$$V = V_c + \frac{V_c}{2} (R_c - 1) [R + 1 - \cos\theta - (R^2 - \sin^2\theta)^{1/2}] \quad (3.2)$$

Donde V_c es el volumen de la cámara de combustión en el PMS [m³], R_c es la relación de compresión [-] y R es el cociente entre la longitud entre centros de la biela y el radio del cigüeñal [-].

El flujo másico que sale de la cámara de combustión se modela de acuerdo con la teoría de flujo isentrópico adimensional, teniéndose que cuando el flujo “está chocado”¹:

$$\dot{m}_{cr} = \frac{C_D A_{RP}}{(RT)^{1/2}} \gamma^{1/2} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (3.3)$$

El flujo se considera chocado cuando:

$$\frac{p_{atm}}{p} \leq \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (3.4)$$

¹Cuando el flujo está ligeramente por debajo de las condiciones sónicas, en condiciones sónicas o condiciones supersónicas

Cuando el flujo no está chocado, se tendrá que:

$$\dot{m}_{cr} = \frac{C_D A_R p}{(RT)^{1/2}} \left(\frac{p_{atm}}{p} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \left\{ \frac{2\gamma}{\gamma-1} \left[1 - \left(\frac{p_{atm}}{p} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] \right\}^{1/2} \quad (3.5)$$

En las **Ecuaciones 3.3, 3.4 y 3.5**, C_D es el coeficiente de descarga equivalente para el conjunto de anillos del pistón [-], A_R es un área de referencia, en este caso se toma como el área resultante entre el diámetro del cilindro y el diámetro del pistón [m²], T es la temperatura del fluido al interior del cilindro [K], R es la constante de gas ideal del fluido al interior del cilindro [J/kg.K] y p_{atm} es la presión atmosférica [Pa].

Por último, la transferencia de calor se calcula teniendo como base la correlación de Woschni, pero teniendo en cuenta los cambios introducidos por Chang y colaboradores [71, 72]:

$$\dot{Q}_{ht} = h A_s (T - T_{pared}) \quad (3.6)$$

$$h = \alpha_e L^{-0.2} p^{0.8} T^{0.73} v^{0.8} \quad (3.7)$$

$$v = C_1 S_p + \frac{C_2}{6} \frac{V_d T_{IVC}}{p_{IVC} V_{IVC}} (p - p_{arrastrado}) \quad (3.8)$$

En las **Ecuaciones 3.6, 3.7 y 3.8**, h es el coeficiente convectivo instantáneo entre el gas y las paredes de la cámara de combustión [W/m².K], A_s es el área superficial total instantánea de la cámara de combustión [m²], T_{pared} es la temperatura de las paredes de la cámara de combustión, la cual se toma como un valor constante durante el intervalo de válvulas cerradas [K]; α_e es un coeficiente de escalado para ajustar el flux de calor obtenido; este ajuste se realizó comparando el valor máximo de calor liberado con la eficiencia de combustión vía análisis de emisiones, utilizándose un valor de 2.5; L es la altura instantánea de la cámara de combustión [m], v es la velocidad del gas al interior del cilindro inducida por la combustión [m/s], C_1 y C_2 son constantes del modelo que toman los valores de 2.28 [-] y 0.00324 [m/s.K], respectivamente, V_d es la cilindrada del motor [m³], T_{IVC} [K], p_{IVC} [Pa] y V_{IVC} [m³] son la temperatura, presión y volumen al interior de la cámara de combustión en el ángulo de cierre de la válvula de admisión, y $p_{arrastrado}$ es la presión de motor arrastrado [Pa].

Al integrar la **Ecuación 3.1** entre el inicio de la combustión y el final de la combustión, se obtiene la *Liberación de Calor Global* durante la combustión:

$$Q_{ch} = \int_{\theta_i}^{\theta_f} \frac{dQ_{ch}(\theta)}{d\theta} d\theta \quad (3.9)$$

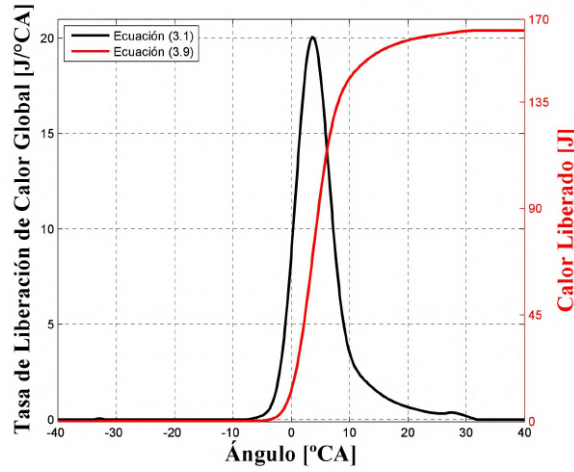


Figura 3.4: Curvas de tasa de liberación de calor y calor liberado. Condiciones de operación del motor: Combustible= 60 % GN-40 % CO₂; $\phi = 0.38$; $T_{ad} = 318^{\circ}C$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

La tasa a la cual se quema el combustible se relaciona con la tasa a la cual se libera el calor (**Ecuación 3.1**) mediante el poder calorífico inferior del combustible:

$$PCI m_f \frac{dx_b(\theta)}{d\theta} = \frac{dQ_{ch}(\theta)}{d\theta} \quad (3.10)$$

Donde PCI es el poder calorífico del combustible [J/kg], m_f es la masa de combustible que ingresa al cilindro [kg] y x_b es la fracción de masa quemada (o de liberación de energía) [-]. Si el perfil obtenido en la **Ecuación 3.10** se normaliza para obtener la unidad mediante su valor máximo, se obtiene la *Fracción de Masa Quemada Normalizada* o *Fracción de Liberación de Energía/Calor Normalizado*.

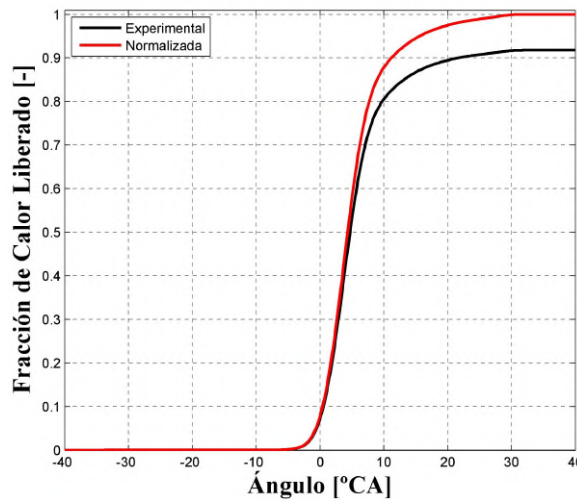


Figura 3.5: Perfiles de fracción de calor liberado global (Ecuación 3.10) experimental y normalizada. Condiciones de operación del motor: Combustible= 60 % GN-40 % CO₂; $\phi = 0.38$; $T_{ad} = 318^{\circ}C$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

3.1.3. Variables de Respuesta

Según los objetivos de una rutina de medición en MCIA, existen diferentes variables de respuesta que permiten cuantificar el desempeño del motor o algunas características del proceso de combustión. Dado que el objetivo general de este trabajo de investigación es abordar una metodología numérica, no se realizará un análisis exhaustivo del proceso de combustión y del desempeño mecánico y ambiental del motor mediante las diferentes variables de respuesta existentes en la literatura especializada. Sin embargo, se utilizará algunas de las variables de respuesta para evaluar el nivel de acuerdo de los resultados numéricos con los resultados experimentales, verificar la capacidad de la metodología para reproducir elementos característicos de las combustión HCCI y generar información que permita tener una aproximación teórica a las discrepancias que pudiesen presentarse entre los resultados numéricos y experimentales. Entre las variables de respuesta a utilizar en este trabajo de investigación se encuentra:

- *Presión media efectiva indicada*: Es un parámetro que permite, además de evaluar la dispersión cíclica del motor, comparar el desempeño del motor independientemente del tamaño de este. Este parámetro se define como el cociente entre el trabajo indicado por ciclo termodinámico del motor y el volumen total desplazado (o la cilindrada):

$$IMEP = \frac{W_i}{V_d} = \frac{\oint pdV}{V_d} \quad (3.11)$$

El trabajo indicado se obtiene al integrar la curva presión-volumen, **Figura 3.6**. Según el segmento área de la curva presión-volumen se tendrá la *Presión Media Efectiva Indicada Global* o la *Presión Media Efectiva Indicada Neta* [37].

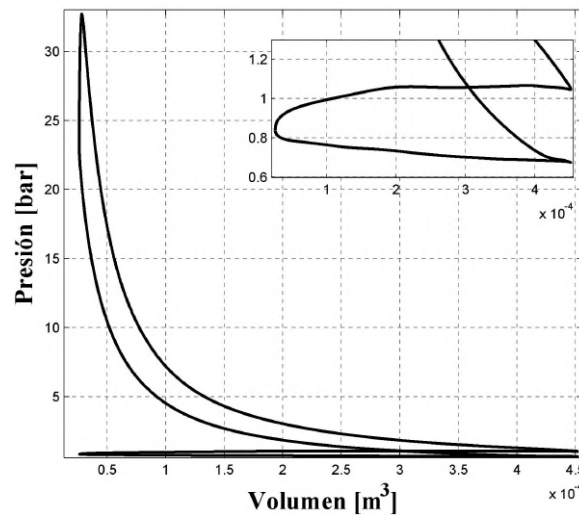


Figura 3.6: Curva presión-volumen de un motor HCCI. Condiciones de operación del motor: Combustible= 60 % GN-40 % CO₂; $\phi = 0.38$; $T_{ad} = 318^\circ C$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

- *Eficiencia indicada*: Este parámetro permite evaluar la capacidad de generación de trabajo del motor respecto a la energía suministrada por el combustible. La *Eficiencia Indicada* se calcula a partir del cociente entre el trabajo indicado y la energía ingresada por el combustible:

$$\eta_i = \frac{W_i}{m_f PCI} \quad (3.12)$$

- *Inicio, CA50 y duración de la combustión:* A partir de la curva de *Fracción de Calor Liberado*, **Figura 3.5**, es posible estimar la duración de la combustión y un parámetro de centrado de la combustión.

El inicio de la combustión en esta investigación se define como el ángulo de giro de cigüeñal donde se alcanza el 10 % de la *Fracción de Masa Quemada Normalizada*:

$$IC = CA10_n = \frac{dQ_{ch}(\theta)}{d\theta} = 0.1 \quad (3.13)$$

El final de la combustión en esta investigación se define como el ángulo de giro de cigüeñal donde se alcanza el 90 % de la *Fracción de Masa Quemada Normalizada*:

$$FC = CA90_n = \frac{dQ_{ch}(\theta)}{d\theta} = 0.9 \quad (3.14)$$

Por último, para caracterizar el centrado de la combustión se usa el ángulo donde se libera el 50 % de la energía contenida en el combustible, el cual permite estimar si la combustión está adelantada (gran parte de la combustión se da al final de la carrera de compresión) o está retrasada (gran parte de la combustión se da durante la carrera de expansión):

$$CA50 = \frac{dQ_{ch}(\theta)}{d\theta} = 0.5 \quad (3.15)$$

- *Intensidad de ringing:* La operación de los motores bajo combustión HCCI a altas cargas o altas temperaturas en la admisión se ve limitada por las altas tasas de incremento en la presión, generándose oscilaciones de presión al interior del cilindro análogas a la combustión anormal por auto-ignición de la mezcla sin quemar cerca a las paredes en los MEP. Para diferenciar este tipo de combustión anormal en la combustión HCCI se suele usar el término *ringing* y utilizar la relación provista por Eng [24] para cuantificar la intensidad (*Intensidad de Ringing*) de las oscilaciones de presión al interior del cilindro:

$$IR = \frac{1}{2\gamma} \frac{\beta \left(\frac{dp}{dt}\right)_{max}^2}{p_{max}} \sqrt{\gamma RT_{max}} \quad (3.16)$$

Donde $\left(\frac{dp}{dt}\right)_{max}^2$ es la tasa máxima de incremento de la presión, p_{max} es la presión máxima alcanza al interior en el cilindro, T_{max} es la temperatura máxima alcanzada al interior del cilindro (la cual se calcula mediante la ecuación de estado de gases ideales) y β es un factor de escala que relaciona la amplitud de pulsación de la presión con la tasa máxima de incremento de la presión; aunque este es un factor que se halla de manera experimental, suele presentar pocas variaciones y se recomienda usar un valor de 0.05 [23, 24].

3.1.4. Procedimiento Experimental

Para realizar la validación de la metodología se realizaron un conjunto de experimentos donde se variaron las condiciones de temperatura en la admisión y el dosado relativo con el cual operó el motor, con el fin de evaluar su capacidad de predicción bajo diferentes condiciones de operación. Dado que el motor operó bajo aspiración natural, los requerimientos de temperatura

de la carga en la admisión para lograr la auto-ignición del biogás cerca del PMS fueron muy altos (superiores a 300 °C), lo cual conllevó a un estrecho rango de operación del motor.

Se realizó un diseño experimental factorial de acuerdo con la metodología descrita por Montgomery [73] con el fin observar el efecto de las variaciones de la temperatura y el dosado relativo sobre la metodología numérica, los efectos de estos cambios en la fluido dinámica del motor y la estratificación de la carga, y la capacidad de la metodología numérica de captar las tendencias en los parámetros de la combustión y el desempeño mecánico y ambiental del motor. La **Tabla 3.3** presenta los niveles y factores evaluados en el diseño experimental, cada uno de los cuales fue replicado.

Para cada combinación de niveles y factores presentados en la **Tabla 3.3**, se almacenaron las curvas de presión de 100 ciclos termodinámicos tras obtener una operación estable del motor, estabilidad verificada a partir de la variabilidad del $IMEP_{neta}$ y de la presión máxima, y el CA50, mediante el código de diagnóstico en línea. La **Tabla 3.4** presenta los datos más importantes sobre la precisión e incertidumbre de los instrumentos usados durante los experimentos.

Tabla 3.3: Diseño factorial experimental para validación de la metodología.

Factor	Descripción del nivel	Designación del nivel
Temperatura en la admisión [°C]	1	325
	2	330
Dosado relativo [-]	1	0.28
	2	0.30
	3	0.42
Presión en la admisión [bar]	1	0.84
Régimen de giro [rpm]	1	1800

Tabla 3.4: Precisión e incertidumbre asociada a las variables medidas.

Medida	Resolución	Precisión
Presión en el cilindro	± 0.02 bar	4 %
Temperatura	± 0.2 °C	4 %
Presión en la admisión	± 0.01 bar	0.5 %
Ángulo de giro de cigüeñal	± 0.1 °CA	8 %
Régimen de giro	± 5 rpm	1 %
O ₂	± 0.1 %vol	0.2 % de la escala completa
CO	± 1 ppm	5 % del valor medido
NO _x	± 1 ppm	± 5 ppm
Variables Calculadas		
Flujo másico de biogás	± 3 mg/s	4 %
Flujo másico de aire	± 0.1 mg/s	2 %

3.2. Metodología Numérica

La metodología numérica, al ser una metodología secuencial, consiste en el desarrollo de simulaciones numéricas en dos etapas. Una primera etapa en la que mediante simulaciones CFD se obtiene la evolución de los campos de flujo al interior del cilindro previo el inicio de la combustión, permitiendo obtener el perfil de temperatura de las regiones/zonas en la que se

divide el volumen al interior del cilindro, respecto al ángulo de giro de cigüeñal, y la masa de la mezcla aire/combustible contenida en dichas zonas; y una segunda etapa en la que se modela el inicio y desarrollo de la combustión a partir de modelos termodinámicos cero dimensionales alimentados por los perfiles de temperatura y distribución de masa de las zonas obtenidos en la etapa previa, donde la evolución termodinámica y el cambio en la composición de los gases contenidos en cada una de las zonas se obtiene a partir de mecanismos de reacción detallados. La primera etapa de la metodología se llevó a cabo en el programa *ANSYS 15*, usando el programa *ANSYS Workbench* para el desarrollo de la malla y el programa *ANSYS Fluent* para llevar a cabo los cálculos numéricos. La segunda etapa se llevó a cabo en el programa *CHEMKIN Pro*. En esta sección se detallan los diferentes elementos (pasos, métodos, esquemas numéricos, etc.) que se usaron para configurar los casos simulados en cada uno de los programas.

3.2.1. Generación de la Malla

El modelado CFD del ciclo completo de un MCIA requiere de una malla capaz de adaptarse a las variaciones del volumen físico al interior de los ductos de admisión y escape, y al interior del cilindro, debido al movimiento de las válvulas y del pistón. Por otro lado, la diferencia en las condiciones del campo de flujo en los ductos del motor, al interior del cilindro y alrededor de las válvulas, conlleva a que la malla que modela el motor no solo se adapte a los cambios de volúmenes, sino que sea capaz de captar dichos cambios en las variables del campo de flujo. Los anteriores requerimientos conllevan a que este tipo de simulaciones sólo se puedan llevar a cabo mediante el uso de mallas dinámicas de fronteras móviles y que usen un mallado no estructurado con el fin de reducir el número de celdas (y por ende de operaciones numéricas). La malla se generó a partir de un CAD simplificado de la cámara de combustión y los ductos de admisión y escape, **Figura 3.7**. La relación de compresión geométrica² del dominio computacional usada en ésta investigación es de 17 : 1, relación de compresión geométrica que presentó el mejor ajuste de presión con la curva de presión promedio bajo condiciones de motor arrastrado, de seis relaciones de compresión evaluadas de 16.9 : 1 a 17.4 : 1. En la **Tabla 3.5** se presentan los valores de la relación de compresión efectiva³ y los volúmenes al interior del cilindro en el PMS y en el cierre de la válvula para las diferentes relaciones de compresión geométricas evaluadas. Se observa en la **Figura 3.7** que el CAD usado corresponde a una geometría simplificada (aunque conserva las principales dimensiones de la cámara de combustión, ductos y válvulas) en la cual se han redondeado bordes, eliminado vértices innecesarios, bordes y caras menores, así como simplificado la forma de los ductos de admisión y escape (**Figura 3.8**); esto con el fin de reducir el número de celdas requeridas en la malla y mejorar la calidad de esta.

Tabla 3.5: Características de las relaciones de compresión evaluadas.

Relación de compresión geométrica	Volumen PMS [cm ³]	Volumen IVC [cm ³]	Relación de compresión efectiva
16.9 : 1	26.76	358.28	13.39 : 1
17 : 1	26.59	358.11	13.47 : 1
17.1 : 1	26.43	357.94	13.54 : 1
17.2 : 1	26.27	357.78	13.62 : 1
17.3 : 1	26.10	357.62	13.70 : 1
17.4 : 1	25.95	357.46	13.78 : 1

²Razón entre el volumen en el PMI y el volumen en el PMS.

³Razón entre el volumen en el cierre de la válvula de admisión y el volumen en el PMS.

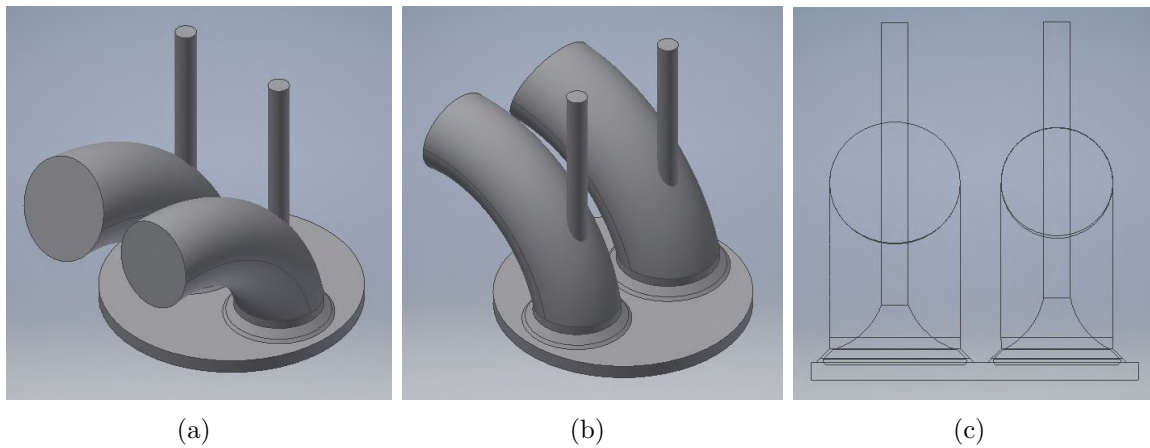


Figura 3.7: (a-b) Vistas isométricas del CAD usado para modelar la cámara de combustión y los ductos de admisión y escape del motor. (c) Detalle de la geometría de las válvulas.

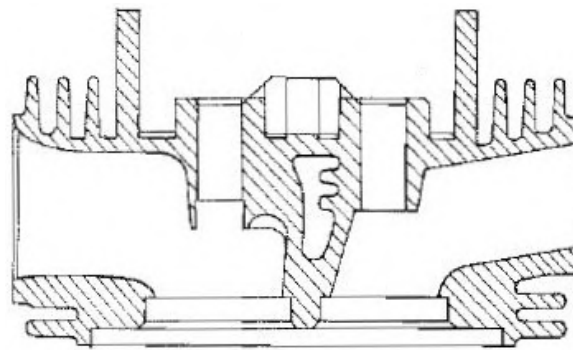


Figura 3.8: Forma de los ductos de admisión y escape de un motor perteneciente a la misma serie del motor usado en la investigación (imagen extraída del manual de servicio, Lombardini ®).

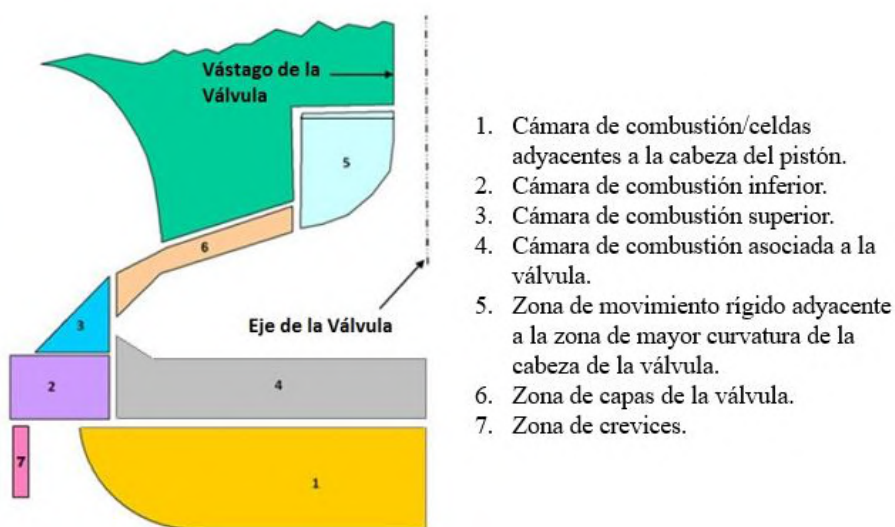


Figura 3.9: Regiones en la que se descompone la geometría de un motor de válvulas rectas en el programa *Workbench-ANSYS*. El caso mostrado corresponde a un pistón con *bowl*, donde la cabeza del pistón está representado por el borde inferior de la zona 1, mientras que el cilindro está representado por los bordes izquierdos de la zona 2 y 7.

Dado que las diferentes regiones de la malla se ven afectadas de diferente forma por el movimiento de las fronteras y debido al requerimiento de una malla no estructurada, se requiere dividir la malla en diferentes zonas/regiones [63, 74]. En la **Figura 3.9** se presentan la división en zonas usada para la geometría utilizada en esta investigación:

- *Zona 1: Cámara de combustión/pistón:* Esta zona consiste en el volumen de la cámara de combustión que está por debajo de la válvula en el PMS. Este volumen permanece fijo durante el desarrollo de la toda la simulación.
- *Zona 2: Cámara de combustión inferior:* Consiste en un volumen que sirve de “capa límite del domino” para capturar las interacciones del flujo con las paredes del cilindro y sirve como una segunda zona de transición para el flujo de alta turbulencia y velocidad que se genera entre la válvula y su puerto. En este volumen se van adicionando celdas a medida que el pistón desciende y se van eliminando celdas a medida que el pistón asciende.
- *Zona 3: Cámara de combustión superior:* Consiste en un volumen de celdas que sirven de una primera transición del flujo de alta velocidad cuando las válvulas inician su apertura y su cierre; así mismo, cumplen la función de convertirse en “celdas paredes” al momento del cierre de la válvula. Este volumen permanece fijo durante el desarrollo de la toda la simulación.
- *Zona 4: Cámara de combustión asociada a la válvula:* Es un volumen que acoge las celdas que se van generando a medida que el cilindro desciende, acogiendo los patrones de flujo que se desarrollan en la vecindad de la cara inferior de la válvula debido a su movimiento.
- *Zona 5: Zona de movimiento rígido:* Esta zona consiste en un volumen rígido que sigue el movimiento de la válvula que tiene como función capturar la concavidad física de la válvula sin afectar la *Zona 6*, facilitando la adición/eliminación durante el levantamiento de la válvula.
- *Zona 6: Zona de capas de la válvula:* Consiste en un volumen que es deformado por el movimiento de la válvula, en el cual se adicionan/eliminan celdas. Su principal función es capturar los gradientes de velocidad que se generan alrededor de las válvula durante su apertura y cierre.
- *Zona 7: Zona de crevices:* consiste en el volumen existente entre la cabeza del pistón y el primer anillo de este. Este volumen permanece fijo durante el desarrollo de la toda la simulación.

La división en zonas se realizó en el sub-programa *ICE-DesignModeler* de *Workbench-ANSYS*, el cual genera las relaciones topológicas y de conectividad entre las diferentes zonas y sus celdas a partir de las variaciones en el volumen del dominio computacional generado por el movimiento de las válvulas y el movimiento del pistón, **Figura 3.10**. El movimiento del pistón se obtiene a partir de las propiedades geométricas del mecanismo biela-manivela-pistón (análogo a lo considerado en la **Ecuación 2.14** para el cálculo del volumen instantáneo del motor).

El movimiento de las válvulas se obtiene mediante el ingreso del perfil de levantamiento de cada válvula. Estos perfiles fueron medidos en el laboratorio y luego se usó una curva *Spline* para interpolar valores de los perfiles con el fin de suavizar el movimiento de la válvulas y ajustar la información de de los perfiles al paso temporal de la simulación. En la **Figura 3.11** se presentan las curvas de valores interpolados y los valores medidos del levantamiento de las válvulas.

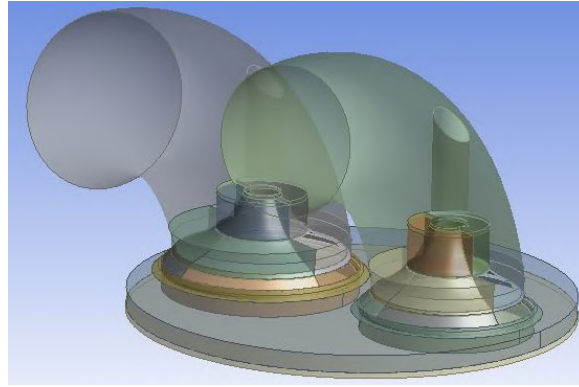


Figura 3.10: Zonas en las que se divide la geometría previo al mallado.

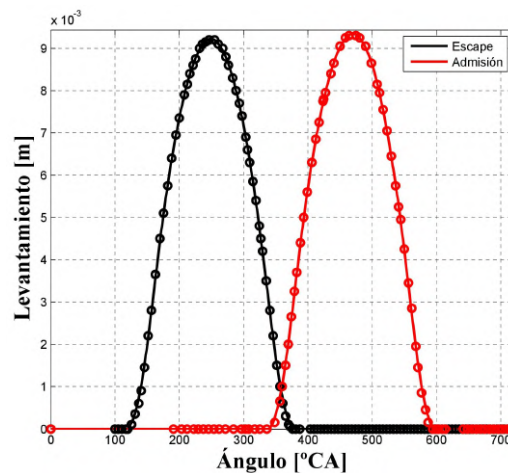


Figura 3.11: Perfiles de levantamiento de las válvulas. Líneas: valores interpolados; Puntos: valores medidos. 0°CA corresponde al PMS al inicio de la carrera de expansión.

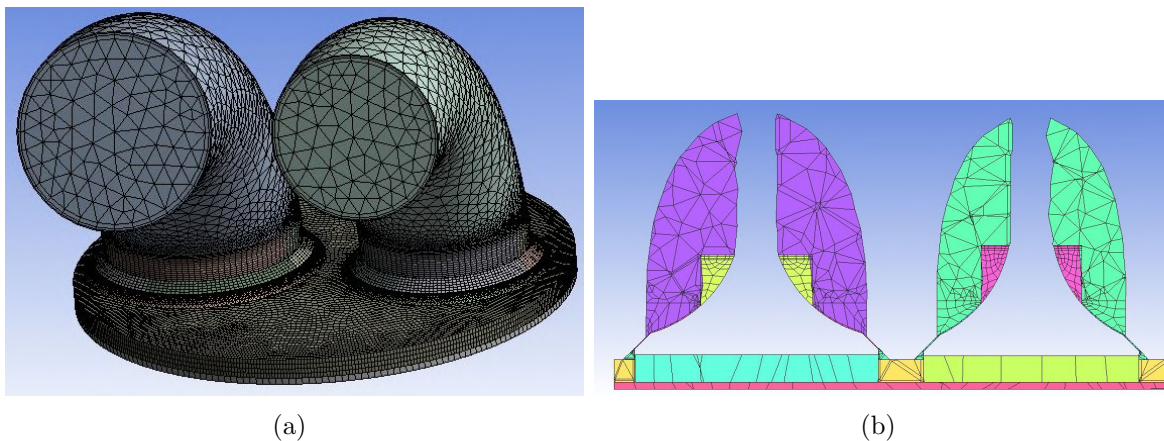


Figura 3.12: Geometría mallada. (a) Vista isométrica (b) Vista de corte.

Una vez dividida la geometría en las diferentes zonas, se procede a realizar el mallado de esta. El mallado se realiza en el sub-programa *ANSYS Meshing* de *Workbench-ANSYS*, el cual usa la topología ya generada en el programa anterior, junto con parámetros asociados a las dimensiones de la geometría para generar la cantidad de celdas adecuadas en cada una de las zonas. Las dimensiones mínimas de las celdas se configuran de acuerdo con el espacio existente

entre las válvulas y el asentamiento de éstas, y los criterios de calidad de la malla. Así mismo, dada las condiciones de flujo en cada una de las zonas de la malla, se usan diferentes tipos de celdas.

Para la independencia de mallado, se usaron tres mallas de diferente cantidad de celdas:

Tabla 3.6: Cantidad de celdas de las mallas usadas en la independencia de mallado.

Malla	PMS		PMI	
	Celdas	Nodos	Celdas	Nodos
Malla 1	155251	78683	426941	216379
Malla 2	418485	224951	1171758	629863
Malla 3	921728	545514	2304320	1363785

Los resultados de la independencia de mallado se presentan a continuación junto con la información de la configuración de las simulaciones realizadas.

3.2.2. Configuración de los Casos para las Simulaciones CFD e Independencia de Mallado

Las simulaciones de CFD para el análisis de la independencia de mallado se llevaron a cabo durante diferentes etapas. Antes de definir dichas etapas se procede a describir las configuraciones de modelos y *solvers* utilizados durante las simulaciones CFD.

3.2.2.1. Configuración de las Mallas Móviles

Para capturar el movimiento de las fronteras y su efecto sobre la solución del problema, se usaron los tres métodos de configuración de mallas disponibles en *ANSYS Fluent*:

- Método *Smoothing*: Configura la forma en que se deforman las celdas por efecto del desplazamiento de las fronteras en movimiento.
- Método *Layering*: Configura la generación/eliminación de celdas por delante de las fronteras en movimiento para evitar las celdas altamente distorsionadas.
- Método *Remeshing*: Configura el re-ordenamiento de nodos (y por ende de celdas) al interior de las zonas/regiones de la malla con el fin de evitar celdas altamente distorsionadas, lo cual ocurre generalmente cuando el desplazamiento de la frontera es mayor al tamaño de celda local de la zona de influencia de la frontera móvil.

En el método *Smoothing* se usa la *analogía del resorte*. En esta analogía, el desplazamiento de los nodos conectados por una cara está dada por la **Ley de Hook**:

$$\vec{F}_i = \sum_j^{n_i} k_{ij}(\Delta\vec{x}_j - \Delta\vec{x}_i) \quad (3.17)$$

Donde $\Delta\vec{x}_i$ y $\Delta\vec{x}_j$ son los desplazamientos del nodo- i y su vecino j , n_i es el número de nodos vecinos conectados al nodo- i y k_{ij} es la constante del resorte (o de rigidez) entre el nodo- i y su vecino j . La constante de rigidez del resorte en la **Ecuación 3.17** se define a partir de una constante definida por el usuario y la magnitud de la distancia entre los nodos en cuestión:

$$k_{ij} = \frac{k_{fac}}{\sqrt{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}} \quad (3.18)$$

Cuando se actualiza la malla, dada la multiplicidad de nodos y la posibilidad de traslape de estos, se asume que la “fuerza” neta en cada nodo generada por el movimiento de la frontera es cero, por lo que previo a la actualización de la malla, el desplazamiento de los nodos se calcula de forma iterativa a partir de la **Ecuación 3.19**:

$$\Delta \vec{x}_i^{m+1} = \frac{\sum_j^{n_i} k_{ij} \Delta \vec{x}_j^m}{\sum_j^{n_i} k_{ij}} \quad (3.19)$$

Siendo m es el número de la iteración.

En el caso de esta investigación, a k_{fac} se le da un valor de 0.05 lo cual indica que los nodos interiores estarán altamente influenciados por el movimiento de la frontera. Así mismo, para el movimiento de los nodos interiores se define un límite de 25 iteraciones de la **Ecuación 3.19** o un valor de 1×10^{-3} como tolerancia de convergencia, es decir:

$$\left(\frac{\Delta \vec{x}_i^m}{\Delta \vec{x}_i^1} \right) < 1 \times 10^{-3} \quad (3.20)$$

Donde \vec{x}_i^m es el desplazamiento del nodo- i en la iteración- m y \vec{x}_i^1 es el desplazamiento del nodo- i tras la primera iteración.

Ahora, para la aplicación del método *Layering*, en cada zona de celdas cercana a una frontera móvil se define un valor de altura de celda mínima (h_{min}) y una altura de celda ideal (h_{ideal}) de acuerdo con el tamaño de las celdas adyacentes a la frontera y el desplazamiento de la frontera en cada paso temporal. Cuando las celdas se expanden, se añadirán nuevas celdas cuando se cumpla la siguiente condición:

$$h_{min} > (1 + \alpha_s) h_{ideal} \quad (3.21)$$

Donde α_s es el factor de división o de ruptura, el cual toma el valor de 0.4 en esta investigación. Al momento de dividirse la celda, la razón entre la altura de la nueva celda y la antigua celda (la adyacente a la frontera) es exactamente α_s .

Cuando las celdas se comprimen, las capa de celdas adyacentes a las celdas contiguas a la frontera se comprimirán hasta una altura definida por la siguiente condición:

$$h_{min} < \alpha_c h_{ideal} \quad (3.22)$$

Donde α_c es el factor de colapso de la capa de celdas, el cual toma el valor de 0.2 en esta investigación. Cuando se cumple la **Ecuación 3.22**, la capa de celdas comprimidas se fusionan con la capa de celdas adyacentes a la frontera.

Por último, la aplicación del método *Remeshing* (el cual se aplica tanto a celdas interiores como a celdas asociadas a caras de la malla) se realiza cada cinco pasos temporales si las celdas cumplen una o varias de las siguientes condiciones:

- El valor del *skewness* de la celda supera el valor de 0.9.
- La longitud máxima de la celda es mayor al valor de 0.004441 m.
- La longitud mínima de la celda es menor al valor de 8.74×10^{-5} m.

La longitud mínima y máxima se definen de acuerdo con las dimensiones de la malla en el PMS.

3.2.2.2. Configuración de las Ecuaciones Gobernantes y las Condiciones de Frontera

Las simulaciones de CFD para el análisis de la independencia de mado se realizaron en tres pasos (pasos en los cuales se usó la presión en el cilindro de motor arrastrado como parámetro de comparación para las soluciones obtenidas):

1. Evaluando las tres mallas para las mismas condiciones de frontera, *solvers*, valores mínimos de residuales y usando el modelo de turbulencia k- ϵ estándar con valores de constantes por defecto.
2. Seleccionada la malla a usar en la investigación en el paso anterior, se procede a comparar la solución obtenida con el modelo de turbulencia k- ϵ RNG.
3. Se evalúa el efecto del modelo de masa de fugas (o *crevices*) en la simulación.

Dado que durante las simulaciones llevadas a cabo en *ANSYS Fluent* no se realiza el análisis de la combustión, las únicas ecuaciones gobernantes que se solucionan son la ecuación de continuidad, la ecuación de momentum, la ecuación de energía y la ecuación de especies, así como las ecuaciones de energía cinética turbulenta y la ecuación de la tasa de disipación de la turbulencia, asociadas al modelo de turbulencia.

Para el modelo de turbulencia, como se indicó anteriormente, se utilizó inicialmente el modelo de turbulencia k- ϵ estándar, incluyendo efectos de compresibilidad y usando funciones de pared estándar. En el modelo se usaron los valores por defecto presentados por el programa, es decir:

- Constante de proporcionalidad para el cálculo de la viscosidad turbulenta: $\mu = 0.09$.
- Constantes del modelo en la ecuación de la ecuación de transporte de la tasa de disipación: $C_{1\epsilon} = 1.44$ y $C_{2\epsilon} = 1.92$.
- Número de Prandtl turbulento para la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta: $Pr_k = 1$.
- Número de Prandtl turbulento para la ecuación de transporte de la tasa de disipación: $Pr_\epsilon = 1.3$.
- Número de Prandtl para la ecuación de energía: $Pr_{energ} = 0.85$.
- Número turbulento de Prandtl en la pared para las *Funciones de Pared*: $Pr_{pared} = 0.85$.
- Número turbulento de Schmidt: $Sc_t = 0.7$.

Para las ecuaciones de especies, se usa la información termodinámica del mecanismo de reacción *GRI 3.0*. Respecto al cálculo de las propiedades del fluido al interior del dominio, la densidad se calcula de acuerdo con la ley de gases ideales y el calor específico a presión constante se calcula usando los polinomios de ajuste del mecanismo. Para reducir el tiempo computacional, dado que se está simulando un flujo frío, la conductividad térmica y la viscosidad se toman como valores constantes, usando un valor medio de estas propiedades entre la temperatura máxima y mínima de la mezcla aire/combustible al interior del cilindro durante el intervalo de válvulas cerradas, asumiendo que la carga se puede modelar como si fuera solo aire con el fin de no incrementar el costo computacional. En la **Figura 3.13** se presentan las principales condiciones de frontera del dominio:

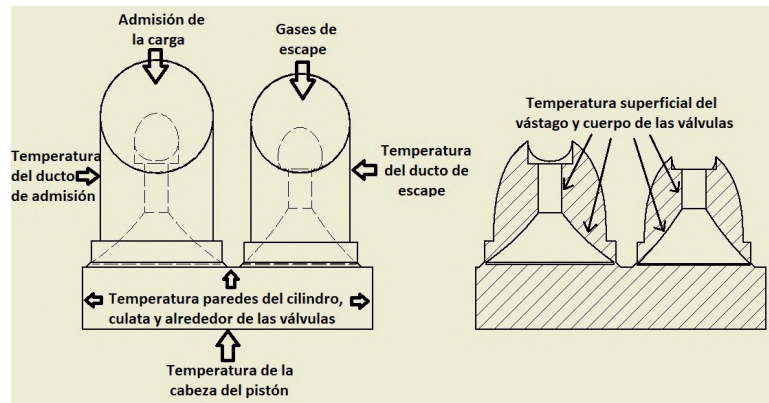


Figura 3.13: Principales condiciones de frontera del dominio computacional.

Las diferentes condiciones de frontera se definieron de la siguiente manera:

- Las condiciones de carga admitida se definen de acuerdo con la temperatura y la presión medidas en el ducto de admisión. La composición de la carga se define como una mezcla de aire seco más combustible, donde las fracciones másicas de las especies admitidas al cilindro se obtiene a partir del flujo de aire estimado y el flujo de gas natural y dióxido de carbono medido. Las condiciones de los gases de escape se definen de acuerdo con la temperatura y la presión medidas en el ducto de escape, mientras que la composición de los gases de escape se toma como la composición de equilibrio al final de la combustión obtenido mediante las rutinas de cálculo durante el pos-procesado de la información experimental.
- La temperatura de pared del ducto de admisión y de escape se estimó mediante la medición de la temperatura superficial externa del ducto de escape, y asumiendo que la transferencia de calor del fluido a los ductos se da en estado estacionario.
- La temperatura de las paredes del cilindro, de la culata y de la cabeza del pistón se asumen iguales. La variación de ésta temperatura con el dosado relativo se estima a partir de los valores promedio obtenidos tras el ajuste de la tasa de calor transferido a las paredes con la correlación de Hohenberg y la tasa de calor transferido a las paredes con las relaciones politrópicas en los intervalos usados para calcular los coeficientes politrópicos en la compresión y el escape [75].
- La temperatura superficial del cuerpo y de las válvulas de admisión de escape se tomaron como $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ mayor que la temperatura de las paredes al interior de la cámara de combustión. Este valor se definió a través de un conjunto de simulaciones llevadas a cabo para diferentes curvas de presión de motor arrastrado, teniendo como variable de respuesta la presión en el IVC.

Para todas las simulaciones llevadas a cabo en *ANSYS Fluent* se usó el esquema PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) como algoritmo de acople del campo de velocidades y de presión en el campo de flujo. Para el cálculo del campo de presión se utilizó el esquema PRESTO (Pressure Staggering Option). En relación a los métodos de discretización espacial, para los diferentes términos de las ecuaciones gobernantes se usa un esquema “*upwind*” de segundo orden. Respecto a los factores de relajación para las variables del campo de flujo, se usa un valor de 0.3 para la presión, de 1 para la densidad, las fuerzas de cuerpo, la viscosidad turbulenta y la fracción másica de las especies, un valor de 0.5 para el momentum y de 0.4 para las variables del modelo de turbulencia. Por último, los residuales usados como criterio de convergencia en cada paso temporal (el cual se tomó de $0.25\text{ }^{\circ}\text{C/A}$) fue de 1×10^{-6} para la

ecuación de energía y de 1×10^{-5} para las demás variables y ecuaciones gobernantes.

En la **Figura 3.14** se presentan los resultados de las simulaciones realizadas bajo condiciones de motor arrastrado, sin calentamiento del aire de admisión, para las tres mallas generadas. Se observa que para todas las curvas el error en el pico de presión son menores al 1%, pero todas las curvas se retrasan respecto a la curva promedio experimental alrededor de 0.6°CA . Este retraso se asocia principalmente a las simplificaciones geométricas y al uso de una relación de compresión equivalente (diferentes a la relación de compresión geométrica), así como el uso de una temperatura de pared promedio para toda la simulación y la ausencia de los efectos de fricción mecánica sobre el fluido.

Por otro lado, se observa que el pico de presión incrementa levemente de la *malla 1* a la *malla 2*, pero el pico de presión cae con la *malla 3*; lo ocurrido con la *malla 3* se asocia a que el incremento de celdas y nodos en la geometría tiene un límite asociado a los parámetros definidos en los modelos de mallas móviles utilizados, de este modo, durante el movimiento de las válvulas, el incremento de celdas y nodos lleva a la generación de celdas con mayor distorsión; si bien esto puede remediarse con parámetros más finos en los modelos de mallas móviles (por ejemplo, un criterio de *skewness* admisible más bajo en el modelo de re-mallado), esto conllevaría a que se incrementen los tiempos de iteración para la actualización de la malla y con ello mayor gasto computacional.

En la **Figura 3.15** se observan los resultados de la solución de la temperatura media para las tres mallas generadas y los resultados obtenidos a partir de las mediciones de la presión en el cilindro. Se observa que el retraso del pico de temperatura es mucho mayor que el retraso del pico de presión, esto asociado a lo anteriormente explicado para el caso de la presión. Se observa además que la metodología usada para estimar la temperatura promedio de las paredes del cilindro presenta un buen ajuste en la etapa temprana de la carrera de compresión y durante el intervalo donde se calcula el coeficiente politrópico de compresión experimental.

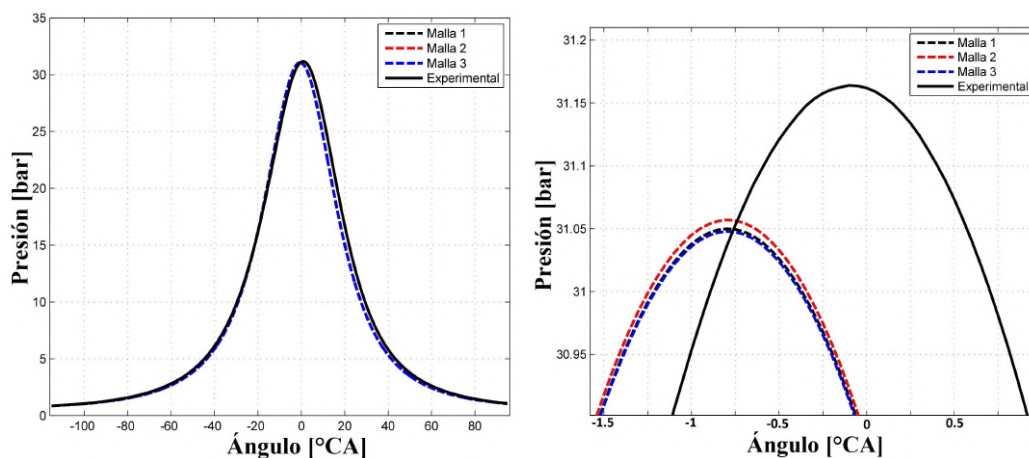


Figura 3.14: Resultado de independencia de mallado durante el intervalo de válvulas cerradas para las condiciones de motor arrastrado: (izq) resultados en el intervalo de válvulas cerradas, (der) ampliación de los resultados cerca al PMS. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.

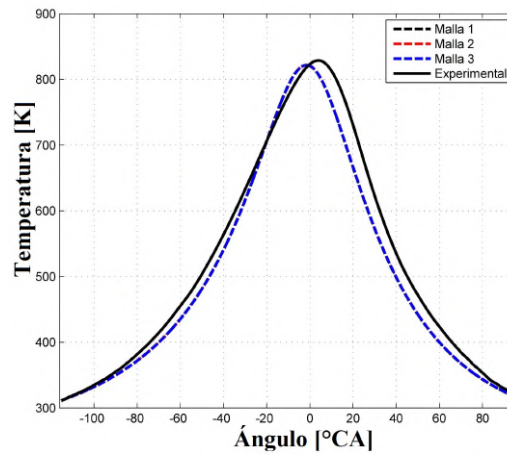


Figura 3.15: Resultado de independencia de mallado durante el intervalo de válvulas cerradas para las condiciones de motor arrastrado. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.

De acuerdo con estos resultados, se decide usar la *mall* 2 en esta investigación. En las **Figuras 3.16, 3.17 y 3.18** se presentan los parámetros de calidad de la *mall* 2 en el PMS para la razón de aspecto, la calidad ortogonal y el *skewness*, respectivamente. Se observa que más del 95% de las celdas cumplen con una buena calidad de mall, respecto a los parámetros de calidad ortogonal y el *skewness*; solo un pequeño porcentaje poseen valores cercanos al límite de mala calidad, asociados a las celdas que están cerca del cuerpo de la válvula, zona de mayor deformación de celdas. En relación con la razón de aspecto, se observa que la mall posee una buena distribución de tamaños de celdas, teniendo valores a lo sumo de 26, estos valores asociados a la celdas en el ducto de admisión.

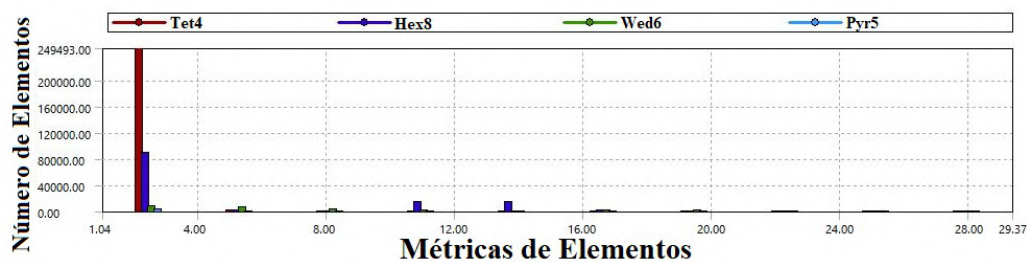


Figura 3.16: *Razón de Aspecto* en el PMS de la mall utilizada en la investigación.

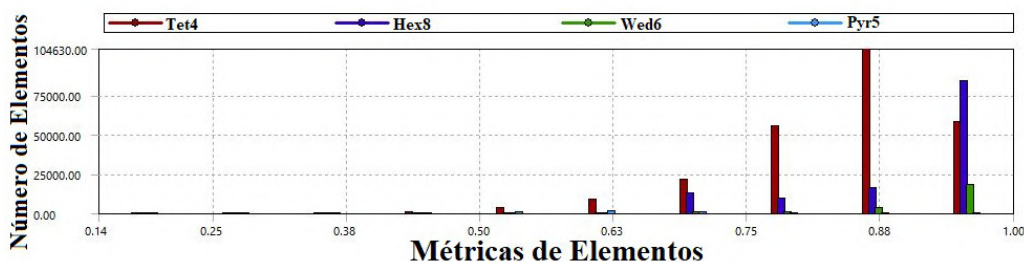


Figura 3.17: *Calidad Ortogonal* en el PMS de la mall utilizada en la investigación.

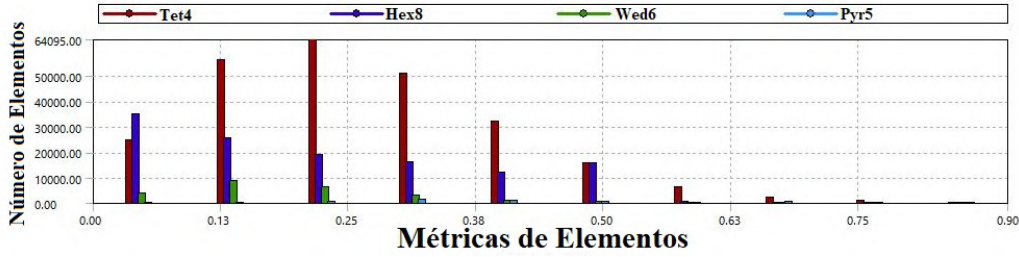


Figura 3.18: *Skewness* en el PMS de la malla utilizada en la investigación.

Elegida la malla, se procede a comparar las soluciones obtenidas variando el modelo de turbulencia, comparando los resultados previos (en la que se usó el modelo $k-\epsilon$ estándar) con los obtenidos al implementar el modelo $k-\epsilon$ RNG. En el modelo $k-\epsilon$ RNG se usaron los valores por defecto presentados por el programa y se tuvieron en cuenta los efectos de *swirl* sobre la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación de turbulencia:

- Constante de proporcionalidad para el cálculo de la viscosidad turbulenta: $\mu = 0.0845$.
- Constantes del modelo en la ecuación de la ecuación de transporte de la tasa de disipación: $C_{1\epsilon} = 1.42$ y $C_{2\epsilon} = 1.68$.
- Número turbulento de Prandtl en la pared para las *Funciones de Pared*: $Pr_{pared} = 0.85$.
- Factor de Swirl: $\alpha_s = 0.07$.

En la **Figura 3.19** se presentan los resultados para la presión en el cilindro bajo las condiciones de motor arrastrado para ambos modelos de turbulencia evaluados. Se observa que para el modelo $k-\epsilon$ RNG, respecto al $k-\epsilon$ estándar, se obtiene un pico de presión más alto y levemente avanzado.

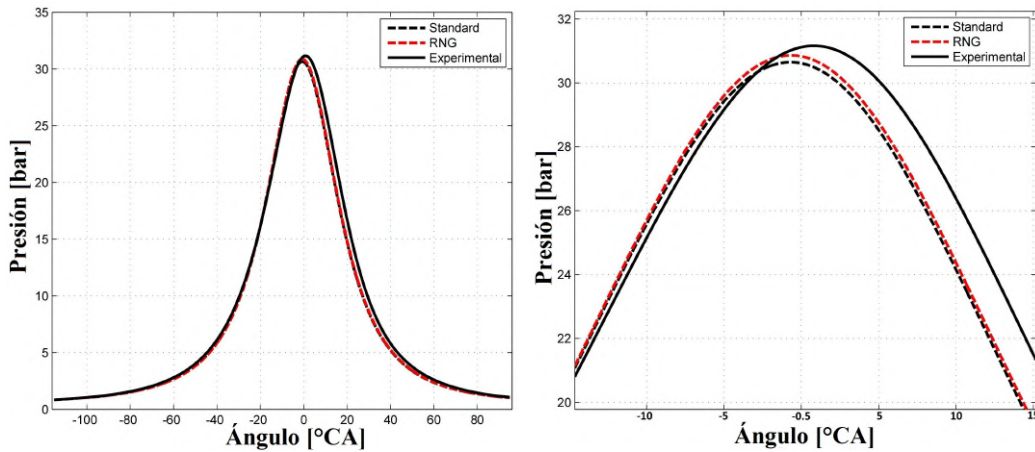


Figura 3.19: Comparación de los resultados obtenidos con los modelos de turbulencia durante el intervalo de válvulas cerradas para las condiciones de motor arrastrado. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.

Ahora, en la **Figura 3.20** se presentan los resultados de la energía cinética turbulenta promedio al interior del cilindro para ambos modelos durante todo el intervalo temporal de la simulación, donde 0 °CA corresponde al PMS al inicio de la carrera de la expansión y 720 °CA corresponde al PMS al final de la carrera de la compresión. Se observa que la magnitud de la energía

cinética turbulenta es mucho menor (diferencias de hasta el 50 % en la magnitud) en el modelo $k-\epsilon$ RNG durante la carrera de compresión; así mismo, se observa una diferencia en magnitud y forma de la energía cinética turbulenta durante el período de cruce de válvulas. Si bien esta diferencia no genera un cambio notorio en la curva de presión durante la carrera de compresión para condiciones de motor arrastrado, es un factor que puede tener un impacto importante en las simulaciones de los puntos experimentales evaluados respecto a la estratificación térmica y másica de la carga durante la carrera de compresión.

Complementando el análisis de los resultados obtenidos con los modelos de turbulencia evaluados, en la **Figura 3.21** se presentan los valores obtenidos para la tasa de disipación de la turbulencia promedio al interior del cilindro. Se observa cómo al igual que para la energía cinética turbulenta, los perfiles y magnitud de la tasa de disipación de la turbulencia presenta cambios importantes, teniéndose valores mucho más bajos durante la carrera de compresión, lo cual muestra el importante efecto del modelo de turbulencia, acompañado de la simulación del período de cruce de válvulas, en la captura de la estratificación térmica de la carga, ya que a menor tasa de disipación de turbulencia, se espera menor energía cinética turbulenta convertida en calor.

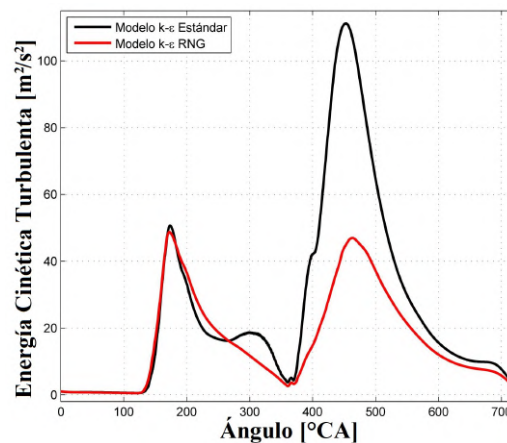


Figura 3.20: Resultados de la energía cinética turbulenta obtenidos para ambos modelos de turbulencia evaluados.

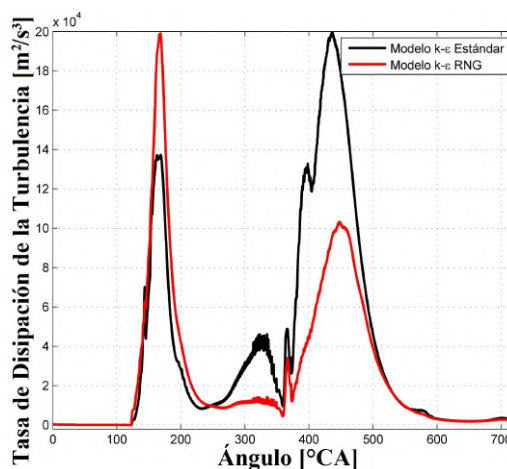


Figura 3.21: Resultados de la tasa de disipación de la turbulencia obtenidos para ambos modelos de turbulencia evaluados.

Finalmente, se presentan los resultados obtenidos para la evolución de la masa al interior del cilindro. En la **Figura 3.22** se presenta el esquema geométrico del modelo de masa de fugas.

En *ANSYS-Fluent*, el flujo másico entre el anillo y la pared del cilindro se modela como un flujo compresible laminar, mientras que el flujo a través de los anillos se modela como un flujo a través de un orificio.

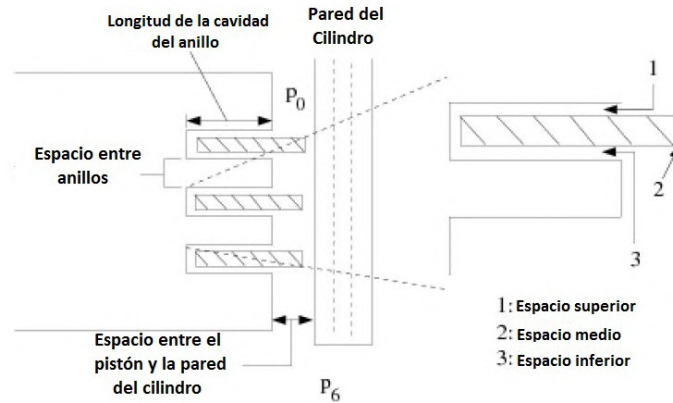


Figura 3.22: Esquema geométrico del modelo de masa de fugas.
Adaptado de *ANSYS-Fluent* [76]

En el primer caso, el flujo másico se calcula como:

$$\dot{m}_{ij} = C_d A_{ij} \rho c \eta_{ij} \quad (3.23)$$

Donde C_d es el coeficiente de descarga, A_{ij} es el área de flujo, ρ es la densidad del gas, c es la velocidad local del sonido y η_{ij} es el factor de compresibilidad, el cual se define como:

$$\eta_{ij} = \begin{cases} \frac{2}{\gamma-1} \left[\left(\frac{p_i}{p_j} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{p_i}{p_j} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right]^{0.5} & \frac{p_i}{p_j} > 0.52 \\ \left(\frac{2}{\gamma-1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} & \frac{p_i}{p_j} \leq 0.52 \end{cases} \quad (3.24)$$

Donde γ es la relación de calores específicos, p_i es la presión aguas arriba del nodo de la “red” y p_j es la presión aguas abajo del nodo de la “red”.

Para el segundo caso, el flujo másico se calcula como:

$$\dot{m}_{ij} = \frac{h_{ij}^2 (p_i^2 - p_j^2) A_{ij}}{24 W_r \mu_{gas} R T} \quad (3.25)$$

Donde h_{ij} es el área transversal de la sección por donde pasa el flujo entre la cavidad del anillo y la cara del anillo, μ_{gas} es la viscosidad local del gas, T es la temperatura del gas y R es la constante universal de los gases. Ahora bien, en el caso de la **Ecuación 3.24** se habla de nodo de “red” ya que el modelo de masa de fugas resuelve las ecuaciones a partir de la representación de las presiones entre el interior del cilindro y el cárter como una red de ecuaciones, tal como se observa en la **Figura 3.23**.

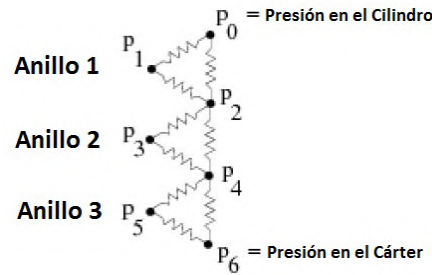


Figura 3.23: Representación en forma de red para solución del modelo de masa de fugas. Adaptado de *ANSYS-Fluent* [76]

El sistema de ecuaciones para esta representación de red es:

$$\begin{aligned}
 \frac{dp_1}{dt} &= \frac{p_1}{m_1} (\dot{m}_{01} - \dot{m}_{12}) \\
 \frac{dp_2}{dt} &= \frac{p_2}{m_2} (\dot{m}_{02} + \dot{m}_{12} - \dot{m}_{23} - \dot{m}_{24}) \\
 \frac{dp_3}{dt} &= \frac{p_3}{m_3} (\dot{m}_{23} - \dot{m}_{34}) \\
 \frac{dp_4}{dt} &= \frac{p_4}{m_4} (\dot{m}_{24} + \dot{m}_{34} - \dot{m}_{45} - \dot{m}_{46}) \\
 \frac{dp_5}{dt} &= \frac{p_5}{m_5} (\dot{m}_{45} - \dot{m}_{56})
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Ahora, en la **Figura 3.24** se observa la evolución de la masa contenida al interior del cilindro. Se observa cómo por efecto del modelo, la masa al interior del cilindro es menor durante la carrera de expansión y la carrera de escape, respecto al resultado cuando no se tiene en cuenta el modelo. Sin embargo, se observa cómo desde la etapa temprana de la carrera de compresión, por efecto del vacío al interior del cilindro, la masa al interior del cilindro incrementa, llevando a un incremento del orden de 2% en la masa contenida al interior del cilindro en el IVC.

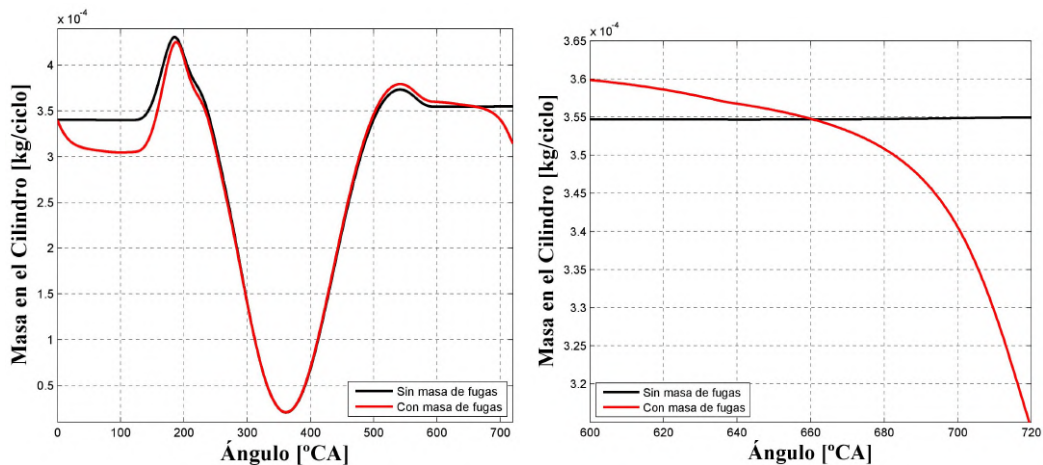


Figura 3.24: Masa al interior del cilindro con y sin modelo de masa de fugas a través de los anillos del pistón obtenidos en la simulación. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.

Finalmente, en la **Figura 3.25** se presentan las curvas experimentales y numéricas de la presión y la temperatura al interior cilindro, incluyendo el modelo $k-\epsilon$ RNG y el modelo de masa de fugas en el caso simulado.

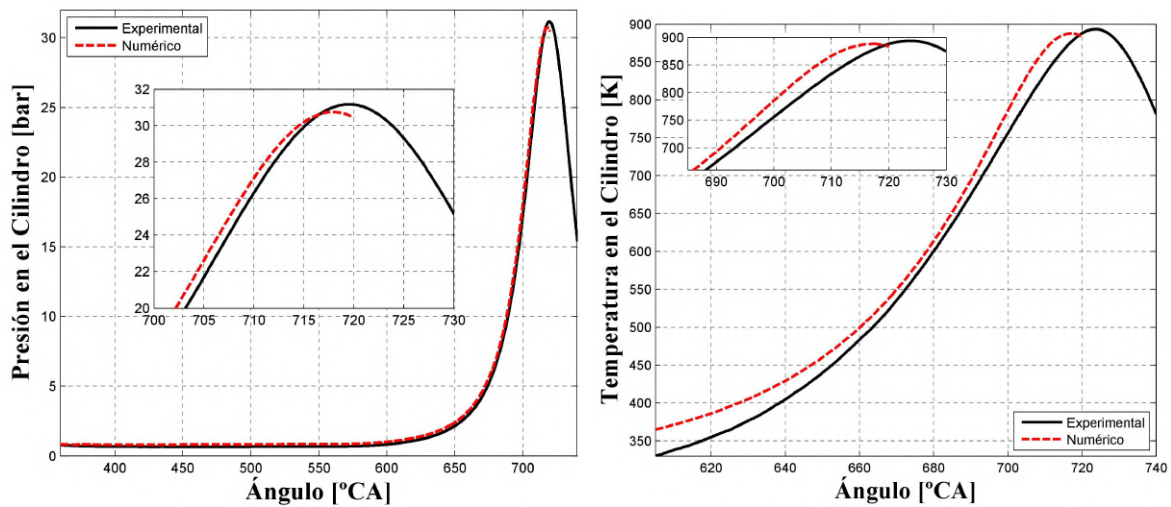


Figura 3.25: Resultados finales de la malla a utilizarse en la investigación. Condiciones de operación del motor: aire seco; $p_{ad} = 0.85 \text{ bar}$; $T_{ad} = 298 \text{ K}$; 1800 rpm.

3.2.3. Configuración de los Casos para las Simulaciones de Cinética Química Detallada

El desarrollo de las simulaciones multizona con cinética química detallada se realizaron con modelos 0D acoplados con un mecanismo de reacción. En el caso de los modelos 0D, la relación de compresión equivalente se obtuvo mediante el desarrollo de múltiples simulaciones durante el intervalo de válvulas cerradas partiendo de las condiciones en el IVC obtenidas experimentalmente para la operación del motor arrastrado a diferentes condiciones de temperatura en la admisión. La temperatura de pared se estimó de manera similar que en el caso de simulaciones CFD. La relación de compresión geométrica usada en ésta investigación fue de 16.8 : 1, la cual fue menor a la utilizada en las simulaciones CFD, ésto probablemente a la ausencia de los efectos de fricción con las fronteras del dominio que si se tienen en cuenta en los cálculos CFD a través de la viscosidad del flujo y el tratamiento de pared (lo cual a su vez impacta la transferencia de calor) y la ausencia de resolución espacial de la presión y de la temperatura, lo que conduce a no requerir un menor volumen para alcanzar un valor de presión máxima similar. En la **Tabla 3.7** se presentan las relaciones de compresión geométricas y efectivas usada en las simulaciones de cinética química detallada y la real del motor.

Tabla 3.7: Comparación entre las relaciones de compresión del motor y la usada para las simulaciones de cinética química detallada.

Relación de compresión geométrica	Volumen PMS [cm^3]	Volumen IVC [cm^3]	Relación de compresión efectiva
16.8 : 1	26.93	358.44	13.31 : 1
17.2 : 1	26.27	357.78	13.62 : 1

En la **Figura 3.26** se presentan los resultados obtenidos para tres puntos experimentales a diferentes temperaturas en la admisión:

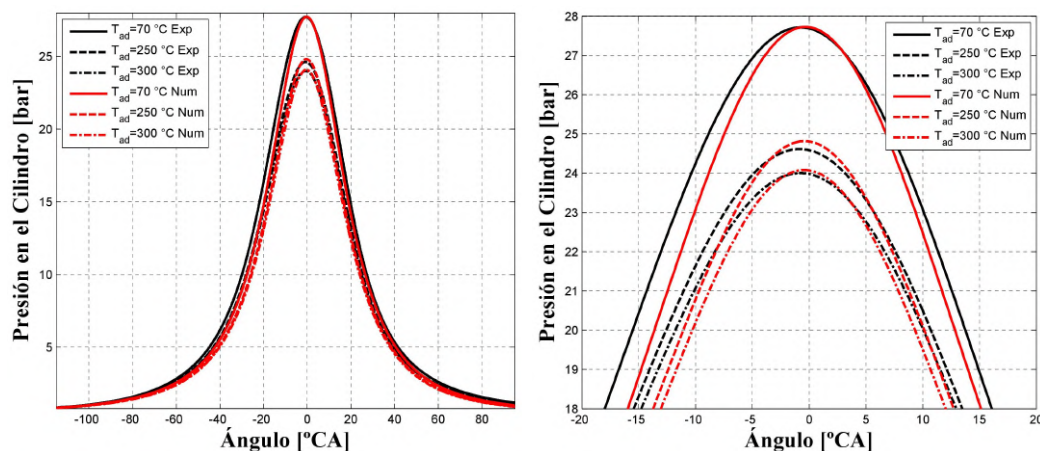


Figura 3.26: Curvas de motor arrastrado experimentales y numéricas (modelo 0D) a diferentes condiciones de temperatura en la admisión.

La **Figura 3.26** permite observar como la relación de compresión elegida tiene un buen ajuste con la presión máxima experimental a diferentes condiciones de temperatura en la admisión, por lo cual se puede asumir que dicha relación de compresión puede utilizarse en las simulaciones para diferentes niveles de temperatura en la admisión.

Para la selección del mecanismo a utilizar en las simulaciones, se compararon las predicciones, para un modelo de 1 zona, del pico de la fracción molar de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) con resultados experimentales del ángulo asociado a la liberación del 10 % de la energía ingresada en el cilindro (CA10) para el motor ya descrito operando con gas natural. El pico de la fracción molar del H_2O_2 usualmente coincide con el CA10 [12], el cual se ha tomado tradicionalmente como el inicio de la combustión. Lo anterior se debe a que el pico de concentración de OH (radical precursor de la combustión) es alcanzado tan pronto como la descomposición del H_2O_2 ha iniciado [77].

Para la simulaciones de una zona se usó la relación de compresión equivalente encontrada y se usarán los mecanismos *GRI 3.0* (53 especies y 325 reacciones) y *San Diego* (63 especies y 307 reacciones). En la **Tabla 3.8** se muestran el número de especies y el número de reacciones en común entre ambos mecanismos (el número entre paréntesis corresponde a las reacciones en común que tienen al menos un parámetro de Arrhenius diferente).

Tabla 3.8: Especies y reacciones en común entre los mecanismos.

	<i>GRI-MECH 3.0</i>
<i>San Diego</i>	46 especies y 144 reacciones (139)

Las pruebas experimentales utilizadas consistieron en siete pruebas (a diferentes dosados) replicadas dos veces. La **Tabla 3.9** muestra los dosados utilizados en cada una de las pruebas, la temperatura del aire de carga admitido y el CA10 obtenido (junto con algunos estadísticos de dispersión de datos) en cada uno a partir del análisis de la presión en el cilindro.

Tabla 3.9: Parámetros de pruebas con gas natural usadas para seleccionar el mecanismo de reacción detallado.

Parámetro	Dosado Relativo (ϕ)						
	0.22	0.25	0.28	0.30	0.32	0.34	0.36
Temperatura Admisión [°C]	300	290	288	280	276	272	263
CA10 [°CA aPMS]	-0.84	0.121	-0.43	-2.06	0.534	0.428	-0.655
σ (CA10) [°CA]	0.69	0.73	0.67	0.71	1.01	1.06	1.22
Gases Residuales [%]	11.52	11.33	10.68	10.35	10.17	9.83	9.69

En la **Figura 3.27** se presentan los resultados obtenidos de las simulaciones y los valores iniciales para el inicio de la combustión (CA10). En estos cálculos se incluyó la fracción de gases residuales en la carga admitida, cuya composición se tomó igual a la composición de los gases de escape obtenida experimentalmente. Se observa que para todos los puntos evaluados, el mejor ajuste entre resultados numéricos y experimentales se obtuvo con el mecanismo de reacción de *San Diego*.

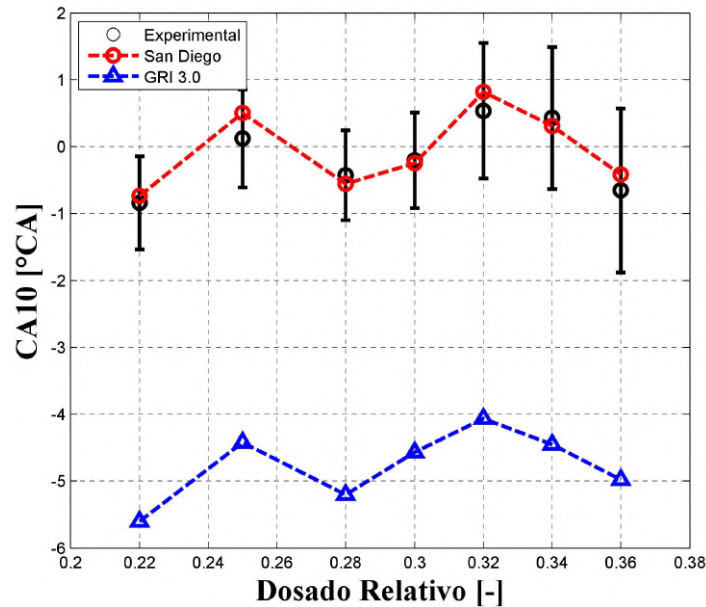
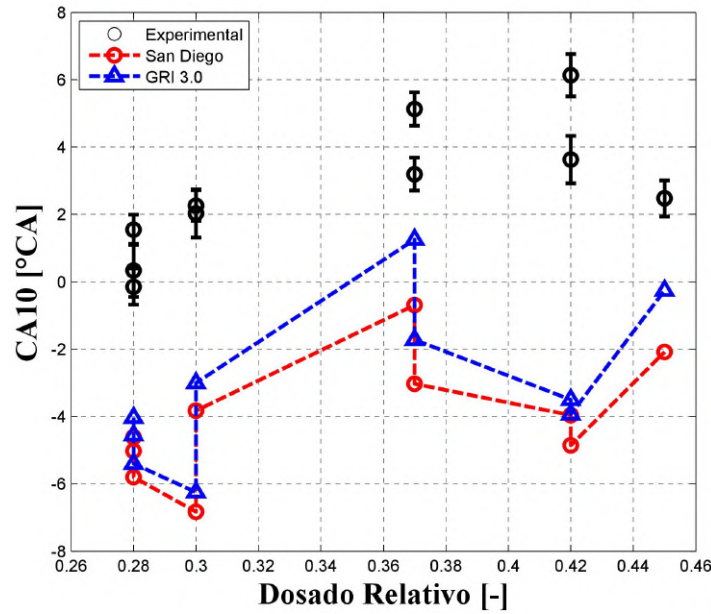


Figura 3.27: Pico de H_2O_2 predicho por los mecanismos *GRI 3.0* y *San Diego*, y los valores experimentales de CA10 para diferentes puntos de operación. Motor operando con gas natural a 1800 rpm; 0° =PMS.

Ahora bien, en la **Tabla 3.10** y la **Figura 3.28** se presentan las condiciones usadas para comparar en la predicción del mecanismo cuando se tiene un diluyente en el combustible en grandes proporciones, es decir, el contenido del CO_2 en el combustible. En éste caso, se observa que el mejor ajuste se logra con el mecanismo *GRI 3.0*, aunque la diferencia con el mecanismo *San Diego* es muy pequeña. El nivel de ajuste entre el pico de H_2O_2 y el CA10 es poco satisfactorio en éste caso. El efecto del modelo de transferencia de calor, en conjunto con las condiciones de presión, temperatura y régimen de giro es un elemento que deberá ser explorado en trabajos posteriores, ya que existen trabajos (aunque a menores temperaturas en el cierre de la válvula de admisión) que han mostrado un mejor ajuste entre el pico de H_2O_2 y el CA10.

Tabla 3.10: Parámetros de pruebas con biogás usadas para seleccionar el mecanismo de reacción detallado.

Parámetro	Dosado Relativo (ϕ)									
	0.28	0.28	0.28	0.30	0.30	0.37	0.37	0.42	0.42	0.45
Temperatura Admisión [°C]	325	330	335	325	330	310	315	325	330	330
CA10 [°CA aPMS]	1.54	0.33	-0.15	2.03	2.26	5.13	3.47	6.13	3.62	2.47
σ (CA10) [°CA]	0.45	0.79	0.54	0.72	0.45	0.49	0.49	0.63	0.70	0.54
Gases Residuales [%]	12.17	12.39	12.12	12.37	11.94	11.09	11.08	11.32	11.41	11.15

Figura 3.28: Pico de H_2O_2 predicho por los mecanismos *GRI 3.0* y *San Diego*, y los valores experimentales de CA10 para diferentes puntos de operación. Motor operando con biogás: 60 % GN - 40 % CO_2 ; 1800 rpm; 0° =PMS.

En relación con los resultados presentados, el mecanismo *San Diego* fue el utilizado para el desarrollo de las simulaciones multizona.

Ahora bien, una vez finalizados los cálculos CFD, se procede a dividir en intervalos el campo de temperatura obtenidos en cada uno de los pasos temporales, donde estos intervalos corresponden a las zonas del modelo multizona. Los intervalos de temperatura se definen entonces como:

$$\Delta T = \frac{T_{max,i} - T_{min,i}}{n - 1} \quad (3.27)$$

Donde $T_{max,i}$ y $T_{min,i}$ son los valores máximos y mínimos del campo de temperatura en el paso temporal i , respectivamente, y n es el número de zonas con las cuales se trabajará el modelo multizona. En el presente trabajo se usan inicialmente 40 zonas y los cálculos se realizan cada 20 pasos temporales (cada $5^\circ CA$)⁴.

De éste modo, la zona 40 (zona más caliente) en el paso temporal i está definida por el intervalo

⁴El paso temporal definido está asociado al tamaño en disco requerido de los archivos generados. En el caso de generar archivos cada 20 pasos temporales con los datos de los presión, temperatura, velocidad, densidad y especies, se obtuvo un tamaño en disco de estos de 104 GB.

de temperatura $T_{40,i} = (T_{max,i} - \Delta T, T_{max,i}]$, la zona 39 (segunda zona más caliente) en el paso temporal i está definida por el intervalo de temperatura $T_{39,i} = (T_{max,i} - 2\Delta T, T_{max,i} - \Delta T]$, y así sucesivamente hasta la zona 1 (zona más fría). Definidos los intervalos de temperatura, se hallan las celdas del dominio asociadas a cada intervalo, con lo cual la fracción de masa de cada zona se calcula como:

$$m_{zona-n,i} = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_{celda} V_{celda} |_{T_{min,zona-n}^{T_{max,zona-n}}}}{m_{total,i}} \quad (3.28)$$

Donde $m_{zona-n,i}$ es la fracción de masa de la zona- n en el paso temporal- i , ρ_{celda} y V_{celda} son la densidad y el volumen, respectivamente, de cada una de las celdas contenidas en la zona- n en el paso temporal- i , y $m_{total,i}$ es la masa al interior del dominio en el paso temporal- i .

Ahora bien, en este trabajo de investigación se usará un modelo multizona reducido [12] con el fin de conservar la resolución de temperatura y distribución de masa de las zonas más calientes, y reducir el tiempo de cálculo requerido para desarrollar la simulación al reunir en una sola zona las zonas que generalmente no alcanzan a reaccionar y que poseen una pequeña fracción de la masa contenida al interior del cilindro. Así, en este trabajo de investigación se usarán 12 zonas, siguiendo la metodología de Bedoya y colaboradores [12].

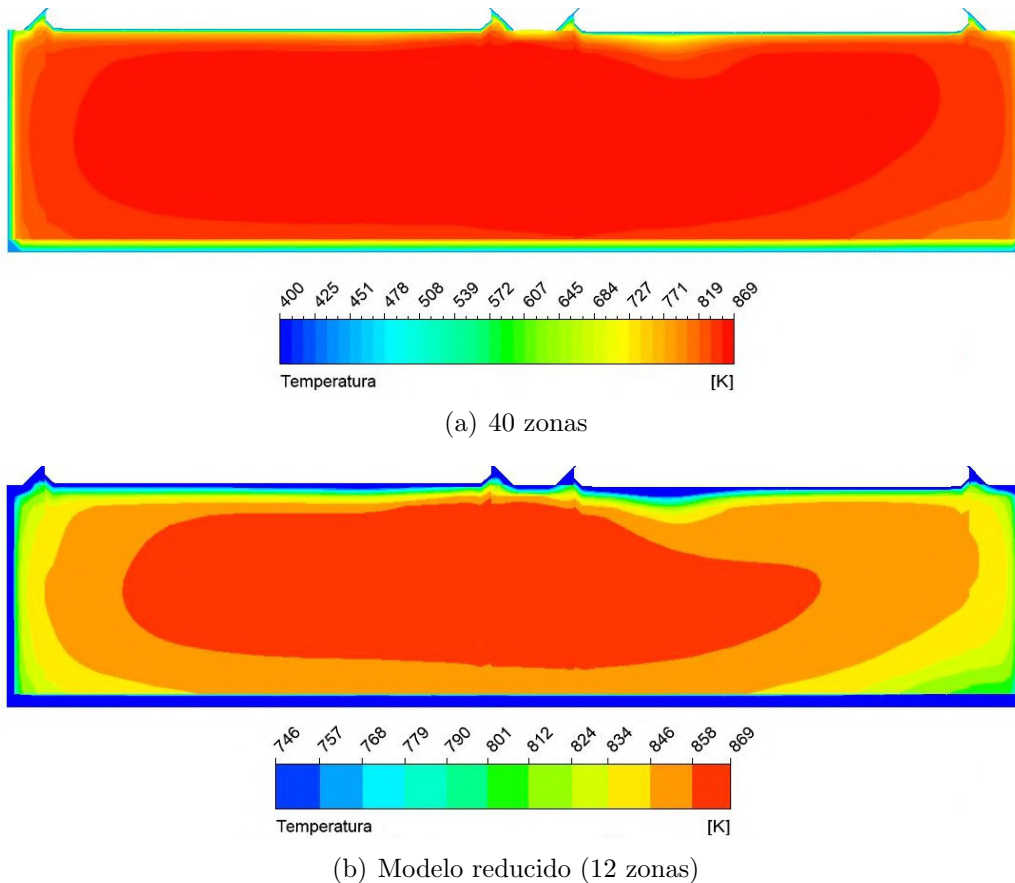


Figura 3.29: Distribución de temperatura al interior de la cámara de combustión 45° aPMS para (a) cuarenta zonas y (b) doce zonas bajo la metodología de reducción de zonas. Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Finalmente, en relación con el ángulo de transición, se utilizaron 5 ángulos alrededor del CA10 experimental para evaluar el efecto del ángulo de transición sobre los resultados obtenidos.

Respecto al esquema de transferencia de calor (ETC), en el programa *CHEMKIN Pro* la transferencia de calor de cada zona se calcula de acuerdo a la **Ecuación 2.15**, siendo el factor λ_{FASZ} un valor constante durante toda la simulación. Como es típico en la metodología secuencial multizona, el valor de dicho factor se correlaciona con la fracción de masa de cada zona en el ángulo de transición. De este modo, se implementaron 4 esquemas de transferencia de calor:

- *ETC 1*: Las tres zonas más calientes son adiabáticas y el área equivalente de transferencia de calor en las demás zonas es proporcional al contenido de masa en éstas.
- *ETC 2*: La zona más caliente es adiabática y el área equivalente de transferencia de calor en las demás zonas es proporcional al contenido de masa en éstas.
- *ETC 3*: El área equivalente de transferencia de calor en las zonas es inversamente proporcional al porcentaje de masa contenida en éstas, es decir, el porcentaje de área superficial para la zona más caliente es igual al porcentaje de masa contenida en la zona más fría, el porcentaje de área superficial para la segunda zona más caliente es igual al porcentaje de masa contenida en la segunda zona más fría y así sucesivamente.
- *ETC 4*: El área equivalente de transferencia de calor en las zonas es igual al porcentaje de masa contenida en éstas.

Capítulo 4

Resultados y Análisis

4.1. Resultados Experimentales

En la **Figura 4.1** se observan las curvas de presión en el cilindro para alguno de los diferentes puntos experimentales evaluados. Se observa que, para las temperaturas en la admisión evaluadas, a medida que se incrementa el dosado relativo se retrasa la combustión. Así mismo se observa el efecto de la variación de la temperatura en la admisión sobre la combustión a medida que se incrementa el dosado relativo; a menor dosado relativo, el cambio de temperatura en la admisión genera avances suaves de la combustión e incrementos menos súbitos en el pico de presión; sin embargo, al incrementarse el dosado relativo, y con ello la concentración de combustible en la mezcla, los incrementos en la temperatura de admisión generan incrementos súbitos en el pico de presión y un mayor avance de la combustión.

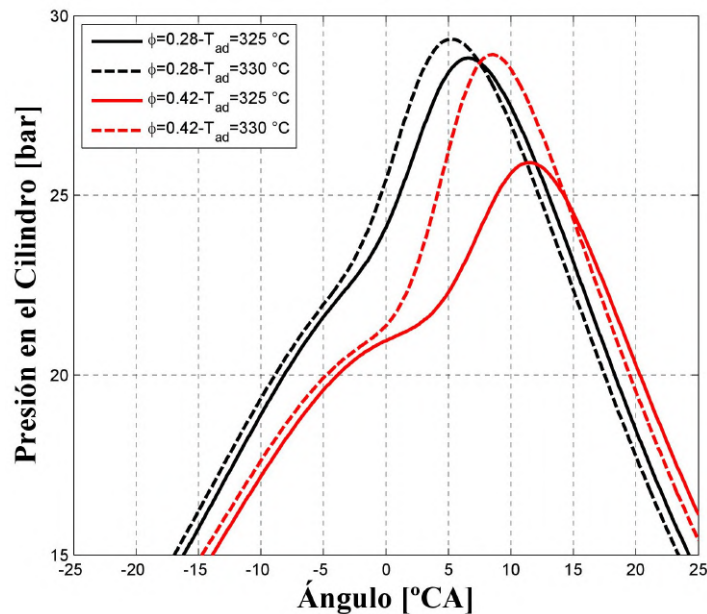


Figura 4.1: Curvas de presión en el cilindro para diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

Se observa que con el incremento del dosado relativo se reduce el valor de la presión durante la compresión. Esto se asocia a la reducción en la relación de calores específicos con el incremento

del dosado relativo (incremento de la concentración de combustible, y con ello del CO_2); esto se observa con mayor claridad en la **Figura 4.2**, con las curvas de temperatura en el cilindro.

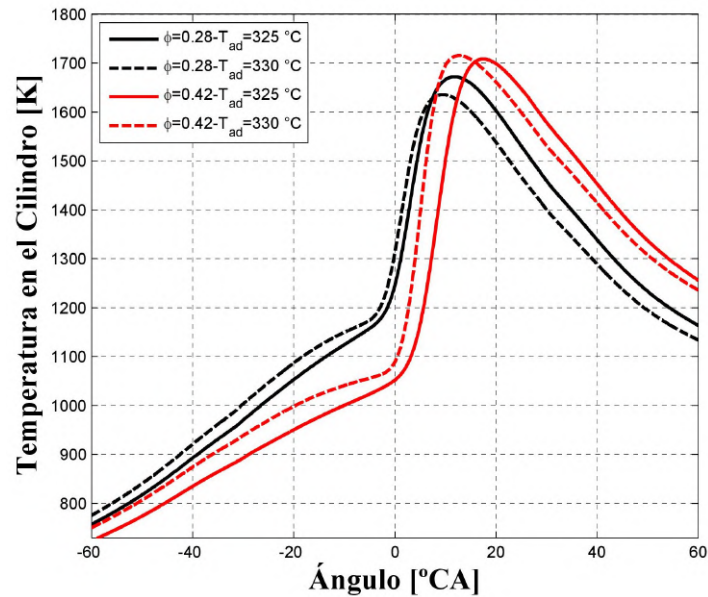


Figura 4.2: Curvas de temperatura en el cilindro para diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

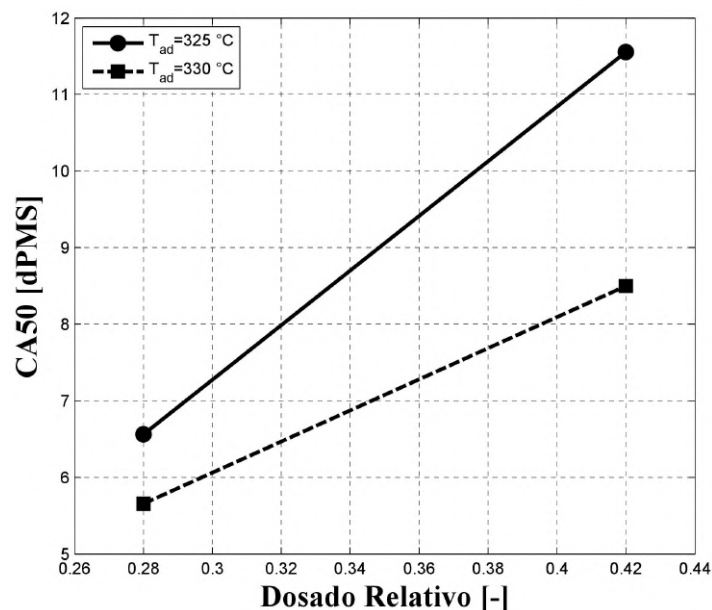


Figura 4.3: Valores del CA50 para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

Ahora bien, la sincronización de la combustión HCCI en motores se suele relacionar con el CA50. En la **Figura 4.3** se observan los valores del CA50 para cada uno de los puntos experimentales evaluados. Se observa que para todos los puntos se obtuvo una combustión retrasada con el fin de evitar operar el motor en zona de *ringing* debido a las altas temperaturas en la admisión. Esto generó un efecto importante sobre la capacidad de producir trabajo en el motor y la eficiencia de este como se verá posteriormente. Se observa claramente el efecto de la temperatura en la

admisión sobre el avance de la combustión, especialmente a medida que se incrementa el dosado relativo. Con incrementos de 5 °C se logra avanzar la combustión hasta 4 °CA en el punto de mayor dosado relativo.

Así mismo, en la **Figura 4.3** se observa que en cada nivel de temperatura, la combustión tiene un mayor avance a menor dosado relativo, esto asociado a la menor concentración de combustible en la mezcla permitiendo así un mayor incremento de la temperatura durante la compresión.

Esta tendencia en los valores de CA50 puede complementarse con los valores de las tasas de liberación de calor global, presentadas en la **Figura 4.4** y calculadas de acuerdo a la **Ecuación 3.1**. Para $\phi = 0.42$, se observa como un incremento en el dosado relativo y/o en la temperatura de la admisión genera un incremento en el pico de la tasa de liberación de calor; el incremento del pico de la tasa de liberación de calor con el incremento del dosado relativo se asocia a la mayor concentración de combustible lo que conlleva a mayores tasas de quemado, mientras que el incremento de la tasa de liberación de calor con el incremento de la temperatura en la admisión se asocia al incremento en las tasas de quemado en la etapa temprana de la combustión, ya que se esperan mayores temperaturas al interior de la cámara de combustión al final de la carrera de compresión. En ambos casos de dosados se observa claramente el efecto en el avance de la combustión con el incremento de la temperatura en la admisión.

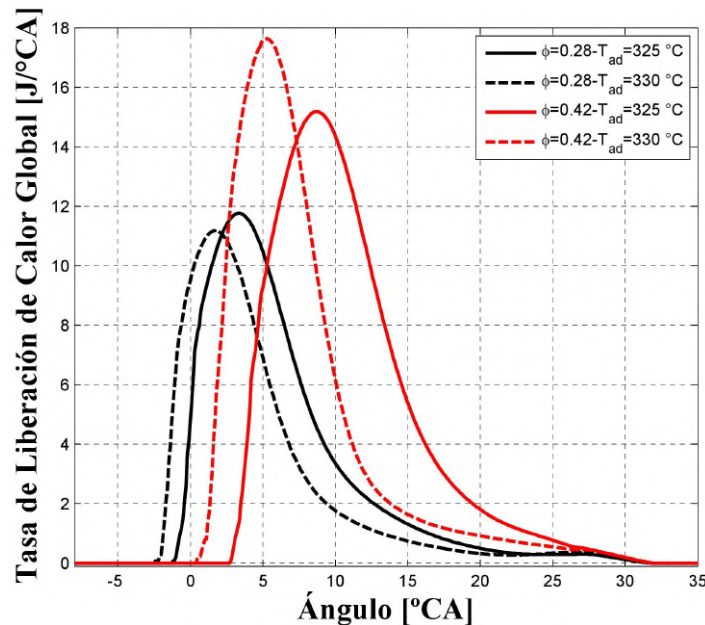


Figura 4.4: Curvas de tasas de liberación de calor global a diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; 1800 rpm.

Ahora bien, los resultados que se presentan en la **Figura 4.4** se pueden complementar con las curvas obtenidas de fracción de calor liberado, **Figura 4.5**; si bien la tendencia del efecto del dosado relativo y la temperatura en la admisión no es muy clara, si se logra apreciar cómo con el incremento de la temperatura en la admisión para un mismo dosado relativo se generan mayores tasas de quemado del combustible (observando la pendiente de las curvas).

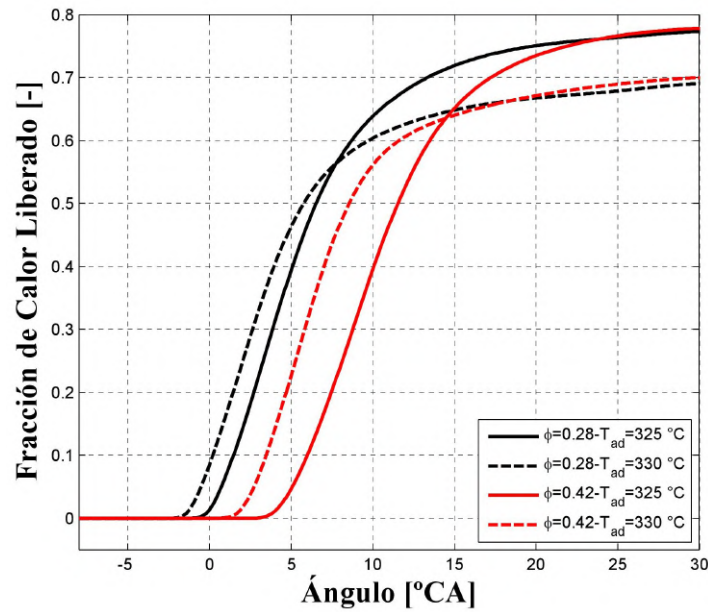


Figura 4.5: Curvas de fracción de calor liberado a diferentes condiciones de temperatura en la admisión y de dosado relativo. Condiciones de operación del motor: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

En relación con los resultados de la **Figura 4.5**, en la **Figura 4.6** se presentan los valores de la duración de la combustión. Se observa una tendencia similar a la observada en la **Figura 4.3** para el CA50, presentándose una combustión adelantada y en promedio más corta con el incremento de la temperatura, aunque el cambio es de menor magnitud respecto al cambio observado para el CA50. Pese a que en todos los puntos evaluados, se obtuvo una combustión retrasada, se observa que se tiene una combustión corta (de menos de 12 °CA), de aquí el requerimiento de trabajar con una combustión retrasada para los altos niveles de temperatura requeridos en la admisión para auto-encender la mezcla aire/combustible, para así evitar operar el motor con altas intensidades de ringing.

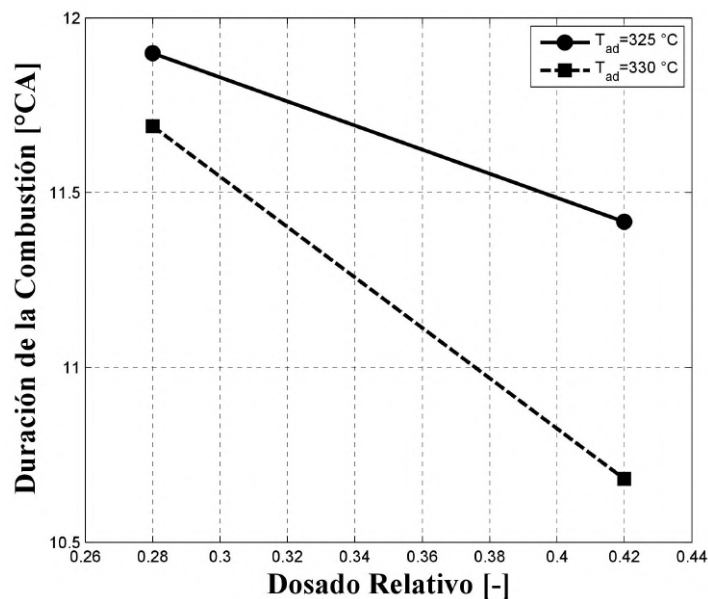


Figura 4.6: Duración de la combustión para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

Por último, respecto al diagnóstico de la combustión, en la **Figura 4.7** se presentan los valores estimados de la fracción de gases residuales, los cuales se obtuvieron a partir de la correlación presentada por Ortiz-Soto y colaboradores [78] y por Fox y colaboradores [79]. Dado que ambas relaciones daban valores similares, se trabajó con la correlación presentada por Ortiz-Soto y colaboradores, dado que ha sido una correlación ya evaluada para la combustión HCCI en motores. En la **Figura 4.7** se observa que en todos los puntos experimentales se opera con altas fracciones de gases residuales, reduciéndose esta fracción a medida que se incrementa el dosado relativo. Estas altas fracciones de gases residuales, sumado al alto contenido de CO_2 en el combustible, la presión de admisión, el alto régimen de giro y el retraso en el IVC (respecto al PMI), explican el porqué de los altos requerimientos de temperatura para auto-encender la mezcla aire/combustible.

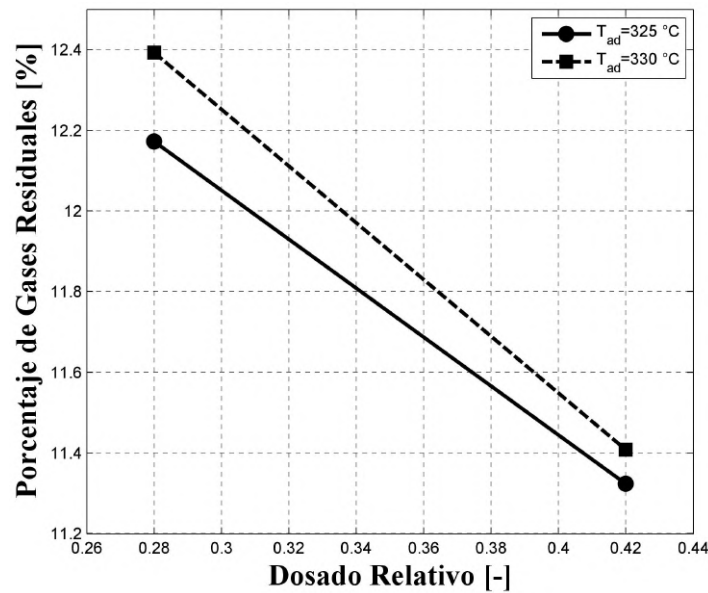


Figura 4.7: Fracción de gases residuales promedio estimados para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; 1800 rpm.

Ahora bien, respecto al desempeño mecánico y ambiental del motor, en la **Figura 4.8** se presentan los valores de IMEP_{net} obtenidos a las diferentes condiciones evaluadas. Se observa que a mayor dosado relativo se alcanza mayores IMEP_{net} , esto debido a que un incremento en el dosado relativo conlleva a mayores tasas de quemado asociada a un incremento en la concentración del combustible. Así mismo, se observa que en el caso de la temperatura de la admisión se tiene lo contrario de la tendencia esperada, es decir, a mayor temperatura de admisión se obtiene un menor valor de IMEP_{net} pese a que el CA50 se adelanta. Esto puede asociarse a que para los niveles de temperatura en la admisión con los que se operó el motor, la reducción en la densidad de la carga (y por ende en la producción de trabajo) y el incremento de la transferencia de calor, supera el efecto positivo de una combustión más avanzada (en relación con la producción de trabajo).

Se destaca el hecho de los bajos valores de la IMEP_{net} obtenida con el motor operando en modo HCCI con biogás, siendo esta 60 % menor a la IMEP_{net} alcanzable en la operación del motor en modo diesel (alrededor de 8 bar), respecto a los máximos valores alcanzados. Para lograr mayores incrementos en la IMEP_{net} se requiere disminuir la temperatura en la admisión que permita alcanzar las condiciones de auto-ignición, esto se puede lograr a través de una mayor presión en la admisión y/o reduciendo el régimen de giro del motor, entre otras posibilidades. En la **Figura 4.9** se observa el coeficiente de variación de la IMEP_{net} para los ciclos utilizados en cada punto experimental. Se observa cómo la dispersión cíclica se reduce con el incremento

en el dosado relativo, pero se incrementa al aumentar la temperatura en la admisión, siendo el mayor incremento en el punto de menor dosado relativo.

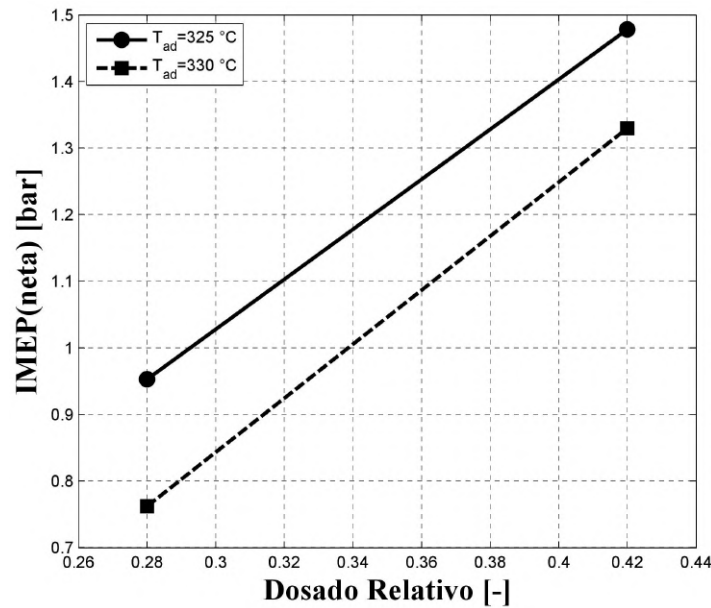


Figura 4.8: Presión media efectiva neta ($IMEP_{neta}$) para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

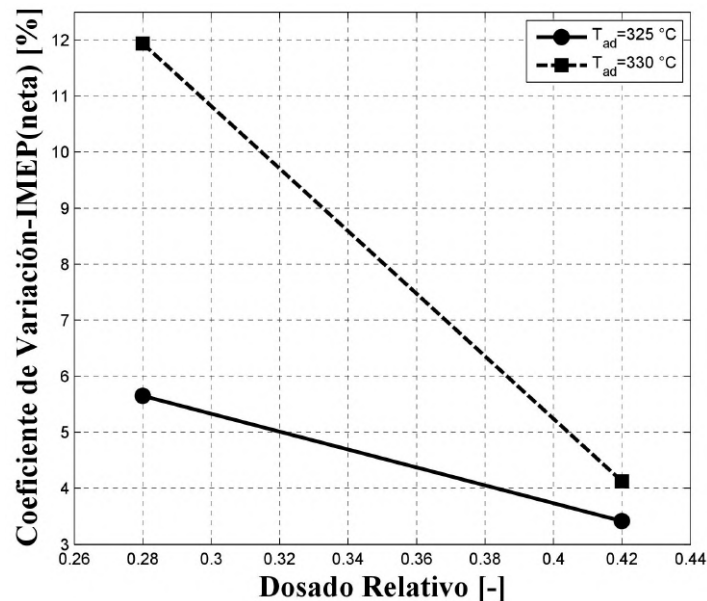


Figura 4.9: Coeficiente de Variación de la $IMEP_{neta}$ para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % gas natural - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

En la **Figura 4.10** se presentan los resultados de la intensidad de ringing. En los puntos experimentales evaluados nunca se evidenció ringing audible, lo cual se ajusta a los bajos valores de intensidad de ringing. Para la condición de temperatura en la admisión de 325 °C la tendencia encontrada se debe a la reducción del pico de presión y menor tasa de incremento de la presión con el dosado relativo, mientras que en el caso de 330 °C a medida que se incrementa el dosado relativo, la tasa de incremento de la presión es mayor.

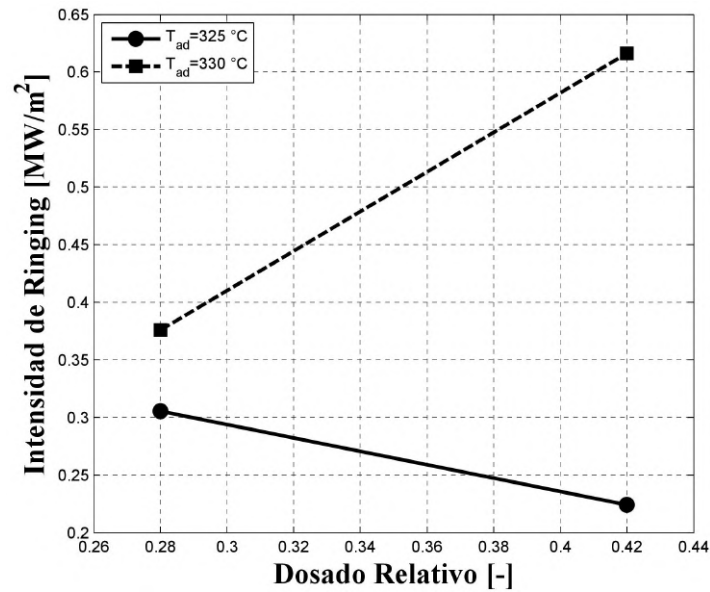


Figura 4.10: Intensidad de ringing para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; 1800 rpm.

En la **Figura 4.11** se presenta la eficiencia indicada obtenida para algunos de los puntos experimentales evaluados. Se observa cómo la baja densidad energética de la carga, asociada a las altas temperaturas y bajas presiones en la admisión, y operar el motor con combustión retrasada generan eficiencias por debajo de las esperadas para el modo de combustión analizado. Para condiciones de baja dispersión cíclica, la eficiencia indicada tiende a incrementar con el dosado relativo, sin embargo, al incrementar la temperatura en la admisión se observa nuevamente que es más significativo su efecto adverso sobre la producción de trabajo debido a la reducción de la densidad de la carga admitida y el incremento de la transferencia de calor, que el efecto positivo asociado al incremento del pico de presión, la reducción de la duración de la combustión y el avance de esta.

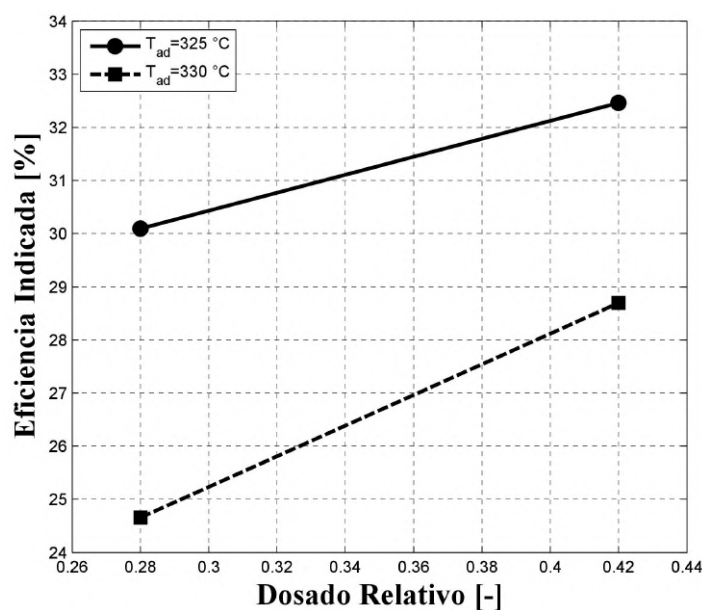


Figura 4.11: Eficiencia indicada para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84\text{ bar}$; 1800 rpm.

Finalmente, en las **Figuras 4.12** y **4.13** se presentan las emisiones en base seca de NOx y CO, respectivamente. Se observa que para todos los puntos de operación se obtuvieron emisiones ultra-bajas de NOx; esto se asocia claramente al pico máximo de la temperatura media al interior del cilindro, **Figura 4.2**, la cual estuvo por debajo de los 1800 K, valor que representa el límite térmico para el inicio de la producción de NOx [80]. Se observa que a altos dosados y en el mayor nivel de temperatura es donde se empieza a obtener valores de NOx por encima del error del instrumento.

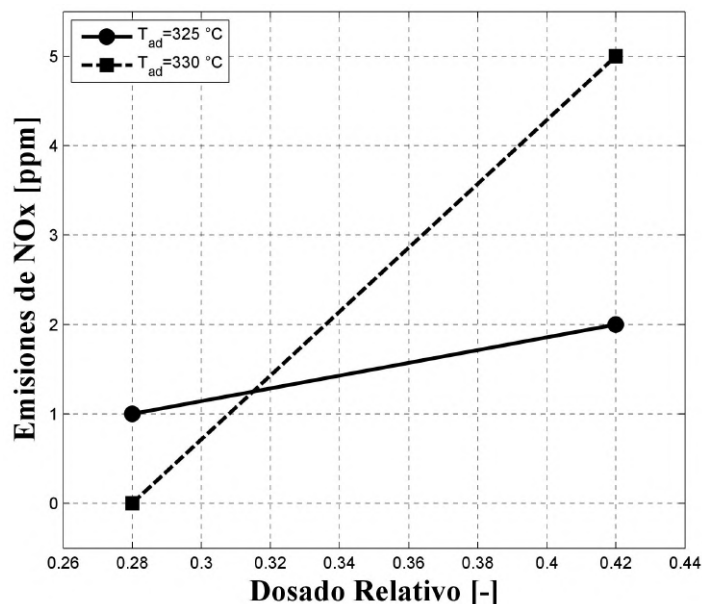


Figura 4.12: Emisiones de NOx en base seca para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

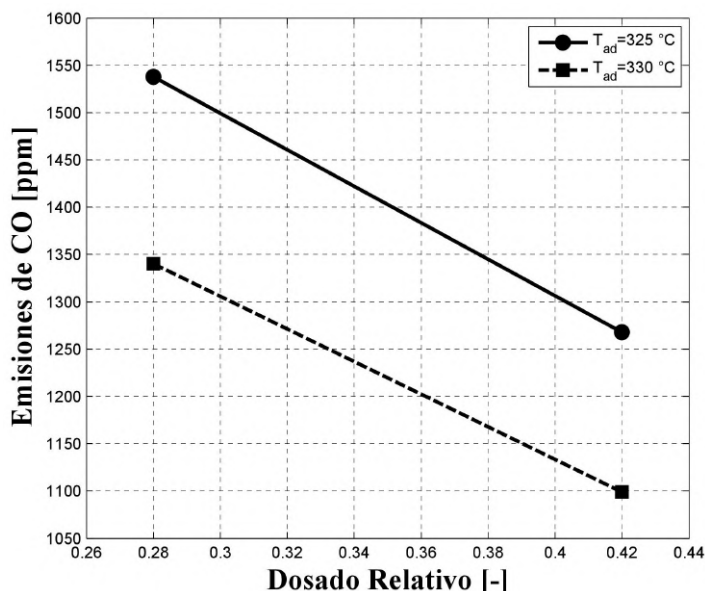


Figura 4.13: Emisiones de CO en base seca para los diferentes puntos experimentales: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; 1800 rpm.

En relación a las emisiones de CO, se observa que a mayor dosado relativo, éstas emisiones se reducen ya que se alcanzan mayores temperaturas al interior del cilindro y se favorecen las reacciones de oxidación de ésta especie.

4.2. Estratificación Térmica y Másica de la Carga durante la Carrera de Compresión

La construcción de la metodología de simulación abordada en éste trabajo de investigación parte de los trabajos de Aceves y colaboradores [9], y de Bedoya y colaboradores [12]; modelando la combustión HCCI como un conjunto de reactores cero-dimensionales que interactúan mediante el trabajo de frontera de éstos, donde cada reactor corresponde a una zona de la cámara de combustión definida por un intervalo de temperatura y una cantidad de masa contenida en ésta. Los intervalos de temperatura y la cantidad de masa que definen cada una de las zonas se obtienen a partir de los perfiles de temperatura y masa resultantes (estratificación térmica y másica) de simulaciones CFD. La metodología parte de la hipótesis de que la adecuada captura del campo de velocidad, y su efecto sobre el campo de temperatura, durante el intervalo de cruce de válvulas permite una mejor predicción de las condiciones de la carga en el IVC y por ende una mejor captura de la evolución de la estratificación térmica y másica de la carga durante la carrera de compresión, permitiendo así una mejor predicción del desarrollo de la combustión mediante un modelo multizona.

Dada las condiciones de alta velocidad (y por ende altos gradientes de presión) alrededor de los puertos de las válvulas durante la apertura y cierre de éstas, se decidió iniciar la simulación desde el PMS, usando los valores de presión y temperatura experimentales en dicho punto, una condición de magnitud de velocidad igual a cero (0) y las fracciones másicas de los gases quemados al final de la combustión obtenidos a partir de equilibrio químico; lo anterior se realiza con el fin de obtener un campo de velocidades y temperatura desarrollados a la apertura de la válvula de escape (EVO), permitiendo así una mejor convergencia de la solución. A continuación analizaremos los resultados obtenidos en todo el intervalo temporal simulado para uno de los puntos experimentales, $\phi = 0.28 - T_{ad} = 325^{\circ}C$, y luego se comparará con los resultados obtenidos para otros puntos experimentales a partir de la apertura de la válvula de admisión (IVO) y las características de la estratificación másica y térmica obtenidas.

4.2.1. Descripción de los Campos de Flujo Obtenidos Durante el Cruce de Válvulas

En las **Figuras 4.14, 4.15 y 4.16** se observa la evolución de la presión manométrica, la magnitud de la velocidad y la temperatura, respectivamente, entre el PMS y la apertura de la válvula de escape en el plano medio de la cámara de combustión. Se observa cómo la presión es uniforme en el cilindro en cada paso temporal a medida que el pistón se desplaza hacia el PMI. En el caso de la velocidad, se observa cómo el fluido permanece casi estático en la parte superior de la cámara de combustión (dada la condición de inicialización de la simulación) y se va acelerando en las zonas cercanas a la cabeza del pistón debido a la aceleración que imprime el pistón en el fluido adyacente a éste durante su movimiento descendente.

Así mismo, en la **Figura 4.15** se observa como se tienen altos gradientes de velocidad en los ductos de admisión y escape, gradientes que se van reduciendo a medida que la simulación va avanzando; éstos gradientes no se asocian a un proceso físico sino a un proceso numérico, donde las condiciones de velocidad en éstas zonas se ajustan a las condiciones de frontera en las zonas de los ductos de admisión y escape con los cuales se inicializa la simulación.

Ahora bien, que se tenga un fluido casi estático en las cercanías de la culata puede tener un efecto importante sobre el modelado del proceso de evacuación de los gases del cilindro, debido al efecto de aceleración que se generará cuando se inicie la apertura de la válvula de escape, lo cual puede generar variaciones en el campo de temperaturas alrededor de la válvula que puede

ser diferente si se tiene un flujo con una velocidad mayor; de aquí la importancia de la elección del punto del ciclo mecánico para inicializar la simulación de acuerdo con los fenómenos que se desean evidenciar y capturar con las simulaciones.

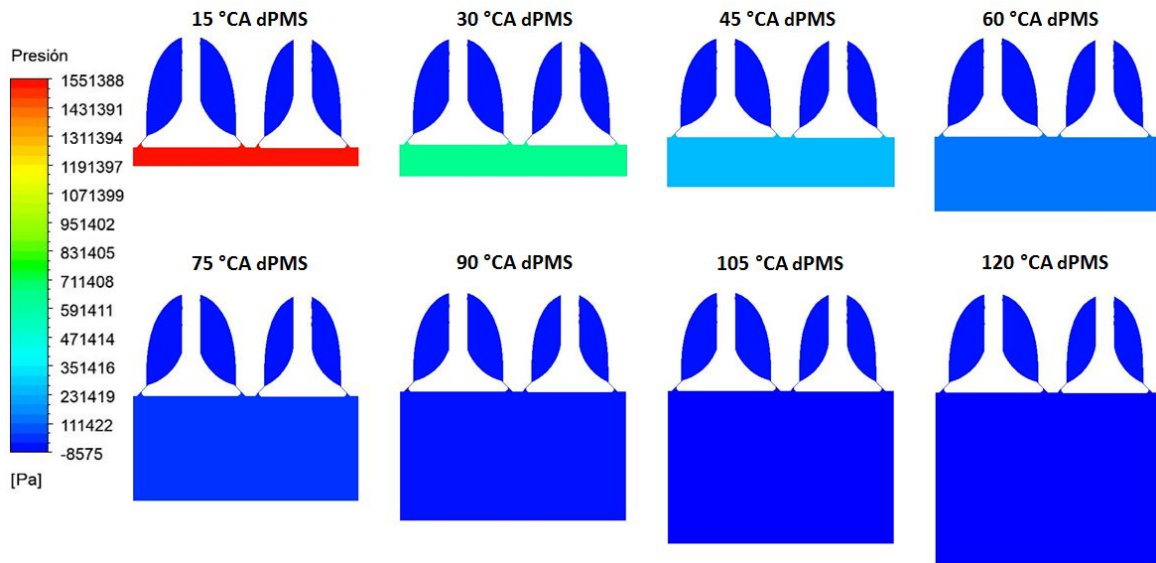


Figura 4.14: Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el PMS y el EVO: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

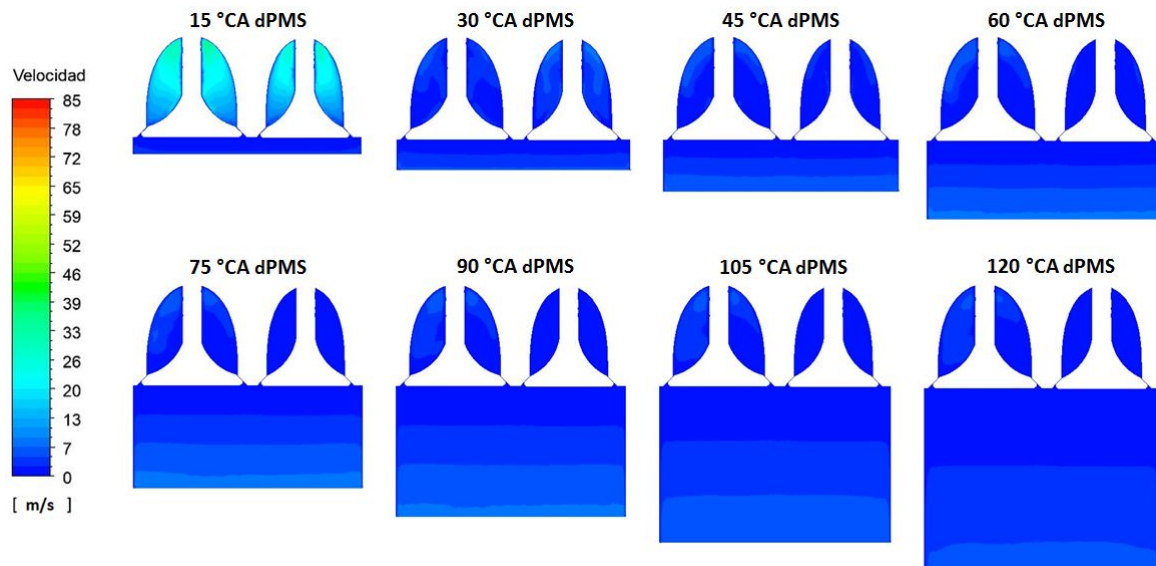


Figura 4.15: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el PMS y el EVO: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

La forma del campo de velocidades obtenido tiene también un efecto significativo sobre el campo de temperatura, **Figura 4.16**, observándose una región de alta temperatura por debajo de la línea media (perpendicular al eje de movimiento del pistón) del dominio, región que se hace más notoria a medida que el pistón se acerca al PMI. Es de interés (y deberá abordarse en próximos trabajos) observar si los campos de velocidad y temperatura obtenidos se generan si la simulación se inicializa en un paso temporal previo al PMS al final de la compresión y cómo afecta el proceso de evacuación de los gases, aunque la elección de éste punto de inicialización

siempre traerá consigo la necesidad de tener un valor adecuado de la magnitud de la velocidad para inicializar la simulación.

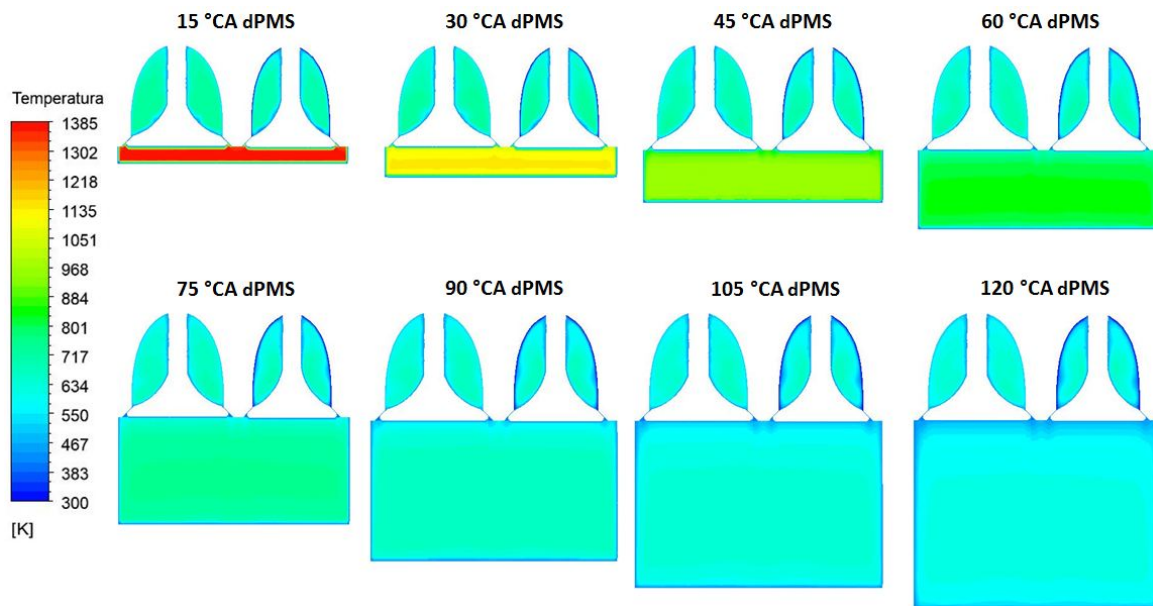


Figura 4.16: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el PMS y el EVO: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Ahora, en la **Figura 4.17** se observa la evolución de la presión manométrica entre la apertura y el cierre de la válvula de escape. Al inicio de la apertura se observa un alto gradiente de la presión en el puerto de escape, gradiente que se va suavizando a medida que se incrementa el área de salida del flujo. Es de interés observar cómo la presión en el cilindro al inicio del intervalo mostrado en la **Figura 4.17** y hasta 10 grados después del PMI tiene un comportamiento poco esperado, incrementándose durante la carrera de expansión y en buena parte de la carrera de escape, volviendo a disminuirse alrededor de los 25 grados después del PMI. Cerca del PMS de la carrera de escape se observa que la presión en el cilindro alrededor de la válvula de admisión es menor a la presión cerca de la válvula de escape, esto debido a que en éste punto la válvula de admisión ya ha comenzado su apertura, modificando el campo de presiones en ésta zona. En el mismo sentido, la **Figura 4.18** presenta la evolución de la magnitud de la velocidad entre la apertura y el cierre de la válvula de escape. Se logra observar cómo en la etapa temprana de la apertura de la válvula de escape se tienen muy altas velocidades de evacuación de los gases (lo cual está asociado a los altos gradientes de presión) resultante en condiciones de flujo chocado; así mismo se observa cómo al inicio de la evacuación de gases sólo se logra acelerar de forma significativa el flujo cuasi estático alrededor de ésta válvula. Sólo hasta después del PMI desaparecen los altos gradientes de velocidad alrededor del puerto de escape, lo cual es de esperarse por el mayor área de paso de flujo disponible. A medida que el pistón asciende hacia el PMS la velocidad al interior del cilindro se va haciendo más homogénea y sólo se tienen altas velocidades alrededor del puerto de la válvula de escape, las cuales son de menor magnitud a las obtenidas al inicio de la apertura de la válvula dada la menor diferencia entre la presión en el cilindro y en el ducto de escape en éste paso temporal.

Los anteriores resultados ponen en evidencia otro punto que debe abordarse en la mejora de la metodología propuesta, y es el hecho de extender el dominio asociado a los ductos de escape y admisión con el fin de que los diferentes campos del flujo tengan un mejor desarrollo a partir de las condiciones de inicialización y observar si éstos tienen un efecto sobre el desarrollo del flujo al inicio de la apertura de la válvula del escape. Así mismo, cabe destacar que al usarse

un *solver* del tipo basado en la presión para la convergencia de las ecuaciones gobernantes, esto tiene un efecto sobre la solución obtenida en los primeros instantes de la apertura de la válvula de escape y la precisión y correspondencia física de la solución obtenida.

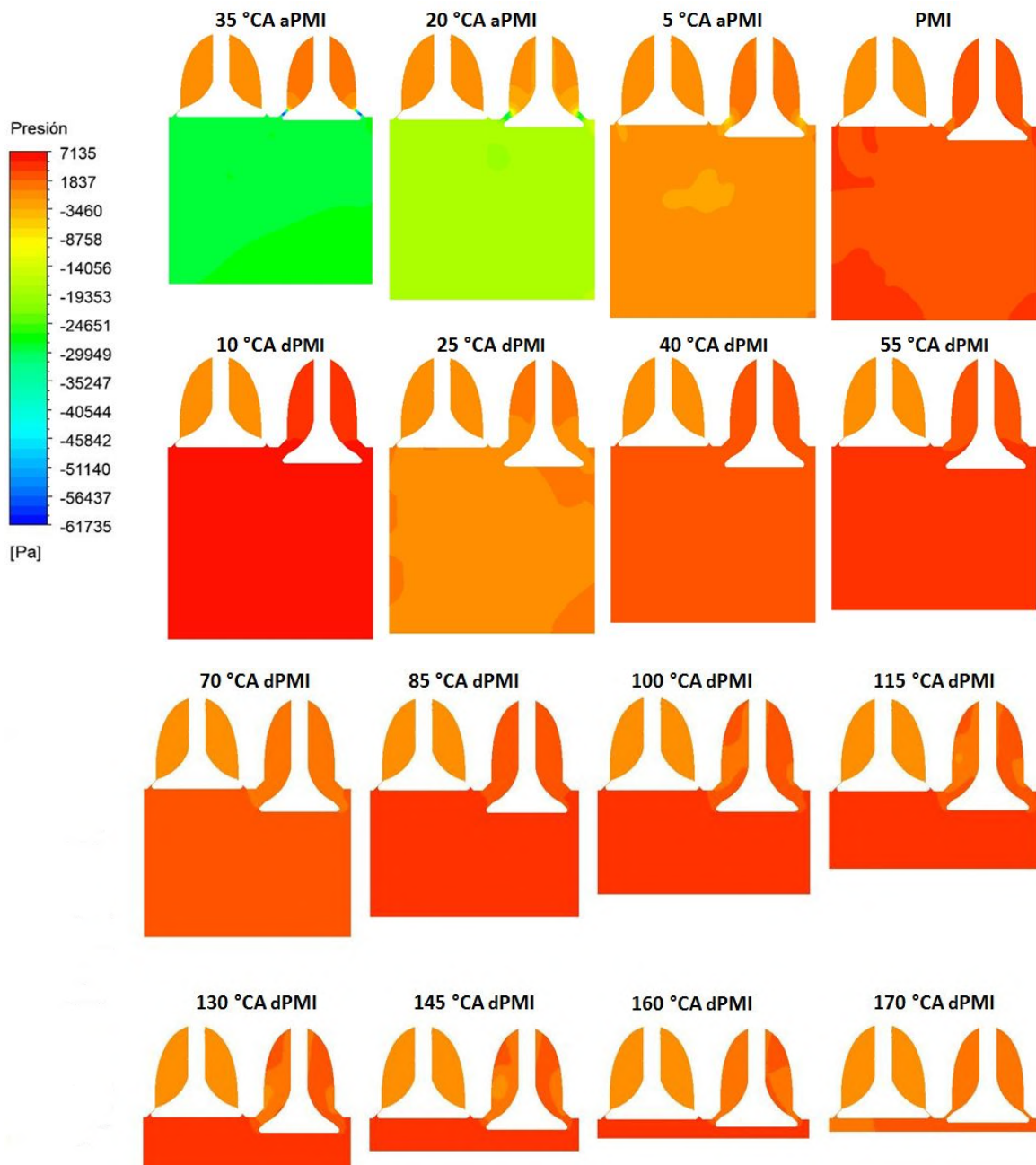


Figura 4.17: Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el EVO y EVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm.

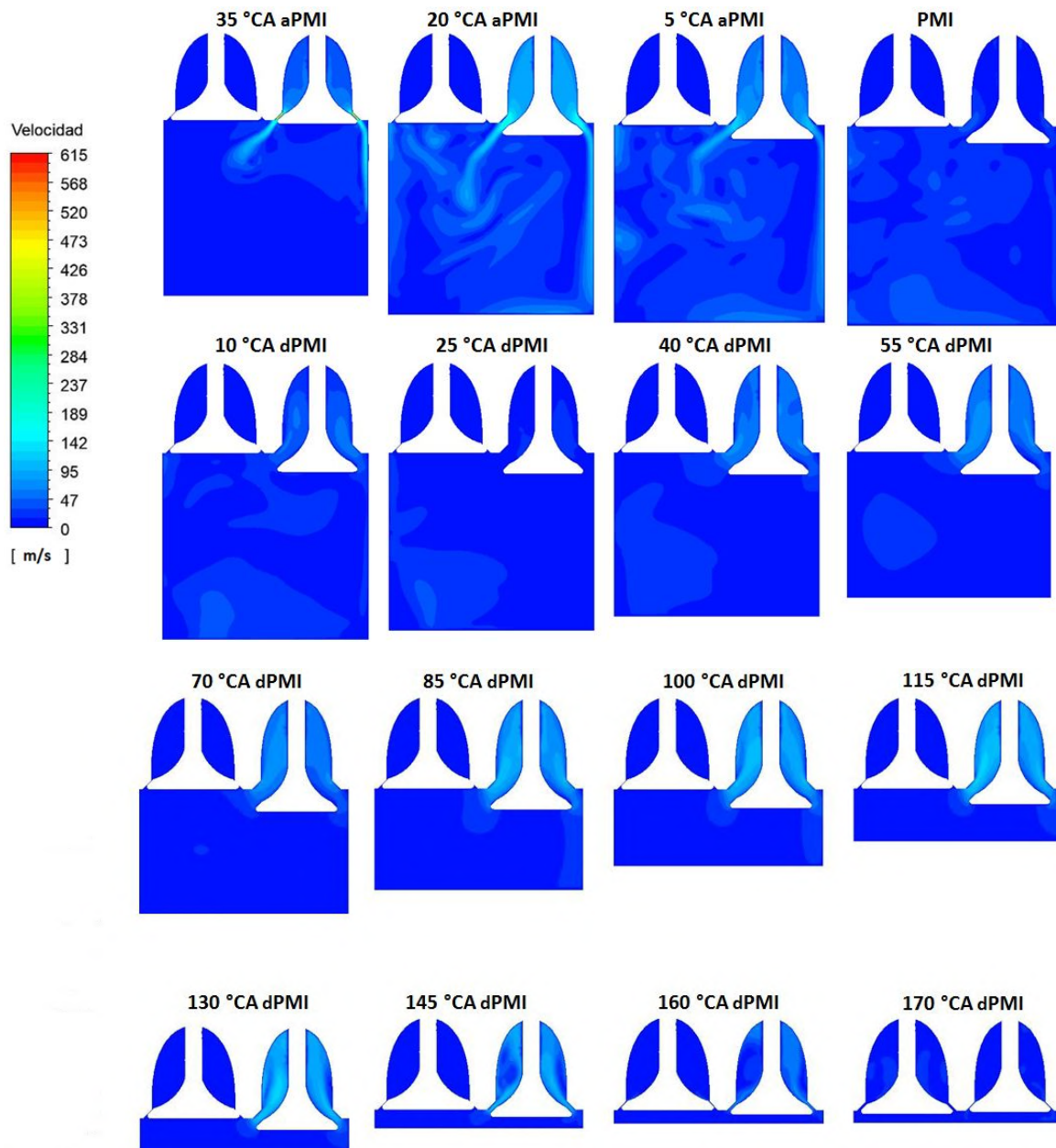


Figura 4.18: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el EVO y EVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Finalmente, en la **Figura 4.19** se presenta la evolución de la temperatura entre la apertura y el cierre de la válvula de escape. En ésta figura se observan dos elementos de interés; el primero se asocia al incremento inesperado de la temperatura en una porción del cilindro en la etapa temprana de la apertura de la válvula de escape, lo cual pareciese generado por una combinación del efecto de “compresión” que genera la válvula y el intercambio entre energía cinética y energía interna que se genera en ésta zona debido al efecto del campo de presión y de velocidad alrededor de ésta región. El segundo elemento de interés son los cambios en el contorno de temperatura que se observa en el ducto de admisión, el cual empieza a homogeneizarse después de los 70° después del PMI, en la carrera de escape; lo interesante aquí es el gran intervalo temporal que se requiere para que el campo de temperatura se estabilice en el ducto de admisión, esto puede estar asociado tanto a la longitud del dominio como al efecto de la malla no-estructurada. Como ya se indicó previamente, éste debe ser un elemento a explorar en próximas aproximaciones a ésta metodología. Así mismo, se observa cómo la temperatura en la cercanía de la pared del

ducto de escape permanece por debajo (alrededor de los 310 K) de la condición de frontera fijada en ésta zona.

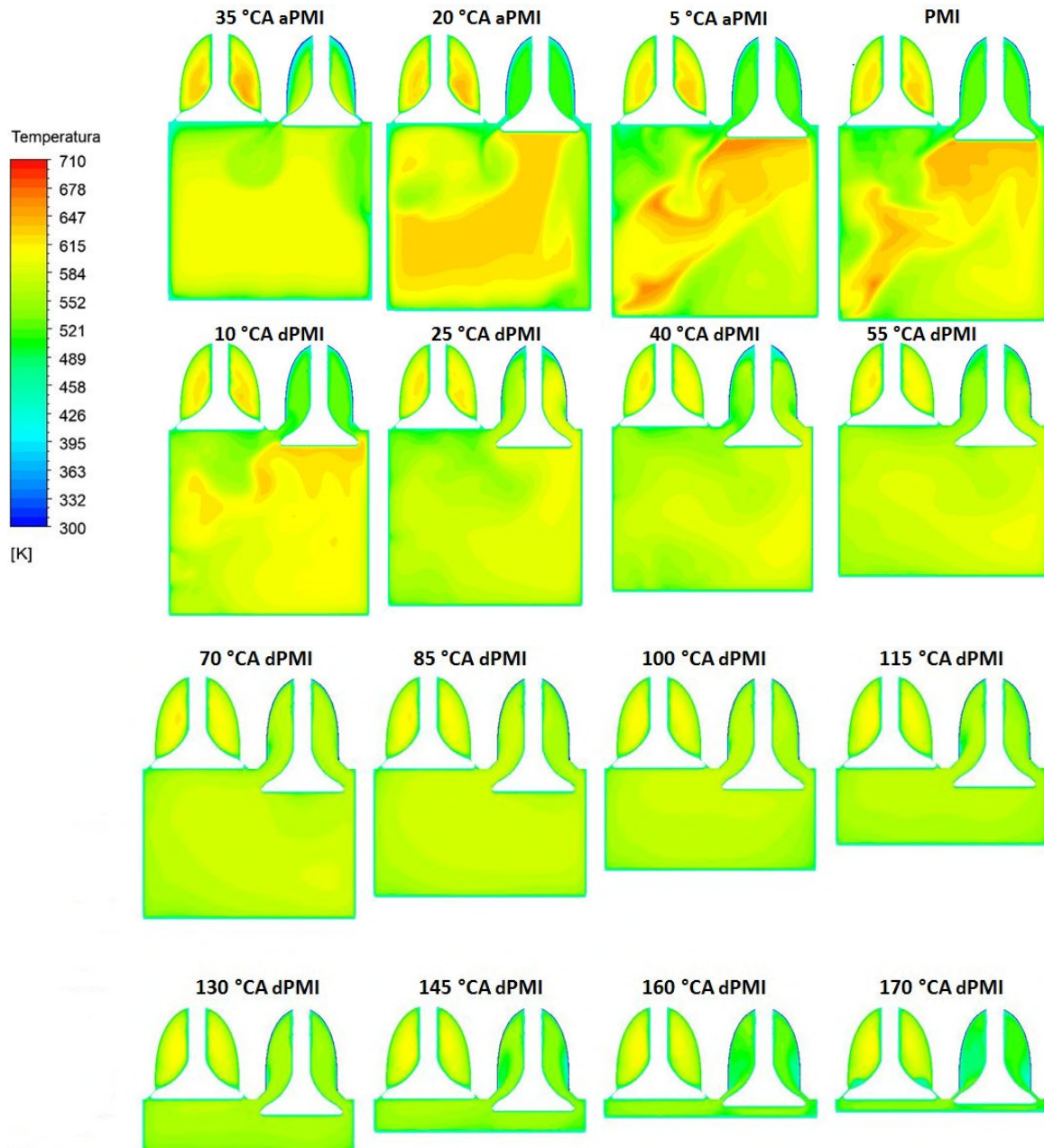


Figura 4.19: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el EVO y EVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm.

Prosiguiendo el análisis de la evolución de los campos de las variables analizadas durante todo el intervalo modelado, en la **Figura 4.20** se presenta el cambio de la presión manométrica entre la apertura y el cierre de la válvula de admisión. Se observa que los gradientes de presión son menores que en el caso de la apertura de la válvula de escape, esto en parte asociado a la menor diferencia de presión entre el interior del cilindro y el ducto de admisión.

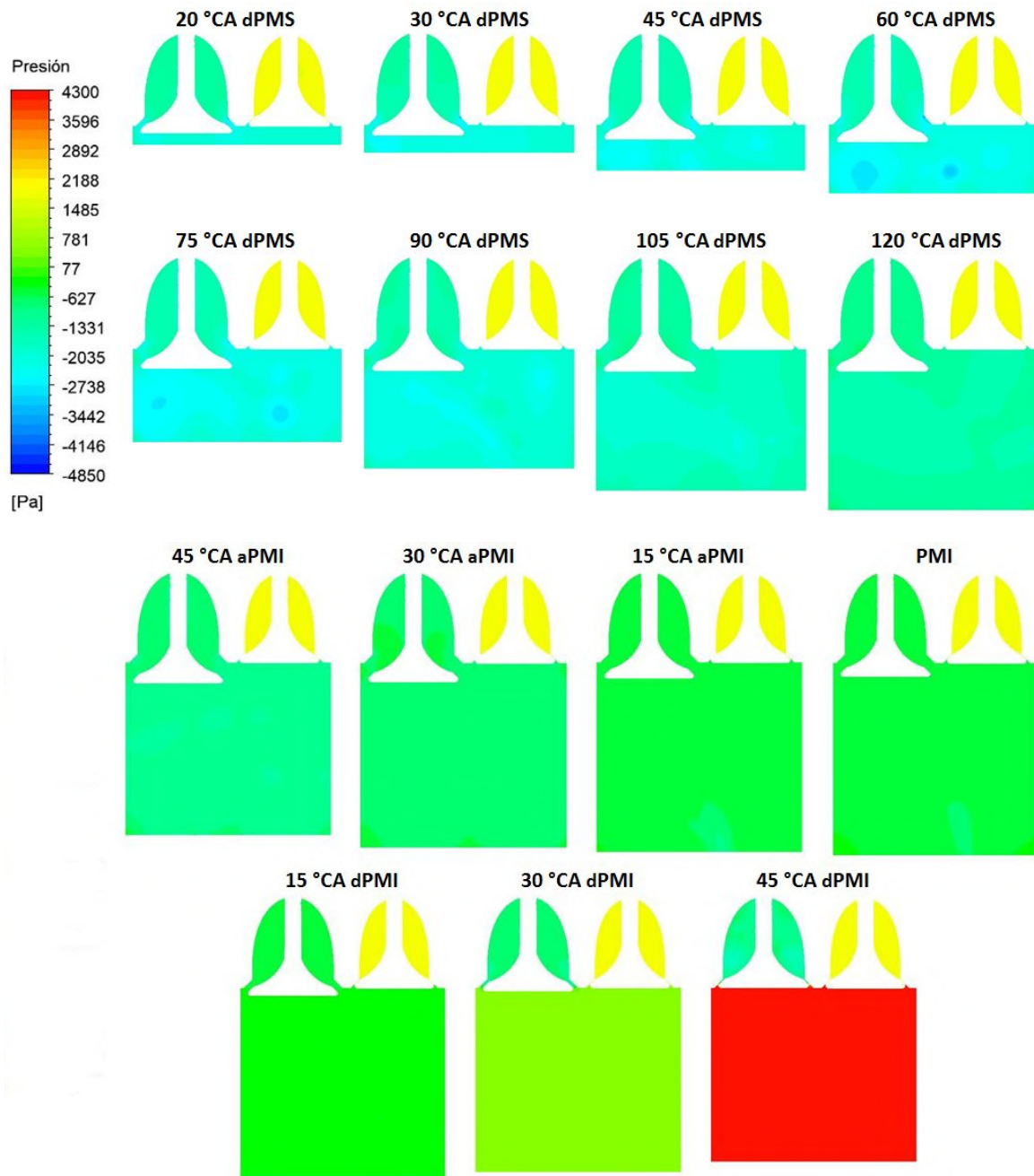


Figura 4.20: Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

En la etapa temprana del proceso de apertura de la válvula de admisión se observan regiones definidas de alta y baja presión, así como la formación de nódulos de baja presión al interior del cilindro y alrededor del puerto de admisión. Esto se asocia a los patrones de velocidad, **Figura 4.21**, que genera la carga admitida que se acelera a medida que atraviesa el puerto de admisión y que se desacelera al llenar el volumen disponible en el cilindro, así como la diferencia de velocidad entre el flujo que ingresa al cilindro, el flujo que choca en la cabeza del pistón y asciende en la parte izquierda de la cabeza del pistón, y el flujo de baja velocidad que está por debajo de la válvula de admisión. Cerca del PMI, al final de la carrera de admisión, la presión empieza a homogeneizarse en todo el cilindro, el patrón de flujo descargado por el borde derecho del puerto de admisión es modificado y se presentan bajos gradientes de velocidad al interior del cilindro, teniéndose zonas de alta velocidad adyacente en las paredes del cilindro y una zona de baja velocidad en el centro del cilindro.

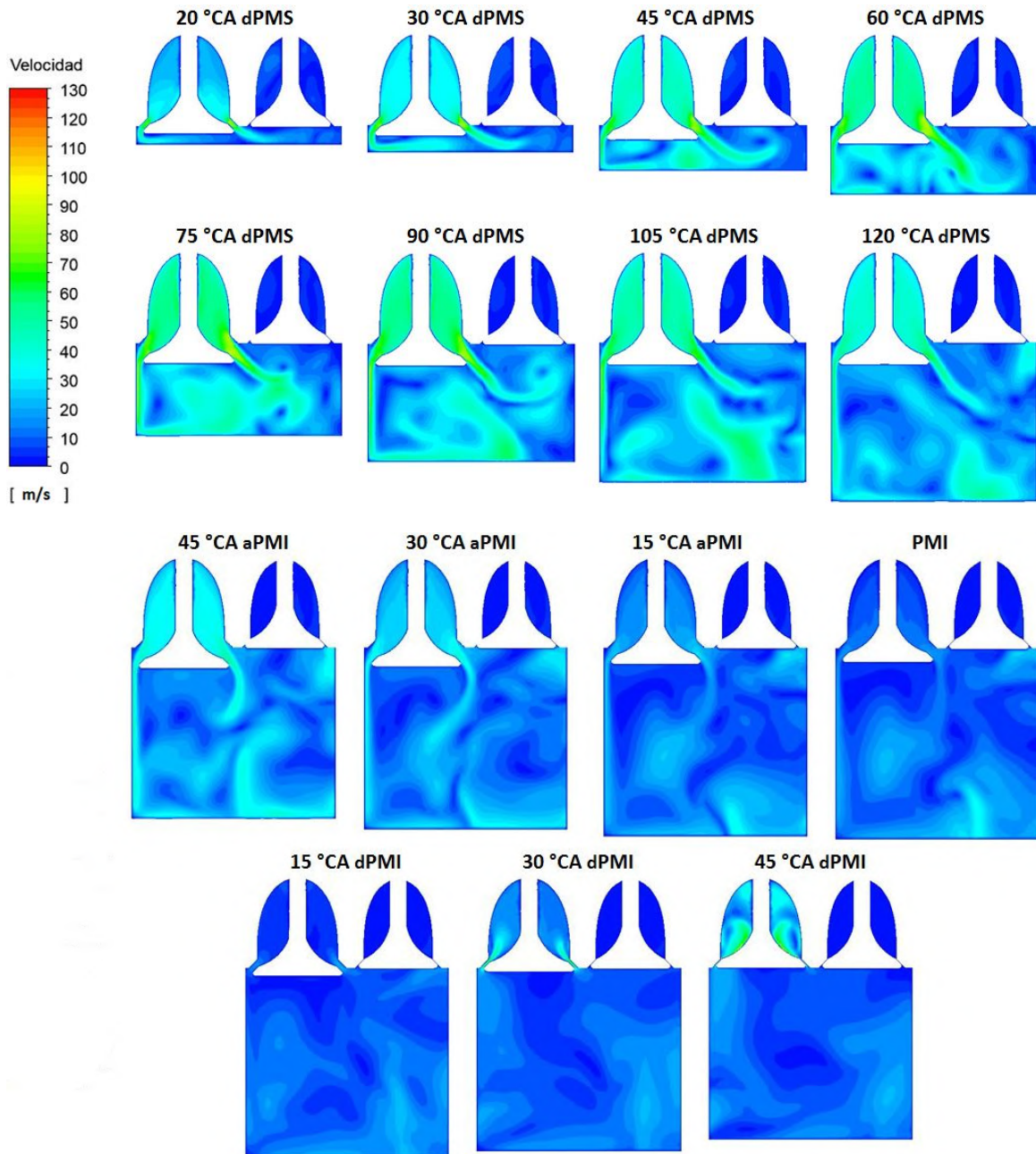


Figura 4.21: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm.

En la **Figura 4.22** se presenta la evolución de los contornos de temperatura entre la apertura y el cierre de la válvula de admisión. Se observa cómo al inicio de la apertura de la válvula se tiene un cambio drástico en la temperatura del ducto de admisión, elevándose alrededor de 45 °C por encima de la temperatura de ingreso de la carga. Éste incremento de temperatura se asocia al ajuste de la solución al cambio drástico de presión que se genera durante el intervalo inicial de la válvula de admisión, es decir, a un efecto puramente numérico, ya que se observa cómo al incrementarse el área de descarga del flujo (lo que genera celdas con menor sesgo) la temperatura del ducto vuelve a tender al valor de la temperatura de ingreso de la carga. Así mismo, se logra observar cómo la temperatura de la carga que se aloja en gran parte del volumen del cilindro cae en promedio 60 °C al ingresar a éste, respecto a la temperatura en el ducto de admisión, y cómo se generan regiones con caídas del orden 90 °C por efecto de la transferencia de calor hacia las paredes. Ahora bien, se observa cómo cerca del cierre de la

válvula de admisión, por efecto del campo de velocidad que desplaza la carga al centro del cilindro y por el efecto de la compresión se genera una región definida de alta temperatura (alrededor de 30 °C por debajo de la temperatura de admisión) y será la región que defina la principal zona de autoignición al final de la carrera de compresión.

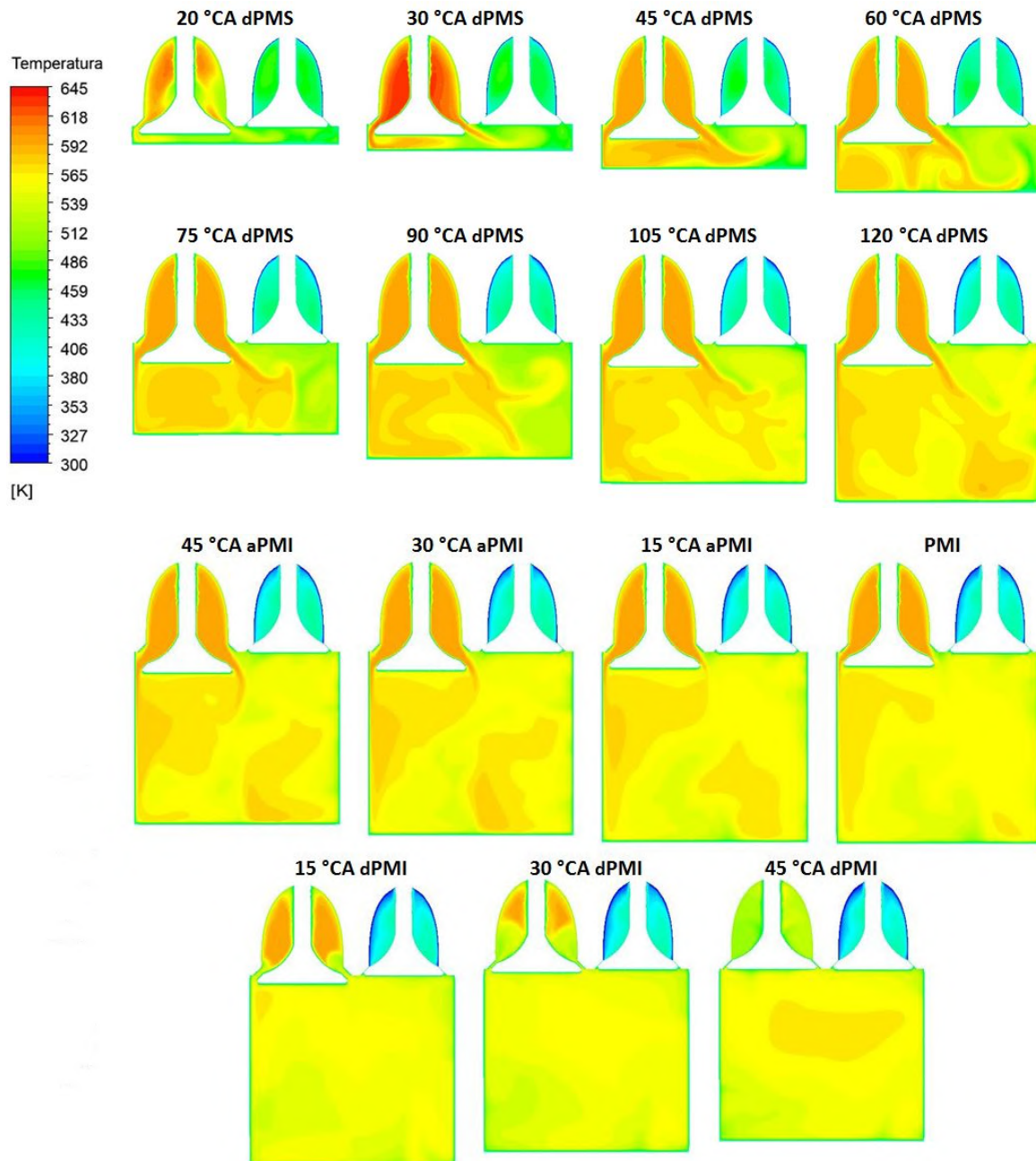


Figura 4.22: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm.

Sin embargo, para mayor claridad, en la **Figura 4.23** se presenta la evolución de los contornos de temperatura entre la apertura y el cierre de la válvula de admisión para un plano de corte paralelo al eje de desplazamiento del cilindro y alineado con el eje medio del vástago de la válvula de admisión. Se observa cómo la región de alta temperatura no se ubica totalmente en el centro del cilindro (para el caso del punto experimental en cuestión), sino que también recoge una porción de la región superior frontal del cilindro, esto asociado a los patrones de descarga de flujo y ubicación del puerto de admisión.

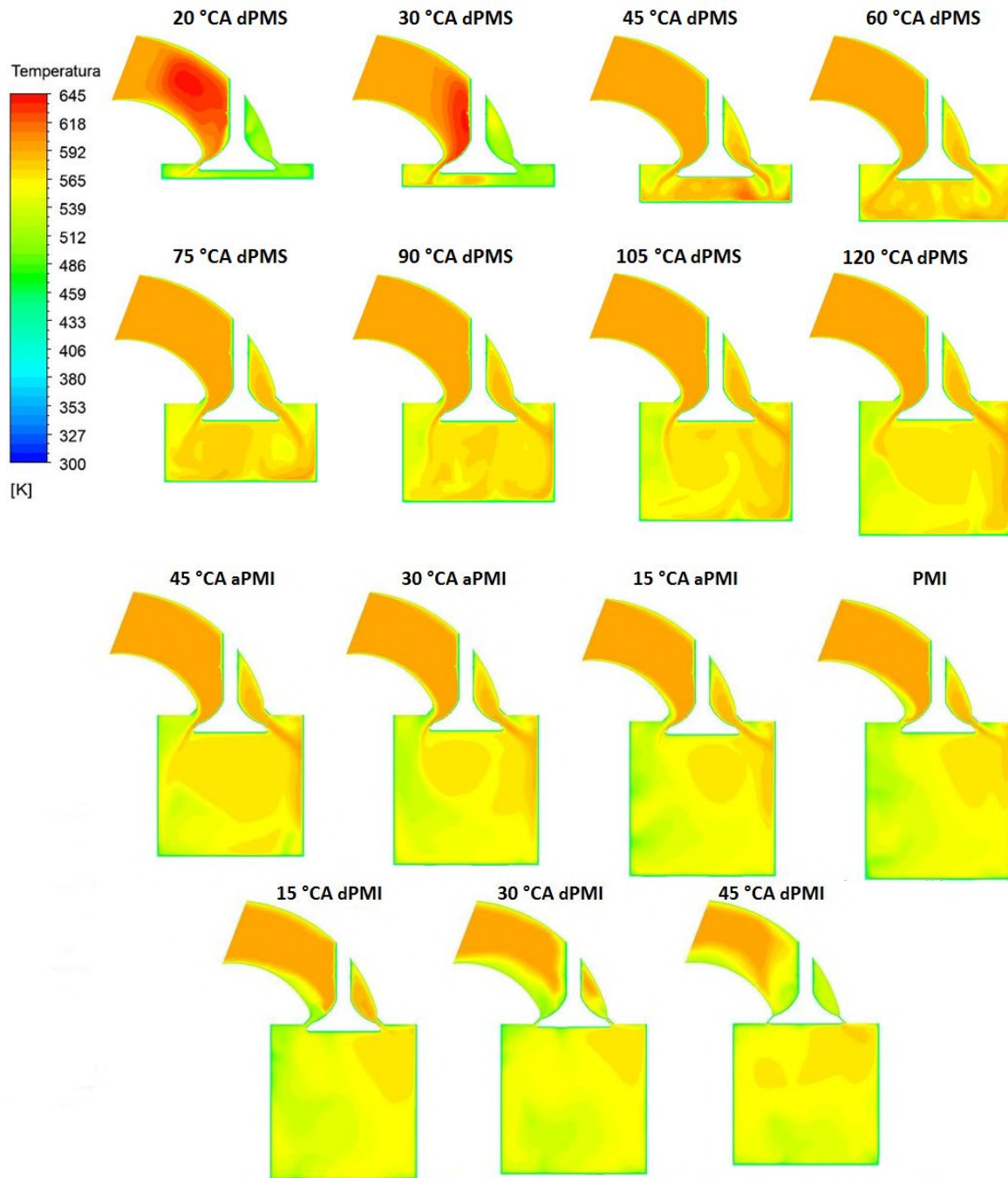


Figura 4.23: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVO y IVC para un plano de corte paralelo al eje de desplazamiento del cilindro: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

4.2.2. Evolución de los Campos de Flujo Durante la Carrera de Compresión

En la **Figura 4.24** se presenta la evolución de la presión manométrica entre el cierre de la válvula de admisión y el PMS. Se observa que al igual que los últimos pasos temporales presentados en **Figura 4.20**, la presión permanece homogénea en todo el dominio de la cámara de combustión. Ahora bien, en la **Figura 4.25** se presenta la evolución de los contornos de temperatura para el mismo intervalo temporal; se observa cómo la región de mayor temperatura empieza a ocupar un volumen mayor en la primera etapa de la carrera de compresión y a

medida que el volumen de la cámara de combustión se va reduciendo la región más caliente se va ubicando en el centro de ésta.

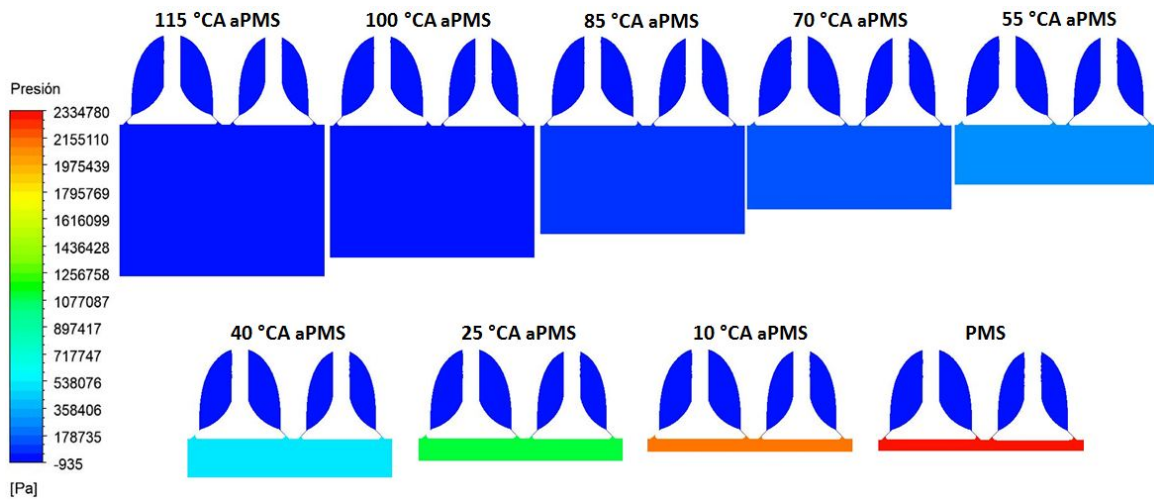


Figura 4.24: Evolución de la presión (manométrica) al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm.

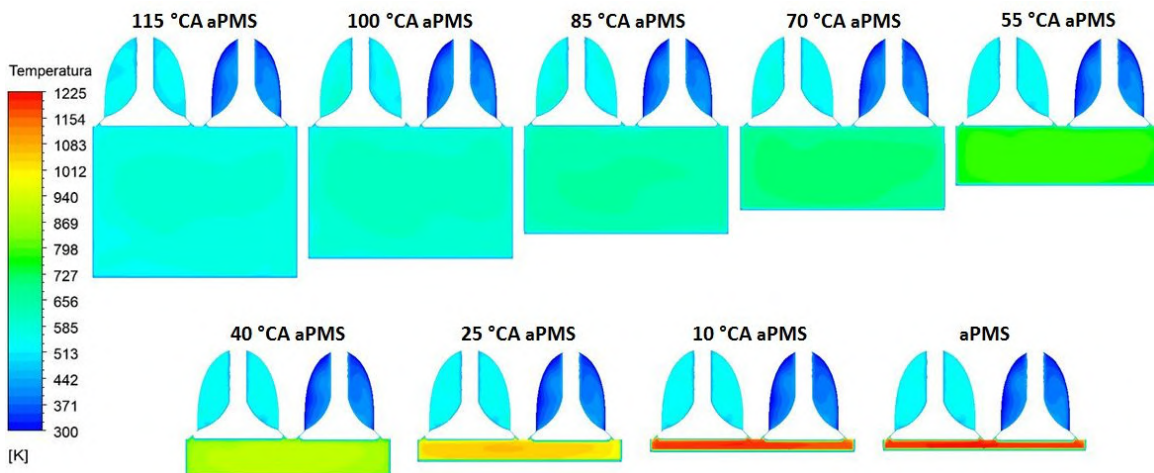


Figura 4.25: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm.

En la **Figura 4.26** se presenta la evolución de los contornos de temperatura para un plano perpendicular al de la **Figura 4.25** y paralelo al eje de desplazamiento del pistón, observándose una evolución del contorno de temperatura similar, lo cual conlleva a presuponer que la estratificación térmica que se da al interior de la cámara de combustión no presenta cambios significativos con el plano desde el cual se observa el mapa de contornos de la variable. La estratificación térmica (y por ende másica) al interior de la cámara de combustión está influenciada principalmente por el patrón de flujo tipo *tumble*, lo cual se evidencia en la **Figura 4.27** en el cual se logra ver un incremento de una región de baja velocidad generado para el patrón de flujo. Esto se observa con mayor claridad en la **Figura 4.28**, la cual presenta el campo de flujo en forma de vectores para tres pasos temporales diferentes en la carrera de compresión.

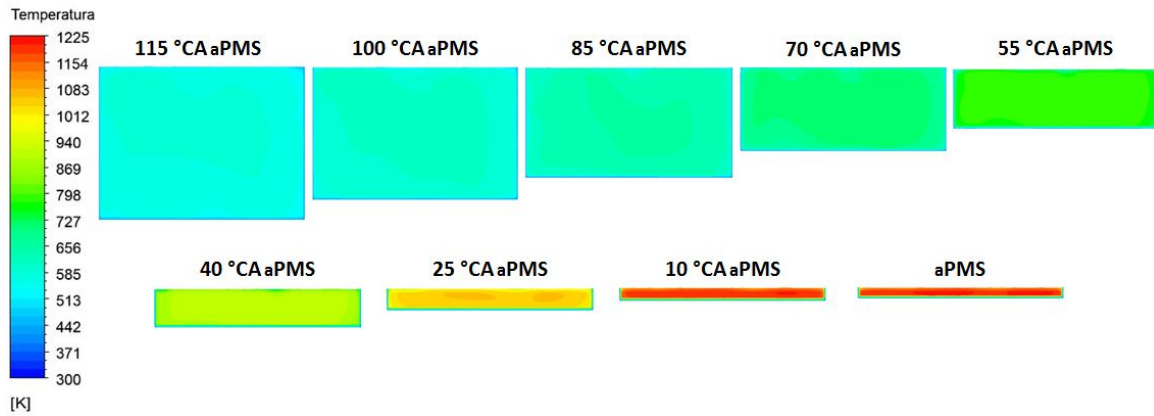


Figura 4.26: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS en un plano perpendicular: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

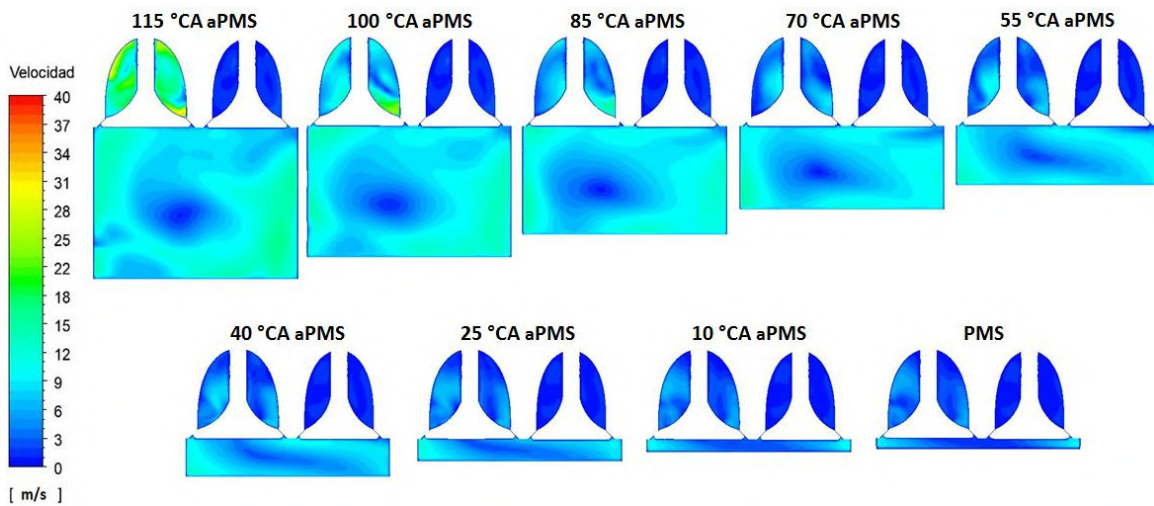


Figura 4.27: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

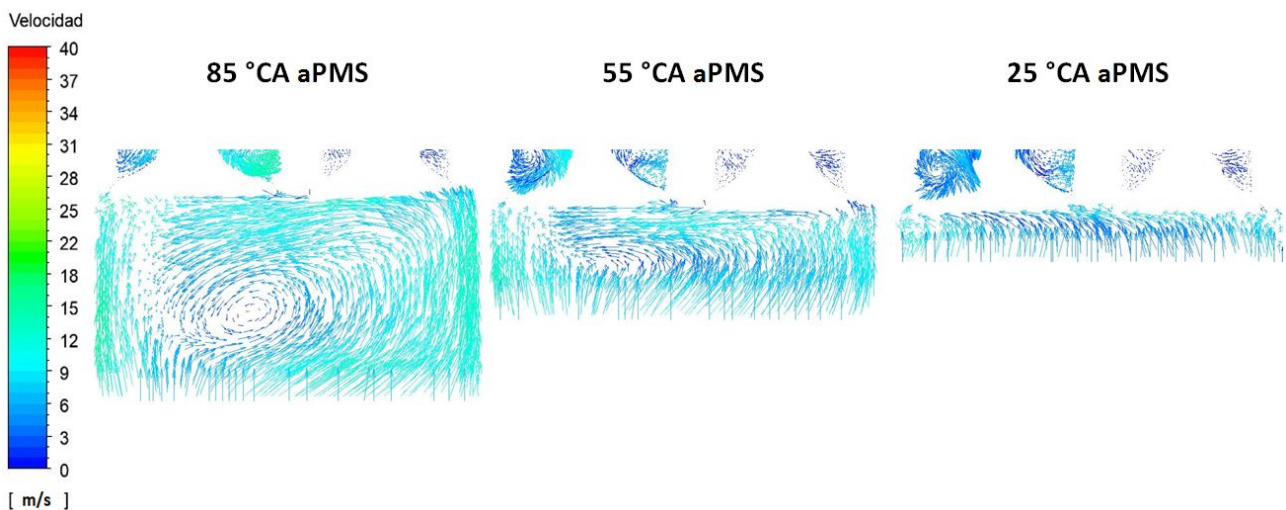


Figura 4.28: Campo de velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Ahora bien, a partir de los campos de flujo obtenidos mediante la simulación CFD, se construyeron los perfiles de masa y temperatura para doce zonas a partir de cuarenta zonas (modelo reducido) [12]. En la **Figura 4.29** se presenta la distribución de temperatura al interior del cilindro para doce zonas, en dos ángulos de giro de cigüeñal diferentes, para el plano medio de la cámara de combustión y el plano perpendicular a éste.

En la **Figura 4.30** se presentan los perfiles de temperatura. Se observan unos perfiles suaves y con diferencias de temperatura entre zonas adyacentes que van desde 5 °C en el IVC a 20 °C cerca del PMS. En la **Figura 4.31** se presentan los perfiles de masa, observándose cómo se tiene una distribución de masa levemente heterogénea entre las zonas más calientes cerca del IVC, y aunque la zona más caliente ocupa un volumen representativo en la cámara de combustión (**Figura 4.25**), éste volumen sólo representa alrededor del 5 % de la carga, mientras que las zonas más frías representan menos del 10 % de la carga.

A medida que la carga se comprime y que el patrón de flujo *tumble* va acumulando la carga al centro de la cámara de combustión, la masa de la zona de las dos zonas calientes va incrementando hasta contener el 60 % de la carga. Así mismo se logra observar cómo el mismo patrón de flujo genera la transferencia de carga de la zona más caliente a la segunda zona más caliente y de las zonas frías y de la tercera zona más caliente hacia las zonas de temperatura intermedia.

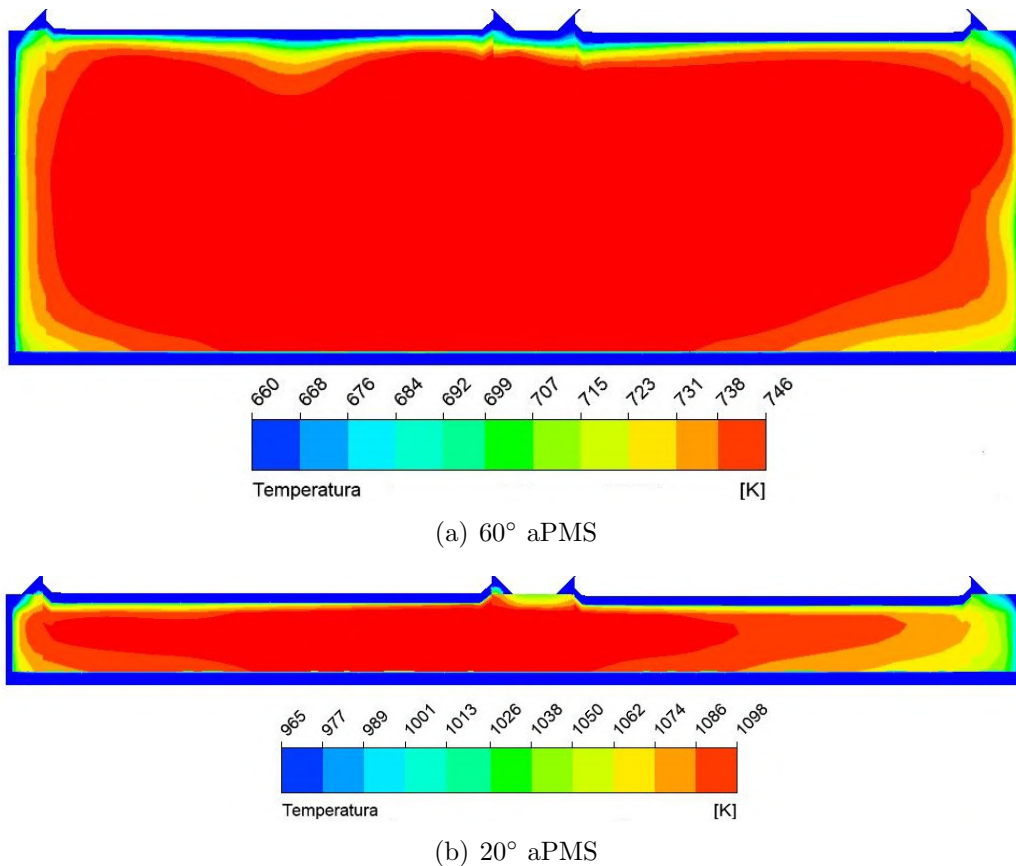


Figura 4.29: Distribución de temperatura al interior de la cámara de combustión a diferentes ángulos de giro de cigüeñal. Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

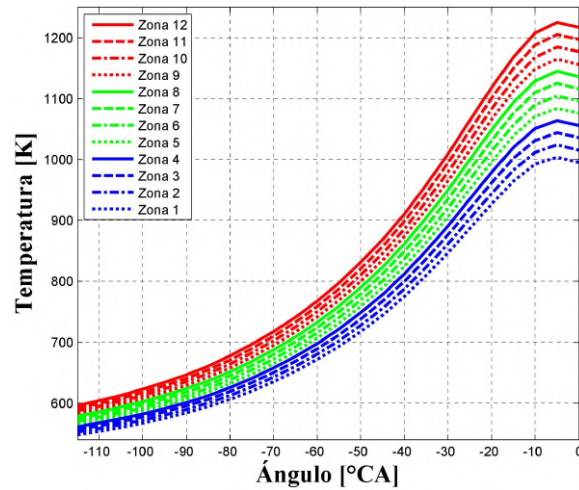


Figura 4.30: Perfiles de Temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

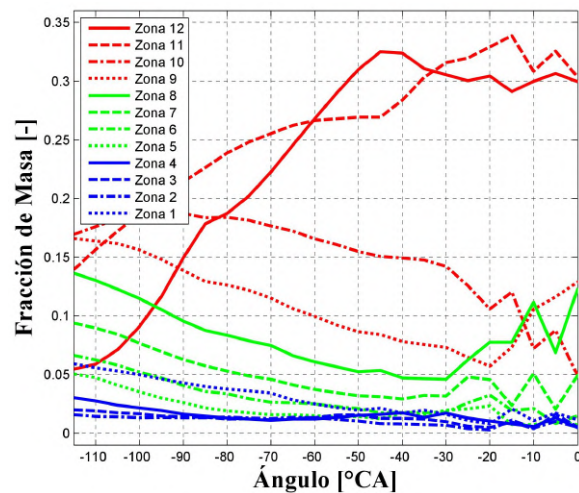


Figura 4.31: Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Los resultados obtenidos con la actual metodología se compararon con los resultados a partir de simulaciones axisimétricas que modelan sólo la carrera de compresión en el intervalo de válvulas cerradas¹. En la **Figura 4.32** y la **Figura 4.33** se presentan los resultados los perfiles de temperatura y masa, respectivamente, obtenidos. En relación con los perfiles de temperatura se observa el efecto del campo de velocidades sobre la estratificación térmica de la carga, teniéndose una estratificación térmica más compacta durante toda la carrera de compresión para la simulación de válvulas cerradas (la diferencia de temperatura entre zonas adyacentes es de $15 \text{ }^\circ\text{C}$ cerca del PMS), una temperatura levemente inferior para la zona más caliente y una diferencia de alrededor de $50 \text{ }^\circ\text{C}$ para las zonas más frías en las cercanías del PMS.

¹La malla utilizada fue una malla 2D, con alrededor de 18000 celdas en el IVC y 3000 en PMS. La simulación se inicializó con las condiciones de presión y temperatura experimentales en el IVC

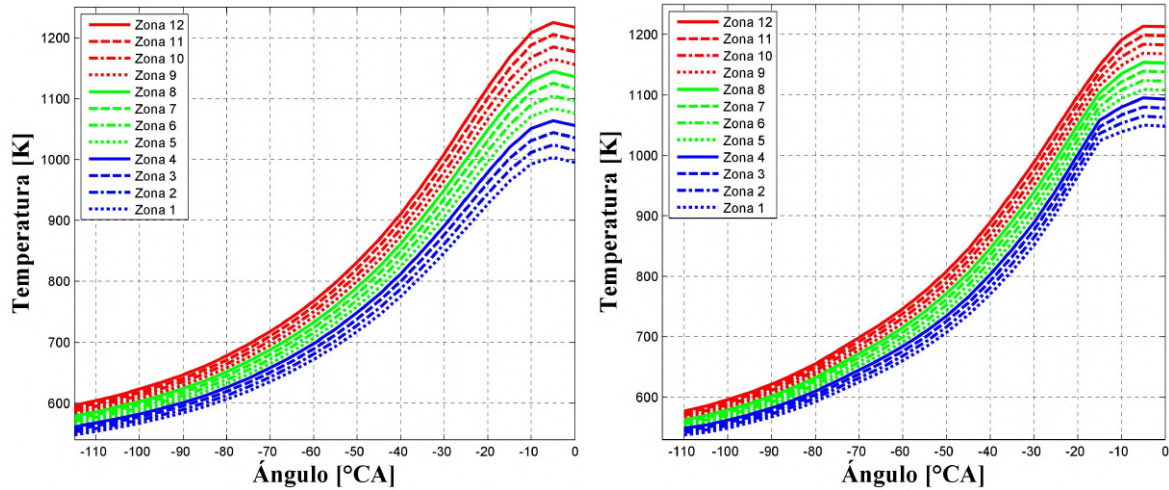


Figura 4.32: Perfiles de temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para un dominio 3D que incluye el período de cruce de válvulas (izquierda, correspondiente a la **Figura 4.30**) y para un dominio 2D durante el período de válvulas cerradas (derecha): $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

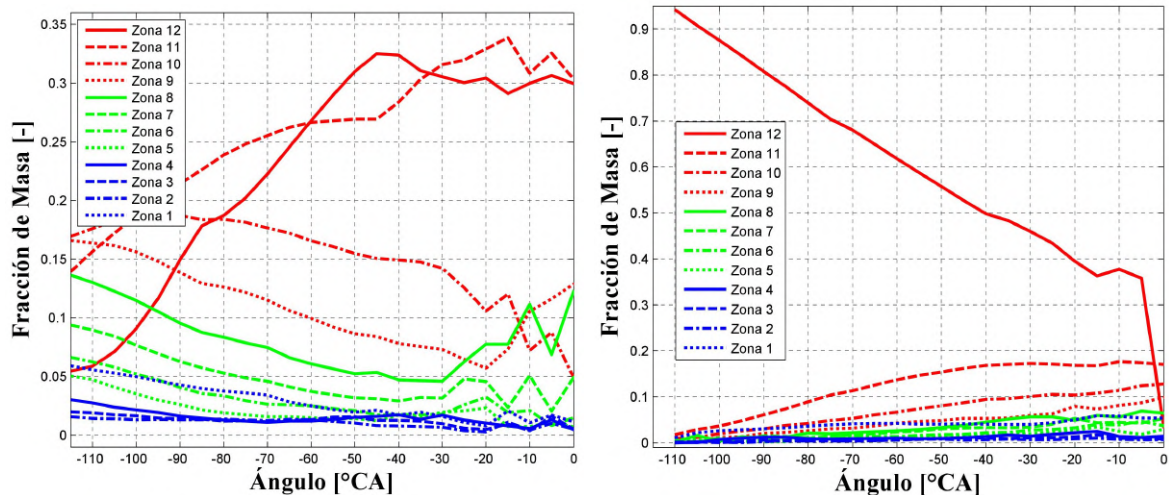


Figura 4.33: Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para un dominio 3D que incluye el período de cruce de válvulas (izquierda, correspondiente a la **Figura 4.31**) y para un dominio 2D durante el período de válvulas cerradas (derecha): $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Las diferencias en la estratificación másica son más notables. Dado que en las simulaciones en el período de válvulas se parte de una condición de temperatura y presión para toda la carga en el cierre de la válvula de admisión, la carga se centra en la zona más caliente y se transporta a las demás zonas de temperatura principalmente por el incremento de los gradientes de temperatura al interior del dominio (debido a la transferencia de calor hacia las paredes), más que por un efecto fluido dinámico. En la **Figura 4.34** se presenta una comparación directa de los perfiles masa para las zonas frías y las zonas calientes. Respecto a las zonas frías se observa claramente la tendencia de acumulación de masa en las zonas, para la simulación 2D, a medida que se comprime la carga, mayor contenido de masa (respecto a la simulación 3D) y una estratificación más heterogénea en las cercanías del PMS. Respecto a las zonas calientes, en las cercanías del PMS, los perfiles de masa son cercanos en ambas metodologías de simulación CFD para las

zonas menos frías, sin embargo, para la zonas más caliente se tiene una diferencia marcada en la segunda zona más caliente en todo el intervalo temporal y una leve diferencia en la zona más caliente a los 10° antes del PMS y una diferencia muy notoria cuando se tiende al PMS.

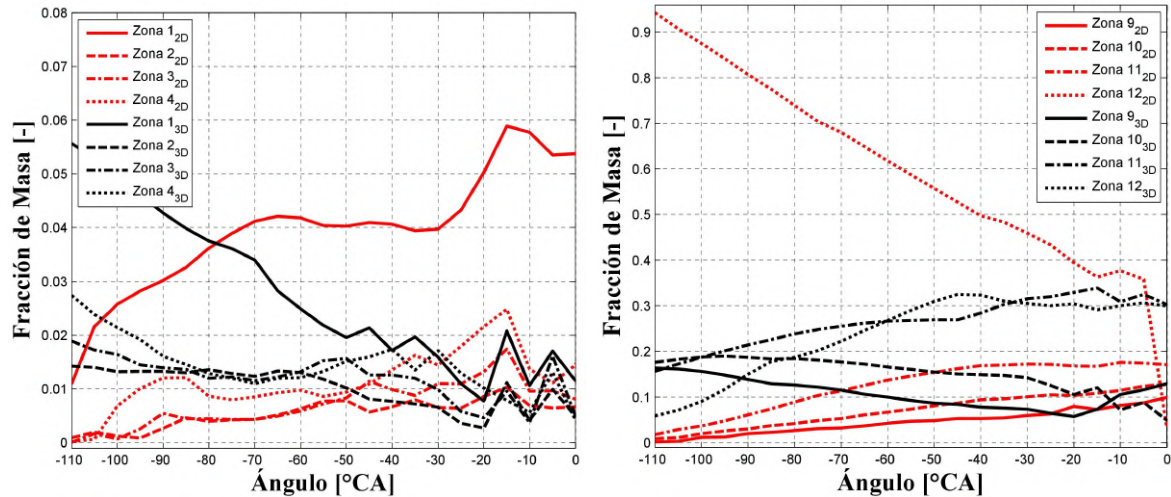


Figura 4.34: Comparación de perfiles de masa obtenidos a partir de la simulación CFD para un dominio 3D que incluye el período de cruce de válvulas y para un dominio 2D durante el período de válvulas cerradas. Zonas frías (izquierda) zonas calientes (derecha): $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Los anteriores resultados son de interés de cara a la exploración de estrategias de estratificación de la carga desde simulaciones CFD, ya que el efecto de una estrategia puede conducir a distribuciones diferentes de la carga según la metodología de simulación, siendo la adecuada inicialización del campo de velocidades un factor fundamental en el caso de la simulación del período de válvulas cerradas.

4.2.3. Variaciones de la Estratificación Térmica y Másica de la Carga durante la Carrera de Compresión con Cambios en la Temperatura de Admisión y el Dosado Relativo

En las Figuras 4.35 y 4.36 se presentan la evolución de los contornos de velocidad y temperatura, respectivamente, entre la apertura y cierre de la válvula de admisión para el punto de operación con dosado relativo de 0.28 y temperatura en la admisión de 330°C .

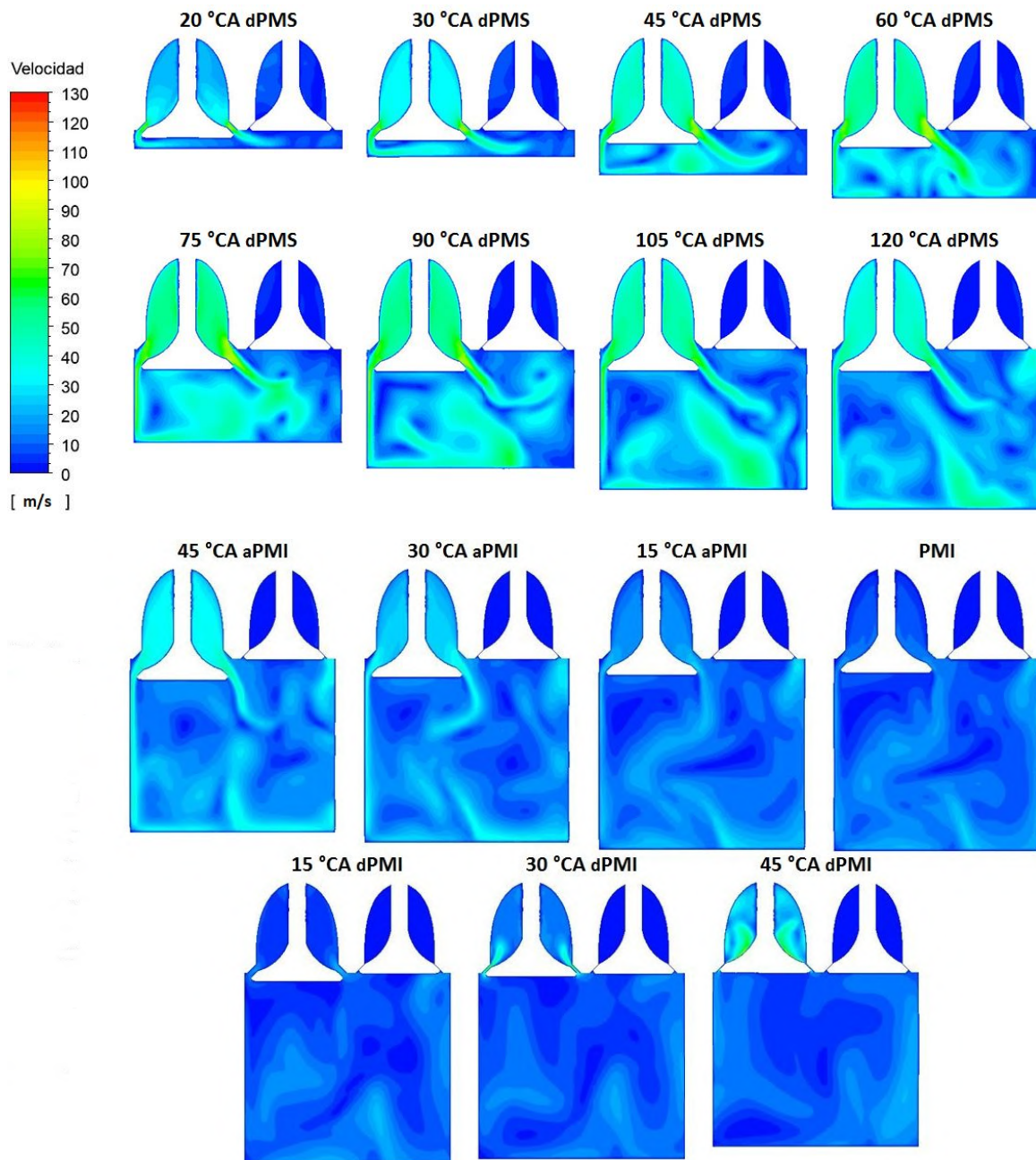


Figura 4.35: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

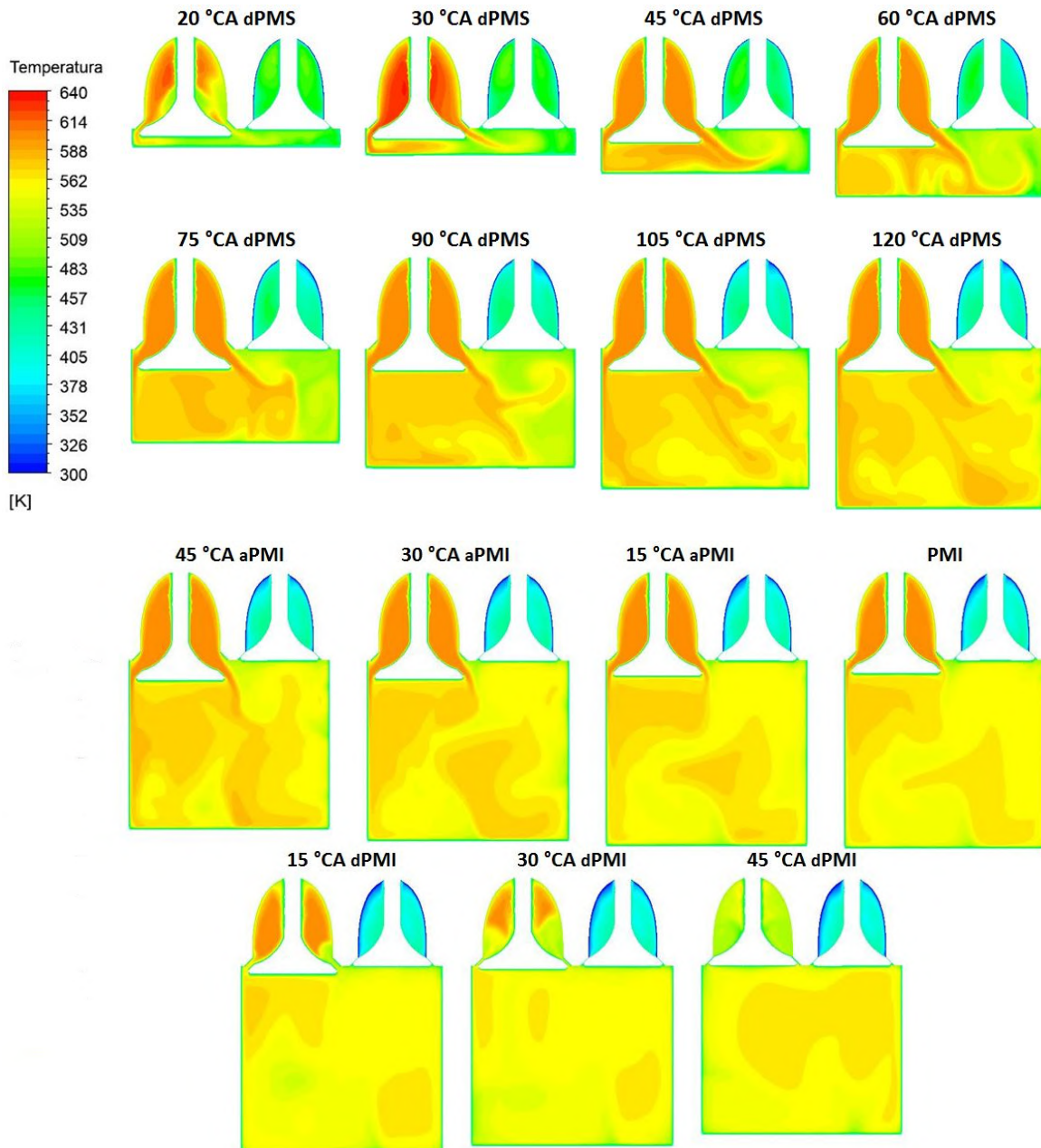


Figura 4.36: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVO y IVC: $\phi = 0.28$; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ °C}$; 1800 rpm.

Se observa que los patrones de flujo no presentan cambios relevantes con el cambio de la temperatura en la admisión durante gran parte del intervalo de apertura de la válvula de admisión (respecto al punto de operación del mismo dosado y de temperatura en la admisión de 325 °C), sin embargo, al iniciarse el cierre de ésta se observan cambios en los patrones tanto del flujo que ingresa al cilindro como en la distribución de zonas de mayor velocidad al interior del cilindro, generándose una mayor heterogeneidad en el campo de velocidades al cierre de la válvula de admisión y a un volumen mayor de carga de alta temperatura.

En las **Figuras 4.37** y **4.38** se presentan la evolución de los contornos de velocidad y temperatura, respectivamente, durante la carrera de compresión para el punto de operación con dosado relativo de 0.28 y temperatura en la admisión de 330 °C , mientras que en la **Figura 4.39** y **Figura 4.40** se presentan los perfiles de estratificación térmica y másica para el punto en cuestión y se compara con el punto de temperatura en la admisión de 325 °C . Se observa que la mayor heterogeneidad de la velocidad del campo de velocidades para el punto de 330 °C

en la admisión conlleva a una mayor región de baja velocidad rodeado por un flujo de mayor velocidad cerca de las paredes (si se compara con los contornos obtenidos para el punto de mismo dosado y 325°C en la admisión). Si bien éste patrón de flujo parece no afectar la forma como se estratifica la masa en las regiones de baja y media temperatura, sí se logra observar un incremento notable en la masa contenida en la tercera y cuarta zona más caliente. Ésta mayor heterogeneidad del campo de velocidades durante la compresión lleva un comportamiento de estratificación de la masa muy similar, en donde el movimiento de *tumble* y el proceso de compresión llevan a una transferencia de la masa desde las regiones frías y de temperaturas intermedias hacia las regiones de más alta temperatura, sin embargo, durante la parte final de la carrera de compresión se evidencia una transferencia más pronunciada de la masa de la zona más caliente a la segunda zona más caliente.

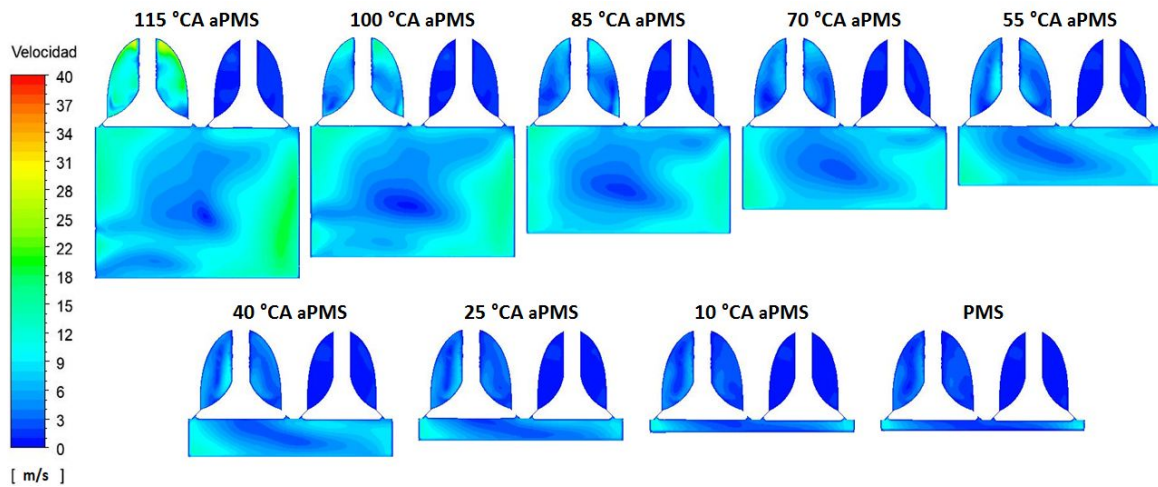


Figura 4.37: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

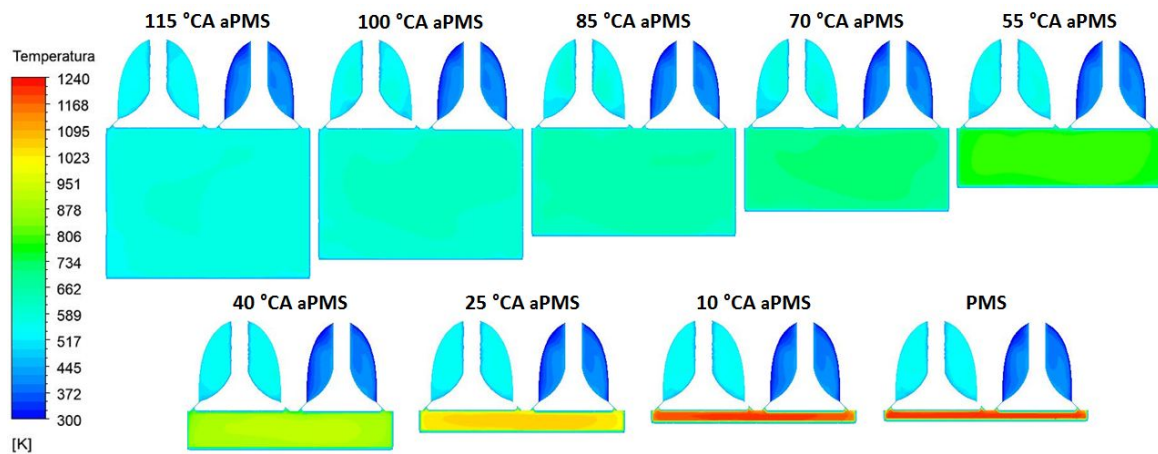


Figura 4.38: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Éste comportamiento en la estratificación de la carga permite entender la tendencia observada en la **Figura 4.9** para los puntos de dosado relativo de 0.28. El incremento en la dispersión cíclica con el incremento en la temperatura en la admisión se asocia a la forma en como se distribuye la masa previo a la auto-ignición, ya que si bien se tiene un leve incremento en la temperatura de cada una de las regiones (como se observa en la **Figuras 4.40**), la región que

primero se auto-enciende (zona más caliente) posee una menor cantidad de masa en el caso de $T_{ad} = 330^\circ C$, siendo menor la cantidad de calor que se produce en la primera etapa de la combustión y que permite auto-encender de forma efectiva las demás regiones, y mayor la probabilidad de que los radicales que se generan en los principales puntos de ignición sean transportados a zonas de menor temperatura donde no puedan conducir efectivamente a las reacciones de ramificación requeridas para mantener una combustión estable.

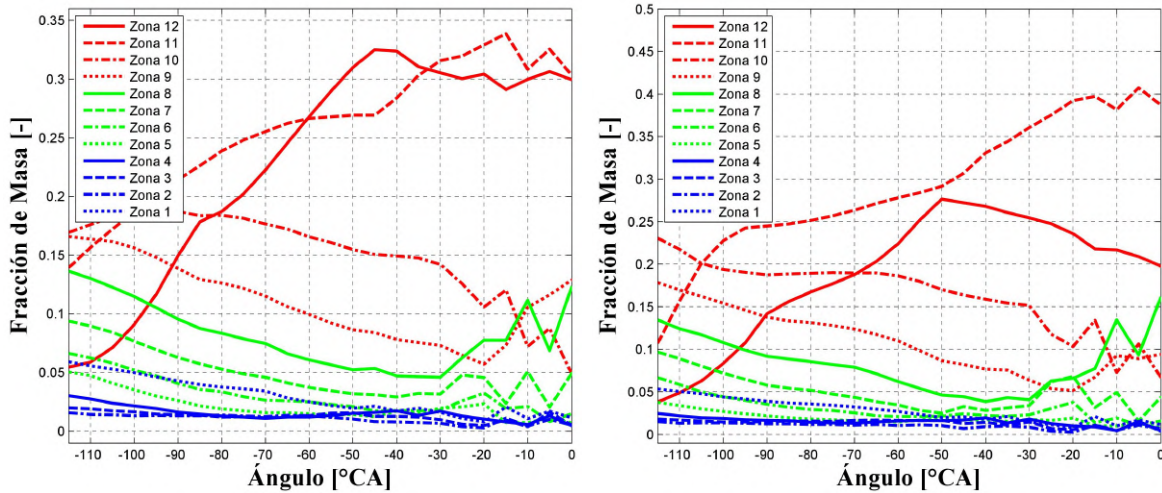


Figura 4.39: Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 325^\circ C$ (izquierda); $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 330^\circ C$ (derecha).

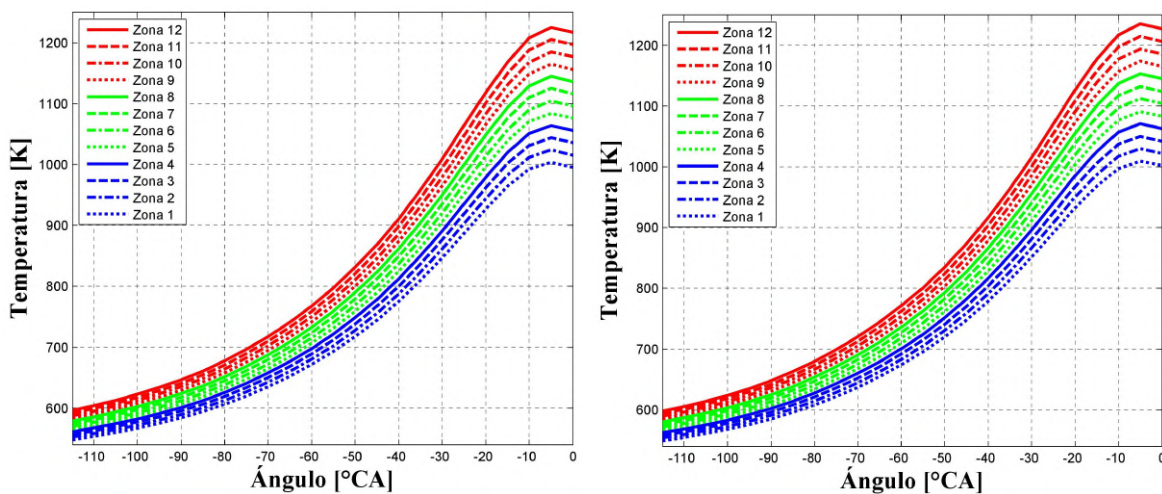


Figura 4.40: Perfiles de temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 325^\circ C$ (izquierda); $\phi = 0.28$: $T_{ad} = 330^\circ C$ (derecha).

Finalmente, en las **Figuras 4.41 y 4.42** se presentan los contornos de velocidad y temperatura, respectivamente, para un dosado de 0.42 y una temperatura en la admisión de $325^\circ C$. Al comparar el contorno de velocidad con el obtenido para la misma condición de temperatura en la admisión y menor dosado, **Figura 4.27** se observa claramente el efecto que tiene el dosado relativo sobre el campo de velocidades y por ende sobre la estratificación térmica y másica de la carga, **Figuras 4.43 y 4.44**. Con el incremento del dosado relativo se tiene nuevamente un campo de velocidades más heterogéneo en el IVC que conlleva a una mayor cantidad de carga en las regiones más calientes de la cámara de combustión, aunque con una cantidad

menor en la región de mayor temperatura. Durante la compresión los patrones de flujo tienden a trasladar la masa hacia el centro de la cámara de combustión, donde se ubican las regiones de mayor temperatura, transfiriendo masa de las regiones frías y de temperaturas intermedias a las zonas de mayor temperatura. La tasa a la cual se transfiere masa hacia las regiones de mayor temperatura es alta hasta alrededor de los 40° antes del PMS, tras lo cual la tasa se reduce debido a la menor disponibilidad de volumen en la cámara de combustión y por ende del espacio disponible para que los patrones de flujo se puedan seguir desarrollando efectivamente y moviendo la carga hacia el centro de la cámara de combustión; lo que es particular para ésta condición de mayor dosado relativo, es que en vez de comenzar un proceso de transferencia de masa de la región más caliente a la segunda más caliente al final de la carrera de compresión, se sigue presentando una acumulación de masa en la zona más caliente.

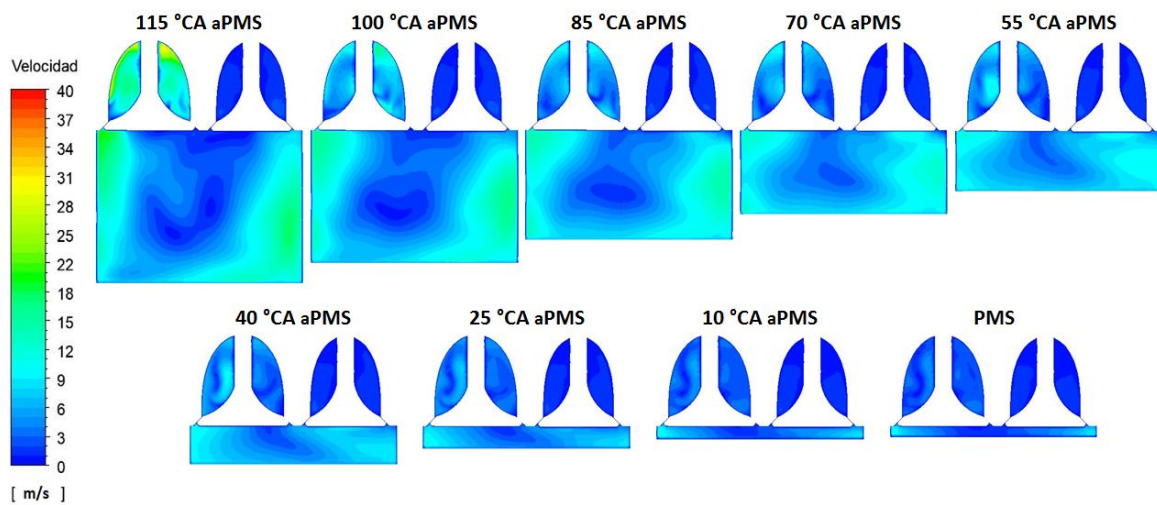


Figura 4.41: Evolución de la velocidad al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

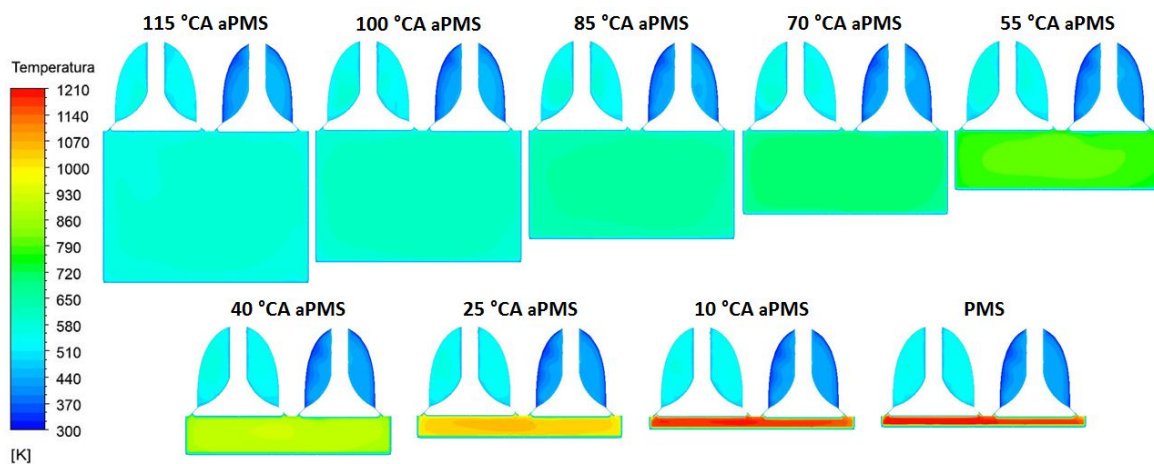


Figura 4.42: Evolución de la temperatura al interior del cilindro entre el IVC y el PMS: $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325^\circ\text{C}$; 1800 rpm.

Finalmente, en la **Figura 4.44** se observa que los perfiles de temperatura para una misma condición de temperatura en la admisión no presentan cambios importantes con el incremento en el dosado relativo, lo cual brinda nuevas herramientas para entender por qué se obtiene una combustión más retrasada y una duración de la combustión similar, aún cuando se tienen mayores picos de presión y de tasa de liberación de calor.

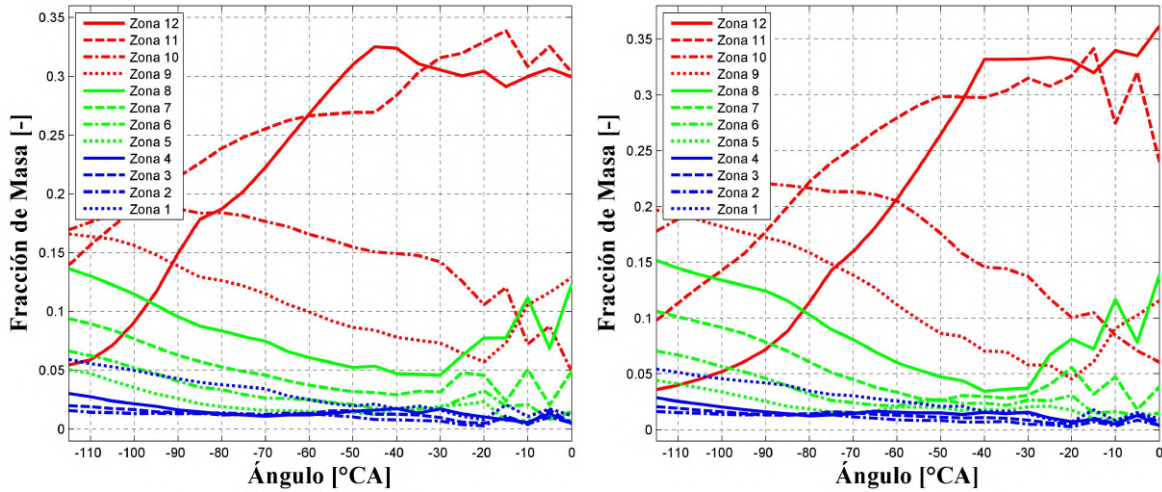


Figura 4.43: Perfiles de masa para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $T_{ad} = 325^{\circ}C$: $\phi = 0.28$ (izquierda); $\phi = 0.42$ (derecha).

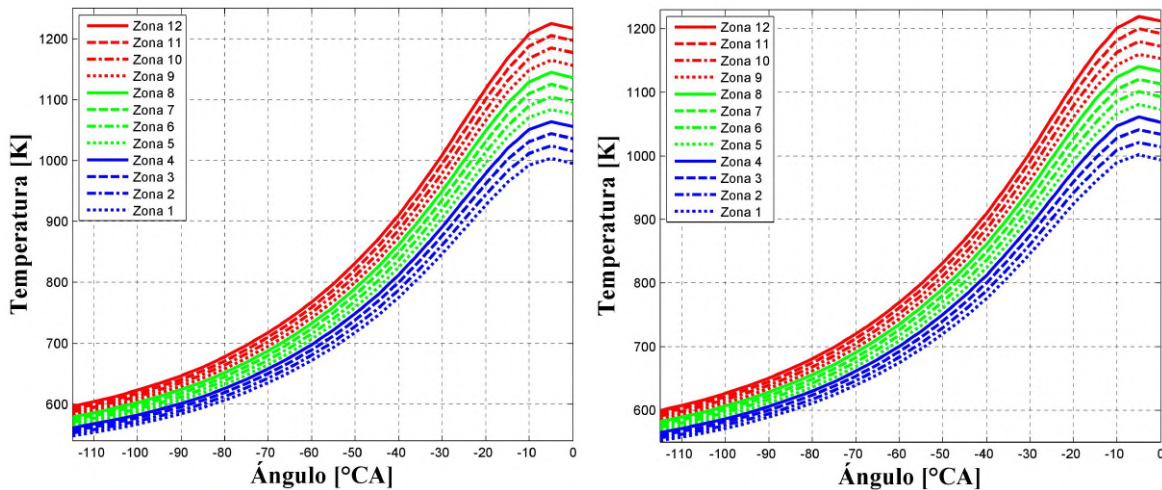


Figura 4.44: Perfiles de temperatura para doce zonas obtenidos a partir de la simulación CFD para $T_{ad} = 325^{\circ}C$: $\phi = 0.28$ (izquierda); $\phi = 0.42$ (derecha).

4.3. Resultados Numéricos en las Simulaciones Multizona con Cinética Química Detallada

4.3.1. Efecto del Ángulo de Transición entre CFD-Cinética Química Detallada

En la **Figura 4.45** se presentan los resultados de la presión en el cilindro para la condición de $\phi = 0.28 - T_{ad} = 325^{\circ}C$, utilizando el esquema de transferencia de calor 4: el área equivalente de transferencia de calor a las paredes de cada zona es igual a la fracción de masa contenida en dicha zona en el ángulo de transición; mientras que en la **Tabla 4.1** se presenta la distribución de masa en el ángulo de transición para los diferentes casos. Para éste punto de operación el CA10 correspondió a 1.5° dPMS, mientras que el CA05 correspondió a 0.6° dPMS.

Tabla 4.1: Variación de la distribución de la masa con el ángulo de transición.

Ángulo de transición [°CA]	Porcentaje de masa en la zona [%]											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
-3	3.93	1.16	1.81	1.36	1.12	0.52	1.42	6.39	11.86	8.99	30.91	30.53
-0.5	1.15	0.49	0.5	0.43	0.71	1.49	4.92	12.28	12.88	4.89	30.33	29.93
-0.1	1.21	0.51	0.53	0.42	0.71	1.47	4.84	12.11	12.87	4.99	30.39	29.95
0.2	1.04	0.46	0.44	0.47	0.69	1.53	5.08	12.61	12.9	4.67	30.22	29.89

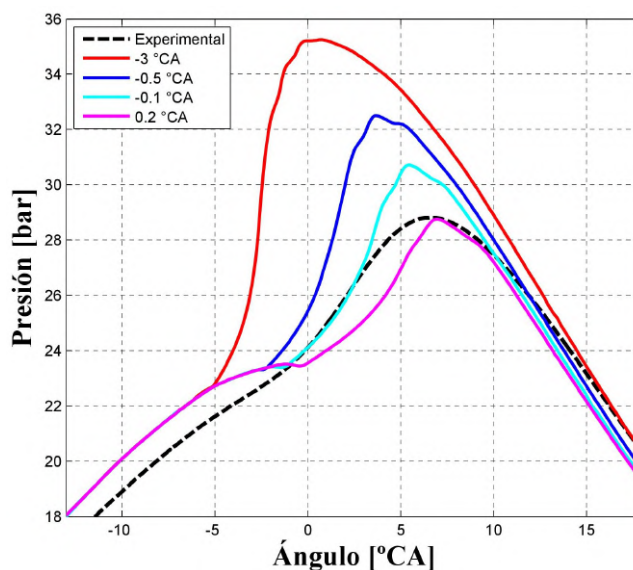


Figura 4.45: Comparación entre la presión en el cilindro experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325^\circ\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5^\circ \text{ dPMS}$; ETC= 4.

Se observa que la predicción del pico de presión es altamente sensible al ángulo de transición utilizado. Ángulos muy retrasados tienden a sobreestimar los picos de presión. Esto se debe al hecho de que las simplificaciones en el modelado del proceso de compresión en las simulaciones CFD tiende a que se sobreestime la presión ligeramente en las cercanías del PMS, lo cual genera a su vez temperaturas cercanas a la temperatura de auto-ignición del combustible, **Figura 4.46** y por ende que se inicie el proceso de combustión apenas se hace la transición hacia los cálculos de cinética química. A medida que se utilizan ángulos de transición que tienden hacia el CA10, la transición se hace en condiciones de menor temperatura y por ende el inicio de la combustión es menos súbita

Sin embargo, en condiciones de operación de combustión retrasada el CA10 se ubica en una zona de baja temperatura y baja presión, respecto a las condiciones en el PMS, lo cual tiende a reducir las tasas a las cuales se generan los radicales que llevan hacia la auto-ignición y al desarrollo de la combustión. Esto se observa con claridad en la **Figura 4.45** para los ángulos de transición de 0.1° aPMS y 0.2° dPMS , en los cuales se empieza a generar una concavidad acentuada en la curva de presión generado por un “tiempo de retraso” entre el ángulo de transición y la auto-ignición del combustible en los cálculos multizona.

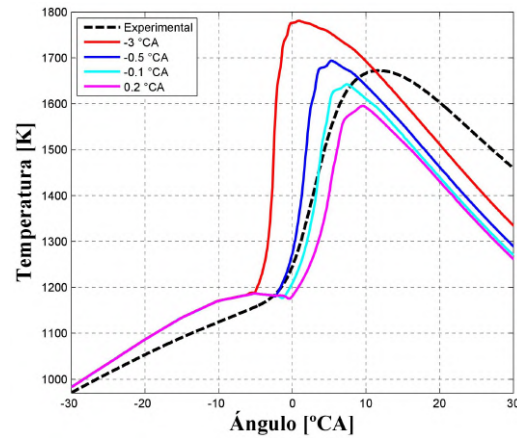


Figura 4.46: Comparación entre la temperatura promedio experimental y numérica para diferentes ángulos de transición: Combustible=60% GN - 40% CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5 \text{ }^\circ\text{dPMS}$; ETC= 4.

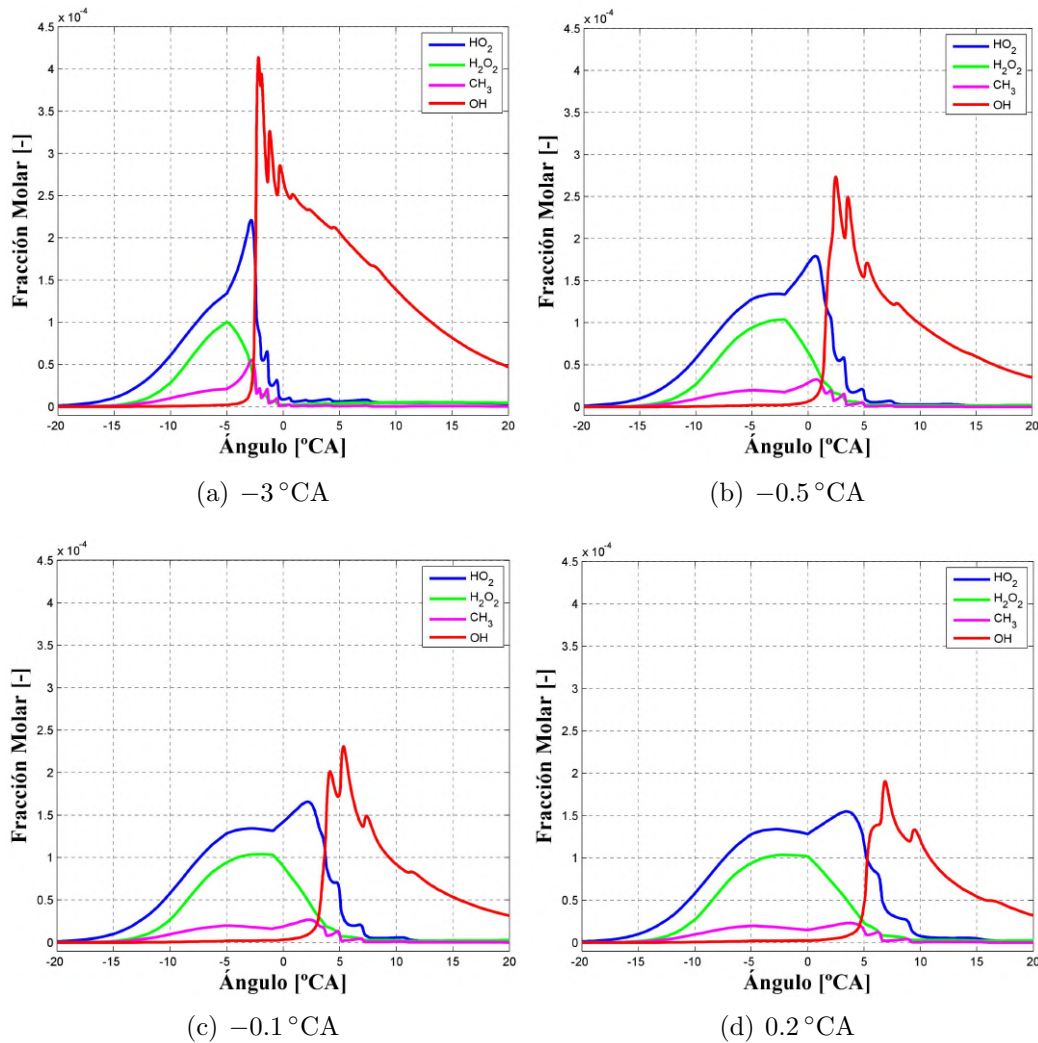


Figura 4.47: Evolución de la fracción molar de diferentes radicales de interés en la ignición y la combustión: Combustible=60% GN - 40% CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5 \text{ }^\circ\text{dPMS}$; ETC= 4.

En la **Figura 4.47** se presenta la evolución de diferentes radicales de interés en la ignición y la

combustión para los cuatro ángulos de transición evaluados. Se observa claramente el efecto del ángulo de transición en relación con la temperatura sobre los radicales, obteniéndose una menor generación del radical OH y CH_3 , y un incremento y consumo más lento de los radicales HO_2 y H_2O_2 a medida que se escoge un ángulo de transición más retrasado. Así mismo, el que se dé una mayor o menor generación de OH conlleva a una mayor o menor, respectivamente, tasa de liberación de calor y fracción de masa quemada (o de calor liberado) tal como se observa en las **Figuras 4.48** y **4.49**. Por otro lado, se observa que la duración de la combustión (calculada como la diferencia entre el CA90 y el CA10 para la fracción de masa quemada normalizada) se ve poco afectada por el ángulo de transición, pero no la fracción de masa quemada, la cual está influenciada tanto por la distribución másica como por la temperatura de cada una de las zonas. Así mismo, se logra observar que una menor tasa de liberación de calor conlleva a un menor pico de presión y una menor temperatura, que a su vez se relaciona con una menor presión en la carrera de expansión, lo cual conduce a subestimaciones del trabajo producido y por ende de la eficiencia indicada del motor.

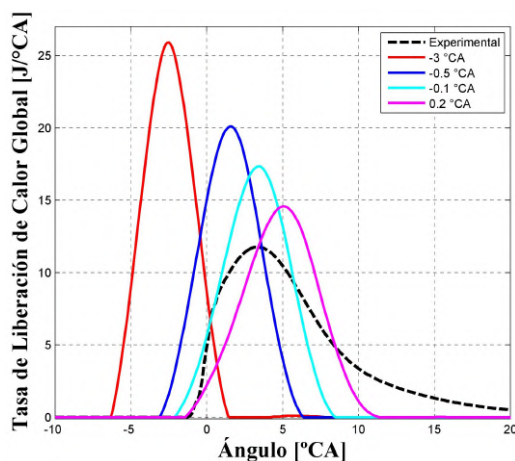


Figura 4.48: Comparación entre la tasa de liberación de calor global experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5^\circ \text{ dPMS}$; ETC= 4.

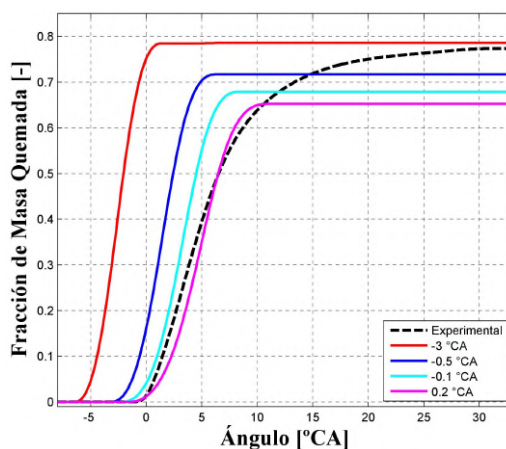


Figura 4.49: Comparación entre la fracción de masa quemada experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5^\circ \text{ dPMS}$; ETC= 4.

En la **Figura 4.50** se presenta la evolución de la fracción molar de CO y CO_2 para los diferentes

ángulos de transición evaluados. La cantidad inicial de CO_2 antes de la combustión se debe principalmente al aportado por el combustible sin reaccionar, mientras que la cantidad inicial de CO se asocia a los gases no evacuados del ciclo previo. Se observa cómo la máxima fracción molar de CO se incrementa con un ángulo de transición más retrasado. Aunque las diferencias en la generación de CO_2 no son notorias, se observa que para el caso del ángulo de transición más avanzado no se tiene la mayor generación de CO_2 al final del proceso de combustión, esto se asocia a que si bien se logran mayores temperaturas, es mayor la cantidad de masa en las zonas más frías si se compara con los demás casos evaluados.

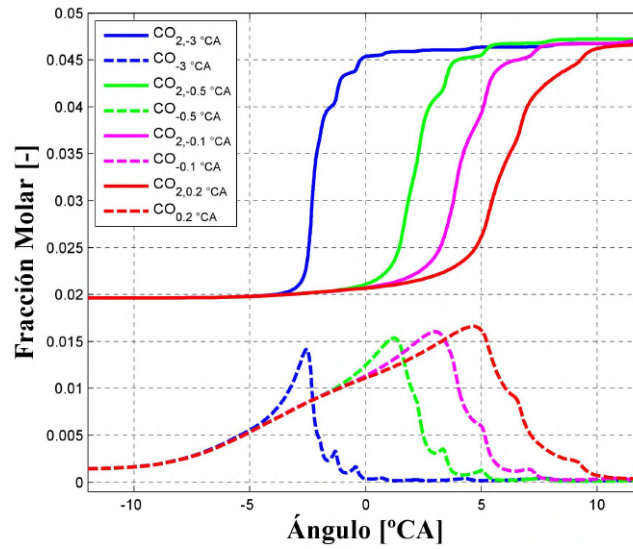


Figura 4.50: Evolución de la fracción molar de CO y CO_2 para los diferentes ángulos de transición evaluados: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; $CA_{10_{exp}} = 1.5^\circ \text{ dPMS}$; ETC= 4.

Finalmente, en la **Figura 4.51** se presenta la temperatura de cada una de las zonas para los diferentes ángulos de transición analizados. Como es de esperarse a partir de las curvas de temperatura promedio al interior del cilindro, **Figura 4.46**, la temperatura en cada una de las zonas se va reduciendo a medida que se tiene un ángulo de transición más avanzado. La zona con mayor temperatura al final de la compresión no es la zona con mayor temperatura durante la combustión, aunque sí es la primera en auto-encenderse; esto se asocia a que la zona más caliente tiene ligeramente menos masa que la segunda zona más caliente, y a su vez, la expansión que se genera en la zona más caliente conlleva a comprimir las subsiguientes zonas, permitiéndoles alcanzar mayores temperaturas.

Se espera que las zonas de temperatura intermedia al final de la compresión sigan siendo inferiores a las zonas calientes aún durante la combustión, y esto se cumple para una combustión con un ángulo de transición avanzado. Sin embargo, cuando el ángulo de transición comienza a retrasarse, el efecto del área equivalente de transferencia de calor genera que dichas zonas de temperatura intermedia alcancen valores cercanos a los valores de temperatura en la expansión de las zonas calientes. Así mismo, para ángulos de transición retrasados se observa cómo cambios ligeros en dicho ángulo genera que las zonas intermedias de menor temperatura empiecen a ser zonas apagadas o de quemado parcial durante la combustión.

Por último, se observa que las zonas frías tienden a permanecer apagadas, ya que se mantienen por debajo de la temperatura de auto-ignición del combustible, y con un ligero incremento en la presión generado por el efecto de compresión de la zona adyacente.

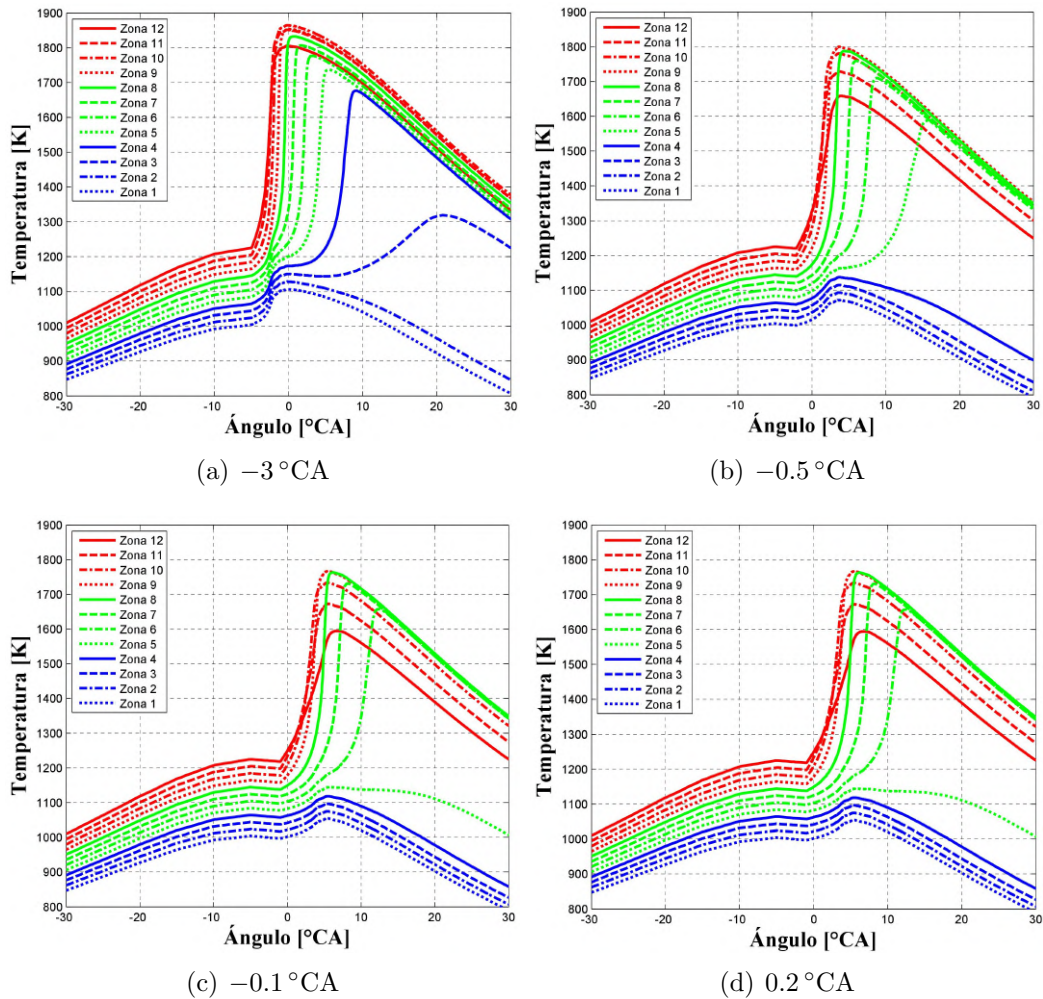


Figura 4.51: Evolución de la temperatura en las diferentes zonas: Combustible=60 % GN - 40 % CO_2 ; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; ETC= 4.

Finalmente, en la **Figura 4.52** se presenta la comparación entre los resultados numéricos y experimentales de diferentes variables de interés en la evaluación del desempeño mecánico y ambiental del motor. En el caso de la intensidad de ringing (IR), no se presentan los valores para los primeros tres ángulos de transición ya que se alcanzan valores de 50 en el caso de -3°CA y de 5 en el caso de -0.1°CA , lo cual conduciría a que no se obtuviese la suficiente resolución para observar los resultados para las demás variables. Se observa que en el caso de la eficiencia indicada (variable asociada al trabajo indicado) la sub-estimación de la presión en la carrera de expansión genera un bajo ajuste en ésta variable, ajuste que se va reduciendo a medida que el pico de presión disminuye y se acentúa la concavidad observada en la **Figura 4.45**. En relación con la presión máxima se observa un mejoramiento en el ajuste a medida que se tiene un ángulo de transición menos avanzado, sin embargo, esto no conduce a un buen ajuste en la intensidad de ringing dado el bajo ajuste en la tasa de incremento de la presión. En relación con el CA50 se observa una mejora en el ajuste a medida que se tienen un ángulo de transición más avanzado. Por último, en relación con las emisiones de CO , se evidencia un bajo ajuste sin importar el ángulo de transición, aunque en el caso de la estimación de los NO_x , la simulación permite hacer una buena estimación de éste contaminante.

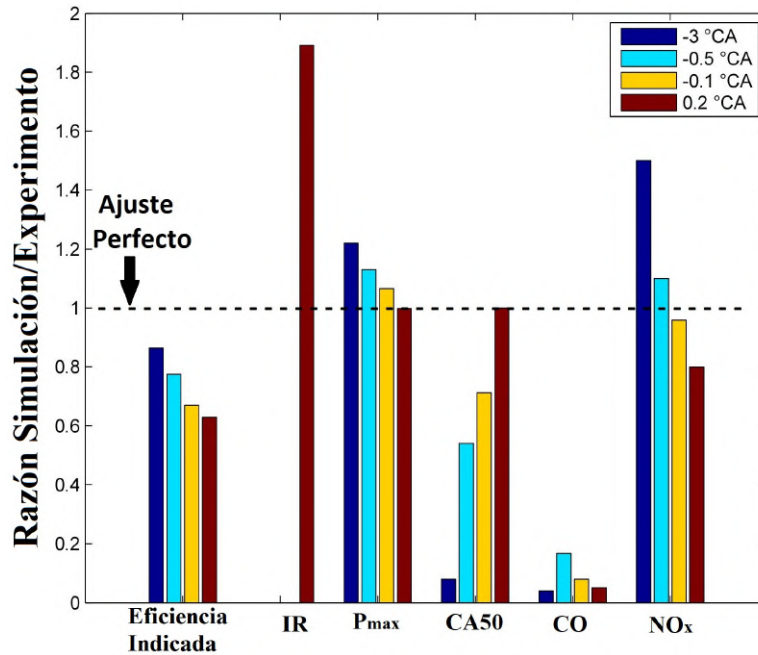


Figura 4.52: Razón entre el valor numérico y experimental para diferentes variables: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ °C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5^\circ \text{ dPMS}$; ETC= 4.

4.3.1.1. Resultados a Diferentes Condiciones de Dosado Relativo y Temperatura en la Admisión

En las Figuras 4.53 y 4.54 se presentan los resultados numéricos y experimentales para la presión y la temperatura, respectivamente, para dos condiciones de dosado relativo a una temperatura de admisión de 330 °C utilizando el esquema de transferencia de calor 4. En el caso de $\phi = 0.28$ el CA05 fue de -0.3° aPMS y el CA10 fue de 0.3° dPMS , mientras que en el caso de $\phi = 0.42$ el CA05 fue de 2.9° dPMS y el CA10 fue de 3.6° dPMS .

Se logra observar el mismo comportamiento evidenciado en el análisis anterior para el punto de operación de $\phi = 0.28$ y temperatura en la admisión de 325 °C. Al usar un ángulo de transición retrasado se obtienen mayores picos de presión y de temperatura, ya que en la condición de combustión retrasada con la cual se operó el motor genera que los cálculos de cinética química se inicien con mayor temperatura al interior del cilindro. En el caso de $\phi = 0.42$, se observa que la presión predicha a partir de las simulaciones CFD es mayor que la presión experimental (alrededor de 3 bar mayor), lo cual genera que la simulación multizona sea más sensible a variaciones del ángulo de transición que en ambos casos de $\phi = 0.28$.

Por otro lado, se observa que en el caso de $\phi = 0.28$ se vuelve a tener un valor de presión en la carrera de expansión por debajo de los valores experimentales, pero en el caso de $\phi = 0.42$ se tiene un mejor ajuste en éste mismo aspecto.

A partir de los resultados observados en ésta sección, se logra evidenciar que en el caso de una combustión retrasada, el criterio del CA10 como ángulo de transición no es un criterio que genere el mejor ajuste entre los resultados numéricos y experimentales. El mejor ajuste se logra con un ángulo un poco más retrasado, como el CA05, ya que para condiciones de combustión retrasada esto permite iniciar la simulación multizona en condiciones en donde las zonas calientes están cercanas a la temperatura de auto-ignición del combustible, obteniéndose el mejor balance entre precisión en la evolución de los perfiles de temperatura obtenidos mediante la simulación CFD y la captura de la cinética química temprana previa a la ignición. Esto conlleva, además, a resaltar

la importancia en la precisión con la cual se puede predecir la evolución de la temperatura de la carga durante la carrera de compresión en las simulaciones CFD.

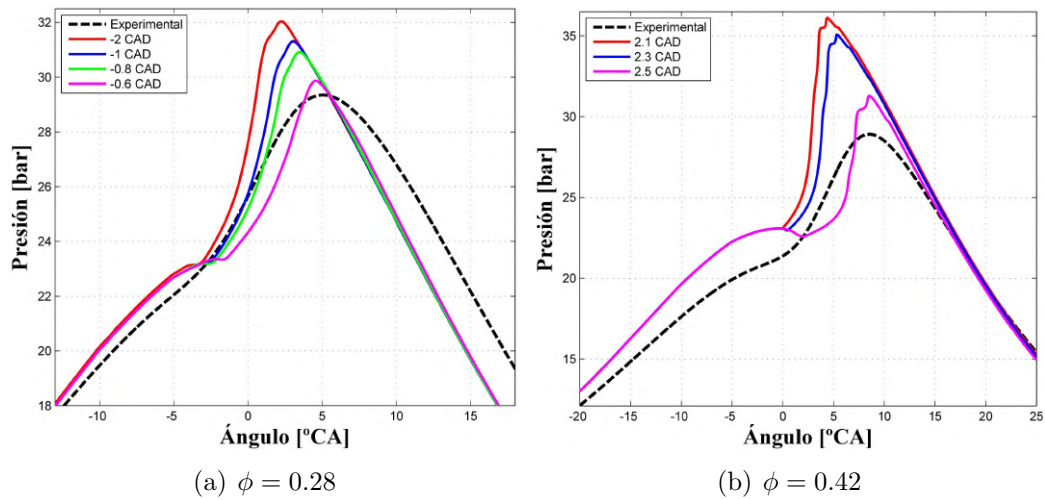


Figura 4.53: Comparación entre la presión en el cilindro experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; ETC= 4.

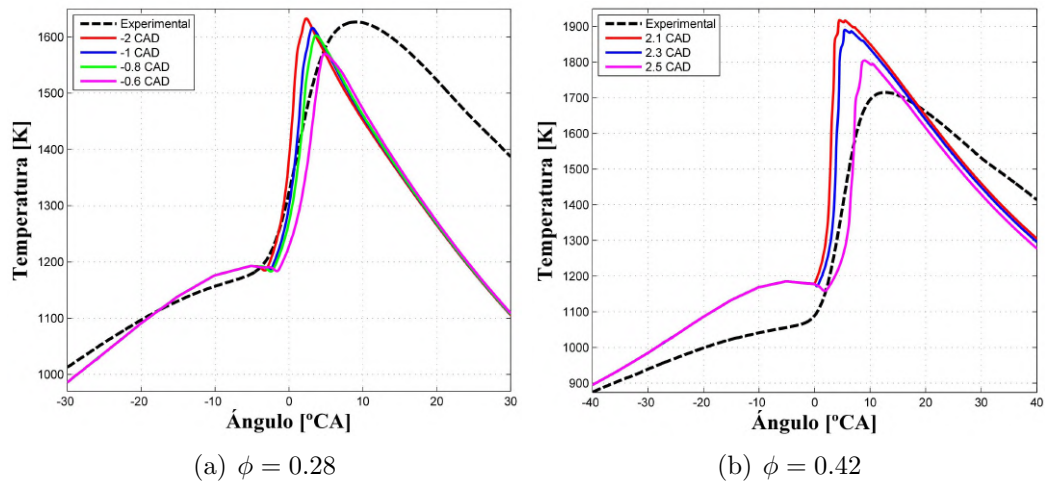


Figura 4.54: Comparación entre la temperatura en el cilindro experimental y los resultados numéricos multizona para diferentes ángulos de transición: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; $CA10_{exp} = 1.5 \text{ }^\circ \text{dPMS}$; ETC= 4.

4.3.2. Efecto del Esquema de Transferencia de Calor

En la **Figura 4.55** se presentan los resultados experimentales y numéricos de la presión y la temperatura en el cilindro para la condición de $\phi = 0.28$ - $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$, utilizando los cuatro esquemas de transferencia de calor propuestos. En la **Tabla 4.2** se presenta el porcentaje de área superficial equivalente por zona según el esquema de transferencia de calor.

Se observa que para el punto evaluado, los diferentes esquemas de transferencia de calor no generan un cambio drástico en la forma y magnitud de las curvas presentadas en la **Figura 4.55**. Si bien con el esquema 3 se tiene un mayor pico de presión y una mayor presión en la carrera de expansión (lo que igual genera una mayor temperatura), las diferencias son leves

y por ende no conllevan a cambios representativos en los diferentes parámetros de desempeño mecánico y ambiental del motor.

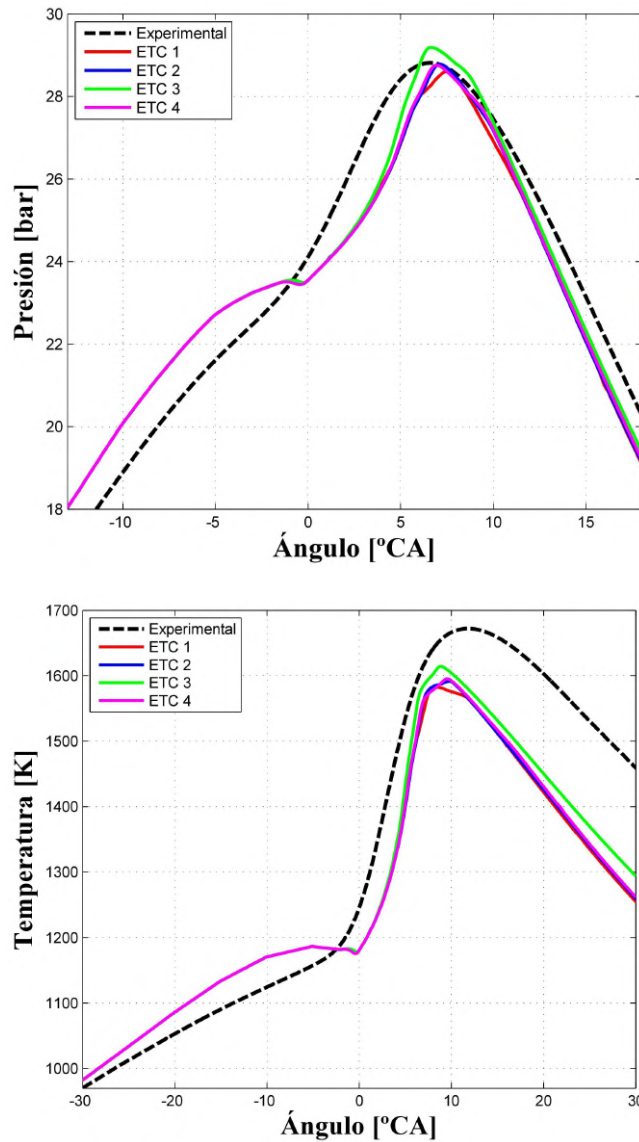


Figura 4.55: Comparación entre los resultados experimentales y numéricos multizona para diferentes esquemas de transferencia de calor: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; AT= 0.2° dPMS.

Tabla 4.2: Área de transferencia de calor equivalente por zona según el esquema implementado para: $\phi = 0.28$, $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$ y AT= 0.2° dPMS.

Esquema de Transferencia	Porcentaje de Área Superficial por Zona [%]											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	2.96	1.29	1.24	1.33	1.98	4.35	14.41	35.81	36.63	0	0	0
2	1.49	0.65	0.62	0.67	0.99	2.18	7.24	17.99	18.4	6.67	43.1	0
3	29.87	30.22	4.67	12.9	12.61	5.08	1.53	0.7	0.47	0.44	0.46	1.05
4	1.04	0.46	0.44	0.47	0.69	1.53	5.08	12.61	12.9	4.67	30.22	29.89

Ahora bien, si exploramos el punto de operación correspondiente a $\phi = 0.42$ - $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$, **Figura 4.56**, encontramos que se tiene la misma tendencia encontrada para el punto de operación

previo, es decir, los cambios que se generan por los diferentes esquemas de transferencia de calor no generan cambios drásticos en la magnitud y forma de las curvas presentadas, aún cuando los esquemas 3 y 4 presentan grandes cambios en el área de transferencia de calor equivalente en las zonas calientes y frías.

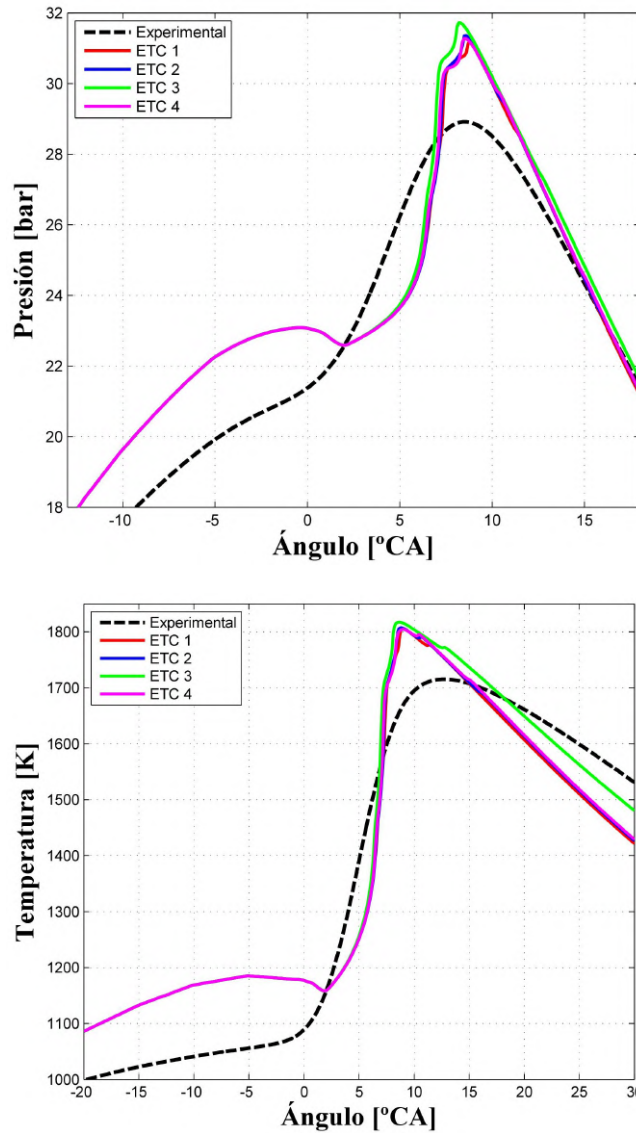


Figura 4.56: Comparación entre los resultados experimentales y numéricos multizona para diferentes esquemas de transferencia de calor: Combustible=60% GN - 40% CO₂; $\phi = 0.42$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; AT= 2.5° dPMS.

Tabla 4.3: Área de transferencia de calor equivalente por zona según el esquema implementado para: $\phi = 0.42$, $T_{ad} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$ y AT= 2.5° dPMS.

Esquema de Transferencia	Porcentaje de Área Superficial por Zona [%]											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	1.78	0.56	0.24	0.31	1.76	3.23	14.94	48.01	29.17	0	0	0
2	0.95	0.29	0.13	0.16	0.93	1.71	7.89	25.38	15.42	5.85	41.29	0
3	28.71	29.43	4.17	10.99	18.09	5.63	1.22	0.66	0.12	0.09	0.21	0.68
4	0.68	0.21	0.09	0.12	0.66	1.22	5.63	18.09	10.99	4.17	29.43	28.71

Ahora, volviendo a la condición de $\phi = 0.28$ - $T_{ad} = 325^\circ C$, en la **Figura 4.57** se presenta la evolución de diferentes radicales de interés para los diferentes esquemas de transferencia de calor.

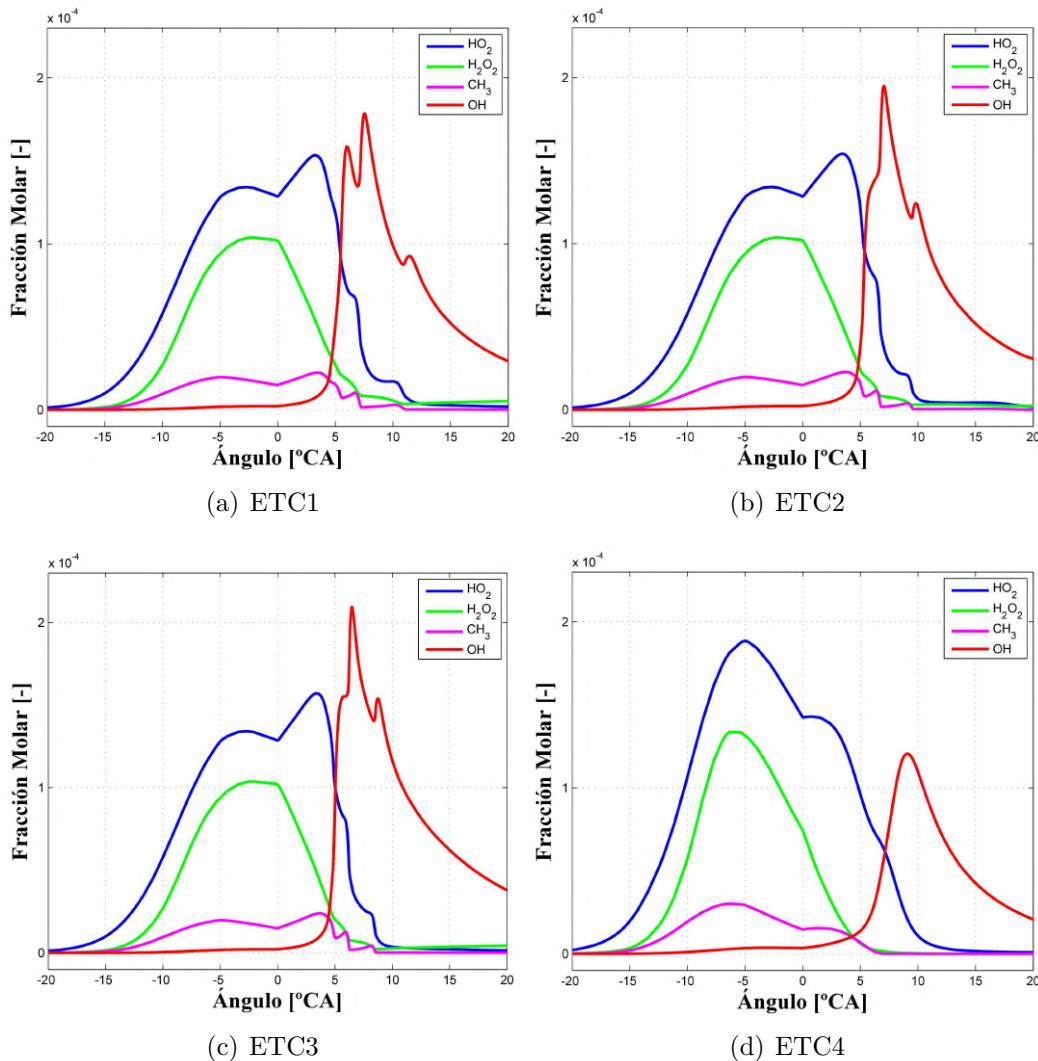


Figura 4.57: Evolución de la fracción molar de diferentes radicales de interés en la ignición y la combustión: Combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84$ bar; $T_{ad} = 325^\circ C$; 1800 rpm; AT= 0.2° dPMS.

A excepción del esquema 4, los radicales previos a la auto-ignición presentan una evolución similar y con un mayor valor pico en la fracción molar del radical *OH* a medida que las zonas más calientes no se asumen como adiabáticas. Lo anterior puede explicarse desde la mejor re-distribución del área de transferencia de calor equivalente, lo cual permite que las zonas de temperatura intermedia reduzcan la tasa de pérdida de calor y por ende de la promoción de generación del radical *OH*. En el caso del esquema 4, los altos porcentajes de área de transferencia de calor equivalente en la primera y segunda zona más caliente reducen la producción del radical *OH*, aunque esto no conlleva directamente a que se tenga un pico menor en la temperatura promedio al interior del cilindro.

Ahora bien, el evaluar diferentes esquemas de transferencia de calor se realizó bajo la hipótesis de que estos pueden generar un mejor ajuste entre las emisiones de CO y HC numérica y experimentales. En la **Figura 4.58** se presenta la evolución de la fracción molar de CO. Se observa, al igual que con los radicales, el esquema 4 presenta una tendencia diferente respecto a

los demás esquemas en relación con la evolución de CO, sin embargo, al final de la combustión la fracción molar de CO varía poco entre esquemas. Cabe recordar que las simulaciones se han desarrollado bajo condiciones de combustión retrasada, en donde el efecto de transferencia de masa entre zonas tiene un efecto más notorio en el proceso de combustión y quizás por ésta razón, los esquemas de transferencia de calor tienen un menor efecto que en trabajos anteriores en donde se simulan condiciones de combustión centrada.

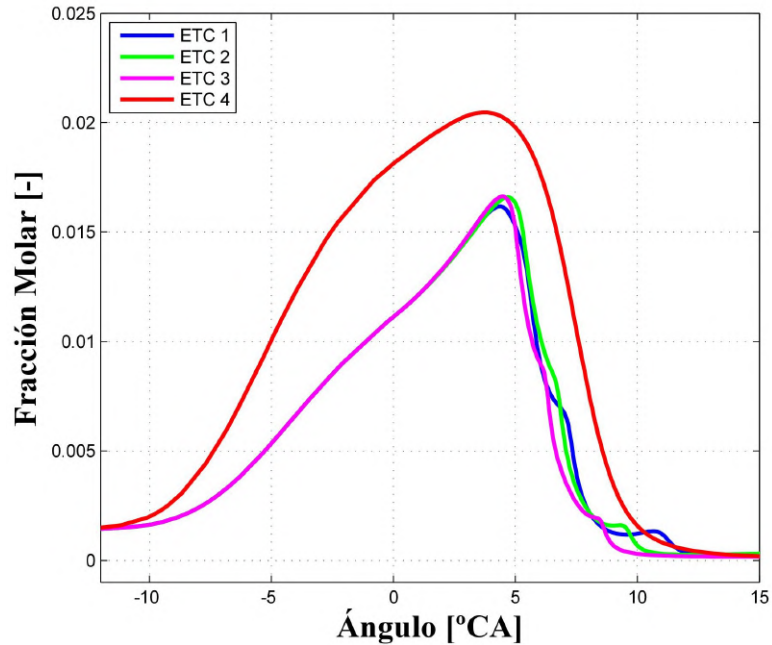


Figura 4.58: Evolución de la fracción molar de CO y para los diferentes esquemas de transferencia de calor evaluados: combustible=60 % GN - 40 % CO₂; $\phi = 0.28$; $p_{ad} = 0.84 \text{ bar}$; $T_{ad} = 325 \text{ }^\circ\text{C}$; 1800 rpm; AT= 0.2° dPMS.

Capítulo 5

Conclusiones y Futuros Trabajos

Éste trabajo de investigación se enfocó en el desarrollo de una metodología secuencial CFD-cinética química detallada (aplicando un modelo multizona) para el análisis de la combustión HCCI y sus principales emisiones. La metodología se construyó a partir de simulaciones CFD en el programa *ANSYS-Fluent*, en el cual se simuló el período de cruce de válvulas y de compresión con el fin de tener una mejor predicción de las condiciones de la carga en el cierre de la válvula de admisión y la obtención de perfiles térmicos y másicos que llevan consigo el efecto de la heterogeneidad de la carga en dicho instante y del campo de velocidades. Estos perfiles sirvieron como parámetros de inicialización en un modelo multizona que incluían cálculos de cinética química detallada (usándose el mecanismo de San Diego, incluida la cinética del nitrógeno), llevados a cabo en el programa *Chemkin.Pro*, para la predicción del desarrollo de la combustión y de las principales emisiones. Para validar la metodología, se llevó a cabo un conjunto de experimentos en un motor operando con combustión HCCI construido a partir de un motor Diesel. El motor se operó con biogás, a 1800 rpm y con aspiración natural. Éstas condiciones de operación llevaron a altos requerimientos de temperatura en la admisión para lograr las condiciones de auto-ignición de la mezcla cerca del PMS, y por ende se trabajó con condiciones de combustión retrasada para evitar altos niveles de ringing.

Los principales resultados derivados del trabajo de investigación se presentan a continuación:

- La simulación del proceso de cruce de válvulas en el modelado de un motor de combustión interna no sólo requiere de modelos numéricos adecuados para la solución de las ecuaciones gobernantes, sino también de una malla adecuada. Aún para mallas medianamente burdas, éstas simulaciones conllevan un alto costo computacional.

El período más crítico en éste tipo de simulaciones yace en la apertura y cierre de las válvulas, momentos en los que se tienen altas deformaciones de las celdas alrededor de éstas y con condiciones de presión y temperatura que pueden aproximarse a las condiciones de flujo chocado. Un buen modelado de éstos periodos se asocia tanto a la calidad de la malla como en un buen desarrollo del flujo en los ductos de admisión y escape, ésto último se logra con un tamaño de dominio adecuado de éstas zonas de la malla y de una buena inicialización de las condiciones de frontera.

En el caso de éste trabajo de investigación se obtuvieron discrepancias numéricas, evidenciadas en los contornos numéricos de presión y temperatura al inicio de la apertura de las válvulas, especialmente en la válvula de escape en la cual se tiene la mayor diferencia de presión al iniciar la apertura. Sin embargo, el proceso de admisión de la carga se logró modelar con éxito, alcanzándose valores de presión en el IVC similares a los obtenidos experimentalmente.

- Para los diferentes puntos de operación simulados, se observó una fuerte heterogeneidad

másica de la carga (aunque con una homogeneidad en el dosado relativo) en el cierre de la válvula de admisión. Se observó cómo los patrones de flujo tienden a concentrar la carga en el centro del cilindro, generando una zona de baja velocidad en la cual se da un movimiento de masa entre las zonas intermedias y las zonas calientes. Lo anterior es de vital importancia en el modelado de los enfoques de combustión avanzada diferentes a la combustión HCCI, ya que el incremento de la estratificación de la carga al final de la carrera de compresión va a depender de cómo se reduzcan estos patrones de flujo que tienden a concentrar la carga en el centro de la cámara de combustión.

Para la mayoría de los puntos de operación evaluados se evidenció que no siempre la zona caliente contiene la mayor cantidad de la carga y no se presenta una relación directa entre el nivel de temperatura media de la región (o zona) con el contenido de carga de ésta.

Cuando se comparan los resultados obtenidos del modelo 3D con un modelo 2D axi-simétrico, para el modelo 3D se encuentra un mayor contenido de carga en las zonas de temperatura intermedia y una mayor diferencia de temperatura entre las zonas.

- El modelo de cinética química tiene un gran influencia sobre el nivel de precisión con que se estima el desarrollo de la combustión, pero aún más importante en la captura de las reacciones tempranas que llevan a la auto-ignición del combustible. La precisión con la cual se estima los perfiles de temperatura en la simulación CFD tienen una fuerte influencia sobre el efecto del nivel de variación en el ángulo de transición sobre las simulaciones multizona.

En el caso de combustión retrasada, variaciones del orden a 0.5° en el ángulo de transición generan cambios importantes en los resultados obtenidos. Así mismo, el criterio del CA10 como ángulo de transición no se cumple a cabalidad, ya que en combustión retrasada éste ángulo se ubica en la carrera de expansión a condiciones de presión y temperatura que ralentizan las reacciones de la química temprana de la ignición y conllevan a “tiempos de retraso” significativos entre el ángulo de transición y el ángulo en donde se inicia la combustión. Para la mayoría de los puntos de operación simulados, se obtuvo un mejor ajuste en la forma y picos de presión usando el CA05 como ángulo de transición.

- Dado que en la combustión retrasada los efectos de la transferencia de masa entre las zonas son significativos, las simulaciones multizona presentaron un bajo ajuste con diferentes parámetros de desempeño del motor: emisiones de CO, presión media efectiva indicada, eficiencia indicada, intensidad de ringing, duración de la combustión. La predicción de la carrera de expansión tuvo un efecto importante en el bajo ajuste de entre lo simulado y lo obtenido experimentalmente, de ahí que la posibilidad de obtener un desarrollo más suave y capturar la etapa tardía de la combustión son factores claves para tener un mejor ajuste en estos parámetros bajo condiciones de combustión retrasada.
- Para las condiciones evaluadas, la variación del esquema de transferencia de calor tuvo un efecto casi nulo sobre la fracción molar de CO al final de la simulación y sobre la forma de la curva y la magnitud de la presión al interior del cilindro. Esto se debe puede asociar a las diferencias de temperatura existentes entre las paredes y las diferentes zonas bajo condiciones de combustión retrasada; así mismo, bajo éstas condiciones el efecto de la transferencia de masa entre las zonas y el efecto de la turbulencia sobre el desarrollo de la combustión empieza a ser significativo, por lo cual las suposiciones del modelo multizona empiezan a perder precisión y el esquema de transferencia de calor como parámetro de ajuste de las emisiones de CO y HC empieza a ser poco influyente.

Dentro de los elementos que el autor considera que deben ser evaluados en trabajos futuros que permitan mejorar la metodología propuesta están:

- Desarrollar las simulaciones CFD con una malla más refinada y con dominio más grande

para las regiones de los ductos de admisión y escape.

- De acuerdo con la capacidad de computacional, incluir códigos en las simulaciones CFD que permitan modelar la variación de la temperatura de las paredes del cilindro con el tiempo para tener una mejor captura del efecto de la transferencia de calor sobre la estratificación térmica y másica de la carga durante la compresión.
 - Incluir en el dominio computacional la zona de “crevices” asociada al primer anillo del cilindro y observar su efecto combinado con el modelo de “crevices” del programa.
 - Profundizar en las estrategias de transferencia de calor y masa entre las zonas bajo el enfoque de simulación multizona, con el fin de desarrollar códigos propios de simulación que permitan superar las limitaciones del modelo actual que contiene el programa comercial utilizado.
 - Evaluar nuevos esquemas de estratificación de la carga que no estén centrados sólo en la agrupación de zonas por temperatura.
 - Avanzar en el entendimiento del efecto del mecanismo de reacción en la química temprana del combustible y durante la combustión, dado que en la actualidad en el grupo de investigación se usan mezclas de combustibles para los que no siempre se tiene un mecanismo de reacción plenamente validado o las condiciones de temperatura, presión y dosado a las cuales se evalúan los mecanismos existentes están en los límites de las condiciones en las cuales se ha validado experimentalmente.
 - Evaluar la metodología para condiciones de combustión centrada y presiones por encima de la atmosférica en la admisión.
-

Bibliografía

- [1] M. V. Gualteros and E. Hurtado, “Revisión de las regulaciones e incentivos para el uso de las energías renovables en colombia.,” *Revista Juridicas*, vol. 10, no. 1, 2013.
- [2] J. E. McCarthy, “Cars, trucks and climate: Epa regulation of greenhouse gases from mobile sources,” Congressional Research Service, Library of Congress, 2010.
- [3] DieselNet, “Emission standards of cars and light trucks: <http://www.dieselnets.com/standards/eu/ld.php>,” 01 de Mayo de 2018.
- [4] A. MTC, “Assessment of the dual-fuel technology,” tech. rep., Swedish Gas Centre, 2011.
- [5] J. E. Dec, “Advanced compression-ignition engines—understanding the in-cylinder processes,” *Proceedings of the combustion institute*, vol. 32, no. 2, pp. 2727–2742, 2009.
- [6] M. Yao, Z. Zheng, and H. Liu, “Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (hcci) engines,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 35, no. 5, pp. 398–437, 2009.
- [7] N. Milovanovic and R. Chen, “A review of experimental and simulation studies on controlled auto-ignition combustion,” 2001.
- [8] A. McIlroy, G. McRae, V. Sick, D. L. Siebers, C. K. Westbrook, P. J. Smith, C. Taatjes, A. Trouve, A. F. Wagner, E. Rohlfing, D. Manley, F. Tully, R. Hilderbrandt, W. Green, D. Marceau, J. O’Neal, M. Lyday, F. Cebulski, T. R. Garcia, and D. Strong, “Basic research needs for clean and efficient combustion of 21st century transportation fuels,”
- [9] S. M. Aceves, D. L. Flowers, C. K. Westbrook, J. R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen, and B. Johansson, “A multi-zone model for prediction of hcci combustion and emissions,” tech. rep., SAE Technical paper, 2000.
- [10] A. Babajimopoulos, D. Assanis, D. Flowers, S. Aceves, and R. Hessel, “A fully coupled computational fluid dynamics and multi-zone model with detailed chemical kinetics for the simulation of premixed charge compression ignition engines,” *International journal of engine research*, vol. 6, no. 5, pp. 497–512, 2005.
- [11] S.-C. Kong, C. D. Marriott, R. D. Reitz, and M. Christensen, “Modeling and experiments of hcci engine combustion using detailed chemical kinetics with multidimensional cfd,” tech. rep., SAE Technical paper, 2001.
- [12] I. D. Bedoya, F. Cadavid, S. Saxena, R. Dibble, S. Aceves, and D. Flowers, “A sequential chemical kinetics-cfd-chemical kinetics methodology to predict hcci combustion and main emissions,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2012.
- [13] T. Jaramillo, J. David, *et al.*, *Investigación teórico-experimental del desempeño de un motor HCCI operado con Etanol Anhidro [E100] E hidratado [E80]*. PhD thesis, Universidad Nacional de Colombia.

- [14] K. M. Moreno Cabezas *et al.*, “Estudio computacional del efecto de temperatura de admisión, uso de combustible dual y recirculación de gases en rendimiento y emisiones de combustión hcci (homogeneous charge compression ignition),” Master’s thesis, Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá, 2017.
- [15] H. Zhao, *HCCI and CAI engines for the automotive industry*. Elsevier, 2007.
- [16] S. Onishi, S. H. Jo, K. Shoda, P. Do Jo, and S. Kato, “Active thermo-atmosphere combustion (atac)-a new combustion process for internal combustion engines,” tech. rep., SAE Technical paper, 1979.
- [17] M. Noguchi, Y. Tanaka, T. Tanaka, and Y. Takeuchi, “A study on gasoline engine combustion by observation of intermediate reactive products during combustion,” tech. rep., SAE Technical Paper, 1979.
- [18] P. M. Najt and D. E. Foster, “Compression-ignited homogeneous charge combustion,” tech. rep., SAE Technical paper, 1983.
- [19] C. K. Westbrook, “Chemical kinetics of hydrocarbon ignition in practical combustion systems,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, no. 2, pp. 1563–1577, 2000.
- [20] A. Oakley, H. Zhao, N. Ladommatos, and T. Ma, “Dilution effects on the controlled auto-ignition (cai) combustion of hydrocarbon and alcohol fuels,” tech. rep., SAE Technical paper, 2001.
- [21] A. Bhave, M. Balthasar, M. Kraft, and F. Mauss, “Analysis of a natural gas fuelled homogeneous charge compression ignition engine with exhaust gas recirculation using a stochastic reactor model,” *International Journal of Engine Research*, vol. 5, no. 1, pp. 93–104, 2004.
- [22] N. Komninou, D. Hountalas, and C. Rakopoulos, “A parametric investigation of hydrogen hcci combustion using a multi-zone model approach,” *Energy conversion and management*, vol. 48, no. 11, pp. 2934–2941, 2007.
- [23] I. D. Bedoya, S. Saxena, F. J. Cadavid, R. W. Dibble, and M. Wissink, “Experimental study of biogas combustion in an hcci engine for power generation with high indicated efficiency and ultra-low nox emissions,” *Energy Conversion and Management*, vol. 53, no. 1, pp. 154–162, 2012.
- [24] J. Eng, “Characterization of pressure waves in hcci combustion,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2002.
- [25] J. Hyvönen, G. Haraldsson, and B. Johansson, “Operating range in a multi cylinder hcci engine using variable compression ratio,” tech. rep., SAE Technical paper, 2003.
- [26] N. Milovanovic, D. Blundell, R. Pearson, J. Turner, and R. Chen, “Enlarging the operational range of a gasoline hcci engine by controlling the coolant temperature,” 2005.
- [27] S. M. Aceves, J. R. Smith, C. K. Westbrook, and W. Pitz, “Compression ratio effect on methane hcci combustion,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 121, no. 3, pp. 569–574, 1999.
- [28] J.-O. Olsson, P. Tunestål, B. Johansson, S. Fiveland, R. Agama, M. Willi, and D. N. Assanis, “Compression ratio influence on maximum load of a natural gas fueled hcci engine,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2002.
- [29] I. Bedoya, S. Saxena, R. Dibble, and F. Cadavid, “Exploring optimal operating conditions for stationary power generation from a biogas-fueled hcci engine,” in *7th US National*

Technical Meeting of the Combustion Institute, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA, pp. 2172–2177, 2011.

- [30] G. Haraldsson, P. Tunestål, B. Johansson, and J. Hyvönen, “Hcci combustion phasing in a multi cylinder engine using variable compression ratio,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2002.
- [31] S. S. Morimoto, Y. Kawabata, T. Sakurai, and T. Amano, “Operating characteristics of a natural gas-fired homogeneous charge compression ignition engine (performance improvement using egr),” tech. rep., SAE Technical Paper, 2001.
- [32] A. Königstein, U. D. Grebe, K.-J. Wu, and P.-I. Larsson, “Differentiated analysis of downsizing concepts,” *MTZ worldwide*, vol. 69, no. 6, pp. 4–11, 2008.
- [33] M. Christensen, B. Johansson, P. Amnéus, and F. Mauss, “Supercharged homogeneous charge compression ignition,” tech. rep., SAE Technical paper, 1998.
- [34] J.-O. Olsson, P. Tunestål, and B. Johansson, “Boosting for high load hcci,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2004.
- [35] H. Zhao, Z. Peng, J. Williams, and N. Ladommatos, “Understanding the effects of recycled burnt gases on the controlled autoignition (cai) combustion in four-stroke gasoline engines,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2001.
- [36] K. Narayanaswamy and C. J. Rutland, “Cycle simulation diesel hcci modeling studies and control,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2004.
- [37] J. B. Heywood *et al.*, “Internal combustion engine fundamentals,” 1988.
- [38] H. Su, *Stochastic Reactor Models for Simulating Direct Injection Homogeneous Charge Compression Ignition Engines*. PhD thesis, University of Cambridge, 2010.
- [39] S. B. Fiveland and D. N. Assanis, “Development and validation of a quasi-dimensional model for hcci engine performance and emissions studies under turbocharged conditions,” tech. rep., SAE Technical paper, 2002.
- [40] S. M. Aceves, D. L. Flowers, F. Espinosa-Loza, A. Babajimopoulos, and D. N. Assanis, “Analysis of premixed charge compression ignition combustion with a sequential fluid mechanics-multizone chemical kinetics model,” tech. rep., Lawrence Livermore National Lab., Livermore, CA (US), 2004.
- [41] W. L. Easley, A. Agarwal, and G. A. Lavoie, “Modeling of hcci combustion and emissions using detailed chemistry,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2001.
- [42] M. Sjöberg, J. E. Dec, and N. P. Cernansky, “Potential of thermal stratification and combustion retard for reducing pressure-rise rates in hcci engines, based on multi-zone modeling and experiments,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2005.
- [43] M. Jia, M. Xie, and Z. Peng, “A comparative study of multi-zone combustion models for hcci engines,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2008.
- [44] S.-C. Kong, A. Patel, Q. Yin, A. Klingbeil, and R. D. Reitz, “Numerical modeling of diesel engine combustion and emissions under hcci-like conditions with high egr levels,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2003.
- [45] S.-C. Kong, H. Kim, R. D. Reitz, and Y. Kim, “Comparisons of diesel pcci combustion simulations using a representative interactive flamelet model and direct integration of cfd

- with detailed chemistry,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 129, no. 1, pp. 252–260, 2007.
- [46] S. M. Aceves, D. L. Flowers, J. Martinez-Frias, J. R. Smith, C. Westbrook, W. Pitz, R. Dibble, J. F. Wright, W. C. Akinyemi, and R. P. Hessel, “A sequential fluid-mechanic chemical-kinetic model of propane hcci combustion,” tech. rep., Lawrence Livermore National Lab., CA (US), 2000.
- [47] D. L. Flowers, S. M. Aceves, J. Martinez-Frias, and R. W. Dibble, “Prediction of carbon monoxide and hydrocarbon emissions in iso-octane hcci engine combustion using multizone simulations,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 1, pp. 687–694, 2002.
- [48] D. Flowers, S. Aceves, J. Martinez-Frias, R. Hessel, and R. Dibble, “Effect of mixing on hydrocarbon and carbon monoxide emissions prediction for iso-octane hcci engine combustion using a multi-zone detailed kinetics solver,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2003.
- [49] H. Barths, C. Felsch, and N. Peters, “Mixing models for the two-way-coupling of cfd codes and zero-dimensional multi-zone codes to model hcci combustion,” *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 1, pp. 130–139, 2009.
- [50] Y. Zhang, E. Kung, and D. Haworth, “A pdf method for multidimensional modeling of hcci engine combustion: effects of turbulence/chemistry interactions on ignition timing and emissions,” *Proceedings of the combustion institute*, vol. 30, no. 2, pp. 2763–2771, 2005.
- [51] F. Maroteaux and P.-L. Pommier, “A turbulent time scale based $k-\varepsilon$ model for probability density function modeling of turbulence/chemistry interactions: Application to hcci combustion,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 42, pp. 105–114, 2013.
- [52] L. Cao, A. Bhave, H. Su, S. Mosbach, M. Kraft, A. Dris, and R. M. McDavid, “Influence of injection timing and piston bowl geometry on pcci combustion and emissions,” *SAE International Journal of Engines*, vol. 2, no. 2009-01-1102, pp. 1019–1033, 2009.
- [53] R. Cox and J. Cole, “Chemical aspects of the autoignition of hydrocarbon-air mixtures,” *Combustion and Flame*, vol. 60, no. 2, pp. 109–123, 1985.
- [54] F. Battin-Leclerc, “Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 34, no. 4, pp. 440–498, 2008.
- [55] J. Zádor, C. A. Taatjes, and R. X. Fernandes, “Kinetics of elementary reactions in low-temperature autoignition chemistry,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 37, no. 4, pp. 371–421, 2011.
- [56] F. Zhao, T. W. Asmus, D. N. Assanis, J. E. Dec, J. A. Eng, and P. M. Najt, “Homogeneous charge compression ignition (hcci) engines: key research and development issues pt-94,” *Progress in technology*, vol. 94, 2003.
- [57] J. M. Simmie, “Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels,” *Progress in energy and combustion science*, vol. 29, no. 6, pp. 599–634, 2003.
- [58] J. A. Miller, R. E. Mitchell, M. D. Smooke, and R. J. Kee, “Toward a comprehensive chemical kinetic mechanism for the oxidation of acetylene: comparison of model predictions with results from flame and shock tube experiments,” in *Symposium (International) on Combustion*, vol. 19, pp. 181–196, Elsevier, 1982.
- [59] J. Warnatz, U. Maas, and R. W. Dibble, “Physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation,” 1995.

-
- [60] M. J. Pilling, *Low-temperature combustion and autoignition*. Elsevier, 1997.
- [61] D. John and J. Anderson, “Computational fluid dynamics: the basics with applications,” *Mechanical Engineering Series. McGraw-HILL*, 1995.
- [62] H. Jasak and Z. Tukovic, “Automatic mesh motion for the unstructured finite volume method,” *Transactions of FAMENA*, vol. 30, no. 2, pp. 1–20, 2006.
- [63] S. Gundlman, “Cfd modeling of a four strokes si engine for motorcycle application,” Master’s thesis, KTH Industrial Engineering and Management, 2009.
- [64] M. Van Dyke and F. M. White, “An album of fluid motion,” 1982.
- [65] I. S. Ertesvåg and B. F. Magnussen, “The eddy dissipation turbulence energy cascade model,” *Combustion science and technology*, vol. 159, no. 1, pp. 213–235, 2000.
- [66] D. C. Wilcox *et al.*, *Turbulence modeling for CFD*. DCW industries La Canada, CA, 2006.
- [67] C. Argyropoulos and N. Markatos, “Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 39, no. 2, pp. 693–732, 2015.
- [68] B. E. Launder and D. B. Spalding, *Mathematical models of turbulence*. No. BOOK, Academic press, 1972.
- [69] J. Kubesh, S. R. King, and W. E. Liss, “Effect of gas composition on octane number of natural gas fuels,” tech. rep., SAE Technical Paper, 1992.
- [70] D. Rogers, *Engine combustion: pressure measurement and analysis*. SAE, 2010.
- [71] J. Chang, O. Güralp, Z. Filipi, D. Assanis, T.-W. Kuo, P. Najt, and R. Rask, “New heat transfer correlation for an hcci engine derived from measurements of instantaneous surface heat flux,” *SAE transactions*, pp. 1576–1593, 2004.
- [72] B. Lawler, M. Hoffman, Z. Filipi, O. Güralp, and P. Najt, “Development of a postprocessing methodology for studying thermal stratification in an hcci engine,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 134, no. 10, p. 102801, 2012.
- [73] D. C. Montgomery, *Design and analysis of experiments*. John Wiley & Sons, 1991.
- [74] T. Lucchini, G. D’Errico, F. Brusiani, G. Bianchi, Ž. Tuković, and H. Jasak, “Multi-dimensional modeling of the air/fuel mixture formation process in a pfi engine for motorcycle applications,” tech. rep., SAE Technical Paper, 2009.
- [75] S. H. Quintana, E. S. Castaño Mesa, and I. D. Bedoya, “Experimental study of the polytropic coefficient for an air-cooled, high-compression-ratio, spark-ignition engine fueled with natural gas, biogas, and a propane–syngas blend,” *Energy & fuels*, vol. 32, no. 2, pp. 2376–2384, 2018.
- [76] ANSYS, *ANSYS Fluent Theory Guide*. ANSYS, 2013.
- [77] Z. Hong, K.-Y. Lam, R. Sur, S. Wang, D. F. Davidson, and R. K. Hanson, “On the rate constants of $\text{OH} + \text{HO}_2$ and $\text{HO}_2 + \text{HO}_2$: A comprehensive study of H_2O_2 thermal decomposition using multi-species laser absorption,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, no. 1, pp. 565–571, 2013.
- [78] E. A. Ortiz-Soto, J. Vavra, and A. Babajimopoulos, “Assessment of residual mass estimation methods for cylinder pressure heat release analysis of hcci engines with negative valve overlap,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 134, no. 8, p. 082802, 2012.
-

- [79] J. W. Fox, W. K. Cheng, and J. B. Heywood, “A model for predicting residual gas fraction in spark-ignition engines,” *SAE Transactions*, pp. 1538–1544, 1993.
- [80] M. Chistensen and B. Johansson, “Homogeneous charge compression ignition with water injection,” *SAE (1999-01-0182)*.