

# Modelado del efecto de la viscosidad en la combustión de la mezcla B20 de biodiesel de palma africana tenera en motores de combustión interna encendidos por compresión

Felipe Ortiz Valenzuela

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:  
**Magíster en Ingeniería Mecánica**

Director:  
Juan Miguel Mantilla González, MSc

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ingeniería  
Bogotá, D.C., Colombia  
2010



Tesis aprobada por la Facultad de Ingeniería en cumplimiento de los requisitos exigidos para otorgar el título de: **Magíster en Ingeniería Mecánica**

---

Juan Miguel Mantilla González  
Director de la tesis

---

Diego Garzón Alvarado  
Jurado

---

Helmer Acevedo Gamboa  
Jurado

---

Carlos H. Galeano Ururena  
Jurado

Universidad Nacional de Colombia  
Bogotá, D.C., 21.07.2010



# Agradecimientos

A mi familia por el continuo apoyo que me brindó a lo largo del desarrollo de este trabajo.

Agradezco a los ingenieros Juan Rincón y Guillermo Cardenas, por la oportunidad que me brindaron para financiar mis estudios.

## Resumen

En la creciente demanda de alternativas renovables y ambientalmente sostenibles a los combustibles fósiles, se han planteado múltiples opciones provenientes de la biomasa. En los motores diesel, la balanza se inclina hacia la utilización del biodiesel proveniente de aceites vegetales y en Colombia, debido al conocimiento existente en su cultivo y explotación, el aceite de palma y su biodiesel han sido planteados como la solución más viable a esta problemática. La experiencia a nivel mundial de la implementación de estos nuevos combustibles, ha sido acompañada de una gran polémica entorno a las diferencias que generan en el desempeño del motor, las propiedades físicas del biodiesel. En el presente estudio, se realiza el análisis de los efectos que tiene sobre la liberación de energía, la modificación de la viscosidad del combustible. Para ello, se toma como punto de partida la formulación de un modelo cero dimensional para un motor diesel. Posteriormente, se involucra un modelo del chorro de inyección, que permita describir la influencia de las propiedades físico-químicas relevantes en la atomización y evaporación del combustible, conservando la filosofía del modelo cero dimensional. Finalmente, se presentan los resultados comparativos obtenidos en las simulaciones que utilizan B20 como combustible en condiciones estándar y de la ciudad de Bogotá.

**Palabras clave:** Modelamiento, atomización, liberación de energía, biodiesel de palma, viscosidad, motor diesel.

## Abstract

In the growing demand of fossil fuel alternatives, has been proposed multiple choices coming from the biomass. In the diesel engine field, the biodiesel which comes from the vegetable oils is more accepted choice. In Colombia, due to exist knowledge in the crop, the palm oil and its biodiesel has been proposed as the better solution to this problem. The world experience in the use of those new fuels, have been followed of a great and open discussion about differences in the physical properties of the biodiesel and its effect on the engine performance. The present study focusses in the viscosity change effect on the heat release in a diesel engine. For that, first step is to formulate a zero dimensional model for a diesel engine. Later the effect of the physico-chemical properties of the biodiesel fuel, is described by means of a spray model which maintain the philosophy of a zero dimensional approach. Finally, comparative results obtained in the simulations for a diesel engine which uses a B20 mix as a fuel and works in standard and Bogota conditions, are presented and discussed.

**Keywords:** Modeling, atomization, heat release, palm biodiesel, viscosity, diesel engine.

# Contenido

<b>Agradecimientos</b>	<b>v</b>
<b>Resumen</b>	<b>vi</b>
<b>Lista de símbolos</b>	<b>x</b>
<b>Lista de tablas</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>1</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2. Planteamiento del problema</b>	<b>5</b>
2.1. Motores de combustión interna . . . . .	5
2.1.1. Conceptos termodinámicos . . . . .	5
2.1.2. Parámetros de desempeño . . . . .	6
2.1.3. Combustión en MCI-EC . . . . .	8
2.2. Biodiesel . . . . .	10
2.3. Propiedades del combustible e influencia sobre los parámetros de desempeño y emisiones . . . . .	11
2.3.1. Temperatura de punto de combustión (Flash point) . . . . .	12
2.3.2. Punto de nube (Cloud point) - Punto de fluidez (Pour point) . . . . .	14
2.3.3. Número de cetano . . . . .	14
2.3.4. Densidad . . . . .	15
2.3.5. Poder calorífico . . . . .	15
2.3.6. Oxígeno . . . . .	15
2.3.7. Temperaturas de destilación . . . . .	17
2.3.8. Tensión superficial . . . . .	17
2.3.9. Viscosidad . . . . .	18
2.4. Parámetros de desempeño y emisiones . . . . .	18
2.5. Hipótesis: Rol de la viscosidad, número de cetano y otras propiedades en el proceso de combustión de biodiesel . . . . .	22

<b>3. Modelado del cilindro</b>	<b>27</b>
3.1. Modelos en motores de combustión interna . . . . .	29
3.2. Modelo del volumen de control . . . . .	31
3.2.1. Modelo termodinámico . . . . .	32
3.2.2. Consideraciones . . . . .	34
3.3. Etapas, procesos y fenómenos del proceso de combustión en MCI-EC . . . . .	35
3.3.1. Compresión . . . . .	35
3.3.2. Expansión . . . . .	38
<b>4. Modelado de la liberación de calor</b>	<b>46</b>
4.1. Enfoques del modelado de la LC . . . . .	48
4.1.1. Enfoque global . . . . .	49
4.1.2. Enfoque zonal . . . . .	51
4.2. Planteamiento del modelo de LC . . . . .	57
4.2.1. Desintegración de la columna líquida y las gotas . . . . .	57
4.2.2. Movimiento e ingreso de aire al VC . . . . .	62
4.2.3. Evaporación . . . . .	65
4.2.4. Combustión . . . . .	74
4.3. Acoplamiento de los diferentes modelos . . . . .	75
4.4. Implementación computacional . . . . .	76
<b>5. Resultados</b>	<b>87</b>
5.1. Validación del modelo . . . . .	87
5.1.1. Descripción general . . . . .	87
5.1.2. Comparación . . . . .	89
5.2. Influencia de los fenómenos modelados . . . . .	92
5.3. Resultados con mezclas de biodiesel . . . . .	97
5.3.1. Estándar . . . . .	98
5.3.2. Bogotá . . . . .	106
5.3.3. Evolución de la masa de combustible . . . . .	113
5.4. Función de Wiebe . . . . .	117
<b>6. Conclusiones</b>	<b>120</b>
<b>A. Supuesto de presión uniforme</b>	<b>123</b>
<b>B. Combustible</b>	<b>126</b>
B.1. Determinación de la mezcla y propiedades críticas . . . . .	127
B.2. Propiedades de líquido . . . . .	127
B.2.1. Presión de Saturación . . . . .	129
B.2.2. Entalpía de vaporización . . . . .	129

---

B.2.3. Densidad . . . . .	130
B.2.4. Viscosidad . . . . .	133
B.2.5. Tensión superficial . . . . .	137
B.2.6. Calor específico . . . . .	138
B.3. Propiedades de vapor . . . . .	138
B.3.1. Viscosidad dinámica . . . . .	138
B.3.2. Conductividad térmica . . . . .	140
B.3.3. Difusividad binaria . . . . .	140
B.3.4. Entalpía de formación . . . . .	141
<b>Bibliografía</b>	<b>143</b>

# Lista de símbolos

## Símbolos con letras latinas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$A$	Área	$m^2$	$\int \int dx dy$
$A/F$	Relación aire combustible	1	$\frac{m_{aire}}{m_{comb}}$
$c_v$	Calor específico a volumen constante	$\frac{kJ}{kgK}$	$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$
$h$	Entalpía específica	$\frac{kJ}{kg}$	$\frac{U+PV}{m}$
$m$	Masa	kg	$DF$
$P$	Presión	Pa	$\frac{F}{A}$
$Q$	Calor	kJ	1. $LT$
$T$	Temperatura	K	$DF$
$t$	Tiempo	s	$DF$
$V$	Volumen	$m^3$	$\int \int \int dx dy dz$
$W$	Trabajo	kJ	1. $LT$
$u$	Energía interna específica	$\frac{kJ}{kg}$	$u = q + w$

## Símbolos con letras griegas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$\alpha$	Coeficiente de T.C.	$\frac{W}{m^2 \cdot K}$	Ec.3-16
$\gamma$	Relación de calores específicos	1	$\frac{c_v}{c_p}$
$\chi_b$	Fracción de masa quemada de combustible	1	$\frac{m_{quemada}}{m_{total}}$
$\chi_{b(Vibe)}$	Fracción de masa quemada de la función Vibe	1	Ec.4-4
$\theta$	Desplazamiento angular del cigueñal	Rad	

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$\Delta\theta$	Duración de la combustión	Rad	$\theta_{final} - \theta_0$
$\sigma$	Tensión superficial	$\frac{N}{m}$	$\frac{W_{necesario/area}}{A}$
$\eta$	Viscosidad dinámica	$\frac{kg}{m \cdot s}$	$\eta = \frac{\tau}{\frac{d\bar{u}}{dy}}$
$\nu$	Viscosidad cinemática	$\frac{m^2}{s}$	$\nu = \frac{\eta}{\rho}$
$\rho$	Densidad	$\frac{kg}{m^3}$	$\frac{m}{V}$
$\phi$	Relación de equivalencia	1	$\frac{A/F_{real}}{A/F_{st}}$

## Subíndices

Subíndice	Término
comb	Combustible
c	Cavidades
tc	Transferencia de calor
HRR	Razón de liberación de energía
pared	Temperatura de pared
p	pistón
b	quemado
0	Estado de referencia
st	Estequiometrica

## Superíndices

Superíndice	Término
n	Coefficiente x

## Abreviaturas

Abreviatura	Término
1.LT	Primera ley de la termodinámica

**Abreviatura    Término**

---

DF	Dimensión fundamental
HRR	Razón de liberación de energía
PCI	Poder calorífico inferior
MCI	Motor de combustión interna
EC	Encendido por compresión
ECh	Encendido por chispa
$NO_x$	Óxidos de nitrógeno
PMI	Punto muerto inferior
PMS	Punto muero superior
$CO_2$	Dióxido de carbono
CO	Monóxido de carbono
HC	Hydrocarburos sin quemar
CC	Cámara de combustión
TC	Transferencia de calor
cetano	Número de cetano
ME	Masa evaporada
RE	Razón de evaporación
LC	Liberación de Calor
VLC	Velocidad de liberación de calor
MQ	Masa de combustible quemada
RQ	Razón de quemado de masa de combustible

# Lista de Tablas

<b>2-1.</b>	Referencias para las figuras de las propiedades del combustible. . . . .	13
<b>2-2.</b>	Ensayos de calidad en la elaboración del biodiesel en la Unión Europea, EE.UU. y Colombia. . . . .	19
<b>2-3.</b>	Propiedades determinadas en los estudios que utilizan como combustible biodiesel preparado de aceites vegetales. . . . .	20
<b>5-1.</b>	Características del motor utilizado por Hiroyasu et al [1]. . . . .	90
<b>5-2.</b>	Condiciones de la simulación realizada. (* <i>Respecto al PMS.</i> ) . . . . .	90
<b>5-3.</b>	Constantes de la función de Wiebe para las condiciones y combustibles simulados. . . . .	119
<b>B-1.</b>	Composición del biodiesel de palma utilizado para las simulaciones. . . . .	126
<b>B-2.</b>	Propiedades individuales de los componentes del combustible *[2]; **[3]; **[4] . . . . .	128
<b>B-3.</b>	Coefficientes utilizados para determinar la densidad de los componentes del biodiesel[5]. . . . .	131
<b>B-4.</b>	Constantes para determinar la viscosidad cinemática de los componentes del biodiesel mediante la Ec.B-11 [5] . . . . .	134
<b>B-5.</b>	Constantes para determinar la viscosidad cinemática de los componentes del diesel mediante la Ec.B-11 [6] . . . . .	134

# Lista de Figuras

2-1.	Diagrama de la conversión de energía en un MCI. . . . .	5
2-2.	Ciclo Diesel ideal. . . . .	6
2-3.	Comparación entre el Ciclo diesel real e ideal. . . . .	7
2-4.	Cambio de la presión, temperatura, razón de liberación de energía y fracción de masa quemada ( $\chi_b$ ) durante el proceso de combustión en un MCI-EC. . . . .	9
2-5.	Proceso de transesterificación. . . . .	11
2-6.	Ciclo del CO <sub>2</sub> . . . . .	12
2-7.	Valores reportados para el biodiesel extraído del aceite de palma para las propiedades de: A. Punto de combustión. B. Punto de nube, punto de fluidez. C. Número de cetano. D. Gravedad específica. E. Poder calorífico. . . . .	16
2-8.	Valores reportados para el biodiesel extraído del aceite de palma para las propiedades de: A. Temperaturas de destilación. B. Viscosidad cinemática. . . . .	20
2-9.	Cambio de la geometría del chorro inyectado y de la distribución de las gotas atomizadas. . . . .	23
2-10.	Hipotesis: A. Interacción de los procesos que intervienen en la fase de retardo a la ignición. B. Avance de la masa inyectada, preparada y quemada en el tiempo. . . . .	26
3-1.	División del volumen físico del cilindro en 1,2 o n-zonas. . . . .	27
3-2.	Modelado del MCI bajo un enfoque cero dimensional de una zona (a); dos zonas (b) y k-zonas (c). . . . .	28
3-3.	Variables cinemáticas del mecanismo biela-manivela en un MCI. . . . .	36
3-4.	Curva de la razón de liberación de energía (HRR) y de la fracción de masa quemada ( $\chi_b$ ). . . . .	40
4-1.	Esquema de los diferentes procesos involucrados en la LC. . . . .	47
4-2.	Esquema de la suposición de conservación de momento para un VC arbitrario. . . . .	52
4-3.	Comportamiento según Abramovich [7] de las variables: a) Radio máximo (R); b) Velocidad ( $v_m$ ) y concentración ( $y_m$ ) en el eje del chorro; c) Velocidad (v) y concentración (y) a lo largo de la sección transversal. . . . .	53
4-4.	a) Distribución de velocidad a lo largo del chorro. b) Esquema del modelo planteado por Chiu et al [8]. . . . .	54

4-5. Esquema de la distribución del chorro y su descripción acorde a Hiroyasu et al [9]. . . . .	55
4-6. Esquema del modelo planteado para la descripción de la dinámica de LC. . .	58
4-7. Esquema de la descripción de la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz. . . . .	59
4-8. Desintegración de la columna líquida acorde a Reitz y Bracco [10]. . . . .	60
4-9. Mecanismo de desintegración utilizado en el modelo propuesto. . . . .	62
4-10. Esquema del VC para: <b>a.</b> la simultaneidad de los procesos de evaporación y movimiento <b>b.</b> separación de los mismos para la aproximación abordada. . .	63
4-11. Trayectoria simulada considerando el rebote elástico entre el VC y la pared de la CC. . . . .	65
4-12. Procesos involucrados en la evaporación de una gota. (liq,l=líquido; gas,g=mezcla de gases; i=especie i.; $p_{est}$ =presión estática). . . . .	66
4-13. Clasificación de los modelos utilizados para describir el calentamiento de una gota. . . . .	68
4-14. Esquema del modelado de los diferentes procesos (A. Transporte de Energía B. Transporte de masa) . . . . .	69
4-15. Acoplamiento de los modelos de transporte de masa y energía para describir el fenómeno de evaporación. . . . .	69
4-16. Esquema de la composición de los flujos de energía en el modelo para: a. Calentar una esfera sólida en movimiento; b. Considerar el calentamiento de la capa de vapor; c. Repartir la energía entre el calentamiento de la gota y el cambio de fase del líquido. . . . .	70
4-17. Esquema del modelo para el fenómeno de evaporación. . . . .	71
4-18. Diagrama general de la implementación del modelo propuesto. . . . .	77
4-19. Esquema de la implementación del modelo de liberación de energía. . . . .	78
4-20. Esquema de la implementación del modelo de inyección. . . . .	80
4-21. Esquema de la implementación del modelo de rompimiento de las gotas. . . .	81
4-22. Esquema de la implementación del modelo de cinemática del VC. . . . .	82
4-23. Esquema de la implementación del modelo de evaporación de combustible líquido. . . . .	83
4-24. Esquema de la implementación del modelo de mezclado de combustible y aire en el VC. . . . .	84
4-25. Esquema de la implementación del modelo de combustión en el VC. . . . .	85
4-26. Esquema de la implementación del modelo de equilibrio. . . . .	86
5-1. Entradas necesarias en el modelo para la simulación. . . . .	88
5-2. Resultados del modelo para cada simulación. . . . .	89
5-3. Comparación de los resultados obtenidos en el modelo propuesto y los obtenidos por Hiroyasu et al [1]. . . . .	91
5-4. Area superficial de las gotas presentes en el chorro de inyección. . . . .	95

5-5. A. Radio Medio de Sauter y B. Número de gotas correspondientes al SMR para las gotas presentes en el chorro de inyección . . . . .	96
5-6. A. Velocidad de evaporación y B. Masa evaporada de las gotas presentes en el chorro de inyección . . . . .	96
5-7. Angulo máximo del cono de inyección ( $\theta/2$ ) en los diferentes VCs utilizados para describir la LC en condiciones de Bogotá. . . . .	98
5-8. Radio Medio de Sauter para las gotas presentes en el chorro de inyección para condiciones estándar de operación del motor. . . . .	99
5-9. Area superficial para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones estándar. . . . .	100
5-10. Masa evaporada para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones estándar. . . . .	101
5-11. Velocidad de evaporación para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones estándar. . . . .	101
5-12. Masa quemada en condiciones estándar de operación. . . . .	102
5-13. Velocidad de quemado de combustible en condiciones estándar. . . . .	102
5-14. Presión al interior del cilindro en condiciones de operación estándar. . . . .	103
5-15. Temperatura media del fluido de trabajo al interior del cilindro en condiciones estándar. . . . .	103
5-16. Liberación de calor en condiciones estándar de operación. . . . .	104
5-17. Liberación de calor normalizada ( $\chi$ ) para condiciones estándar. . . . .	105
5-18. Velocidad de LC en condiciones estándar. . . . .	105
5-19. Radio Medio de Sauter para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de operación de Bogotá. . . . .	107
5-20. Area superficial para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de Bogotá. . . . .	107
5-21. Masa evaporada para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de Bogotá. . . . .	108
5-22. Velocidad de evaporación para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de Bogotá. . . . .	109
5-23. Masa de combustible quemado en condiciones de operación de Bogotá. . . . .	110
5-24. Velocidad de quemado de combustible en condiciones de Bogotá. . . . .	110
5-25. Presión al interior del cilindro en condiciones de operación de Bogotá. . . . .	111
5-26. Temperatura media del fluido de trabajo al interior del cilindro en condiciones de Bogotá. . . . .	111
5-27. Liberación de calor para condiciones de operación de Bogotá. . . . .	112
5-28. Liberación de calor normalizada ( $\chi$ ) para condiciones de Bogotá. . . . .	113
5-29. Velocidad de LC en condiciones de Bogotá. . . . .	114
5-30. Evolución de la masa de combustible para condiciones Estándar . . . . .	114
5-31. Evolución de la masa de combustible para condiciones de Bogotá. . . . .	115

---

<b>5-32.</b> LC normalizada para condiciones de operación de Bogotá y estándar para B0.	117
<b>5-33.</b> LC normalizada para para condiciones de Bogotá y estándar para B20. . . .	118
<b>5-34.</b> Fracciones de masa quemada para los combustibles y condiciones simuladas.	119
<b>A-1.</b> $\Delta\theta$ mínimo para garantizar la validez del supuesto $\nabla P = 0$ en el motor utilizado en el presente estudio. . . . .	125
<b>B-1.</b> Propiedades del punto crítico para las mezclas de B0 y B100. A. Temperatura ; B. Presión. . . . .	128
<b>B-2.</b> Presión de saturación para distintas mezclas de B0 con B100. . . . .	129
<b>B-3.</b> Entalpía de vaporización para las diferentes mezclas de B0 con B100. . . . .	130
<b>B-4.</b> Densidad de líquido en función de la temperatura para diferentes mezclas de B0 y B100. . . . .	132
<b>B-5.</b> Densidad del diesel colombiano obtenida con la relación propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11]. . . . .	132
<b>B-6.</b> Densidad de la mezcla B20 de diesel y biodiesel de palma, obtenida con la relación propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11].	133
<b>B-7.</b> Razones de densidad entre el B20 y el B0 para las situaciones presentadas (Experimental, Propuesta y según Benjumea et al [11]). . . . .	133
<b>B-8.</b> Viscosidad cinemática de líquido para las diferentes mezclas de B0 y B100. .	135
<b>B-9.</b> Viscosidad del diesel colombiano obtenida con la relación propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11]. . . . .	136
<b>B-10</b> Viscosidad de la mezcla B20 de diesel y biodiesel de palma, obtenida con la relación propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11].	136
<b>B-11</b> Razones de viscosidad entre el B20 y el B0 para las situaciones presentadas (Experimental, Propuesta y según Benjumea et al [11]). . . . .	137
<b>B-12</b> Tensión superficial para las diferentes mezclas de B0 y B100. . . . .	138
<b>B-13</b> Viscosidad dinámica del vapor para las diferentes mezclas de B0 y B100. . .	139
<b>B-14</b> Conductividad térmica del vapor para las diferentes mezclas de B0 y B100. .	140
<b>B-15</b> Coeficiente de difusividad binaria para las diferentes mezclas de B0 y B100 a presión de: A. 1 bar; B. 50 bar. . . . .	141

# 1. Introducción

A nivel mundial, la utilización de combustibles de origen fósil como fuente de energía para los motores de combustión interna (MCI), ha sido a lo largo de la historia del automóvil un factor importante. Sin embargo, el inminente agotamiento de los recursos petroleros, el creciente deterioro de la capa de ozono, el efecto invernadero y el cambio climático, son fenómenos que en el presente siglo han encaminado a la humanidad en la búsqueda de fuentes alternas de energía. Estas deben permitir plantear no solo modelos de desarrollo sostenible sino también mitigar los nocivos efectos originados por la utilización de combustibles fósiles y sus emisiones, de las cuales el parque automotor es uno de los principales protagonistas [12].

En respuesta a dicha búsqueda, en el campo de los automotores, se han planteado diferentes alternativas de combustibles provenientes de la biomasa. Entre estas, el biodiesel que es extraído de aceites vegetales. Característica que le permite situarse dentro de las fuentes de energía renovables. Ya que, al ser obtenido de la biomasa, se presenta un ciclo cerrado en el carbono. Contrario a lo que se presenta en los combustibles fósiles.

En la actualidad el biodiesel es definido como el combustible compuesto de etil-ésteres o metil-ésteres obtenidos a partir de los ácidos grasos de los aceites vegetales. El primero (etil) es el resultado de la reacción de los ácidos grasos con etanol; en el segundo (metil) el etanol es reemplazado con metanol [13]. En Colombia, según la norma NTC 1438 [14] el biodiesel está definido como los mono-alquil-ésteres de los ácidos grasos de cadena larga, derivados de aceites vegetales o grasas animales para uso como combustible o como mezcla en los motores diesel. En la literatura especializada en el tema y en el presente trabajo, la nomenclatura utilizada para denominar al combustible compuesto por biodiesel o por mezclas de Diesel y este es BXX. Donde XX corresponde a la composición de biodiesel en volumen. Así, una mezcla B20 corresponde a 20 % de biodiesel y 80 % de diesel petrolero, una mezcla B50 corresponde a 50 % de biodiesel y 50 % de diesel petrolero. Finalmente, el combustible compuesto 100 % de biodiesel es denominado B100.

En Colombia, la ley 693 de 2001 [15], la ley 939 de 2004 [16] y el proyecto de ley 048 [17], reglamentan el uso de mezclas de biodiesel en motores de combustión interna encendidos por compresión (MCI-EC), como medida para disminuir las emisiones de agentes contaminantes a la atmósfera. Estas reglamentaciones, que entran en vigencia en el primer semestre de 2007, buscan que el diesel vendido en el país contenga inicialmente una mezcla de 5 % de

---

biodiesel en volumen (B5), dejando abierta la opción de un aumento gradual hasta llegar a una mezcla de 30 % de biodiesel (B30).

La entrada en vigencia de las medidas planteadas anteriormente, se va a realizar sin un conocimiento concreto y soportado técnicamente, acerca de los efectos que la mezcla de diesel petrolero con biodiesel puede generar en un MCI-EC. Esto es, efectos sobre su desempeño, mantenimiento, emisiones, etc. Adicionalmente, se desconoce el desempeño del mismo, cuando opera a una altura de 2600 msnm, como la que se presenta en la región del altiplano cundiboyacense y especialmente en la ciudad de Bogotá. La utilización de los estudios realizados en condiciones diferentes a las locales de presión y temperatura; en los cuales no es posible encontrar un diesel con igual composición al producido en el país, no es el fundamento más adecuado para la elaboración de las normas. Con esto, el grado de incertidumbre de los efectos de la aplicación de tales medidas se incrementa sustancialmente y predecir el comportamiento de un MCI-EC bajo estas condiciones, resulta en una labor más de arte que de ciencia.

Aunque se ha encontrado que el biodiesel presenta una gran similitud en sus propiedades con el diesel petrolero [12, 18], su utilización como combustible en los MCI-EC genera problemas sobre los parámetros de desempeño (torque, potencia, consumo específico), incremento de algunas emisiones y corrosión en el sistema de alimentación del motor. Diferentes estudios en el tema [12, 19, 20], fundamentan la variación de los parámetros de desempeño a la presencia de oxígeno en la composición del combustible, lo cual incide en la disminución del poder calorífico inferior (LHV, de su sigla en Inglés) y con este, la disponibilidad de energía. Sin embargo, se encuentra que el biodiesel producido de diferentes fuentes (algodon, soya, palma, girasol, etc) [21, 22], no presenta cambios significativos (inferiores a 1MJ) en su poder calorífico y los parámetros de desempeño son diferentes en el mismo motor operando bajo condiciones de carga similares. Encontrándose en algunos casos, valores superiores respecto al mismo parámetro del motor operando con diesel petrolero. Estos resultados que atacan fuertemente la hipótesis de la dependencia exclusiva y directa entre el poder calorífico y el desempeño del motor, dejan abierta una discusión sobre cuáles son las propiedades más relevantes del biodiesel y como éstas afectan el desempeño del motor.

La gran mayoría de estudios realizados a nivel mundial, cuyos resultados a menudo son contradictorios en algunos aspectos, generalmente coinciden en que, utilizando biodiesel como combustible se presenta disminución de los valores de los parámetros de desempeño como torque y potencia, incremento del consumo específico y aumento de emisiones de óxidos de nitrógeno ( $NO_x$ ). Tales estudios, aunque permiten la comparación entre los valores relevantes en el campo práctico, ofrecen resultados en características de forma mas no de fondo, aportando soluciones obtenidas empíricamente y que dejan de lado la esencia del problema: La variación del combustible y con ella, la alteración del proceso de combustión.

Entre las propiedades que presentan la mayor variación entre biodiesel y diesel petrolero se encuentran la densidad, el número de cetano, el poder calorífico y en mayor proporción, la viscosidad del combustible. Por ello, dejando a un lado la hipótesis de la dependencia directa entre el poder calorífico y el desempeño del motor, el presente estudio busca determinar la influencia de la viscosidad en la manera como se presenta la liberación de calor del combustible en el tiempo. Ya que, sin ninguna modificación en las condiciones de operación, la forma como se presente esta liberación de calor, tiene un efecto directo sobre la potencia indicada entregada por el motor.

Buscando explicar los efectos que la viscosidad tiene sobre la liberación de calor, se propone la utilización de una herramienta matemática. En esta, el fenómeno que se intenta modelar, es la alteración del proceso de combustión causada por dos factores: el primero es la disminución del tiempo de retardo a la inflamación; el segundo, es la necesidad de un incremento en el tiempo para la correcta vaporización del combustible vinculada al aumento de la viscosidad. Tales factores que se manifiestan en el desarrollo de la fase de retardo a la inflamación, afectan directamente la fase siguiente de premezclado y finalmente el resultado es un valor inferior de la razón de liberación de energía en el tiempo.

### **Objetivo General**

Desarrollar un modelo matemático, cero dimensional, para el proceso de combustión en un motor de combustión interna encendido por compresión, que utiliza una mezcla B20 (Biodiesel al 20 % y diesel petrolero al 80 % en volumen) como combustible, para identificar la influencia de la viscosidad del combustible en el proceso de combustión.

### **Objetivos Específicos**

- Determinar la variación de la viscosidad en función de la temperatura, de la mezcla B20 de biodiesel de palma.
- Determinar los valores de las constantes de la función de Vibe para un MCI-EC, que utiliza una mezcla B20 de biodiesel de palma como combustible y opera en las condiciones de Bogotá.
- Explicar teóricamente la relación existente entre la viscosidad del combustible y la liberación de calor del combustible, cuando el MCI-EC utiliza diesel petrolero y una mezcla B20 de biodiesel de palma como combustible.

## 2. Planteamiento del problema

### 2.1. Motores de combustión interna

Los motores de combustión interna son máquinas térmicas reciprocantes, mediante las cuales, la energía química del combustible se transforma en energía térmica y posteriormente, en energía mecánica (Figura 2-1).

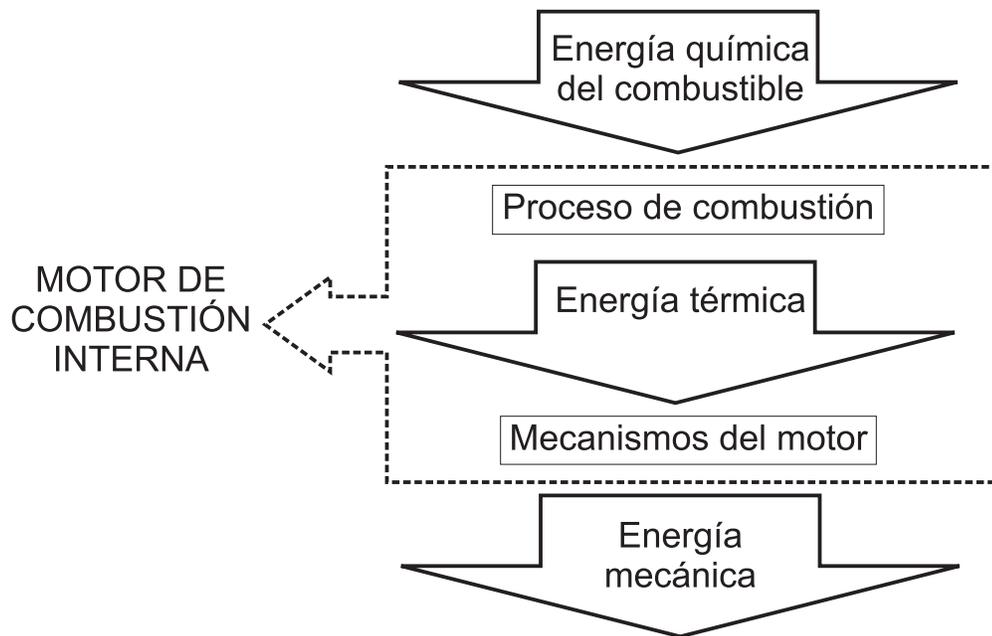


Figura 2-1.: Diagrama de la conversión de energía en un MCI.

#### 2.1.1. Conceptos termodinámicos

Las máquinas térmicas se modelan mediante ciclos ideales, en los cuales no se contemplan los factores que pueden generar pérdidas en los procesos de compresión, adición de calor, expansión y rechazo de calor. El ciclo a presión constante o Ciclo Diesel (Figura 2-2) representa el funcionamiento de los motores encendidos por compresión, este se caracteriza por un proceso de adición de calor (2 a 3) que se realiza, como su nombre lo indica, a presión

constante. Para los otros procesos del ciclo ideal se tiene: Compresión isentrópica (1 a 2), expansión isentrópica (3 a 4) y rechazo de calor de forma isocórica (4 a 1).

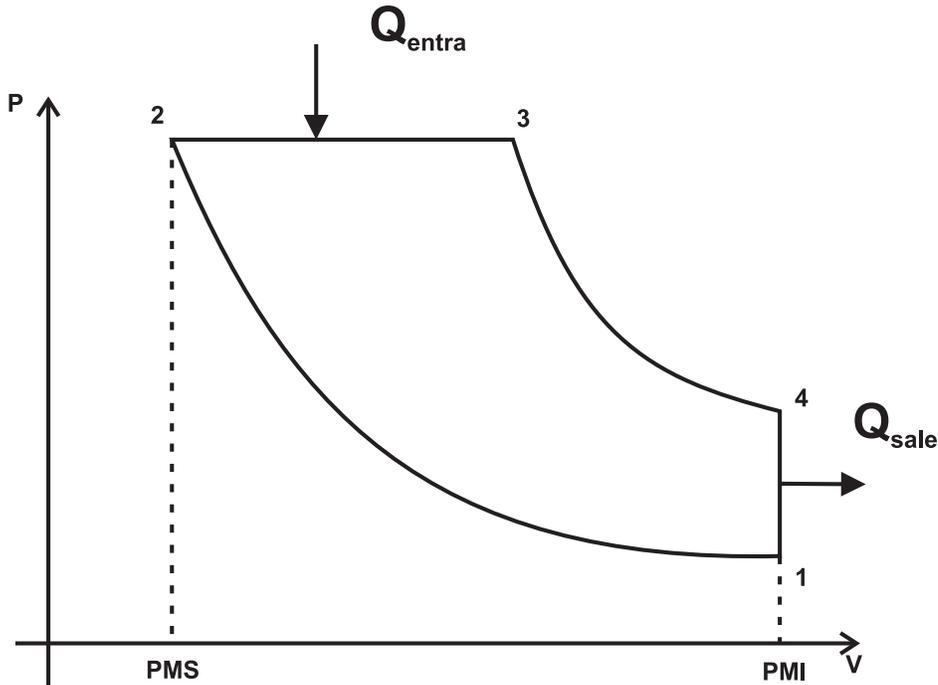


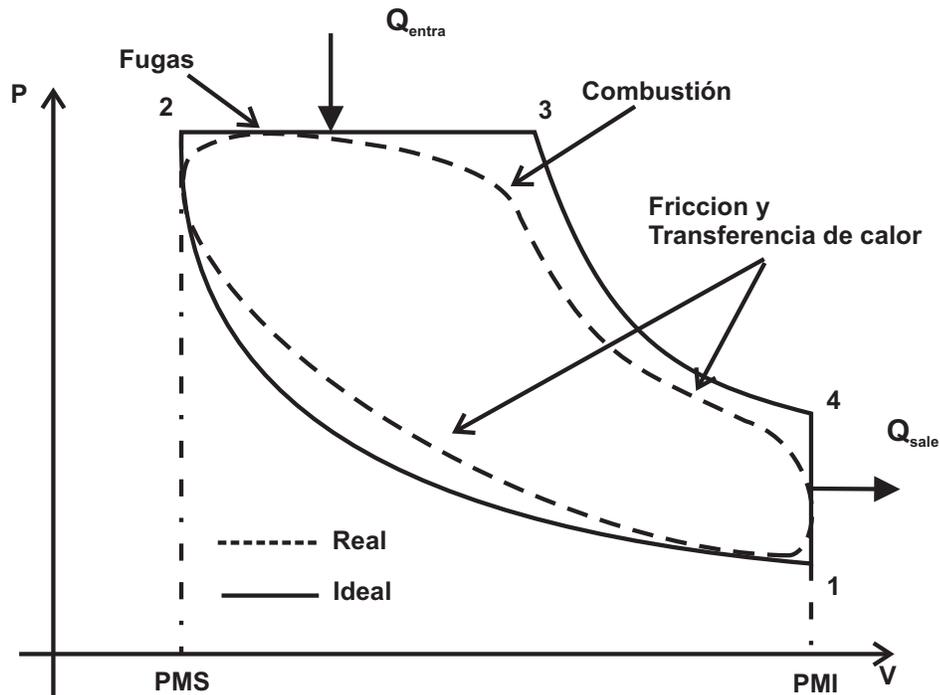
Figura 2-2.: Ciclo Diesel ideal.

Aunque la idealización de los procesos constituye un paso fundamental en cualquier área ingenieril, en la medida en que se abandonan las simplificaciones realizadas para obtener un Ciclo Diesel ideal, el funcionamiento de un MCI-EC y por lo tanto la salida de potencia, difieren de los resultados obtenidos mediante el proceso ideal (Figura 2-3). Los factores más relevantes que causan las diferencias entre los ciclos real e ideal son [23]:

- Fricción en los componentes mecánicos y en el fluido de trabajo.
- Efectos sobre la transferencia de calor debidos a la combustión.
- Efectos inerciales de los componentes.
- Pérdidas ocasionadas por una combustión incompleta y/o disociación en las reacciones.

### 2.1.2. Parámetros de desempeño

Debido a la necesidad de conocer y comparar el funcionamiento de las variables que pueden afectar el funcionamiento de un MCI, se han establecido algunos parámetros que permiten llevar a cabo dicha labor. En esta sección solo se citan los que se referencian en este documento.



**Figura 2-3.:** Comparación entre el Ciclo diesel real e ideal.

- **Potencia indicada (IP, de su sigla en Inglés):** Se define como la cantidad de trabajo por unidad de tiempo que es obtenida del diagrama indicador del ciclo real.
- **Potencia al freno (BP, de su sigla en Inglés):** Esta es la salida real de la potencia obtenida del MCI en funcionamiento, su obtención se realiza acoplando el motor a un dinamómetro.
- **Potencia de fricción (FP, de su sigla en Inglés):** Es la diferencia obtenida entre la potencia indicada y la potencia al freno, se considera que esta diferencia se presenta por las pérdidas que genera la fricción entre los componentes del MCI y los elementos auxiliares.
- **Consumo específico de combustible al freno (BSFC, de su sigla en Inglés):** Es la medida de la cantidad másica de combustible necesario para obtener una unidad de trabajo.
- **Relación aire combustible (A/F):** Es la relación entre la masa de aire admitida en el motor por unidad de masa de combustible. esta se puede presentar de dos formas:
  - $A/F_{st}$ : Se utiliza cuando la masa de aire corresponde exactamente a la cantidad estequiométrica para el combustible utilizado.
  - $A/F_{real}$ : Hace referencia a la condición actual de la relación aire combustible.

- Relación de equivalencia ( $\phi$ ): Hace referencia a la razón entre la relación  $A/F_{\text{real}}$  y la relación  $A/F_{\text{st}}$ . Puede adquirir valores mayores o menores a 1, en cuyo caso se dice que la mezcla es rica o pobre, respectivamente.

### 2.1.3. Combustión en MCI-EC

El proceso de combustión es definido como una reacción de oxidación exotérmica rápida que libera una elevada cantidad de energía como calor [24].

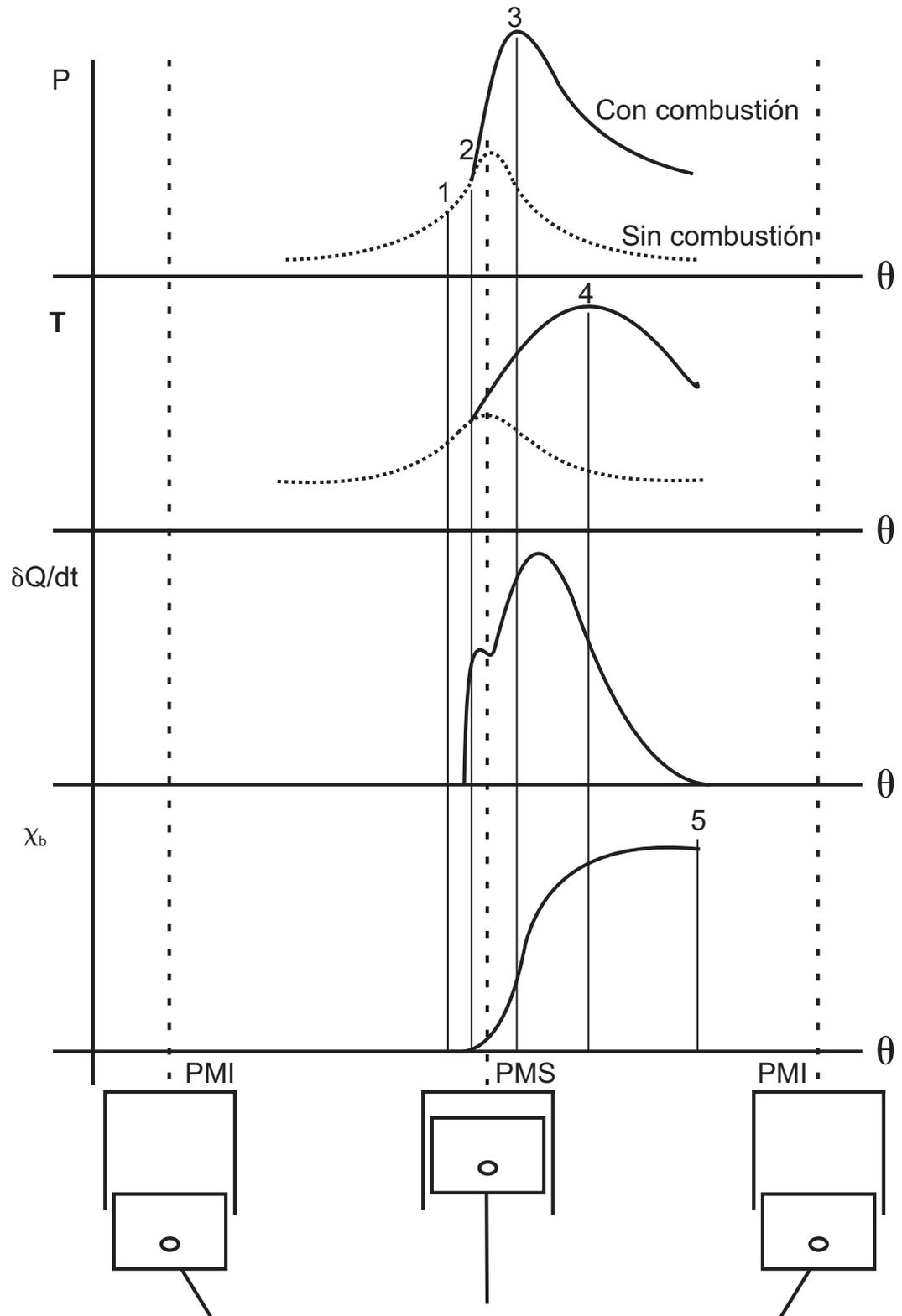
En los MCI-EC, cuando el pistón se encuentra en las cercanías del punto muerto superior (PMS), se inicia la inyección del combustible dentro de la cámara de combustión (CC), esto en motores de Inyección directa (DI, de su sigla en Inglés) o en la precámara en motores de inyección indirecta (IDI, de su sigla en Inglés). El contacto del combustible inyectado a alta velocidad, con el aire en condiciones de temperatura y presión elevadas, produce la vaporización de una parte del combustible. Gracias a la difusión de la masa del combustible evaporado, se consiguen dentro de la CC pequeñas zonas cuya relación local de aire y combustible (caracterizada por ser pobre en este motor), acompañadas de la elevada temperatura del aire, generan el autoencendido de la mezcla. En estas pequeñas zonas, se generan frentes de llama que avanzan cubriendo todo el volumen de la CC, dependiendo del grado de turbulencia del aire y la inyección de combustible que garantizan un mezclado de estos componentes.

El proceso de combustión en los MCI-EC, se divide en 4 etapas (Figura 2-4):

- Retardo a la inflamación (1 a 2): Esta etapa abarca desde el instante en el que se inicia la inyección del combustible (1) hasta cuando se genera el autoencendido de la mezcla (2). Se considera que ocurre este último en el punto de separación de los diagramas  $P - \theta$  con y sin combustión [25]. Los procesos físicos que tienen lugar en esta etapa son atomización y evaporación del combustible y posteriormente se produce la mezcla del vapor de combustible con el aire. Se considera que el fenómeno de autoencendido se produce cuando  $1,4 \leq \phi \leq 2$  [26].

Algunos autores no consideran esta etapa dentro del proceso de combustión, ya que en esta no se produce liberación de calor, más bien es un tiempo en el que parte del combustible se evapora y se prepara mezclándose con el aire disponible, para en las etapas posteriores liberar la energía química alojada en este.

- Combustión rápida (2 a 3): Se presenta entre el punto de autoencendido de la mezcla (2) hasta el punto de máxima presión en el cilindro (3). Esta etapa esta dominada por un proceso de difusión entre los vapores de combustible y el aire. La presión máxima en el cilindro se alcanza en esta etapa, debido al quemado rápido de la mezcla previamente



**Figura 2-4.:** Cambio de la presión, temperatura, razón de liberación de energía y fracción de masa quemada ( $\chi_b$ ) durante el proceso de combustión en un MCI-EC.

preparada de aire-combustible y a la continua inyección de combustible. En esta se libera aproximadamente un 30 % de la energía del combustible [25] causada por el quemado de una proporción similar de este.

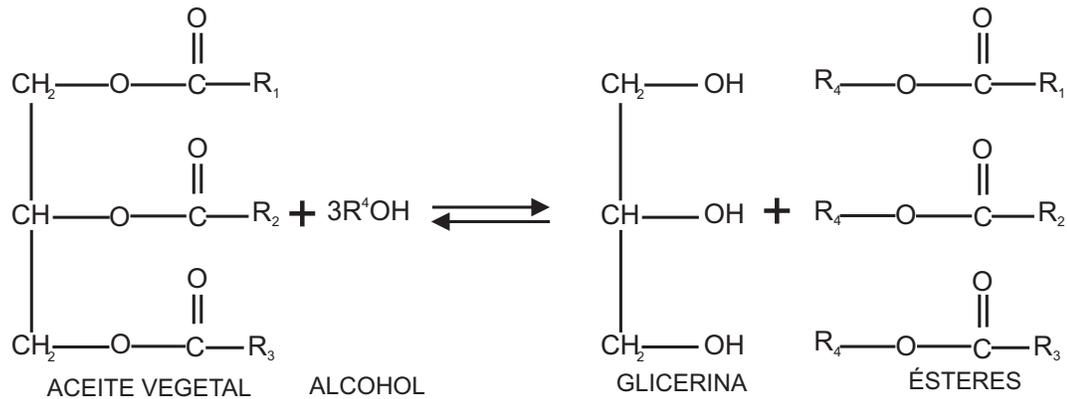
- **Combustión lenta (3 a 4):** Durante esta etapa de la combustión, continua el mezclado de los reactantes desde el punto de máxima presión en el cilindro (3) y hasta el punto de máxima temperatura en el cilindro (4). la etapa de combustión lenta esta dominada por la razón y las condiciones de mezclado entre el aire y los vapores de combustible [26, 25], por ello la turbulencia del aire en esta etapa es decisiva. La cantidad de energía liberada al final de esta etapa esta entre 70 y 80 %, respecto a la cantidad total que se libera en todo el proceso [25].
- **Combustión residual (4 a 5):** En esta etapa, donde se quema el combustible residual alojado en las zonas de enriquecimiento local, la temperatura, presión y la razón de liberación de energía decrecen considerablemente. siendo dominada ésta última por la cinética de la reacción de oxidación [26]. Esta etapa se extiende hasta el final del proceso donde se presenta la extinción de la llama y alcanza una parte considerable de la carrera de expansión del pistón[25].

## 2.2. Biodiesel

En la actualidad, el rápido agotamiento de las reservas de petróleo en el mundo, ha impulsado el uso de aceites vegetales como combustibles para MCI-EC. Dependiendo de las condiciones climáticas y de las características del suelo, diferentes naciones se encuentran en la búsqueda de aceites vegetales que, después de un proceso de transesterificación, puedan ser usados como combustibles en motores diesel sin que su desempeño sea sensiblemente afectado. Por ello, EE.UU. adelanta estudios en la utilización del aceite de soya; Europa estudia el uso del aceite de girasol y de oliva; Filipinas el uso del aceite de coco; y algunas naciones de Asia el uso del aceite de palma [12].

El biodiesel es el combustible para MCI-EC, constituido por los metil o etil ésteres de los ácidos grasos del aceite vegetal. La obtención más eficiente de este se logra mediante el proceso de transesterificación. En este proceso se busca convertir los triésteres del glicerol en (m)etil ésteres [27]. Esto se consigue adicionando al aceite vegetal una proporción de alcohol (generalmente 10 %) en presencia de un catalizador como soda cáustica o potasa, dando como resultado 90 % de biodiesel y 10 % de glicerina en volumen (Figura 2-5). En conclusión, el proceso de transesterificación busca y consigue reemplazar la glicerina presente en la molécula del aceite vegetal por un alcohol. La diferencia existente entre los metil ésteres y los etil ésteres resultantes, radica básicamente en el alcohol que sea utilizado en el proceso de obtención. En el caso del metil éster, se utiliza alcohol metílico o metanol; mientras que

para el etil éster, se utiliza alcohol etílico o etanol [13]. Indistintamente de la utilización de uno u otro, el producto final es denominado biodiesel.



**Figura 2-5.:** Proceso de transesterificación.

La utilización de biodiesel como combustible en los MCI-EC generalmente afecta los parámetros de desempeño, razón por la cual, su empleo es fuertemente cuestionado. En contraste, el biodiesel es superior en términos de bajo contenido de azufre, número de cetano, temperatura de autoencendido, contenido de aromáticos y biodegradabilidad [28]. Adicionalmente, la utilización de biodiesel puro o mezclado con diesel, representa un aporte en la disminución de algunos agentes contaminantes como se muestra a continuación.

Debido a su origen vegetal, las emisiones de dióxido de carbono ( $CO_2$ ), causadas por el proceso de combustión del biodiesel, son las previamente retiradas de la atmósfera en el proceso de fotosíntesis realizado por las plantas que son utilizadas para la fabricación del combustible (Figura 2-6). Sumado a esto, se ha encontrado que el contenido de oxígeno (aproximadamente 10%) [12, 29] en la molécula de biodiesel, genera un proceso de combustión más eficiente. Esto permite una disminución en los valores de las emisiones de monóxido de carbono ( $CO$ ), material particulado e hidrocarburos sin quemar ( $HC$ ) generadas por el motor.

### 2.3. Propiedades del combustible e influencia sobre los parámetros de desempeño y emisiones

La forma de diferenciar y estandarizar un combustible es relativa a dos factores, su aplicación y el combustible mismo. En el caso del biodiesel las propiedades que son determinadas en su elaboración están establecidas para EE.UU. en la norma ASTM 6751-02 [30], para la

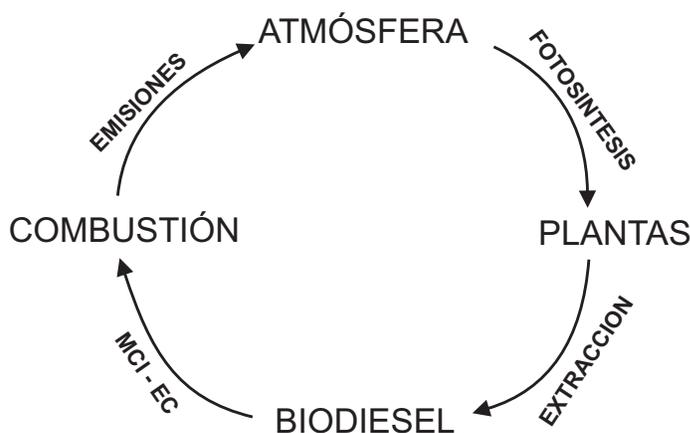


Figura 2-6.: Ciclo del CO<sub>2</sub>.

Unión Europea en la norma EN 14214 [31] y para Colombia en la norma NTC 1438 (Tabla 2-2). En los estudios realizados en el tema, pocas veces se realiza una medición completa de todas estas propiedades y frecuentemente son determinadas las que resultan más relevantes a criterio del investigador (Tabla 2-3). Sin embargo, este procedimiento es uno de los responsables del elevado rango de variación en los resultados de estos estudios [13, 18].

Debido a la diversidad de resultados que se encuentran en la caracterización del combustible, cuando se realiza una visión global sobre el biodiesel, exige que dicho análisis deba ser sesgado explícitamente al biodiesel de interés, en este caso el que es extraído de la palma africana. Ya que existe una elevada variación en las propiedades del biodiesel obtenido de las diferentes fuentes vegetales. Por ello, a continuación se presenta un breve recuento de las propiedades del biodiesel extraído de la palma africana, únicamente. Por brevedad, las referencias en la Figura 2-7 y Figura 2-8 son dadas acorde a la Tabla 2-1.

### 2.3.1. Temperatura de punto de combustión (Flash point)

La temperatura de punto de combustión, es una medida de la tendencia del combustible a formar una mezcla inflamable con aire, bajo condiciones controladas de laboratorio. Su determinación se realiza acorde a la norma ASTM D93 [40]. Como se puede observar en la (Figura 2-7 A) , para diferentes estudios, se presenta una elevada variación de esta temperatura. Graboski y McCornick [18], afirman que la variación de esta propiedad puede estar relacionada con la falta de pureza del biodiesel, específicamente por la presencia de trazas de etanol o metanol residual del proceso de transesterificación. Hecho que evidencia la complejidad asociada a la utilización de este combustible en los MCI. Ya que, como se presenta a continuación, no es la única propiedad que tiene variaciones significativas.

**Tabla 2-1.:** Referencias para las figuras de las propiedades del combustible.

Número	Referencia	Observación
1	[32]	B100 / Metil-ester (ME)
2	[33]	B100 / ME
3	[18]	B100 / ME
4	[18]	B100 / ME - Esterina
5	[34]	B100 / ME
6	[35]	B2 / ME
7	[35]	B5 / ME
8	[35]	B10 / ME
9	[34]	B100 / ME. Medido a 80 °C
10	[34]	B20 / ME. Medido a 80 °C
11	[34]	B5 / ME. Medido a 80 °C
12	[12]	B100 / Etil-ester
13	[36]	B100 / ME
14	[37]	B100 / ME
15	[38]	B100 / ME
16	[39]	B100 / ME

### 2.3.2. Punto de nube (Cloud point) - Punto de fluidez (Pour point)

La temperatura en la cual se presenta la formación de las primeras estructuras sólidas de cera en la superficie del combustible, se conoce como el punto de nube. Su determinación se realiza acorde a la norma ASTM D2500 [41]. Dicha propiedad del combustible, permite conocer la temperatura a la cual se puede presentar el taponamiento del inyector o el filtro de combustible, debido a la obstrucción generada por estas estructuras. El punto de fluidez, determina la temperatura más baja en la cual se presenta movimiento del combustible. Esta propiedad, define la temperatura en la cual el combustible no puede ser bombeado por el sistema de alimentación del motor. Se determina según la norma ASTM D97 [42]. Al igual que el punto de combustión, las temperaturas de punto de nube y fluidez, presentan variaciones importantes para los diferentes estudios realizados (Figura 2-7 B). Las características estructurales del combustible que pueden afectar estas propiedades de flujo son, el grado de insaturación y la longitud y bifurcación de la cadena de hidrocarburos [18].

### 2.3.3. Número de cetano

El número de cetano, es una medida relativa del retardo a la ignición. Este último, hace referencia al tiempo que transcurre entre el inicio de la inyección, hasta el momento en el cual se produce un incremento sensible de la presión en el interior del cilindro, con respecto al incremento de la presión debida a la reducción del volumen. Se determina según la norma ASTM D613 [43]. El número de cetano para el biodiesel, en general es superior al determinado para el diesel. Presentando variaciones entre 50 y 66 (Figura 2-7 C), para el biodiesel extraído de la palma africana. Variaciones que pueden estar relacionadas con la presencia de glicerol y de metanol residual [18].

Un número de cetano elevado, está asociado a un tiempo corto de retardo a la ignición. En contraste, la disminución en el número de cetano se asocia a un incremento en dicho tiempo. Estas dos situaciones influyen sobre el proceso de combustión y con ello, sobre la formación de emisiones y la salida de trabajo del motor. Una reducción en el número de cetano, genera una disminución en el tiempo disponible para que se lleve a cabo el proceso de combustión, provocando una combustión incompleta [36, 44, 45]. lo cual implica un incremento en la temperatura de los gases de escape [36, 44]; del ruido [36, 46, 47, 48, 49]; de las emisiones de óxidos de nitrógeno ( $NO_x$ ) [18, 50, 48]; hidrocarburos sin quemar ( $HC$ ), de monóxido de carbono ( $CO$ ) [50]; y opacidad de los humos [46, 47, 48, 51]. Por otra parte, un número de cetano elevado puede ser indicativo de facilidad de encendido en frío [47, 48, 50] e influye sobre la presión máxima que se alcanza en el cilindro [49].

### 2.3.4. Densidad

La densidad del combustible, frecuentemente es reportada mediante la gravedad específica. Esta última se obtiene del cociente entre la densidad del combustible y la densidad del agua en condiciones de referencia. La densidad del combustible se determina según la norma ASTM D4052. Los valores reportados en los diferentes estudios se presentan en la Figura 2-7 D.

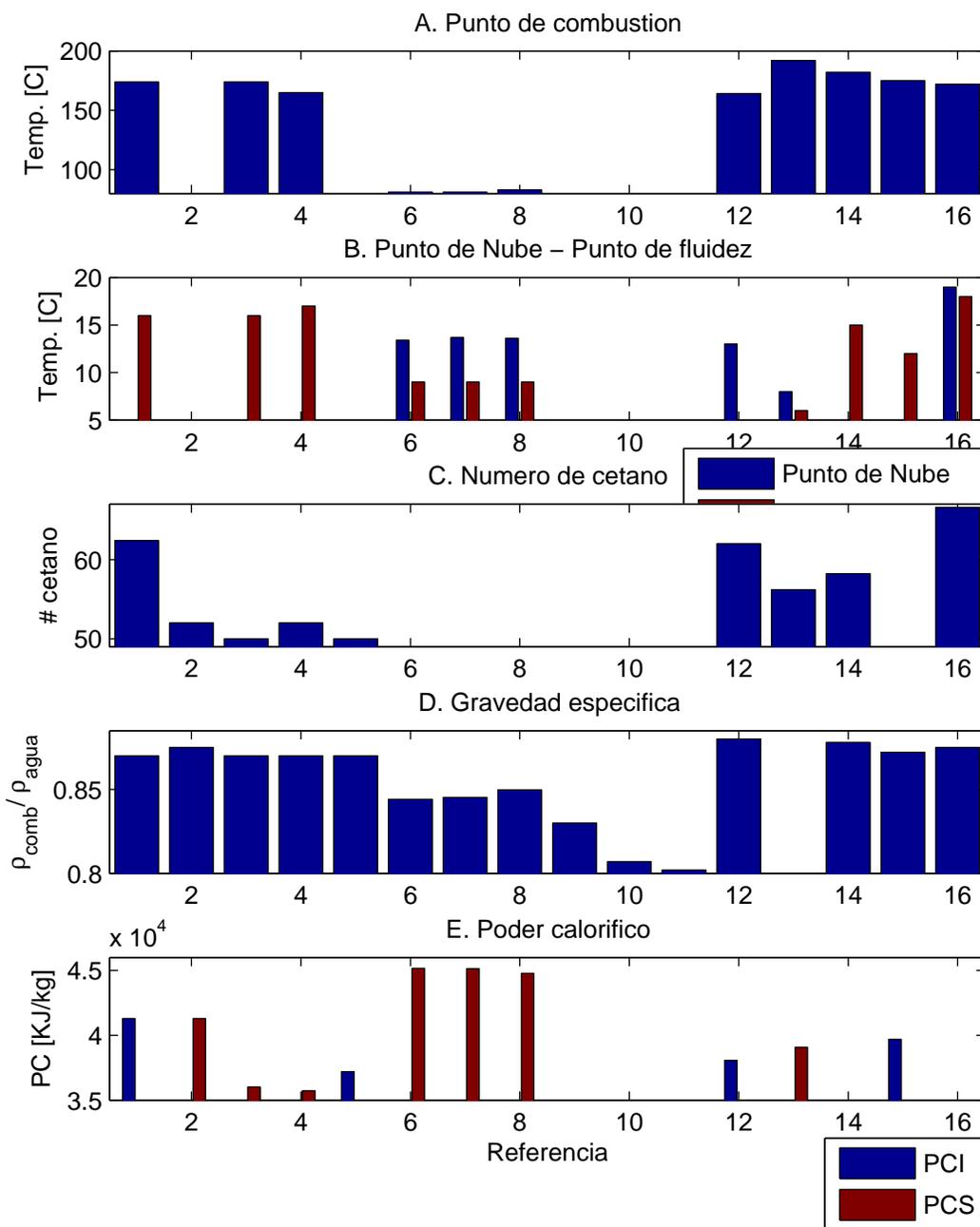
Un incremento en el valor de esta propiedad, para un reglaje dado del sistema de inyección, ocasiona un aumento en el consumo másico de combustible [18, 19, 32, 44, 52]. Adicionalmente, modifica la forma del chorro del combustible inyectado y la penetración de este [51, 53]. También contribuye en un 2% en el aumento del tamaño de las gotas atomizadas. La disminución en el valor de la densidad, involucra bajas emisiones de material particulado (*MP*) y de *NO<sub>X</sub>*, así como un valor bajo de viscosidad dinámica [50]. En el caso específico del biodiesel, donde generalmente se presenta un aumento en el valor de esta propiedad, acompañado de una disminución en el poder calorífico, respecto al diesel, resulta en una disminución en la salida de potencia y el torque [18].

### 2.3.5. Poder calorífico

El poder calorífico, determina la cantidad de energía del combustible por unidad de masa. Según sea el caso, es posible determinar el poder calorífico superior (PCS) e inferior (PCI). Donde la diferencia en estos valores, radica en la fase en la cual se encuentre el agua en los gases de escape. Para el primero (PCS), se hace referencia a una fase líquida del agua y para el segundo (PCI) una fase gaseosa. La Figura 2-7E muestra los diferentes valores obtenidos para esta propiedad, por diferentes autores. La disminución en el valor del poder calorífico tiene una relación directa con algunos de los parámetros de desempeño. Este hecho, que se presenta en el biodiesel (Figura 2-7E), da como resultado una salida de potencia inferior en el motor con respecto al diesel [21, 54], en especial a carga total [35]; incremento en el consumo específico de combustible [19, 32, 52, 54, 55] y bajo torque [18].

### 2.3.6. Oxígeno

La presencia de oxígeno en el combustible, lo cual es característico del biodiesel, permite un incremento en la eficiencia de la combustión. Esto debido a que el quemado de la mezcla se realiza en condiciones más cercanas a la relación  $A/F_{st}$  [12, 21, 44, 51]. Adicionalmente, se presenta una disminución en las emisiones de *MP* [12, 18, 19, 51]; *CO* y *HC* [19]. Sin embargo, este hecho que es positivo con respecto a la salida de potencia y algunas emisiones, permite que la mezcla alcance las condiciones cercanas a la relación  $A/F_{st}$  un 15% más rápido [21] e incrementa la temperatura de combustión. Hecho que favorece la formación de *NO<sub>X</sub>* térmico (mecanismo de Zeldovich [56])[21, 44].



**Figura 2-7.:** Valores reportados para el biodiesel extraído del aceite de palma para las propiedades de: A. Punto de combustión. B. Punto de nube, punto de fluidez. C. Número de cetano. D. Gravedad específica. E. Poder calorífico.

### 2.3.7. Temperaturas de destilación

Las temperaturas en las cuales se obtiene la evaporación de ciertos porcentajes del combustible, permiten determinar la volatilidad de este y así predecir su comportamiento en la fase de formación y preparación de la mezcla en la CC, previo al proceso de combustión. Las temperaturas determinadas generalmente son el punto inicial de evaporación (IBP, de su sigla en Inglés); T10, T50 y T90, las cuales hacen referencia a las temperaturas en las cuales se alcanza la evaporación del 10, 50 y 90% del combustible; y finalmente, el punto final de evaporación (FBP, de su sigla en Inglés), que determina la temperatura en la cual se produce la evaporación de la totalidad del combustible.

La Figura 2-8 A presenta los valores de estas temperaturas para diferentes estudios. Graboski y McCornick [18], afirman que la presencia de bajos puntos iniciales de evaporación (IBP), sugieren la presencia de metanol o glicerol residual que no es removido durante el proceso de transesterificación.

Para el diesel, se han establecido relaciones de influencia sobre el comportamiento del motor acorde a la temperatura a la cual se han evaporado las siguientes proporciones de la mezcla:

- T10, presenta influencia sobre el comportamiento del encendido de la mezcla [46, 50, 57].
- T50, tiene relación con la viscosidad y densidad del combustible [46, 50, 57].
- T95, guarda relación con la generación de emisiones en el motor. Un incremento en el valor de esta temperatura, está asociado al incremento de  $NO_x$  y  $MP$  [46, 50, 57]; de igual forma al incremento en la formación de depósitos de carbón en la CC [57]. Por otra parte, su disminución involucra un aumento en la formación de  $HC$  y reducción de  $NO_x$  [46, 50, 57].

En cuanto a lo que al biodiesel se refiere, el efecto de estas temperaturas no está completamente definida y su verdadera influencia se desconoce [50]. Aunque, los valores obtenidos en la medición de estas temperaturas son superiores con respecto a las obtenidas en el diesel. Hecho que sugiere una disminución en la volatilidad del combustible, provocando un proceso de evaporación más lento [21, 29].

### 2.3.8. Tensión superficial

Aunque su determinación no hace parte de los estándares de calidad exigidos en la producción del biodiesel (ASTM 6751, EN 14214, NTC 1438). Resulta ser una propiedad importante durante el proceso de inyección del combustible. Un aumento en su valor se opone a la formación de las gotas, incrementando su tamaño [18, 29, 34, 49, 55]. Lo cual afecta el grado

de mezclado del combustible con el aire (homogeneidad de la mezcla) [18]. Teniendo un efecto significativo sobre la eficiencia en la combustión [49] y causando un incremento en la emisión de óxidos de nitrógeno [55].

### 2.3.9. Viscosidad

La viscosidad cinemática, es la medida de la resistencia al flujo, que presenta un fluido bajo la acción de la fuerza de gravedad. Para los combustibles, su determinación se realiza acorde a la norma ASTM D445 [58]. Bajo este procedimiento, los resultados reportados (Figura 2-8 B), muestran una elevada variación en el valor de esta propiedad, para el biodiesel extraído del aceite de palma africana. La mayoría de los valores en la Figura 2-7 A se encuentran entre 4 y 5  $mm^2/s$ , intervalo que supera en un 30% aproximadamente, a los valores que presenta esta en el diesel.

La viscosidad del combustible, al igual que la tensión superficial, tiene una influencia directa sobre el proceso de inyección y atomización del combustible. El incremento en su valor provoca en principio, mayores esfuerzos mecánicos sobre los componentes del sistema de alimentación [48, 50], ya que existe mayor resistencia por parte del combustible a fluir. Adicionalmente, se presenta disminución en el rendimiento en la atomización [36, 44, 47, 54]; disminución en el ángulo del cono formado por el chorro de combustible inyectado [19, 21, 44, 51, 59]; aumento en la velocidad del chorro al salir de la tobera del inyector, provocando un incremento en la penetración de este [18, 44].

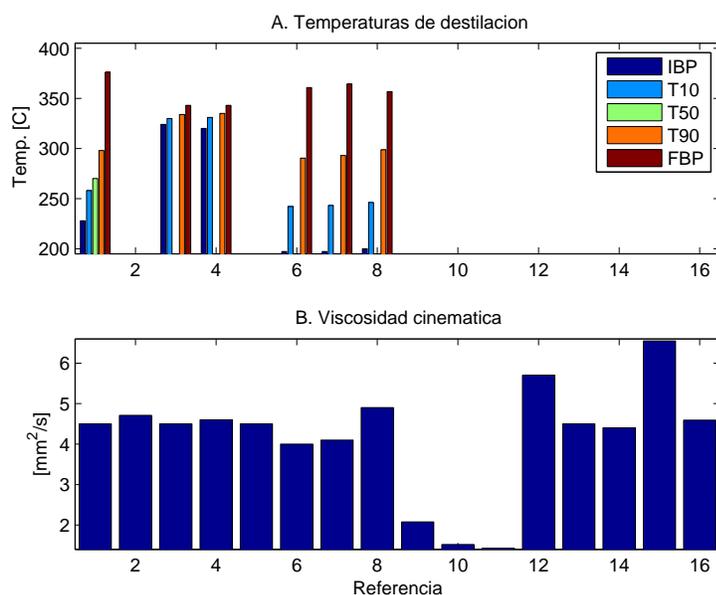
## 2.4. Parámetros de desempeño y emisiones

Desde la propia invención del MCI-EC en el siglo pasado, se planteó la utilización de combustibles provenientes de la biomasa para su funcionamiento. Aunque debido al auge y crecimiento de la industria petrolera, esta idea quedo en un segundo plano hasta mediados de siglo.

En 1938, Watson [60] siendo pionero en los estudios del tema, utilizó aceites vegetales de palma y soya como combustibles en un MCI-EC teniendo como resultado un incremento en el consumo específico. Desde ese momento hasta la actualidad, se han realizado una gran cantidad de estudios en los cuales se utiliza como combustible aceite vegetal y en los más recientes, biodiesel. En estos, aunque existen diferencias en resultados y sus justificaciones, generalmente se reporta disminución en la potencia al freno [19, 20, 53]; incremento en el consumo específico al freno [19, 20, 61]; Disminución en las emisiones de monóxido de carbono ( $CO$ ) e hidrocarburos sin quemar ( $HC$ ) [19, 61, 28, 53, 20, 62] y un incremento en la

**Tabla 2-2.:** Ensayos de calidad en la elaboración del biodiesel en la Unión Europea,EE.UU. y Colombia.

Propiedad (unidades)	NORMA EN 14214	NORMA ASTM 6751-02	NORMA NTC 1438
	Límite/Ensayo	Límite/Ensayo	Límite/Ensayo
Contenido de ester (%)	max 96,5/EN 14103	-	max 96,5
Densidad 15°C ( $kg/m^3$ )	860-900/ISO 3675	D 2500	860-900/ASTM D4052
Viscosidad 40°C ( $mm^2/s$ )	3,5-5/ISO 3104	1,9-6/D 445	1,9-6/ASTM D445
Punto de nube (°C)	-	Reportar/D 2500	Reportar/D2500
Punto de inflamación (°C)	min 120/ISO 3679	min100/D 93	min 120/D 93
Contenido de azufre (mg/kg)	max 10/EN 20846	max 15/D 5453	-
Residuos de carbón (%)	max 0,3/ISO 10370	max 0,1/D 524	max 0,3/D4530
Número de cetano	min 51/ISO 5165	min 45/D 613	min 47/D 613
Contenido de cenizas (%)	max 0,02/ISO 3987	max 0,02/D 874	max 0,02/D874
Contenido de agua (mg/kg)	max 500/ISO 12937	max 500/D 2709	max 500/ASTM E203
Contaminación total (mg/kg)	max 24/EN 12662	-	max 24/EN12662
Corrosion al cobre (3 horas a 50°C)	clase 1/ISO 2160	clase 3/D 130	clase 1/D 130
Estabilidad a la oxidación 110°C (horas)	min 6/EN 14112	-	min 6/EN 14112
Número ácido (mg KOH/g)	max 0,5/EN 14104	max 0,8/D 664	max 0,5/D 664
Índice de yodo (gl/100g)	max 120/EN 14111	-	max 120/EN 14111
Contenido de acido linolenico (%)	max 12/EN 14103	-	max12/EN 14103
Contenido de metanol (%)	max 0,2/EN 14110	max 0,2/EN 14110	-
Contenido de ester (%)	max 96,5/EN 14103	-	max 96,5
Contenido de monoglicéridos (%)	max 0,8/EN 14105	-	max 0,8 ASTM D6584
Contenido de diglicéridos (%)	max 0,2/EN 14105	-	max 0,2/ASTM D6584
Contenido de triglicéridos (%)	max 0,2/EN 14105	-	max 0,2/ASTM D6584
Glicerina libre (%)	max 0,02/EN 14105	max 0,02/D 6584	max 0,02/ASTM D6584
Glicerina total (%)	max 0,25/EN 14105	max 0,24/D 6584	max 0,25/D 6584
Metales grupo I (mg/kg)	max 5/EN 14108	-	max 5/ASTM D5863
Metales grupo II (mg/kg)	max 5/EN 14538	-	max 5/ASTM D5863
Contenido de fósforo (mg/kg)	max 10/EN 14107	max 10/D 4951	max 10/ASTM D4951
Temperatura de evaporación 90 % (°C)	Según país/EN116	max 360/D 1160	max 360/ASTM D86
Estabilidad térmica (% reflectancia)	-	-	min 70/ASTM D6468



**Figura 2-8.:** Valores reportados para el biodiesel extraído del aceite de palma para las propiedades de: A. Temperaturas de destilación. B. Viscosidad cinemática.

**Tabla 2-3.:** Propiedades determinadas en los estudios que utilizan como combustible biodiesel preparado de aceites vegetales.

Propiedades	Maní	Soya	Palma	Girasol	Colza	Jatropha
Viscosidad cinemática (37,8°C)	4,9	4,5	5,7	4,6	3,59	4,8
Número de cetano	54	45	62	49	52	57
Poder calorífico inferior (MJ/l)	33,6	33,5	33,5	33,5	33,5	34
Punto de nube (°C)	5	1	13	1	-	4
Punto de fluidez (°C)	-	-7	-	-	-15	-
Punto de combustión (°C)	176	178	164	183	172	163
Densidad (g/ml)	0,833	0,885	0,88	0,86	0,874	0,88
Residuos de carbón (% peso total)	-	1,74	-	-	1,83	2

eficiencia térmica del motor [19, 20, 61].

Estos estudios que son tan solo un ejemplo, esbozan los resultados de la mayoría y el comportamiento de los parámetros de desempeño en un MCI-EC, cuando se utiliza biodiesel o mezclas de este como combustible. Sin embargo, se encuentra que la variación de estos parámetros no puede ser generalizada a términos de biodiesel. Ya que, aunque exista variación frente al diesel petrolero, también se presentan variaciones entre el biodiesel que es producido de diferentes fuentes.

Altim et al [22] realizaron un estudio utilizando aceite vegetal y biodiesel puro (B100) como combustibles en un MCI-EC. En los resultados de este estudio se observa, al igual que en los estudios previos, disminución en los valores de los parámetros de desempeño respecto al diesel petrolero. Pero se encuentra además, que esta disminución no es igual para todo el biodiesel, ya que difiere entre las fuentes de las cuales es extraído (Soya, Girasol y algodón). Generalmente se asocia la disminución de estos valores con el poder calorífico inferior (PCI) del combustible, suposición que en este caso pierde validez debido a que esta variación del PCI no es significativa (menor a 1 MJ) entre las diferentes fuentes de biodiesel. Rakopoulos et al [21] realizaron un estudio similar al anterior, en este no se utilizó B100 sino mezclas B10 y B20 de biodiesel obtenido de diferentes fuentes (Algodón, Soya, Girasol, Colza y Palma). Al igual que lo encontrado por Altim et al [22], aunque se presenta disminución en los parámetros de desempeño frente al diesel petrolero, no es igual para todas las mezclas y en este caso, la variación del PCI entre las fuentes de biodiesel es inferior a 500 KJ.

Los resultados de Alkim et al [22] y de Rakopoulos et al [21], son un reflejo de lo encontrado en otros estudios [19, 20, 53, 61] en lo que respecta al diesel petrolero, pero simultáneamente atacan la hipótesis que justifica la disminución en los valores de los parámetros de desempeño, asociando el hecho exclusivamente al PCI del combustible. Con ello, queda ausente la justificación acerca de cuál es el factor que genera la mayor diferencia en el desempeño del motor, cuando se utiliza diesel petrolero y biodiesel.

Con el ánimo de abrir una nueva discusión, dejando a un lado la hipótesis de fundamentar la disminución del desempeño del MCI-EC en el PCI, se plantea lo siguiente: Retomando nuevamente los trabajos citados [21, 22] se encuentra que, entre las propiedades de los combustibles utilizados, la que presenta mayor variación es la viscosidad. Hecho que también se encuentra en los otros estudios [19, 20, 28, 53, 61, 62] y que es característico en el biodiesel [12].

Esta propiedad cuyo valor es elevado en el biodiesel, se encuentra acompañada de un incremento en el valor de la densidad y tensión superficial. Hecho que afecta el proceso de atomización del combustible en la CC [34, 63], alterando la combustión y finalmente el tra-

bajo entregado por el motor.

## 2.5. Hipótesis: Rol de la viscosidad, número de cetano y otras propiedades en el proceso de combustión de biodiesel

Esta hipótesis se plantea para el proceso de combustión de biodiesel en general. De igual forma, se considera que es aplicable a la mezcla B20 de biodiesel de palma, partiendo de la suposición que los componentes de ésta son totalmente miscibles. es decir, no se presenta separación del biodiesel y el diesel petrolero en ningún momento ya que conforman una mezcla homogénea.

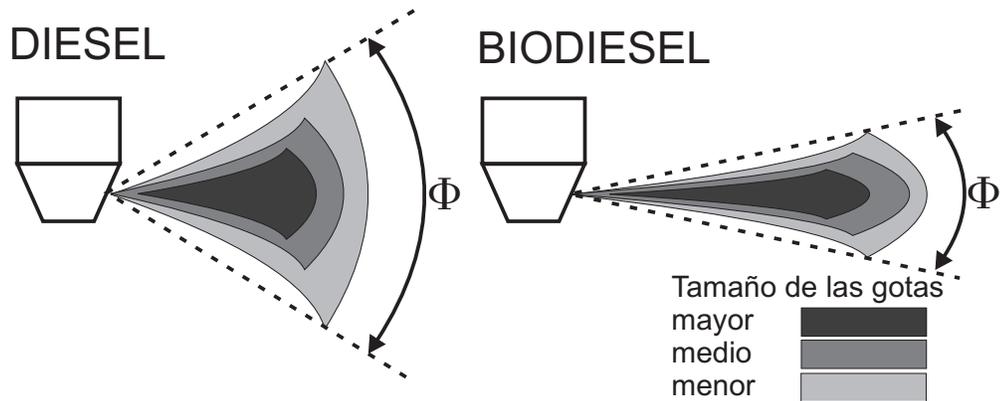
En principio, el incremento de la viscosidad en el biodiesel, involucra mayor dificultad para hacer circular el combustible dentro del sistema de alimentación del motor (bomba de inyección, mangueras, etc), produciendo mayores esfuerzos en los componentes y con ello un desgaste prematuro [12, 18]. Dejando de lado este hecho, para centrarse en los procesos de inyección y combustión del biodiesel, resulta importante analizarlos por separado debido a los fenómenos que ocurren y que dan como resultado un proceso de combustión diferente.

### ■ Proceso de inyección

Cuando el pistón se encuentra en la carrera de compresión, en las cercanías al PMS se abre el inyector para dar inicio a la atomización del combustible. Aca se presenta el primer fenómeno que obra en contra del proceso de combustión.

Debido al cambio en el valor de la viscosidad del combustible, existe una mayor resistencia por parte del fluido a pasar por el orificio del inyector, con ello se presenta un incremento de la presión en la línea de inyección [19, 64]. Lo cual da como resultado que el combustible que logra pasar a través del inyector lleve mayor velocidad [29], tenga mayor penetración [18, 44] y el ángulo del cono ( $\Phi$ ) del chorro inyectado sea menor [19, 21, 44, 51, 59]. Debido a una velocidad superior, a la diferencia en la forma del chorro y al incremento en el valor de la viscosidad del combustible, se consigue un chorro de combustible inyectado con una forma diferente, en el cual el fluido se encuentra más concentrado por unidad de volumen, tiene mayor alcance y que presenta mayor resistencia a desintegrarse [34, 44, 63], con ello la formación de las gotas se dificulta (Figura 2-9). Este hecho se acompaña con un valor superior de la tensión superficial[18], el cual también se opone a la formación de gotas debido a una mayor fuerza de cohesión en el combustible [65], dando como resultado un incremento en el

tamaño de las gotas atomizadas [29, 34, 18, 49, 55].



**Figura 2-9.:** Cambio de la geometría del chorro inyectado y de la distribución de las gotas atomizadas.

Teniendo en cuenta estos dos mecanismos que dificultan la formación de las gotas, el resultado final en el proceso de inyección, será un incremento en el tiempo necesario para la atomización del combustible (no de la inyección) y un tamaño superior de las gotas atomizadas [29, 18, 21, 55, 49].

- **Proceso de evaporación del combustible**  
Considerando el resultado del proceso anterior, las gotas atomizadas de mayor tamaño tendrán una dificultad superior para evaporarse y mezclarse con el aire presente en la CC [18, 21]. Adicionalmente, la disminución en la presión de vapor que se presenta en el biodiesel un obstáculo más para la formación de la mezcla, ya que este hecho lleva implícito un aumento en el tiempo de evaporación del combustible [21].

Estos dos fenómenos que tienen lugar en la fase de retardo a la inflamación, exigen por si solos un incremento en el tiempo necesario para la preparación de la mezcla. De no cumplirse esto, el resultado será una menor cantidad de mezcla preparada al final de ésta y con ello, menor cantidad de energía liberada.

- **Retardo a la inflamación**  
La existencia de un número de cetano alto, implica menor tiempo de retardo a la inflamación. Adicionalmente, la presencia de oxígeno en la molécula de biodiesel disminuye el valor de la relación  $A/F_{st}$  de 14,5 para diesel a 12,5 para biodiesel. Con ello se alcanzan un 15% más rápidos valores de (o inferiores a) 2 en la relación de equivalencia [21], lo cual ayuda a que el fenómeno de autoencendido se presente más rápido.

En conclusión, teniendo en cuenta los efectos que se producen por separado en cada uno de los procesos descritos anteriormente, propiedades como la viscosidad y la tensión superficial exigen mayor tiempo para la fase de retardo a la inflamación. Por otra parte, el número de cetano y la presencia de oxígeno molecular reducen el tiempo disponible para esta fase de la combustión.

Para fines ilustrativos, la Figura 2-10 presenta un esquema de lo descrito anteriormente y cómo pueden influir estos mecanismos en los procesos de evaporación y combustión de la masa de combustible.

El resultado de esta cadena de sucesos será, una menor cantidad de mezcla preparada para cuando ocurre el fenómeno de autoencendido, con ello se disminuyen la cantidad de combustible que se quema, la razón de liberación de energía y los valores de presión máxima en el cilindro, para la fase de combustión rápida. Hechos que, en ausencia de alguna modificación en las condiciones de operación, producen los siguientes efectos sobre los parámetros de desempeño y emisiones:

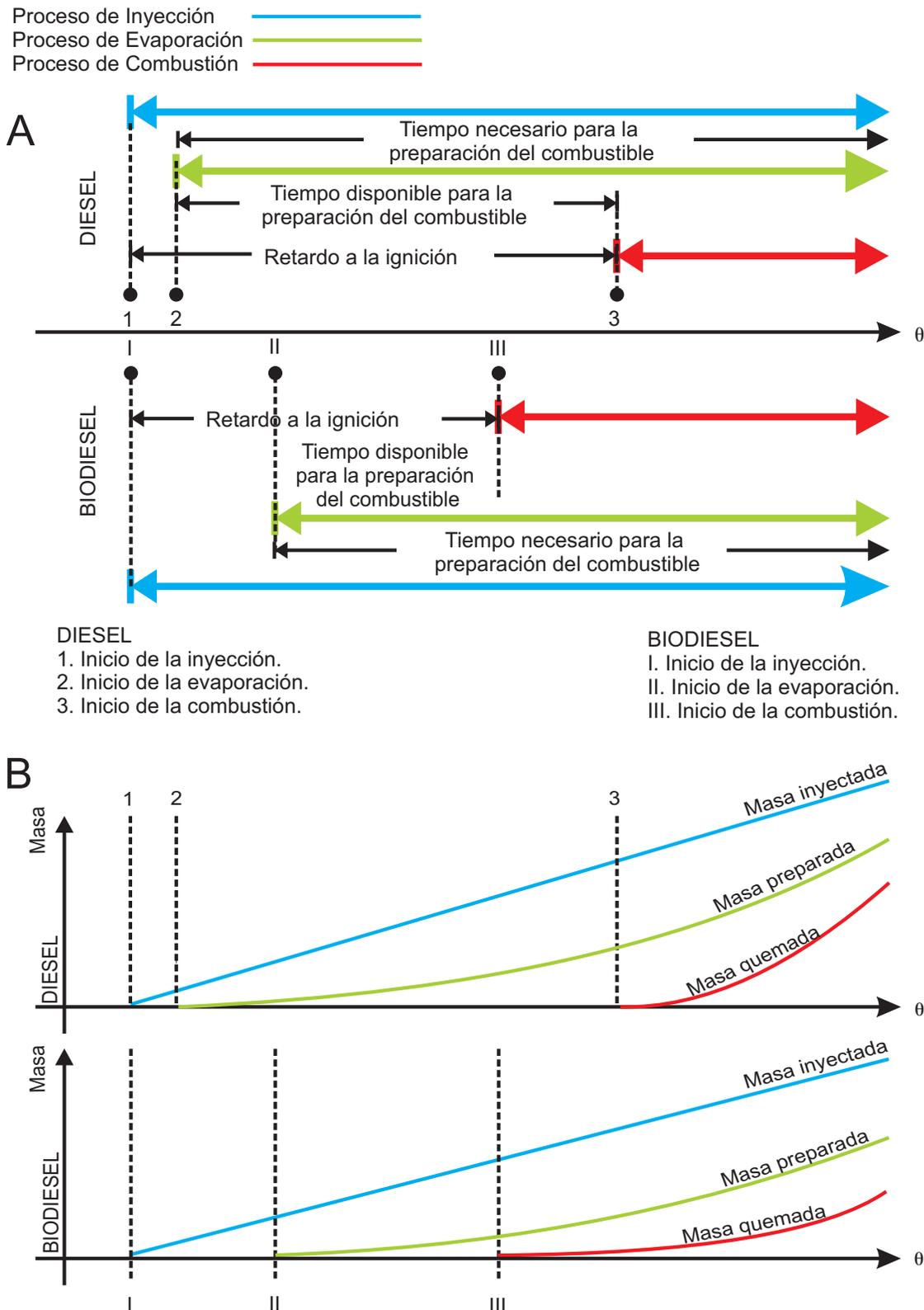
- **El consumo específico al freno se incrementa**, debido a una reducción en la cantidad de masa que se quema en la fase de combustión rápida. Con esta se espera una cantidad inferior de energía liberada en esta fase y el valor máximo de presión alcanzada será también menor.

Es importante mencionar que el consumo específico al freno es el parámetro más relevante para este caso. Ya que es una medida objetiva de la cantidad de energía consumida para producir una unidad de trabajo o en otros términos, es una medida de la relación costo/beneficio en el motor.

- **La generación de óxidos de nitrógeno en el proceso de combustión se incrementa**. Aunque exista un contenido bajo de aromáticos en el combustible y una fase de combustión rápida corta. Debido a una reducción en la relación  $A/F_{st}$  respecto al diesel, el combustible que se quema lo hace en condiciones más cercanas a esa relación estequiométrica ( $\phi \cong 1$ ). Con ello, la temperatura alcanzada en esta reacción con biodiesel será (en condiciones de densidad energética equivalente) más elevada respecto al diesel, lo cual implica un incremento en la formación de  $NO_x$  térmico (mecanismo de Zeldovich [56]).

El presente trabajo se centra en la mezcla B20, ya que ha sido objeto de un amplio estudio a nivel mundial. Hecho que permite referenciar adecuadamente los resultados obtenidos. Por otra parte, se hace énfasis en la viscosidad por ser la propiedad que presenta mayor variación, en el biodiesel con respecto al diesel petrolero. Adicionalmente, un hecho que sustenta la hipótesis planteada anteriormente es la publicación de un estudio reciente [34] el cual encontró que, entre las propiedades que tienen relación con la atomización del combustible,

la viscosidad es la propiedad que presenta la mayor influencia (89,1%), por encima de la tensión superficial (10,7%) y la densidad (0,2%) en el tamaño de las gotas atomizadas.

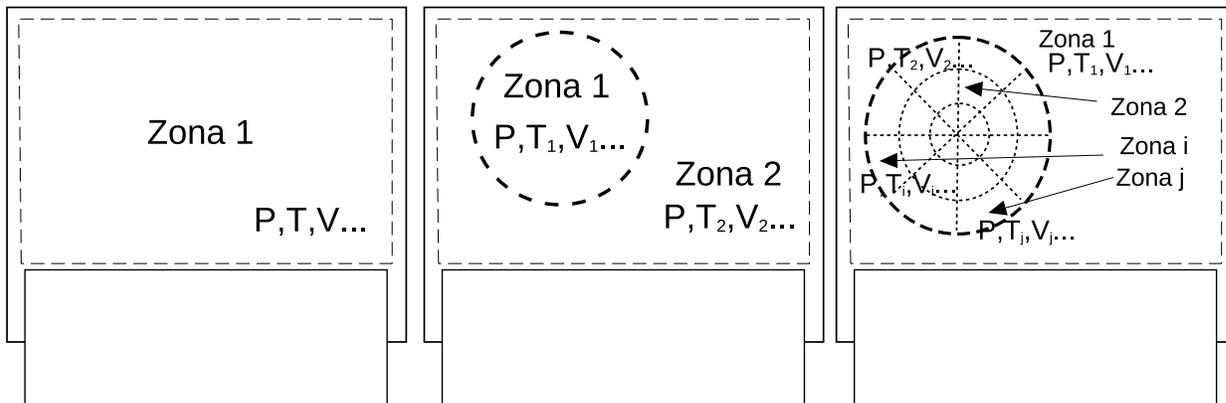


**Figura 2-10.:** Hipotesis: A. Interacción de los procesos que intervienen en la fase de retardo a la ignición. B. Avance de la masa inyectada, preparada y quemada en el tiempo.

### 3. Modelado del cilindro

La continúa búsqueda de herramientas que permitan describir y comprender eficientemente los diferentes procesos que tienen lugar en un MCI-EC ha motivado en gran medida la diversidad en los modelos utilizados en este campo. Por ello, es usual la combinación de diferentes enfoques buscando describir o profundizar en un aspecto particular del proceso citado.

Una primera clasificación de los modelos en MCI puede ser realizada teniendo en cuenta la dependencia de las propiedades del fluido con las dimensiones utilizadas ( $t, x_1, x_2, x_3$ ), de esta forma es posible agrupar los modelos en cero ( $f(t)$ ), uni ( $f(t, x_1)$ ) y multidimensionales ( $f(t, x_1, x_2)$  o  $f(t, x_1, x_2, x_3)$ ). En el primer grupo, cero dimensional, se puede encontrar una clasificación adicional que hace referencia a la división del volumen de control seleccionado. Esto es, acorde a la situación específica se realiza la división de este en 1 o más zonas, las cuales se diferencian en composición, volumen y temperatura; dando como resultado los modelos de una zona o dos zonas (Figura 3-1); o la generalización de este último en un modelo multizona (n-zonas).

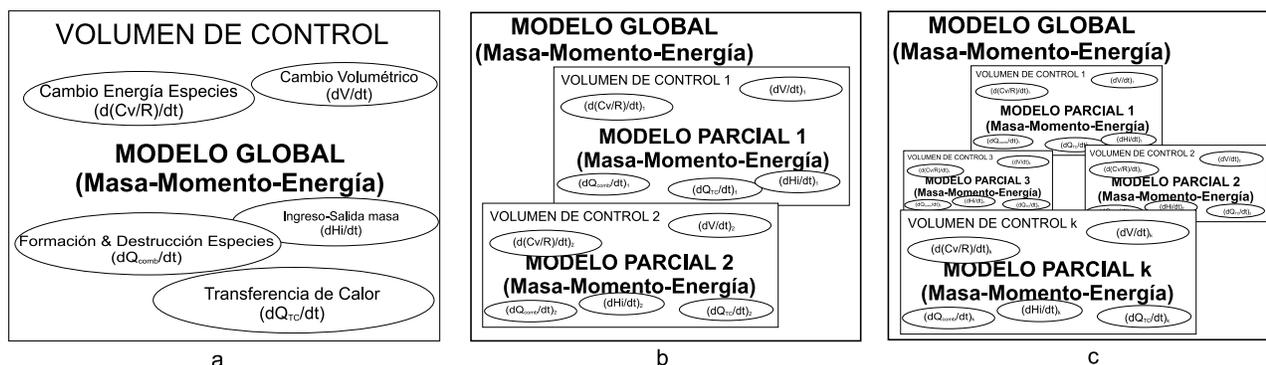


**Figura 3-1.:** División del volumen físico del cilindro en 1,2 o n-zonas.

Por otra parte, considerando la naturaleza del enfoque de la aproximación a la explicación de los diferentes procesos individuales que tienen lugar en el MCI, se genera una nueva clasificación. Así, la aparición de relaciones basadas en una manipulación estadística de los datos obtenidos experimentalmente ( $C_p(T), C_v(T), h(T), s(T)$ ), conforman el primer grupo de clasificación. Seguido a este se encuentran los modelos basados en análisis dimensional ( $C_d(Re), C_f$ ) o teorías particulares (Conducción-Fourier; Formación de NOx-Zeldovich,

Razón de reacción asociada a la turbulencia-Magnussen, Viscosidad-Newton, etc) que buscan describir los diferentes subprocesos considerando un enfoque más elemental que los anteriores. Finalmente, un último grupo lo conforman los modelos que apoyándose en soluciones particulares, desacoplamiento, linealización y/o normalización de las leyes fundamentales de conservación de masa, momento y energía describen los diferentes subprocesos (Ec. de Bernoulli, ley  $d^2$  de evaporación).

Debido a la presencia de múltiples y complejos fenómenos en el ciclo que cumple un MCI, en el modelado de este, se hace necesaria la utilización de modelos pertenecientes a los dos grupos previamente citados. Por ejemplo, en un enfoque cerodimensional subdividiéndolo en el número de volúmenes de control, es posible encontrar:



**Figura 3-2.:** Modelado del MCI bajo un enfoque cero dimensional de una zona (a); dos zonas (b) y k-zonas (c).

- 1 zona o global (Figura 3-2 a): La utilización de balances de masa, energía y momento para el cilindro como único volumen de control, acompañados de modelos de liberación de energía, cambio volumétrico, transferencia de calor, etc.
- 2 zonas (Figura 3-2 b): La utilización de balances de masa, energía y momento para dos volúmenes de control que buscan la descripción del comportamiento de la masa quemada (zona 1) y no quemada (zona 2), apoyándose como los anteriores en modelos de liberación de energía, cambio volumétrico, etc. En este grupo, se hace necesaria la utilización de un acoplamiento global para satisfacer los balances dentro del cilindro similar a los utilizados en modelos de una zona.
- n-zonas (Figura 3-2 c): La utilización de balances de masa, momento y energía para k volúmenes de control. En este caso, se busca mediante una descripción cualitativa (relación de equivalencia, masa quemada, posición, etc) obtener un nivel de detalle superior en los resultados del modelado. Al igual que en los 2 anteriores, se hace necesaria la utilización de modelos experimentales, semiexperimentales y particulares,

para describir los procesos particulares que tienen lugar dentro del MCI. De igual forma que el anterior, el acoplamiento de las  $k$  zonas debe satisfacer los diferentes balances globales dentro del cilindro.

Partiendo de los supuestos planteados en el capítulo anterior y para llevar a cabo la prueba de la hipótesis, resulta necesario el planteamiento de un modelo cero dimensional para el proceso de combustión en un MCI-EC. En el presente capítulo se realiza en primer lugar, el planteamiento del modelo del cilindro, continuando con una breve descripción de los diferentes fenómenos involucrados en el proceso en cuestión y los modelos que se utilizarán para incluirlos dentro del modelo del MCI-EC .

### 3.1. Modelos en motores de combustión interna

Como se menciona previamente, la descripción del proceso de combustión en un MCI-EC , implica la utilización de un balance sobre el volumen de control, de las diferentes propiedades del fluido y una serie de modelos que permitan describir los diferentes fenómenos que tienen lugar en el MCI. En el caso de un modelo de una zona, el volumen de control coincide con el volumen del cilindro y no se hace necesaria la utilización de un balance o condición adicional para la obtención de los resultados. En el caso del modelo de dos o más zonas, los balances se plantean sobre los diferentes volúmenes de control y la utilización de suposiciones y/o condiciones adicionales ( $V_{cil} = \sum V_k$ ;  $dQ_{TC-cil} = \sum dQ_{TC-k}$ ) permite la solución acoplada de cada uno de los balances planteados, haciendo que se cumpla de igual forma el balance global sobre el cilindro.

Para los dos casos citados, el planteamiento del balance parte de la descripción de las leyes de conservación de la física, las cuales son incluidas mediante la consideración del fluido de trabajo como un medio continuo y la extensión de las leyes citadas a este medio mediante el Teorema General del Transporte (Ec.3-1). En este, una propiedad extensiva del fluido de trabajo (masa, momento, energía)  $\Psi = M; \vec{J}; U$  se relaciona con su correspondiente propiedad intensiva dentro del volumen de control  $\psi = \rho; \vec{j}; u$  [66].

$$\frac{\delta \Psi}{\delta t} = \int \int \int_V \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla(\psi \cdot \vec{v}) \right) \partial V \quad (3-1)$$

La clasificación dimensional de los modelos presentada previamente, obedece al número de dimensiones consideradas en la Ec.3-1. Esto es, los modelos cero, uni y multidimensionales. En principio, la sustitución de las diferentes propiedades intensivas (masa, momento y energía) da origen a las ecuaciones de Navier-Stokes en su forma Integral. La suposición de volumen de control arbitrario da como consecuencia límites de la integral de igual forma arbitrarios, lo cual permite la eliminación de la integral sobre el volumen de control y con

esto, las expresiones toman su forma diferencial [67] (Ecs.3-2,3-3,3-4).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}\rho) = 0 \quad (3-2)$$

Con,  $\rho = \text{Densidad } [\frac{kg}{m^3}]$   
 $\vec{v} = \text{velocidad del fluido} [\frac{m}{s}]$

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla \cdot \bar{\bar{P}} + \rho \sum_{i=1}^n Y_i \vec{f}_i \quad (3-3)$$

Donde,  $\bar{\bar{P}} = [p + (\frac{2}{3}\mu - \kappa)(\nabla \cdot \vec{v})] I - \mu [(\nabla\vec{v}) + (\nabla\vec{v})^T]$   
 con,

$\kappa = 0$ ; Para fluidos newtonianos. (Hipótesis de Stokes [68]).

$\mu = \text{viscosidad dinámica [Pa s]}$ ;

$Y_i = \text{Fracción másica de la especie i. [adm]}$

$\vec{f}_i = \text{Fuerzas de cuerpo sobre la especie i. [N]}$

$$\frac{\partial \rho(e + \frac{v^2}{2})}{\partial t} + \nabla \cdot \rho(e + \frac{v^2}{2}) = -\nabla \cdot \vec{q} - \nabla \cdot (\vec{v} \cdot \bar{\bar{P}}) \quad (3-4)$$

Donde,

$e = \text{Energía interna específica (J/kg)}$

$q = \lambda \nabla T \text{ Vector de calor (Ley de Fourier) [J/kg]}$

La implementación de la forma diferencial abre paso a la discretización y la utilización de métodos numéricos en las Ecs.3-2,3-3,3-4 y con ello la aproximación a la solución. Sin embargo, en la práctica, la capacidad de los equipos computacionales resulta reducida para conseguir de manera eficiente una solución para los casos más generales (multidimensional). En el caso particular de estudio (Combustión en MCI-EC), la compleja naturaleza del fenómeno (flujo compresible, turbulento, reactivo y multifase), las expresiones que se aproximan a su descripción (ecuaciones diferenciales parciales, acopladas y no lineales) y la metodología generalmente iterativa para encontrar una solución; representan una complicación adicional a la anterior. Por ello, algunas simplificaciones a estas situaciones han sido con frecuencia abordadas en la literatura (ya sea en el método numérico empleado en la solución o en la descripción de un aspecto particular del proceso [69], Annand [70], etc) y con estas se ha conseguido, aproximarse a describir y predecir eficientemente el proceso de combustión en un MCI-EC sin una pérdida considerable de fidelidad en los resultados.

Sintetizando lo anterior, en el esquema general utilizado para el modelado del proceso de combustión en un MCI-EC se hace uso de las leyes físicas. Para ello, los balances de masa, momento, y energía, son la herramienta. El primero de estos, el balance de masa, permite mediante la ecuación de continuidad describir el flujo que entra, sale y se acumula en un volumen de control. El segundo, momento, acompañado del primero, determina el campo espacial de velocidad y aceleración. Finalmente, el balance de energía, permite determinar los cambios de presión y temperatura del sistema, apoyándose en los 2 anteriores. Sin embargo, en los casos más generales de modelamiento (multidimensionales) en los fluidos compresibles como el aire y los gases de combustión, las variaciones en presión y temperatura modifican la densidad y viscosidad, con ello la solución de la Ec.3-4 debe realimentar a las Ecs.3-2 y 3-3 hasta conseguir una solución que satisfaga simultáneamente las 5 ecuaciones en el dominio discretizado, restando sensiblemente la eficiencia computacional del modelo.

## 3.2. Modelo del volumen de control

En el presente estudio, la adopción de un modelo cero dimensional implica el caso más simple de la las Ecs.3-2,3-3,3-4. Esto es, a diferencia de los casos más generales, donde es notable la dependencia dimensional para  $\frac{\delta\Psi_{cil}}{\delta t} = \int \int \int \left( \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial(\psi \cdot v_i)}{\partial x_i} \right) \cdot dV = \int \int \int \frac{d\psi}{dt} \cdot dV$  donde,

$$d\psi = f(x_i, t)$$

Con lo cual se tiene que

$$\frac{\delta\Psi_{cil}}{\delta t} = \int \int \int f(x_i, t) dx_i$$

En este caso, la suposición particular aplicada que da origen a la formulación cero dimensional del modelo es,

$$d\psi = cte|_v$$

Con lo cual,

$$\frac{\delta\Psi_{cil}}{\delta t} = d\psi \cdot \int \int \int f(t)$$

Para el que,

$$f(t) = \frac{dV}{dt}$$

Entonces,

$$\frac{\delta\Psi_{cil}}{\delta t} = d\psi \cdot V(t)$$

En principio, la adopción de independencia dimensional da como resultado que el volumen de control utilizado para la discretización temporal no sea un volumen de control diferencial ( $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ ), sino por el contrario es un volumen finito correspondiente en el caso de una zona, al volumen del cilindro cuya magnitud depende del tiempo  $V = f(t)$ . De esta

forma, ya que los términos que hacen referencia a variaciones espaciales en las propiedades son despreciados el resultado de la Ec.3-4 es un balance de primera ley de la termodinámica para el cilindro, justificando así la denominación del modelo cero dimensional como modelo termodinámico.

### 3.2.1. Modelo termodinámico

La obtención de una forma familiar de un balance de primera ley en el cilindro partiendo de la Ec.3-4 se obtiene despreciando la energía cinética y considerando la Ec.3-2; de igual forma, las relaciones que definen la entalpia  $h = e + \frac{P}{\rho}$ , divergencia  $\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = \left(\frac{1}{V}\right) \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial t}\right)$  y la ecuación de gas ideal  $P = \rho \cdot R \cdot T$ , con lo cual se obtiene la Ec.3-5.

$$\begin{aligned}
 m \cdot \sum h_i^o \cdot \frac{\partial Y_i}{\partial t} + m \cdot v_i \cdot \frac{\partial (\sum Y_i \cdot [h_i^o + \int c_{pi} \cdot dT])}{\partial x_i} - V \cdot \left( v_i \cdot \frac{\partial P}{\partial x_i} \right) + \frac{\sum (c_{vi} \cdot Y_i)}{\sum (R_i \cdot Y_i)} \cdot V \cdot \frac{\partial P}{\partial t} + \\
 \frac{\sum (c_{pi} \cdot Y_i)}{\sum (R_i \cdot Y_i)} \cdot P \cdot \frac{\partial V}{\partial t} + P \cdot V \cdot \left( \frac{\partial \left[ \frac{\sum c_{vi} \cdot Y_i}{\sum R_i \cdot Y_i} + 1 \right]}{\partial t} \right) - \sum (Y_i \cdot c_{pi}) \cdot T \cdot \frac{\partial m}{\partial t} \\
 = -\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial x_i} \cdot V - \left( -\mu \cdot \left( \frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \frac{2}{3} \mu \cdot \delta_{ij} \cdot \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \cdot \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad [J] \quad (3-5)
 \end{aligned}$$

Posterior al procedimiento relacionado en el párrafo anterior y aplicando a la Ec.3-5 la suposición citada previamente respecto al modelo cero dimensional  $d\psi|_v = cte$ , se encuentra que los términos segundo y tercero del lado izquierdo, que involucran la transferencia de energía asociada a la transferencia de masa y el gradiente de presión; así como el primer y segundo del lado derecho, que representan respectivamente la transferencia de energía asociada al fenómeno de conducción, radiación y difusión de masa; y el término de disipación de energía cinética, son despreciados debido a su dependencia directa con las dimensiones consideradas. Sin embargo, debido a la relevancia dentro del balance de los términos que describen la transferencia de calor, es necesario incluir un término que permita considerar el efecto promedio de tal fenómeno ( $\frac{\partial Q_{TC}}{\partial t}$ ) considerando los 3 mecanismos conocidos del mismo (Conducción, convección y radiación).

Finalmente, haciendo uso de las propiedades del fluido de trabajo promediadas sobre el volumen de control ( $\bar{C}v = \sum(Cv_i \cdot Y_i)$ ;  $\bar{C}p = \sum(Cp_i \cdot Y_i)$ ;  $\bar{R} = \sum(R_i \cdot Y_i)$ ;  $\bar{h} = \sum(h_i \cdot Y_i)$ ), se consigue una expresión equivalente a la obtenida con un balance de primera ley de la termodinámica (Ec.3-6). En esta, los términos incluidos corresponden respectivamente al calor liberado por la destrucción y formación de nuevas especies (combustión), trabajo asociado al flujo, trabajo volumétrico, cambio de energía de las especies dentro del volumen

de control, energía debida al ingreso y salida de flujos del mismo y el calor transferido al exterior.

$$\frac{\partial Q_{comb}}{\partial t} + \frac{c_v}{R} \cdot V \cdot \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{c_p}{R} \cdot P \cdot \frac{\partial V}{\partial t} + P \cdot V \cdot \left( \frac{\partial \left[ \frac{c_v}{R} + 1 \right]}{\partial t} \right) - \sum h_i \cdot \frac{\partial m_i}{\partial t} - \frac{\partial Q_{TC}}{\partial t} = 0 \quad [W] \quad (3-6)$$

Como se menciona en la sección previa, la utilización de la Ec.3-6 sobre un volúmen de control equivalente al cilindro, da origen a un modelo cero dimensional de una zona. La utilización de dicha ecuación sobre dos volúmenes de control (masa quemada y no quemada) acoplados con condiciones particulares como las citadas en la sección anterior, da como resultado un modelo de 2 zonas. Finalmente, la generalización de este último (Ec.3-6) a un número arbitrario de zonas (Ec.3-7) que se definen basándose en una característica particular da como resultado el modelo multizona (Ec.3-8).

$$\begin{aligned} & \left( \frac{dQ_{comb-k}}{dt} \right) + \left( \frac{Cv_k}{R_k} \cdot V_k \cdot \frac{dP}{dt} \right) + \left( \frac{Cp_k}{R_k} \cdot P \cdot \frac{dV_k}{dt} \right) \\ & + \left( P \cdot V_k \cdot \left[ \frac{d \left( \frac{Cv_k}{R_k} + 1 \right)}{dt} \right] \right) - \sum_{j=1}^{flujos} \left( h_{kj} \cdot \frac{dm_{kj}}{dt} \right) - \frac{dQ_{TC-k}}{dt} = 0 \quad [W] \quad (3-7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^{zonas} \left\{ \left( \frac{dQ_{comb-k}}{dt} \right) + \left( \frac{Cv_k}{R_k} \cdot V_k \cdot \frac{dP}{dt} \right) + \left( \frac{Cp_k}{R_k} \cdot P \cdot \frac{dV_k}{dt} \right) \right. \\ & \left. + \left( P \cdot V_k \cdot \left[ \frac{d \left( \frac{Cv_k}{R_k} + 1 \right)}{dt} \right] \right) - \sum_{j=1}^{flujos} \left( h_{kj} \cdot \frac{dm_{kj}}{dt} \right) - \frac{dQ_{TC-k}}{dt} \right\} = 0 \quad [W] \quad (3-8) \end{aligned}$$

En la expresión citada previamente (Ec.3-6), así como el balance de momento (Ec.3-3), se observa que las consecuencias más relevantes de la suposición del modelo cero dimensional ( $\frac{\partial \psi}{\partial x_i} = 0$ ), son:

■ Ausencia de un gradiente espacial de:

1. Densidad ( $\frac{\partial \rho}{\partial x_i} = 0$ ).
2. Concentración ( $\frac{\partial Y_i}{\partial x_i} = 0$ ).
3. Velocidad ( $\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0$ ).
4. Temperatura ( $\frac{\partial T}{\partial x_i} = 0$ ).
5. Presión ( $\frac{\partial P}{\partial x_i} = 0$ ).

- Como consecuencia de la ausencia de un gradiente espacial de presión al interior del cilindro ( $\frac{\partial P}{\partial x_i} = 0$ ), amparada en la aproximación de un bajo número de Mach ( $M = \frac{v_{local}}{v_{sonido}}$ ) (AnexoA) y en este caso en ausencia de fuerzas de cuerpo  $\rho \sum_{i=1}^n Y_i \vec{f}_i = 0$ , se observa que según la Ec.3-3 se obtiene la conservación del momento al interior del cilindro ( $\frac{\delta J}{\delta t} = 0$ ).
- A causa de la dependencia directa del campo de velocidad con la presión y las dimensiones utilizadas, dicho campo no puede ser modelado ni determinado.
- Debido a la existencia y a la relevancia de los fenómenos altamente dependientes del campo de velocidad y dimensiones, se hace necesaria la utilización de modelos experimentales para incluir el efecto promedio de procesos como la transferencia de calor [70, 71, 72].

### 3.2.2. Consideraciones

Adicional a las consecuencias mencionadas de la suposición cero dimensional, es necesario resaltar las consideraciones adicionales dentro del modelo particular del cilindro, planteado en el presente estudio. *Las condiciones adicionales consecuencia del modelo de liberación de calor serán aclaradas en el siguiente capítulo.*

- El chorro de inyección es dividido en un número determinado de zonas, adoptando el enfoque multizona. En este, cualquier fenómeno a nivel global puede ser descrito mediante la suma o el promedio de los efectos zonales (Ec.3-8).
- Se considera únicamente el intervalo de tiempo en el cual las válvulas se encuentran cerradas (compresión-expansión). Con ello, no se modela admisión ni escape.
- No se considera el efecto de fenómenos como alojamiento de masa en las cavidades (crevices) o fugas por los anillos (Blowby).
- La masa de combustible, aire y productos puede ser considerada dentro del balance global como una mezcla uniforme ( $\frac{\partial Y_i}{\partial x_i} = 0$ ).
- Se considera el caso de carga total para el motor.  $(P_{cilindro}/A_{piston}) \cdot r_{cig} = T_{freno}$
- La energía cinética del chorro de inyección es despreciable dentro del balance de energía.  $(\frac{1}{2}m_{comb} \cdot v^2 = 0)$
- El proceso de combustión es considerado para el balance global del cilindro como un proceso de adición de calor.

### 3.3. Etapas, procesos y fenómenos del proceso de combustión en MCI-EC

En lo restante del presente capítulo, se realiza una breve descripción de los diferentes fenómenos vinculados a los procesos de compresión-combustión-expansión dentro del MCI-EC y los submodelos utilizados para considerar estos. Debido al enfoque multizona y la ausencia de modelos que consideren fenómenos como la transferencia de calor a nivel de zona, se describe a continuación el enfoque global (1 zona), considerando que la suma o el promedio de los efectos zonales describen el efecto global. El modelo utilizado para describir la dinámica de la liberación de calor será el objeto de estudio del siguiente capítulo.

#### 3.3.1. Compresión

En la etapa de compresión, el pistón se desplaza acercándose a la culata del MCI teniendo las valvulas cerradas. El inicio y final de esta se encuentra acotado entre el PMS y el PMI. Durante este tiempo, se pueden identificar dos o más procesos. Esto es, si se considera que coexisten los procesos de inyección y combustión.

Teniendo en cuenta los diferentes procesos que tienen lugar en la etapa de compresión y por simplicidad, descartando la posibilidad de que exista combustión durante la etapa de compresión, resulta conveniente subdividirla acorde a la existencia o no de inyección. De esta manera, separando estos dos intervalos de tiempo, se identifican las siguientes subetapas:

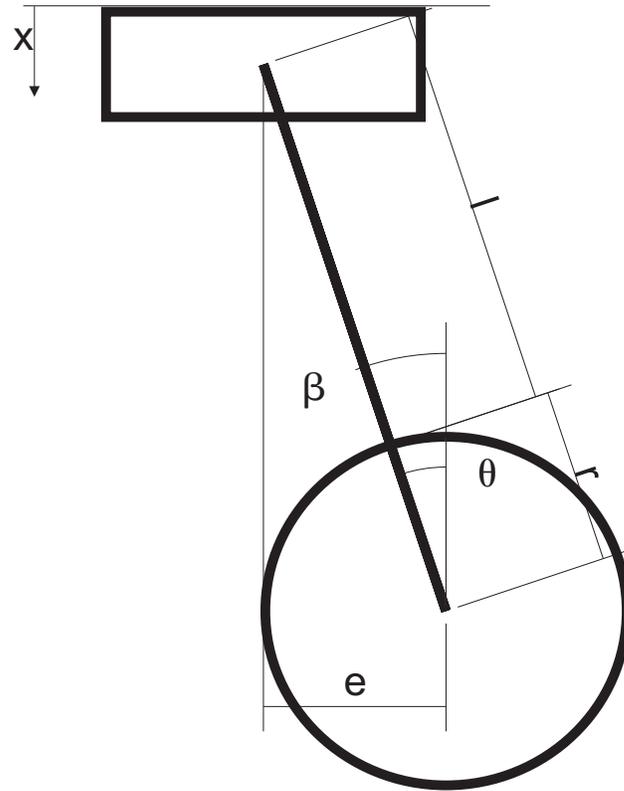
**Compresión en ausencia de inyección:** Durante este intervalo de tiempo, debido al movimiento del pistón se genera una reducción en el volumen del cilindro, con ello se produce un incremento de la presión y la temperatura al interior del mismo, dando lugar a la transferencia de calor entre las paredes y el aire fresco. En la práctica, la velocidad del proceso y el valor del gradiente de temperatura permiten que esta etapa pueda ser modelada acorde a un proceso politrópico [26] (Ec.3-9). En esta primera etapa, se considera la existencia únicamente de la zona de aire, por ello, el modelo no presenta complicaciones adicionales.

- *Proceso politrópico*

Considerando la Ec.3-6 en ausencia de combustión, ingreso de masa y TC, los términos  $\partial q_{comb} = \partial(\frac{c_v}{R}) = \sum h_i \cdot dm_i = \partial q_{TC} = 0$ . Dicha simplificación permite que la Ec.3-6 pueda ser resuelta analíticamente, dando como resultado la Ec.3-9.

$$P = P_0 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-\gamma} \quad [Pa] \quad (3-9)$$

Considerando que para el modelo planteado la variable independiente debe ser únicamente el tiempo, resulta necesario conocer la evolución del valor del volumen en función



**Figura 3-3.:** Variables cinemáticas del mecanismo biela-manivela en un MCI.

del tiempo. Lo anterior se logra planteando y resolviendo la cinemática del movimiento.

- *Cinemática del movimiento del pistón ( $V, dV$ )*

En el MCI, se convierte el desplazamiento lineal del pistón dentro del cilindro, en un desplazamiento angular del cigüeñal. En este movimiento oscilatorio, el pistón se encuentra restringido entre el punto muerto superior (PMS) y el punto muerto inferior (PMI). En los cuales los valores de la velocidad son nulos y la aceleración es máxima. La descripción de esta transformación de movimiento lineal (pistón) en rotacional (cigüeñal) se describe a continuación. Partiendo del caso más general, donde se considera excentricidad entre el eje del pistón y el eje del cigüeñal, las variables cinemáticas a considerar son (Figura 3-3): longitud de la biela ( $l$ ), radio del cigüeñal ( $r$ ), ángulo del cigüeñal ( $\theta$ ), carrera ( $x$ ). Adicionalmente, para este caso general es necesario considerar excentricidad ( $e$ ) y ángulo de la biela ( $\beta$ ).

$$x(\theta) = \sqrt{(r+l)^2 - e^2} - \sqrt{l^2 - (e - r \cdot \text{sen}(\beta - \theta))^2} - r \cdot \text{cos}(\theta - \beta) \quad [m] \quad (3-10)$$

Donde,

$$\text{sen}\beta = \frac{e}{r+1}$$

Al derivar la Ec.3-10 con respecto a  $\theta$ , se obtiene la velocidad instantánea del piston (Ec.3-11).

$$\frac{dx}{d\theta} = \vec{U}_{piston} = r \cdot \text{sen}(\theta - \beta) + \frac{r[e + r \cdot \text{sen}(\theta - \beta)] \cdot \cos(\theta - \beta)}{\sqrt{l^2 - [e + r \cdot \text{sen}(\theta - \beta)]^2}} \quad \left[ \frac{m}{rad} \right] \quad (3-11)$$

Para obtener el volumen del cilindro en función del ángulo del cigüeñal.

$$V(\theta) = V_{muerto} + D^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot x(\theta) \quad [m^3] \quad (3-12)$$

Finalmente, la variación del volumen del cilindro viene dada por.

$$\frac{dV}{d\theta} = D^2 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot \frac{dx}{d\theta} \quad [m^3] \quad (3-13)$$

Expresiones mediante las cuales, es posible determinar la posición ( $x$ ) y velocidad del pistón ( $\frac{dx}{d\theta}$ ); volumen ( $V$ ) y cambio de volumen ( $\frac{dV}{d\theta}$ ); teniendo en cuenta el cambio de variable  $d\theta = \omega \cdot dt$ . Permitiendo así, acompañadas de la Ec.3-9 y la ley de los gases ideales, conocer las condiciones de presión y temperatura para la mezcla fresca para un tiempo dado.

**Compresión en presencia de inyección:** Continuando con el desarrollo de los procesos que tienen lugar en la etapa de compresión, previo al fenómeno de combustión, se produce el ingreso de la masa de combustible. Situación característica en los MCI-ID o IDI. Hecho que, por simplicidad, considerando que el ingreso de masa no produce un desplazamiento significativo de volumen y de esta forma una alteración importante en las condiciones de presión, temperatura y volumen del aire fresco al interior del cilindro, puede ser despreciado. Ya que, la perturbación asociada al ingreso de masa resulta mínima para el sistema termodinámico hasta el momento en el que se produce la evaporación de esta [26]. Con lo anterior, la Ec.3-9 continua siendo válida para esta parte de la etapa de compresión.

Con ayuda de las expresiones presentadas previamente (Ecs. 3-9,3-10, 3-11, 3-12, 3-13) las condiciones bajo las cuales se encuentra el aire al interior del cilindro pueden ser determinadas para la etapa completa de compresión.

Es importante resaltar que, el proceso de inyección se produce por y lleva asociados otros fenómenos importantes. Los cuales, buscando no desviar el objetivo de este capítulo, son pospuestos para ser presentados en detalle en el capítulo siguiente.

### 3.3.2. Expansión

En esta etapa, el pistón se desplaza en sentido contrario a la etapa de compresión partiendo del PMS hacia el PMI. Tiempo durante el cual, los procesos asociados involucran mayor complejidad que en la etapa previa. Teniendo en cuenta esto, nuevamente resulta conveniente determinar instantes de tiempo en los cuales comienzan o terminan los fenómenos involucrados. Buscando de esta manera, no solamente describir el proceso de combustión sino también contextualizar el modelo planteado.

**Expansión en presencia de inyección:** Como punto de partida, es importante resaltar que la selección de la existencia o no de inyección resulta cuestionable pero carece de importancia práctica para la etapa de expansión. Ya que, en este caso el objetivo es considerar los diferentes procesos que tiene lugar en las dos etapas mencionadas (compresión-expansión), sin definir los instantes exactos en los cuales ocurren estos. Por ello, para este caso, se podría considerar un retraso corto al tiempo de inyección. Es decir, el combustible se comienza a inyectar cuando el pistón se encuentra muy cerca al punto muerto superior, dando como resultado que se pueda presentar inyección en la etapa de expansión.

Retomando lo anterior, donde se justificó la eliminación del término correspondiente al ingreso de masa de combustible del balance de Energía ( $\sum h_i \cdot dm_i$ ), la descripción del proceso continua siendo igual. Manteniéndose válidas las expresiones enunciadas previamente. Es importante resaltar que en el caso real, en este instante, ya se pueden presentar uno o varios focos de inflamación. Sin embargo, para este caso particular planteado, donde no se considera la existencia de gradientes de presión al interior de la CC, la presión puede ser determinada mediante la Ec.3-9. La descripción de la combustión usando este tipo de modelo no tiene la capacidad de describir este fenómeno. Ya que, en principio, se considera que la combustión tiene inicio cuando se alcanza una desviación significativa en la curva de presión al interior del cilindro comparándola con la curva de presión para un proceso politrópico, hecho que define el final del tiempo de retardo a la inflamación.

**Expansión en presencia de combustión:** Partiendo de lo expuesto previamente, el instante que define el punto inicial de esta sub-etapa es el final del retardo a la inflamación. Durante este intervalo, el movimiento del pistón en la dirección del PMI acompañado de la reacción exotérmica de oxidación del combustible, permiten la obtención de trabajo en la etapa de

expansión. Ya que esta, produce un incremento de la energía de la mezcla de aire, vapor y productos de combustión al interior del cilindro. En los modelos cero dimensionales, el proceso de combustión se modela haciendo uso de relaciones experimentales que permiten una descripción de este.

- *Liberación de energía ( $dQ_{comb}$ )*

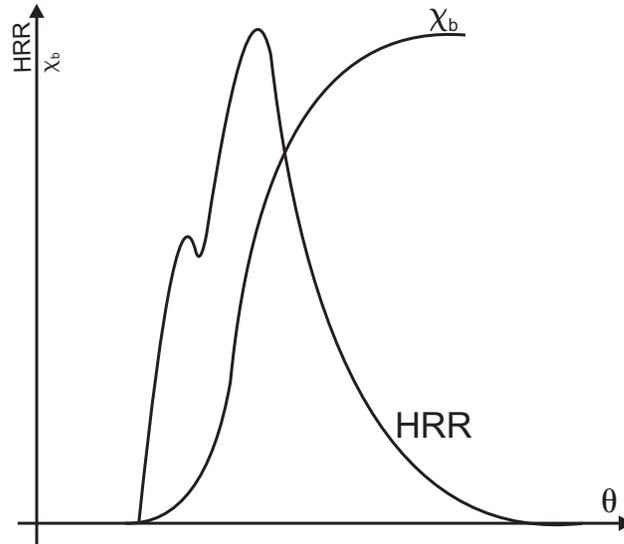
En el modelamiento de MCI-EC el fenómeno de combustión puede tomarse como el proceso mediante el cual se transfiere la energía almacenada en el combustible líquido a la mezcla de aire fresco, vapor y productos de combustión. Considerando los diferentes fenómenos involucrados, es posible encontrar aproximaciones que consiguen describirlo en niveles de detalle de igual forma variados. Esto es, si se consideran los diferentes modelos utilizados (cero y multidimensionales) el rango se extiende desde las relaciones planteadas con sustento netamente experimental (Polígono-hipérbola [26]) hasta relaciones que involucran los diferentes procesos que tienen lugar en el fenómeno citado (Ecuación del chorro de Williams [73]). A un nivel más cercano al modelo planteado, este último límite se extendería hasta los modelos multizona o cuasidimensionales para describir la liberación de energía ([8, 9]).

Considerando el enfoque cero dimensional utilizado en el presente estudio, lo que busca el modelo de liberación de energía es la cuantificación de la energía proveniente del combustible a ser aportada al balance global, así como la velocidad con la que se presenta este aporte. Siendo utilizadas para esto, las curvas de razón de liberación de energía ( $\frac{dQ_{comb}}{dt}$ ; HRR, de su sigla en inglés) y la curva de fracción de masa quemada ( $\chi = \frac{m_{comb-q}}{m_{comb-iny}}$ ), donde  $m_{comb-q}$  y  $m_{comb-iny}$  representan las masas de combustible quemada e inyectada, respectivamente. (Figura 3-4).

Debido a la gran dispersión que caracteriza los modelos de liberación de energía y la relevancia del proceso dentro del modelo global, resulta conveniente realizar una revisión más detallada en este aspecto en particular. Sin embargo, buscando un desarrollo estructurado de la temática de interés, dicha revisión se pospone para el siguiente capítulo.

- *Transferencia de Calor ( $dQ_{TC}$ )*

Adicional a los procesos descritos anteriormente, el incremento de energía aumenta el gradiente de temperatura entre el gas y las paredes, con lo cual la transferencia de calor se hace mayor. Por otra parte, la viscosidad del fluido, la oxidación del combustible, las explosiones y el movimiento del pistón, son fuente de turbulencia al interior del cilindro, con lo cual la transferencia de calor hacia las paredes se ve amplificada y la suposición de un proceso adiabático carece de sustento. Por ello se hace necesaria la vinculación de un modelo para determinar e incluir el efecto de la turbulencia sobre la transferencia de calor y de esta última sobre el balance global del cilindro (Ec.3-6).



**Figura 3-4.:** Curva de la razón de liberación de energía (HRR) y de la fracción de masa quemada ( $\chi_b$ ).

La transferencia de calor (TC) es un fenómeno que se presenta por la existencia de gradientes de temperatura ( $\nabla T$ ). En los MCI, tiene lugar un proceso de TC entre los gases y las superficies en contacto con estos, posteriormente esta energía atraviesa las paredes y es transferida al líquido refrigerante [74]. Para el modelo planteado, solo se tendrá en cuenta el primero de estos procesos, La TC entre los gases y las superficies internas del motor que tienen contacto con estos (paredes del cilindro, culata y cabeza del pistón). Al igual que para la razón de liberación de energía, han sido planteados diferentes modelos que permiten determinar la magnitud de la transferencia de calor entre los gases y los componentes involucrados del motor.

Si bien, el balance de energía dentro del cilindro, permite la obtención mediante modelos o teorías particulares (Fourier, Dufour, etc) de los diferentes términos involucrados en el fenómeno citado, la dependencia directa con las dimensiones genera en este caso una problemática adicional. Por ello, en los modelos cero dimensionales, la utilización de modelos globales, en los cuales se considera el efecto promedio de los diferentes mecanismos de TC, ha sido de amplia aplicación.

Acorde a la clasificación presentada por Borman y Nishiwaki [74], los modelos utilizados para la TC en MCI se pueden dividir en:

1. Globales (Una zona).
2. Zonal (Dos o más zonas).
3. Unidimensionales .

## 4. Multidimensionales.

La clasificación realizada, obedece al igual que la presentada en la primera sección del presente capítulo, a las dimensiones utilizadas y a la naturaleza de la aproximación. Los modelos incluidos en los numerales 1 y 2, obedecen a modelos cero dimensionales, para los cuales se realiza una breve subdivisión considerando la existencia de uno (una zona) o más (dos o más zonas) volúmenes de control para todo el sistema termodinámico. Mientras que para los numerales 3 y 4 se consideran las dimensiones utilizadas en la formulación del modelo. Para el caso de interés en el presente documento, se busca la utilización de un modelo cero dimensional obtenido mediante una relación semi-empírica. Este tipo de planteamiento se obtiene de la formulación de un balance de energía en el cilindro, para el cual, mediante el análisis dimensional es posible plantear una relación entre las diferentes variables involucradas. El resultado de esto, es la relación descrita por la Ec.3-14, relación que ha sido utilizada por diferentes autores (Nusselt, Annand, Eichelberg citados por Woschni [71]; y Borman y Nashawaki [74]) en pro de obtener correlaciones que permitan la obtención del coeficiente de transferencia de calor para ser utilizado en la Ec.3-15.

$$Nu = a \cdot Re^z \quad [Adm] \quad (3-14)$$

Donde,

a,z=Constantes que varían acorde a las suposiciones particulares y los resultados obtenidos por el autor del modelo propuesto.  $Nu, Re$  números adimensionales de Nusselt y Reynolds.

$$\partial Q_{tc} = \alpha(t) \cdot A(t) \cdot (T_{pared} - T_{gases}(t)) \quad [J] \quad (3-15)$$

Donde,

$\alpha$  = Coeficiente de transferencia de calor por convección.  $\left[ \frac{W}{m^2 K} \right]$

$A$  = Área de TC.  $[m^2]$

$T_{pared}$  = Temperatura de las paredes del cilindro.  $[K]$

$T_{gases}$  = Temperatura media de los gases al interior del cilindro.  $[K]$

Partiendo de la expresión planteada previamente (3-14), aplicando las relaciones que definen los números adimensionales ( $Re = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu}$ ;  $Nu = \frac{\alpha \cdot D}{\lambda}$ ), así como las leyes de semejanza que dan origen a la suposición de dependencia de las propiedades de transporte con la temperatura ( $\mu = \mu_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^y$ ;  $\lambda = \lambda_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^x$ ) [26], el resultado del planteamiento es:

$$\alpha(t) = \left( \frac{a \cdot \lambda_0 \cdot T_0^{my-x}}{\mu_0^m \cdot R^m} \right) \cdot D^{m-1} \cdot P^m \cdot U^m \cdot T^{x-m \cdot (y+1)} \quad \left[ \frac{W}{K \cdot m^2} \right] \quad (3-16)$$

Donde,

$a$  = Constante experimental.

$R = \frac{M_{mol}}{R}$  Constante del gas.  $\left[ \frac{J}{kgK} \right]$

$D$  = Dimensión característica (Diámetro pistón).  $[m]$

$P$  = Presión instantánea en el cilindro.  $[Pa]$

$U$  = Velocidad característica.  $\left[ \frac{m}{s} \right]$

$T$  = Temperatura instantánea de los gases.  $[K]$

$T_0$  = Temperatura a condición de referencia.  $[K]$

$\mu_0$  = Viscosidad cinemática en condición de referencia  $T_0$ .  $\left[ \frac{m^2}{s^2} \right]$

Relación en la cual, las propiedades del sistema son tomadas en el instante determinado y las constantes involucradas son obtenidas experimentalmente. Adicional a la descripción de la TC, presentada por la Ec.3-15 y la Ec.3-16, el fenómeno de TC por radiación es considerado mediante la inclusión de un término adicional. Esta metodología, que se observa en [74] en los modelos presentados por Nusselt ( $h_{conv} + h_{radi}$ ) y Annand ( $dQ_{tot} = dQ_{conv} + dQ_{radi}$ ) es cuestionada y descartada en el modelo de Woschni [71]. Fundamentando esto, en la relevancia del fenómeno de combustión como fuente de turbulencia y en la imposibilidad de separar el efecto promedio de los dos mecanismos citados (Convección y radiación).

En principio, la forma del término convectivo (3-15) y la determinación del coeficiente de TC (3-16) es equivalente para la mayoría de los modelos citados [70, 71, 72, 74, 75]. Sin embargo, Woschni [71] sugiere la determinación de la velocidad característica del número de Reynolds con base en dos factores: La velocidad media del pistón ( $\bar{U} = 2 \cdot \omega \cdot s$ ) y la influencia de la combustión como fuente de modificación de la velocidad del fluido (Ec.3-17). Para ello, incluye en la determinación de la velocidad, la referencia del estado del fluido al inicio de la combustión ( $P_{ref}, T_{ref}, V_{ref}$ ) y las diferencias en las propiedades termodinámicas en presencia y ausencia de combustión ( $P_{cil} - P_0$ ).

$$U = C_1 \cdot c_m + C_2 \cdot \frac{V_{cil} \cdot T_{ref}}{P_{ref} \cdot V_{ref}} \cdot (P_{cil} - P_{mot}) \quad \left[ \frac{m}{s} \right] \quad (3-17)$$

En la aproximación global, el resultado de la Ec.3-16, Ec. 3-15 y la Ec.3-17 determina directamente el valor del término  $\frac{dQ_{TC}}{dt}$  en la Ec.3-6. La variación de esta metodología

en la aproximación zonal obedece a la división del término obtenido en la Ec.3-15 mediante la consideración de la masa, temperatura y calor específico de cada una de las zonas, según la aproximación descrita en las Ecs.3-18, 3-19 y 3-20, acorde a Rakopoulos [76].

$$T_{cil} = \frac{\sum_{k=1}^{zonas} (m_k \cdot Cv_k \cdot T_k)}{\sum_{k=1}^{zonas} (m_k \cdot Cv_k)} \quad (3-18)$$

$$T_{cil} \cdot m_{cil} \cdot Cv_{cil} \cdot \frac{dQ_{TC-cil}}{dt} = \frac{dq_{TC}}{dt} \cdot \sum_{k=1}^{zonas} (m_k \cdot T_k \cdot Cv_k) \quad [K] \quad (3-19)$$

$$\frac{dQ_{TC-k}}{dt} = m_k \cdot Cv_k \cdot T_k \cdot \frac{dq_{TC}}{dt} \quad [W] \quad (3-20)$$

- *Propiedades de la mezcla (R, dR, Cv, dCv, Cp, dCp)*

La necesidad de determinar las propiedades de la mezcla de aire fresco, vapor y productos de la combustión se hace evidente en esta etapa del proceso. Para ello, la utilización de relaciones experimentales que describan la razón de calores específicos son una primera aproximación que permite satisfacer dicha necesidad sin restar eficiencia al modelo. Entre estas, se distinguen las aproximaciones en función de la temperatura  $\gamma(T)$  [77, 78] y las aproximaciones en función de la fracción de masa quemada y la temperatura  $\gamma(T, \chi)$  [79].

Sin embargo, considerando que para la obtención de la energía liberada y la determinación de las propiedades de transporte de la mezcla de gas, es necesario conocer la composición de dicha mezcla, es posible obtener las diferentes propiedades ( $Cv, Cp, h$ ) mediante los modelos polinomiales de Burcat y Ruscic [80]. Esto es, determinar las propiedades individuales de cada especie en función de la temperatura y considerar el aporte individual de cada una dentro de la zona considerando la concentración dentro de la misma (Ecs.3-21,3-22,3-23).

$$\bar{C}_v = \sum C_{vi} \cdot Y_i \quad \left[ \frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (3-21)$$

$$\bar{C}_p = \sum C_{pi} \cdot Y_i \quad \left[ \frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (3-22)$$

$$\bar{h} = \sum h_i \cdot Y_i \quad \left[ \frac{J}{kg} \right] \quad (3-23)$$

Para la obtención de la composición de cada zona, es posible la utilización de dos aproximaciones. Esto es, una aproximación considerando:

- La cinética de la reacción.
- Un modelo de equilibrio químico.

En el primer caso, se puede recurrir a modelos de cinética de reacción que describen en detalle la composición temporal de la mezcla dentro de cada zona basándose en un esquema de reacción (global o detallado). Sin embargo, considerando que este enfoque se sale del alcance del presente trabajo, los tiempos característicos de la reacción química ( $10^{-8}$ ) y que los intervalos de tiempo que exige la suposición de presión uniforme son del orden de  $10^{-5}$ , es posible determinar la composición de la zona teniendo en cuenta una aproximación más simple que involucra una menor exigencia computacional como la que ofrece el segundo caso, el modelo de equilibrio.

- *Equilibrio químico* ( $dQ_{comb}, R, dR, Cv, dCv, Cp, dCp$ ) El modelo de equilibrio químico permite la obtención de la composición de los productos de combustión apoyándose en la primera y segunda ley de la termodinámica; y en la función de potencial químico de Gibbs  $\bar{g}_i$ . Esto es, se considera que existe equilibrio químico cuando el sistema termodinámico satisface la condición descrita por la Ec.3-24, donde  $\nu_i''$  y  $\nu_i'$  hacen referencia a los coeficientes estequiométricos de una reacción individual para productos y reactantes, respectivamente.

$$\sum_{i=1}^N \bar{g}_i(\nu_i'' - \nu_i') = 0 \quad (3-24)$$

La relación mostrada previamente (Ec.3-24) implica que en la condición de equilibrio químico del sistema, la suma de los potenciales químicos de los reactantes es igual a la suma de los potenciales químicos de todos los productos [66].

La obtención de la composición de la mezcla de gases basandose en este modelo se realiza mediante la utilización de las constantes de equilibrio químico, (las cuales se encuentran tabuladas o pueden ser determinadas mediante los polinómios de Burcat [80]), la relación descrita por la Ec.3-25 y la relación entre presión parcial y fracción molar de una especie en un sistema ( $\frac{N_i}{N_{total}} = \frac{P_i}{P_{total}}$ ).

$$\prod_{i=1}^N p_i^{(\nu_i'' - \nu_i')} = K_p(T) \quad (3-25)$$

Considerando los modelos planteados previamente (liberación de energía, transferencia de calor, calores específicos y cinemática del movimiento) acoplados al balance de energía (Ec.3-6),

es posible solucionar las condiciones de presión, volumen y temperatura para este intervalo de la etapa de expansión. El cual alcanza su fin cuando la llama se extingue por la oxidación total del combustible, por que alcanza los límites físicos de la CC o debido a que se consiguen relaciones  $A/F$  en las cuales dicha llama se hace insostenible.

**Expansión en ausencia de combustión:** Finalmente, al producirse la extinción de la llama, el contenido al interior del cilindro esta compuesto por los gases con alta energía. Por ello, la transferencia de calor y el movimiento del pistón continúan hasta el final de la etapa de expansión. Teniendo en cuenta esto, los términos que los representan en el balance (Ec.3-6), continúan siendo relevantes y el término  $(\partial Q_{comb})$  se hace cero.

## 4. Modelado de la liberación de calor

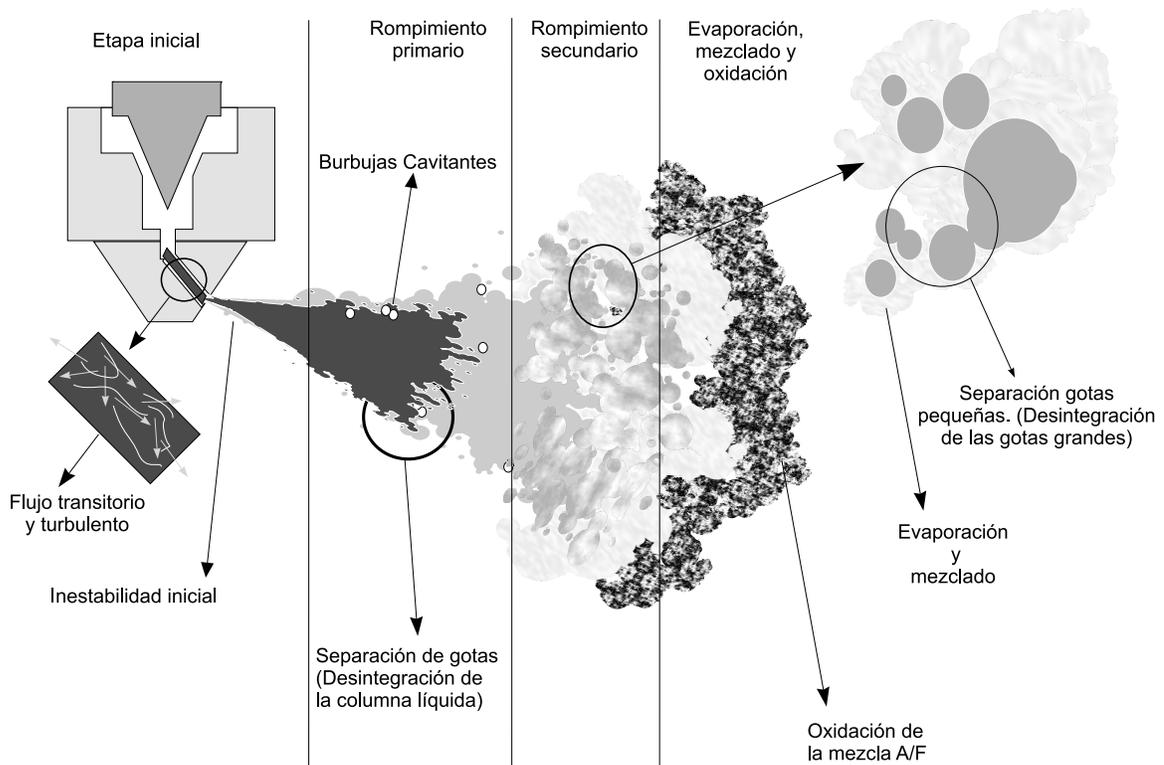
Como se presenta en el capítulo anterior, la liberación de calor (LC) puede ser tomada como el proceso que describe la transmisión de la energía almacenada en el combustible líquido a la mezcla de aire fresco, vapor y productos de combustión. En el presente documento, se asume que la atomización, mezclado y oxidación del combustible inyectado, son procesos que se encuentran íntimamente ligados, por ello para la explicación de la dinámica de la liberación de energía no se realiza diferenciación alguna respecto a si el fenómeno pertenece a un proceso u otro, y se asumen todos estos como vinculados a un único proceso global denominado LC.

Partiendo de lo anterior, para la descripción de la dinámica de la LC, se considera que el comienzo de esta se da dentro del sistema de inyección (Figura 4-1-Etapa inicial). Esto es, cuando la aguja del inyector se levanta y el combustible comienza a fluir dentro de la CC. En principio, la suposición realizada previamente, respecto a considerar este como el inicio de la LC puede no ser lo correcto. Sin embargo, la formación de la mezcla es el factor primario que controla el proceso de LC [81, 82, 83], por ello la geometría del inyector, la presión del sistema y las propiedades del fluido que influyen en los procesos subsiguientes [84, 85, 86, 87], deben ser tenidos en cuenta en dicha descripción.

La inestabilidad generada al interior de la tobera del inyector, debido a la naturaleza transitoria del flujo y la elevada magnitud de la velocidad, dan como resultado un flujo turbulento que influencia el rompimiento del chorro como condición inicial al ingreso en la CC [87, 88]. Posteriormente (Figura 4-1-Rompimiento primario), la columna de combustible líquido que ingresa, es perturbada debido a las interacciones aerodinámicas en la interfase gas-líquido y la inestabilidad inicial en el flujo es amplificada, dando como resultado la desintegración de la columna líquida en pequeñas gotas [84, 87, 89]. A continuación, las pequeñas gotas generadas por el rompimiento de la columna son perturbadas nuevamente por los efectos aerodinámicos, que acompañados de un incremento en la temperatura de las gotas debido a la TC entre el gas y estas, da lugar a una disminución en la tensión superficial [84], con lo cual la gota experimenta vibraciones de frecuencia elevada que dan como resultado un segundo rompimiento (Figura 4-1-Rompimiento secundario). En el cual, el número de Weber de la gota define el régimen en el que este se presenta, dando lugar a diferentes tipos de rompimiento que van haciéndose más caóticos a medida que el número de Weber se incrementa [84, 90].

Por otro lado (Figura 4-1-Evaporación,mezclado y oxidación), la elevada temperatura de los

gases al interior de la CC ocasionada por el proceso de compresión, sumada a la velocidad relativa de las gotas, dan lugar a la evaporación [91], el otro fenómeno importante en la etapa inicial de la LC [92]. Fenómeno para el cual, el tamaño de las gotas generadas en los diferentes regímenes de rompimiento produce áreas superficiales mayores o menores y con esto las razones de evaporación serán proporcionales a esta característica geométrica. Finalmente, del grado de turbulencia al interior de la CC, la temperatura y la concentración del combustible dependen las razones de LC y su eficiencia [93, 94, 95].



**Figura 4-1.:** Esquema de los diferentes procesos involucrados en la LC.

Considerando lo expuesto previamente, es posible observar la serie de eventos necesarios para que se produzca la oxidación del combustible en un MCI-EC y a su vez, se evidencia una de las causas que produce una amplia dispersión en su modelado. Esto es, los distintos niveles de detalle y/o prelación con que se describen los diferentes procesos, han permitido el plantamiento de una gran variedad de aproximaciones.

En el campo cero dimensional, para la descripción de la LC se observan 2 tendencias principales, las cuales se enfocan en la determinación de una expresión  $\frac{dm_{comb-a}}{dt}$  (que representa la velocidad de oxidación de la masa de combustible inyectado ( $m_{comb-iny}$ )), mediante:

- una aproximación discreta (AD):

$$\frac{dm_{comb-q}}{dt} = \frac{\Delta m_{comb-q}}{\Delta t}$$

- una aproximación continua (AC):

$$\frac{dm_{comb-q}}{dt} = m_{comb-iny} \cdot rr(P, T, etc)$$

Expresiones con las cuales, el término de interés  $\frac{\partial q_{comb}}{\partial t}$  en las Ecs. 3-6, 3-7 ó 3-8 se puede obtener mediante las Ecs.4-1 ó 4-2.

$$\frac{dq_{comb}}{dt} = LHV \cdot \frac{dm_{comb-q}}{dt} \quad (4-1)$$

Donde,

$LHV$  =Poder calorífico inferior del combustible [ $\frac{J}{kg}$ ]

$$\begin{aligned} \frac{dq_{comb}}{dt} = \sum \frac{dY_i}{dt} h_i^o = \frac{dm_r}{dt} \left( \sum Y_{i-p} h_i^o - \sum Y_{i-r} h_i^o \right) = \\ \phi \cdot (A/F)_{st} \cdot \frac{dm_{comb-q}}{dt} \cdot \left( \sum Y_{i-p} h_i^o - \sum Y_{i-r} h_i^o \right) \end{aligned} \quad (4-2)$$

Donde, los subindices r y p corresponden a reactantes y productos, respectivamente.

En el presente capítulo, se realiza una breve revisión de los enfoques utilizados para el modelamiento de la LC en el campo cero dimensional (descartando aquellos que obedecen a una aproximación netamente experimental). Posterior a esto, se presenta el modelo de LC a utilizar en el presente estudio.

## 4.1. Enfoques del modelado de la LC

Como se presenta en el capítulo anterior, el modelado cero dimensional se caracteriza por la independencia dimensional de las propiedades del fluido de trabajo dentro del volumen de control. Dentro de este grupo, es posible realizar una clasificación adicional si se considera un enfoque global o uno zonal. Entre estos dos, la diferencia principal radica en el primer caso, que el volumen de control seleccionado coincide con el volumen físico que contiene el fluido de trabajo; en el segundo caso, la división del volumen físico en dos o más volúmenes de control da lugar a la aproximación zonal.

### 4.1.1. Enfoque global

Dentro del enfoque global, se resaltan los modelos planteados por, Wiebe [69] citado por Oppenheim [96]; Whitehouse [97, 98] citado por Benson y Whitehouse [97] y Heywood [45]; y Chmela et al [99]. La razón de citar únicamente estos tres modelos obedece a las características individuales de cada uno, es decir, un enfoque en la cinética, uno en los procesos físicos (evaporación, mezclado, etc) y el tercero en una combinación de los anteriores.

En el primer caso (Wiebe), el planteamiento del modelo se fundamenta en una aproximación centrada en la descripción de la reacción, apoyada en el planteamiento de Semenov, el cual considera que la razón a la que las moléculas de reactantes  $R_r$  se consumen por la reacción química es directamente proporcional a la razón a la que los núcleos efectivos de la reacción  $R_{ef}$  son generados (Ec.4-3), los cuales son proporcionales a la concentración de reactantes [100, 96].

$$\frac{dR_r}{dt} = -n \cdot \frac{dR_{ef}}{dt} \quad (4-3)$$

Con esto, después de la normalización y aplicación de las condiciones iniciales, se consigue la expresión  $\chi$  que representa la razón entre la masa de combustible quemado y la masa de combustible inyectado (Ec.4-4). Expresión con la cual es posible determinar la Velocidad de Liberación de Calor (VLC), considerando que  $\frac{dQ_{comb}}{dt} = LHV \cdot m_{comb-iny} \cdot \frac{d\chi}{dt}$ .

$$\chi(t) = \frac{m_{comb-q}}{m_{comb-iny}} = 1 - \exp\left(-a \cdot \left[\frac{t-t_0}{t_1-t_0}\right]^b\right) \quad \left[\frac{1}{s}\right] \quad (4-4)$$

Donde,

los subíndices 0 y 1, representan el comienzo y final del proceso de combustión; y las constantes  $a$  y  $b$  son constantes experimentales obtenidas para ajustar a la expresión  $\chi$  al caso particular de estudio (geometrías, eficiencia, condiciones, etc).

Para el modelo planteado por Whitehouse [97, 98], la aproximación se sustenta considerando que la reacción depende de la disponibilidad de combustible preparado para la misma (Ec.4-5). La cual esta asociada a 3 factores principales. La masa inyectada ( $m_{comb-iny}$ ), la masa preparada para la oxidación ( $m_{comb-prep}$ ) y la disponibilidad de oxígeno representada por la presión parcial de este ( $P_{O_2}$ ) [97].

$$\frac{dm_{prem}}{dt} = k \cdot m_{comb-iny}^{1-x} \cdot m_{comb-prep}^x \cdot P_{O_2}^n \quad \left[\frac{kg}{s}\right] \quad (4-5)$$

Expresión en la cual al igual que en el caso anterior, se considera mediante las constantes ( $k, x, n$ ) los factores de ajuste para la geometría específica del motor, así como los demás

fenómenos adicionales.

Chmela et al [99], considerando que el proceso de LC en los MCI-EC se lleva a cabo en un entorno caracterizado por la elevada temperatura y la turbulencia, plantean un modelo que se apoya en dos principios para determinar la LC: Mezclado a nivel molecular y cinética de la reacción. La inclusión del primer principio se hace buscando tener en cuenta la asociación de la disipación de energía cinética y el mezclado de las diferentes especies a nivel molecular (Ec.4-7) [95, 101, 102, 103]. En la inclusión del segundo principio se utiliza una formulación basada en la expresión de Arrhenius (Ec.4-8), para tener en cuenta la energía necesaria para que se produzca la reacción. Dando como resultado una expresión que incluye los dos fenómenos (físico y químico), permitiendo conocer cuando la reacción es controlada por la cinética y cuando es controlada por el mezclado (Ec.4-9).

Acorde con Magnussen y Grimsmo [101], al considerar que la razón de reacción se encuentra asociada al mezclado a nivel molecular, se suponen velocidades muy elevadas de cinética química respecto a las de mezclado y se descarta la influencia de las primeras. De esta forma, la descripción de la velocidad de reacción ( $rr$ ) (Ec.4-6) se centra en la determinación del mezclado de los reactantes, el cual se obtiene mediante las variables que relacionan: la razón de transporte de reactantes ( $\dot{m}_{react}$ ); concentración de los reactantes mezclados ( $c_{react-i}$ ), oxígeno o combustible según sea el caso ( $\phi > 1$  ó  $\phi < 1$ ); concentración de las estructuras en las que se mezclan los reactantes ( $c_{est}$ ); concentración de las lugares donde se presentan dichas estructuras ( $c_{reg-est}$ ) y la fracción de estructuras que poseen energía suficiente para que se produzca la oxidación ( $c_{Temp}$ ).

$$rr = \dot{m}_{react} \cdot \frac{c_{Temp}}{1 - (c_{Temp} \cdot c_{est})} \cdot \frac{c_{react-i}}{c_{reg-est}} \quad (4-6)$$

En esta aproximación, la determinación de la velocidad de reacción (Ec.4-6), exige el cálculo de la razón de transporte de reactantes ( $\dot{m}_{react}$ ), expresión que se obtiene mediante la utilización de un modelo de generación y disipación de energía cinética ( $k - \epsilon$ ), el cual debido a su fuerte dependencia con las dimensiones, presenta una gran limitante para el caso de los modelos cero dimensionales.

Teniendo en cuenta lo anterior, Chmela et al [99] plantean la utilización de una expresión que considere principios similares (Ec.4-9), y que permita la obtención de la velocidad de reacción involucrando el mezclado (Ec.4-7) y la cantidad de energía (Ec.4-8) de los reactantes.

$$r_{turb} = C_{1m} \cdot C_{conc} \cdot \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{cil}}} \quad \left[ \frac{1}{s} \right] \quad (4-7)$$

Donde,

$C_{1m}$  = Constante experimental.

$C_{conc}$  = Concentración del reactante más escaso.  $\text{MIN}(O_2, \text{combustible})$ . [Adm]

$k$  = Energía cinética del fluido de trabajo al interior del cilindro. [k]

$V_{cil}$  = Volumen instantáneo del cilindro. [ $m^3$ ]

$$r_{cin} = C_{1k} \cdot C_{comb} \cdot C_{o_2} \cdot \exp\left(\frac{-C_{2k} \cdot T_{act}}{T}\right) \quad \left[\frac{1}{s}\right] \quad (4-8)$$

Donde,  $C_{1k}$  y  $C_{2k}$  son constantes experimentales obtenidas para el combustible particular.

$C_{comb}$  = Concentración de combustible. [Adm]

$C_{o_2}$  = Concentración de oxígeno. [Adm]

$T_{act}$  = Temperatura de activación (*Particular para cada combustible*). [K]

$T$  = Temperatura actual al interior del cilindro. [K]

$$r_{total} = \frac{1}{\frac{1}{r_{turb}} + \frac{1}{r_{cin}}} \quad \left[\frac{1}{s}\right] \quad (4-9)$$

Expresiones en las cuales es posible identificar que los principios aplicados en el modelo de Magnussen [101] para el caso multidimensional ( $(c_{reac-i}, c_{est}, c_{reg-est}); \dot{m}_{reac}; c_{Temp}$ ), se encuentran representados para el caso cero dimensional como  $((C_{conc}, C_{comb}, C_{o_2}), \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{cil}}}, \frac{T_{act}}{T})$ , respectivamente. Una particularidad importante de este modelo radica en la vinculación parcial de los efectos de la cinética de la reacción y la turbulencia, mediante una aproximación cero dimensional global.

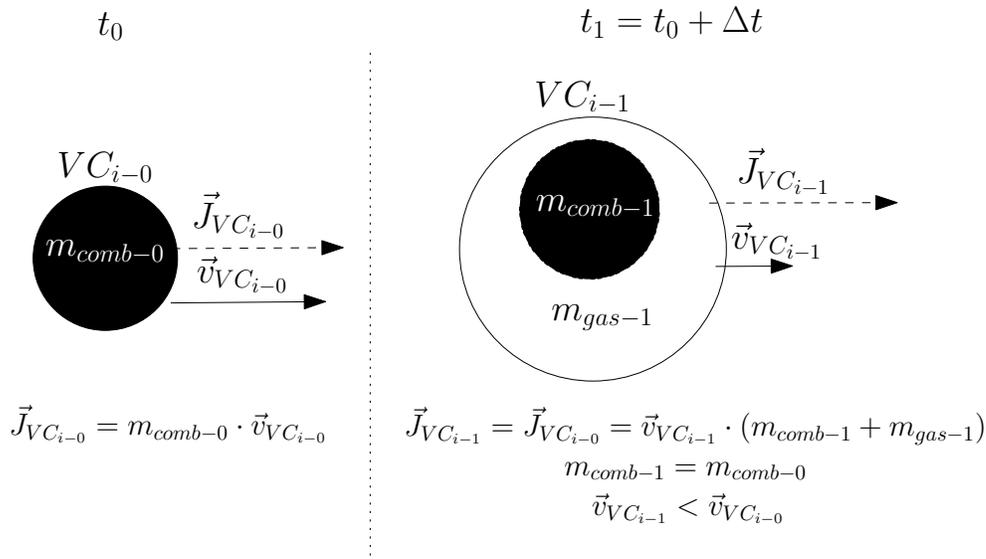
### 4.1.2. Enfoque zonal

En el enfoque zonal, donde se considera la existencia de más de un volumen de control dentro del volumen físico del cilindro, se encuentran dos aproximaciones principales. La primera, en la cual se supone un fenómeno de una sola fase descrito bajo un marco de referencia euleriano y la segunda en la que se considera un fenómeno multifase descrito bajo un marco de referencia lagrangiano. En la primera, se encuentran los modelos de chorro libre de gas y como caso especial, los modelos de dos zonas utilizados principalmente en el modelamiento de la LC en MCI-ECh. Mientras que en la segunda, se encuentra principalmente el modelo multizona planteado por Hiroyasu et al [9] y las modificaciones a este (Rakopoulos et al [7] y Assanis y Jung [104]). Cabe resaltar que una característica adicional de los modelos de zonas, es la suposición de la conservación del momento del chorro de inyección en ausencia de fuerzas externas de cuerpo y/o superficie (Ecs.4-10 y 4-11). Suposición, que implica que la disminución en la velocidad de cualquier volumen de control en el chorro de inyección es proporcional a la cantidad de gas que ingresa a estos (Ec.4-11, Figura 4-2). Con lo cual, es posible tener en cuenta parcialmente los efectos de algunos fenómenos físicos sobre la LC,

sin la necesidad de acoplar todos los balances de momento para los volúmenes de control utilizados; es decir, sin considerar interacciones entre estos.

$$\frac{\delta M}{\delta t} = \iiint \left( \frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \nabla\vec{v}\vec{v}\rho \right) \delta V = \iiint \left( -\nabla\bar{P} - \rho \sum_{i=1}^n Y_i \vec{f}_i \right) \delta V = 0 \quad (4-10)$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} = -\nabla\vec{v}\vec{v}\rho \quad (4-11)$$



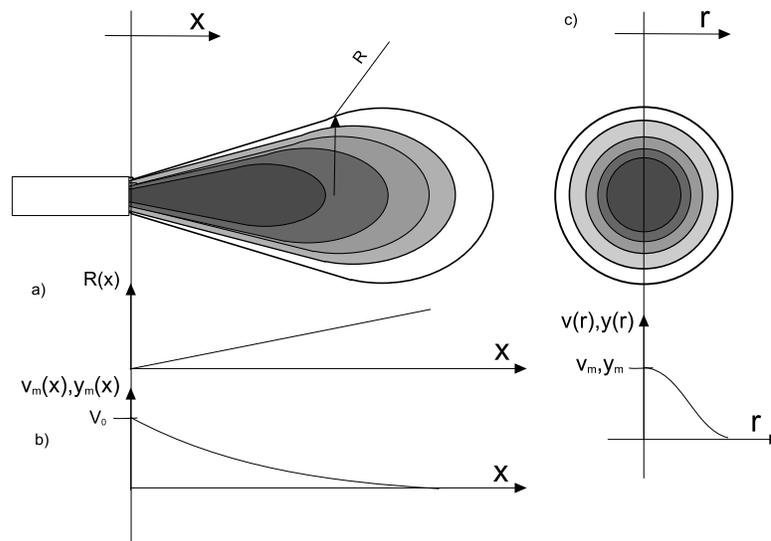
**Figura 4-2.:** Esquema de la suposición de conservación de momento para un VC arbitrario.

### Multizona - 1 fase

Como se menciona en el capítulo anterior, la utilización de dos volúmenes de control que conforman el volumen físico del cilindro, da origen al modelo de dos zonas. Este modelo, de mayor utilización en los MCI-ECh, considera la existencia de una zona compuesta por aire y vapor de combustible; y otra zona compuesta por productos de la oxidación. En este caso, los procesos que tienen lugar en cada una de las zonas se describen de manera independiente, considerando interacciones únicamente en transferencia de masa desde la zona sin quemar a la zona quemada. Se suponen propiedades uniformemente distribuidas en cada una de las zonas (Temperatura, Concentración, Volumen, etc) y al igual que en el modelo global, la presión es uniforme en todo el cilindro. Debido a la baja utilización de los modelos de dos zonas en los MCI-EC, que se fundamenta en la pobre capacidad que tienen para describir el proceso de combustión en estos, no se realiza una descripción más detallada de dichos modelos.

La extensión del número de zonas en los modelos de dos zonas, da origen al modelo multizona de 1 fase. En principio, el planteamiento supone que los procesos de inyección, atomización y evaporación no juegan un papel importante en la LC. Esto, debido a las temperaturas y presiones elevadas en que ocurren estos al interior de un MCI-EC. De esta forma, considerando que el combustible que ingresa a la CC lo hace en condiciones cercanas al punto crítico, la entrada de combustible es supuesta como la inyección de un chorro de vapor de combustible [8]. La descripción de los fenómenos citados previamente es obviada y el modelo se concentra en el mezclado del vapor de combustible que ingresa, con el aire fresco al interior de la CC.

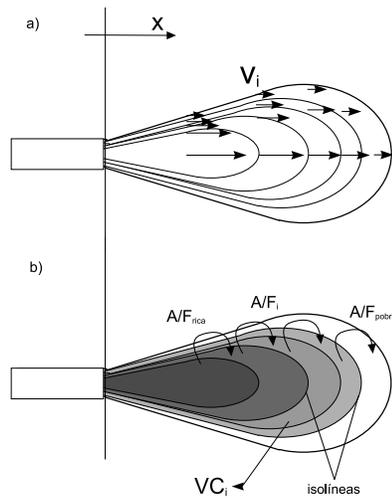
Para modelar el mezclado del vapor de combustible, Chiu et al [8] se centran la descripción de la geometría y el perfil de velocidades del chorro de inyección y en su asociación con la concentración y distribución de las masas dentro de este. Descripción que obedece al planteamiento de Abramovich [7], respecto al movimiento y las características del chorro de gas, donde apoyándose en leyes de semejanza, se considera que la variación del radio del cono de gas ( $R$ ) y la trayectoria media libre de una partícula ( $L_m$ ), son proporcionales a la distancia ( $x$ ) al origen del mismo ( $R \propto x$ ;  $L_m \propto x$ ) (Figura 4-3-a). De igual forma, al tener en cuenta la conservación del momento del chorro (consecuencia de la ausencia de gradiente de presión estática) y las leyes de semejanza, los perfiles de velocidad ( $v$ ), temperatura ( $T$ ) y concentración de especies ( $y$ ) mantienen una relación de proporcionalidad (Figura 4-3-b,c).



**Figura 4-3.:** Comportamiento según Abramovich [7] de las variables: a) Radio máximo ( $R$ ); b) Velocidad ( $v_m$ ) y concentración ( $y_m$ ) en el eje del chorro; c) Velocidad ( $v$ ) y concentración ( $y$ ) a lo largo de la sección transversal.

Considerando el planteamiento de Abramovich [7], respecto a la presencia de zonas de velocidad uniforme (Figura 4-4-a) y la semejanza entre el perfil de velocidad y el de concentración,

Chiu et al [8] utilizan la distribución obtenida de las zonas de velocidad uniforme ( $v_i$ ), para definir los volúmenes de control (VC) del modelo zonal planteado (Figura 4-4-b). De esta forma, los VCs obtenidos de la distribución de velocidad se caracterizan por tener una concentración ( $y$ ) y temperatura uniformes; permitiendo definir una relación  $A/F$  para cada una de las zonas.



**Figura 4-4.:** a) Distribución de velocidad a lo largo del chorro. b) Esquema del modelo planteado por Chiu et al [8].

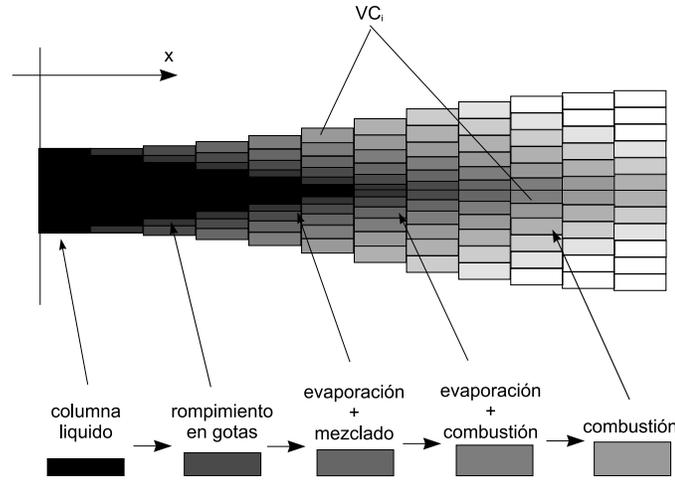
En esta aproximación, la LC se obtiene considerando la oxidación de la mezcla en los VCs cuya relación  $A/F$  y temperatura se encuentran dentro de los límites de flamabilidad. Para ello, al igual que en los anteriores, la utilización del valor del LHV del combustible o de un modelo de equilibrio químico, permiten la obtención de calor liberado en la reacción de cada uno de los VCs.

### Multizona - Multifase

La descripción propuesta en el modelo multizona planteado por Hiroyasu et al [9] difiere de la anterior en dos aspectos principales. El primero, es la consideración de un fenómeno multifase, es decir, en este caso se realiza la descripción aproximada de los fenómenos de rompimiento y evaporación del chorro de inyección. La segunda, es el enfoque lagrangiano utilizado para considerar el ingreso de aire en el VC.

Para describir la dinámica de la LC, se considera inicialmente la presencia de una única zona o VC en el cilindro. Esto es, hasta el instante previo al inicio de la inyección, la descripción es similar a la adoptada en un modelo global. A medida que el combustible es inyectado, se van generando los VCs que se utilizarán para describir el proceso citado. La aproximación

se realiza acorde al esquema planteado en la Figura 4-5, donde se parte del ingreso de una columna líquida de combustible (Figura 4-1), la cual es dividida en un número arbitrario de VC cuyo desplazamiento es dado por la Ec.4-14; y su composición inicial es únicamente combustible líquido hasta el momento del rompimiento. Posterior a esto, cuando el VC haya alcanzado el tiempo característico del rompimiento (Ec.4-12), se considera la atomización total del combustible contenido en el VC en pequeñas gotas de diámetro equivalente al Diámetro Medio de Sauter (DMS) [105], obtenido a partir de las propiedades y condiciones del VC en el tiempo de rompimiento (Ec.4-13).



**Figura 4-5.:** Esquema de la distribución del chorro y su descripción acorde a Hiroyasu et al [9].

$$t_b = c_1 \cdot \frac{\rho_{comb} \cdot d_{iny}}{\sqrt{\rho_{aire} \cdot \Delta P}} \quad (4-12)$$

Donde,

$t_b$  =Tiempo característico de rompimiento. [s]

$\rho_{comb}$  =Densidad de líquido del combustible. [ $\frac{kg}{m^3}$ ]

$d_{iny}$  =Diámetro del orificio del inyector [m]

$\rho_{aire}$  =Densidad del gas en la CC. [ $\frac{kg}{m^3}$ ]

$\Delta P = P_{iny} - P_{cil}$  =Diferencia de presión entre la línea de inyección y la CC.[Pa]

$c_1$  =Constante experimental.

$$DMS = c_1 \cdot d_{iny} \cdot Re_i^{a_1} \cdot We_i^{a_2} \left( \frac{\mu_{comb}}{\mu_{aire}} \right)^{a_3} \left( \frac{\rho_{comb}}{\rho_{aire}} \right)^{a_4} \quad (4-13)$$

Con,

$c_1$  =Constante experimental.

$Re_i$  =Número de Reynolds para el  $VC_i$ . [Adm]

$We_i$  =Número de Weber para el  $VC_i$ . [Adm]

$\mu_{comb}$  =Viscosidad dinámica del combustible líquido [Pas]

$\mu_{aire}$  =Viscosidad dinámica del gas [Pas]

$c_1$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  constantes experimentales.

$$S = 0,39 \cdot t \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \Delta P}{\rho_{liq}}} \quad (4-14)$$

$t$  = tiempo transcurrido desde la salida del inyector [s]

Desde el momento de la atomización en el VC en adelante, se considera la evaporación de las gotas de combustible atomizadas y el ingreso de aire al VC. El primer fenómeno se modela acorde a una descripción cero dimensional como el modelo  $R^2$  de evaporación, en el cual se considera que las variables  $r^2$  y  $t$  conservan una relación lineal a lo largo del proceso. Por otra parte, el ingreso de aire, es modelado mediante la suposición inicial de conservación de momento del chorro de inyección (Figura 4-2). Para considerar esto se realiza el seguimiento del desplazamiento del VC en el tiempo, acorde a la Ec.4-15 y se utiliza un balance de momento planteado acorde a un esquema lagrangiano (Ec.4-16). De esta forma, la disminución de la velocidad del VC es asociada al ingreso de aire.

$$S = 2,95 \cdot \sqrt[4]{\frac{\Delta P}{\rho_{aire}}} \cdot \sqrt{d_{iny} \cdot t} \quad (4-15)$$

$$m_{aire_{VC_i}} = m_{comb_{VC_i}} \cdot \left( v_0 \cdot \frac{dt}{dS} - 1 \right) \quad (4-16)$$

Donde,

$m_{comb_{VC_i}}$  =Masa de combustible en el VC.[kg]

$v_0$  =Velocidad inicial del combustible. [ $\frac{m}{s}$ ]

Finalmente, la oxidación del combustible se realiza considerando dos factores: La mezcla  $A/F$  que se quema lo hace en condición estequiométrica ( $A/F_{st}$ ) y el inicio de la combustión en la zona se presenta despues de que ha transcurrido un tiempo de retardo a la inflamación descrito por una expresión acorde a la ley de Arrhenius. Después de la consideración de estos dos factores, la obtención de la LC en cada volumen de control, se realiza al igual que en los casos anteriores, vía un modelo de equilibrio o mediante el LHV del combustible (Ec.4-17).

$$\Delta Q_{VC_i} = \Delta m_{comb|esteq} \cdot LHV \quad (4-17)$$

Donde,

$\Delta m_{comb|esteq}$  = Masa de combustible que satisface la condición  $A/F = A/F_{st}$ . [kg]

El planteamiento cero dimensional presentado previamente, permite la descripción promedio de los procesos involucrados en la LC. Sin embargo, buscando una aproximación más fundamental que permita un nivel de detalle más elevado en la descripción de la influencia de la viscosidad en los procesos de rompimiento y evaporación. A continuación, partiendo de la aproximación multizona planteada por Hiroyasu et al.[9] se presentan las modificaciones realizadas buscando una descripción donde se exponga con mayor detalle la influencia de la viscosidad del combustible en los fenómenos citados.

## 4.2. Planteamiento del modelo de LC

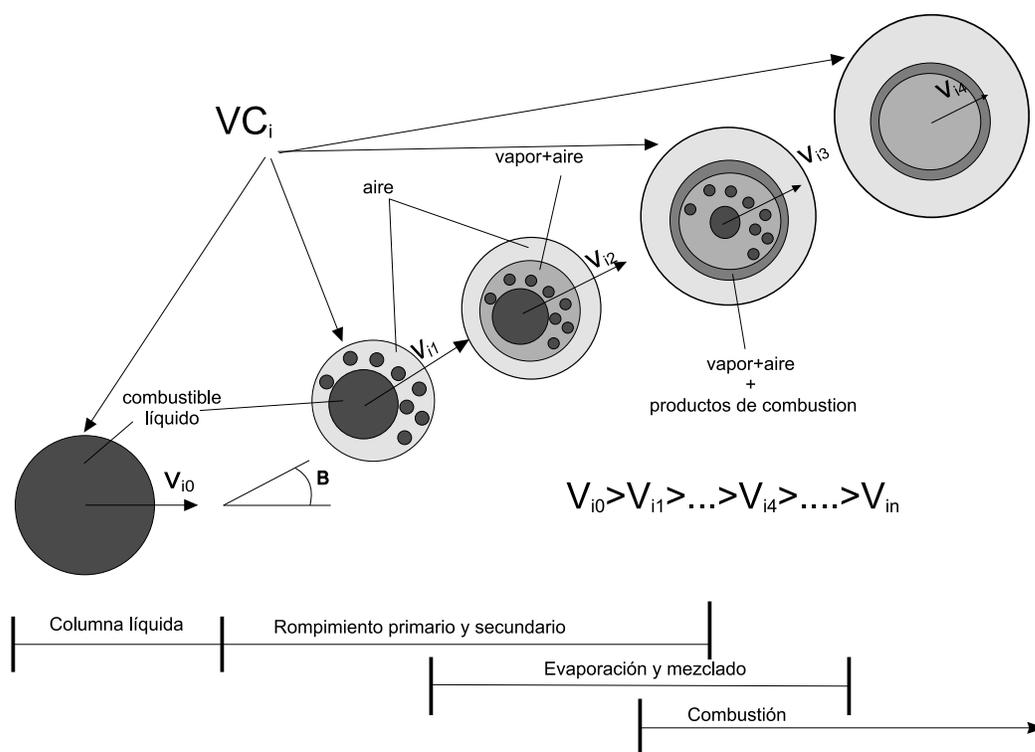
Partiendo de lo expuesto por Hiroyasu et al. [9] y considerando la descripción de los fenómenos y etapas involucradas en la LC en un MCI-EC, se plantea a continuación la aproximación propuesta para el presente estudio, para la dinámica del chorro de inyección (Figura 4-6). En la cual, a diferencia de la anterior, se busca principalmente:

- Omitir la asignación arbitraria de masa en los VCs utilizados, buscando relacionar la cantidad de masa inyectada con la cantidad de VCs necesarios para describir la LC.
- Describir rompimiento del chorro y las gotas como una sucesión de eventos y no como un fenómeno catastrófico, de tal forma que sea posible percibir con un detalle mayor la influencia de las propiedades físicas del combustible ( $\rho, \nu, \sigma$ ).
- Describir el movimiento del VC, tamaño de las gotas y tiempo característico de rompimiento basándose en una aproximación con menor componente experimental.

Para ello, se propone la modificación del tamaño y la masa de combustible del VC utilizado al tamaño de una gota característica. De igual forma, el tamaño de las gotas atomizadas y el tiempo característico de rompimiento basándose en el modelo de los mecanismos de atomización acorde a Reitz y Bracco [10]. Por otra parte, al considerarse el VC coincidente con una gota característica, se plantea la utilización de la descripción lagrangiana del movimiento del VC, análoga al movimiento de una esfera sólida. Lo cual se consigue, mediante el desacoplamiento del término de cambio de masa en el balance de momento.

### 4.2.1. Desintegración de la columna líquida y las gotas

la desintegración de la columna o chorro de líquido que ingresa al cilindro en pequeñas gotas es el fenómeno inicial que se presenta en la atomización (Figura 4-1). En la actualidad no existe consenso respecto a cual o cuales son los fenómenos dominantes en la desintegración de



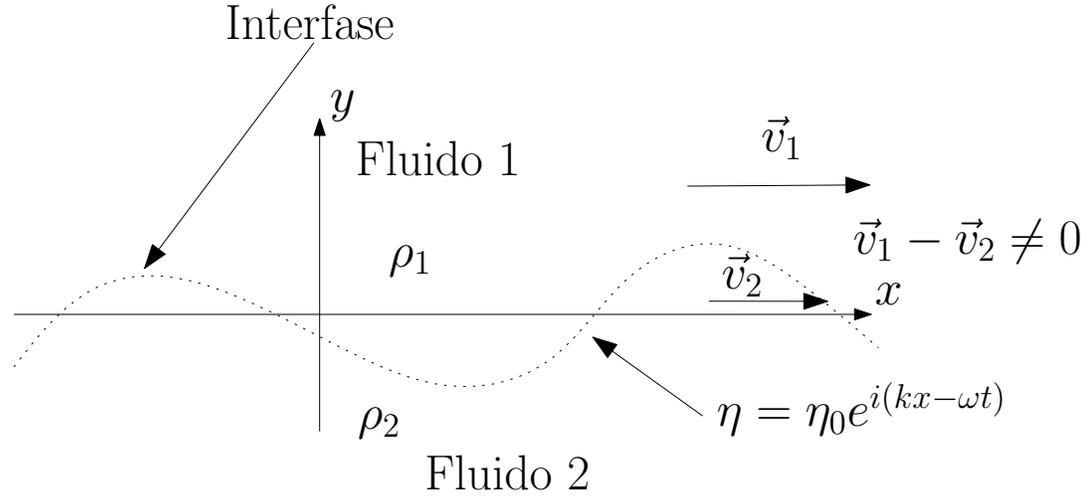
**Figura 4-6.:** Esquema del modelo planteado para la descripción de la dinámica de LC.

dicha columna (Turbulencia, relajación del perfil de velocidad, cavitación, etc). Sin embargo, diferentes aproximaciones basadas en las teorías de inestabilidad hidrodinámica lineales (Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor) han sido utilizadas para describir el fenómeno citado.

Estabilidad es el criterio que determina la capacidad del flujo de mantener su estado ante pequeñas perturbaciones [106, 107], la ausencia de esta es definida como inestabilidad. Por otra parte, si la inestabilidad generada se desplaza con el flujo, se denomina convectiva, de lo contrario se considera absoluta [106].

Acorde con Yoon y Heister [108] se evidencia que el análisis de desintegración de la columna líquida, basado en la teoría de inestabilidad hidrodinámica convectiva de Kelvin-Helmholtz (K-H) es el más utilizado. Con este, es posible describir el efecto desestabilizante en la interfase ( $\eta(x, t)$ ), que es ocasionado por la superposición de la diferencia de velocidades a la diferencia de densidades de dos fluidos que se encuentran en contacto (Figura 4-7). Esto, considerando que cualquier perturbación en la interfase puede ser descrita mediante la suma de las componentes de Fourier de la onda ( $\eta = \eta_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$ ); Donde,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  representa el número de onda [106].

Con base en esta teoría (K-H), Reitz y Bracco [10], determinaron los mecanismos de desinte-



**Figura 4-7.:** Esquema de la descripción de la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz.

gración de la columna de líquido suponiendo los dos fluidos (gas-líquido) como incompresibles ( $\frac{dp}{dt} = 0$ ), la columna de líquido de longitud infinita y suponiendo que la superficie de esta (interfase) puede ser representada por la expresión  $r = r_{iny} + \eta$  con  $\eta = \eta_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$  (Figura 4-8). En esta descripción, se parte de la existencia de una perturbación inicial en la interfase ( $\eta_0$ ), que se ve amplificada debido a la interacción aerodinámica hasta que se alcanza una amplitud de onda crítica; momento en el cual se produce la separación de una gota cuyo diámetro es proporcional a la longitud de la onda de la inestabilidad ( $\Lambda$ ). Reitz [109, 110] solucionó numéricamente las expresiones que describen el fenómeno mencionado, mediante una linealización de los balances de masa y momento de los dos fluidos en la interfase, y obtuvo las regresiones que permiten modelar la longitud de la onda (Ec.4-18), la variación de la amplitud (Ec.4-19) y el tiempo característico de rompimiento (Ec.4-20).

$$\Lambda = 9,02 \cdot r_{col} \left( \frac{(1 + 0,45 \cdot Z^{0,5}) (1 + 0,4 \cdot T^{0,7})}{(1 + 0,87 \cdot W e_{gas}^{1,67})^{0,6}} \right) \quad [m] \quad (4-18)$$

$$\Omega = \left( \frac{\sigma}{\rho_{liq} \cdot r_{col}^3} \right)^{0,5} \left( \frac{0,34 + 0,38 \cdot W e_{gas}^{1,5}}{(1 + Z) (1 + 1,4 \cdot T^{0,6})} \right) \quad [s^{-1}] \quad (4-19)$$

$$\tau_{romp} = 3,762 \cdot B_1 \cdot \frac{r_{col}}{\Lambda \cdot \Omega} \quad [s] \quad (4-20)$$

Donde,

$$Re_{liq} = \frac{r_{col} \cdot v_{rel}^2}{\nu_{liq}}$$



El fenómeno de atomización, se describe mediante la desintegración de las GP, utilizando el modelo del mecanismo de desintegración de la columna líquida, basado en la teoría de onda citada previamente. Cada vez que se alcanza el tiempo característico de las GP (Ec.4-20) se desprende una Gota Hijo (GH) de radio  $r_{GH} = 0,61 \cdot \Lambda$ ; acorde a lo obtenido en el modelo de Reitz y Bracco [10]. Desde el momento de inyección hasta el primer rompimiento, se considera que la GP sigue la trayectoria del eje del inyector. Cuando ocurre el primer rompimiento, la GP y la GH se desvían una única vez, de la trayectoria anterior con un ángulo determinado según la Ec.4-21. Expresión en la que el ángulo máximo de desviación ( $\theta_{max}$ ) se obtiene según Reitz y Bracco [10] mediante la Ec.4-22 para la cual el parámetro  $A = 3 + \frac{1}{3,6}$  se utiliza para considerar los efectos de la geometría del inyector, los cuales no se describen con las teorías de inestabilidad lineales [108]; o según Siebers y Higgins [112], por medio de la Ec.4-23.

$$\theta_{rompe} = \theta_{max} \cdot N_{aleatorio} \quad (4-21)$$

Donde,

$N_{aleatorio}$  = Número aleatorio en el intervalo [0,1].

$$\tan\theta_{max} = \frac{4 \cdot \pi}{A} \cdot \left( \frac{\rho_{aire}}{\rho_{comb}} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot f \left( \frac{\sqrt{3}}{6} \cdot (1 - \exp(-10 \cdot T)) \right) \quad (4-22)$$

Donde,

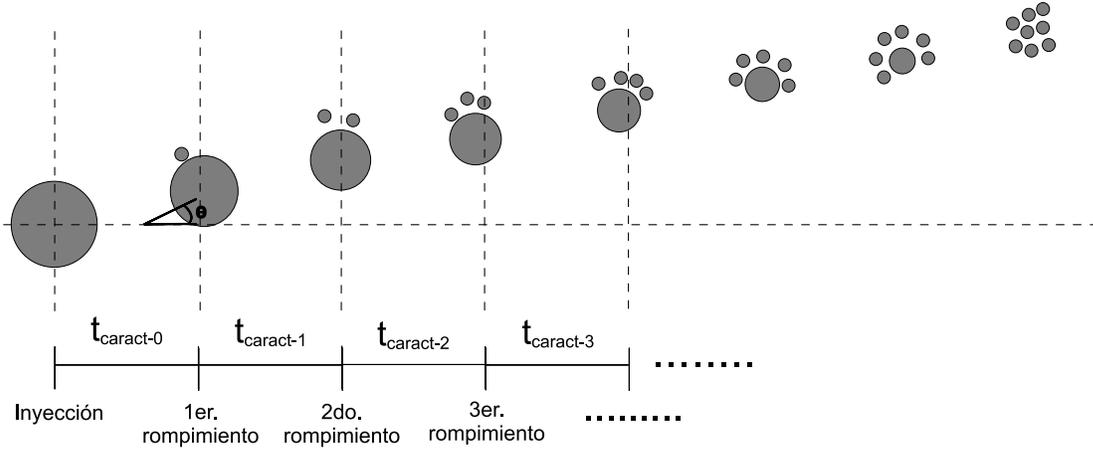
$\theta$  = Ángulo de desviación de la gota respecto al eje del inyector. [grado]

$\rho_{gas}$  = Densidad del gas.  $\left[ \frac{kg}{m^3} \right]$

$\rho_{liq}$  = Densidad del líquido.  $\left[ \frac{kg}{m^3} \right]$

$$\tan\theta_{max} = 0,26 \cdot \left( \left( \frac{\rho_{gas}}{\rho_{liq}} \right)^{0,19} - 0,0043 \cdot \left( \frac{\rho_{liq}}{\rho_{gas}} \right)^{0,5} \right) \quad (4-23)$$

La condición citada previamente para el planteamiento del modelo, que hace referencia a la descripción del fenómeno de rompimiento como una sucesión de eventos y no como un fenómeno catastrófico se satisface teniendo en cuenta que, después del primer rompimiento y en adelante, se determina nuevamente el tiempo de rompimiento ( $t_{carac-i}$ ) considerando en la Ec.4-20 las nuevas condiciones de la GP (radio, velocidad y propiedades físico-químicas). Para el modelo multizona propuesto, se considera la utilización de la GP como la "semilla" del VC a utilizar para describir la LC. De esta forma se busca una definición menos arbitraria



**Figura 4-9.:** Mecanismo de desintegración utilizado en el modelo propuesto.

en la selección de la cantidad de combustible en el VC y establecer una relación entre la cantidad de combustible inyectado y el número de zonas a utilizar para describir el proceso. Cabe resaltar que acorde al planteamiento del modelo de Hiroyasu et al [9] (donde la cantidad de combustible en cada VC permanece constante) las GH generadas a partir de la GP, permanecen dentro del VC y por ello la descripción de la evolución del comportamiento de estas en el tiempo (velocidad, temperatura, razón de evaporación, etc.) se encuentra ligada a la GP como se verá más adelante.

#### 4.2.2. Movimiento e ingreso de aire al VC

La descripción del movimiento del VC en el tiempo, se realiza mediante la aplicación de un balance de momento, en un marco de referencia lagrangiano (Ec.4-24). En la cual, se considera que la descripción de los fenómenos puede realizarse mediante la superposición de estos. Es decir, se considera el movimiento como si no existiera la evaporación (Figura 4-10b1) y como se verá más adelante, evaporación en ausencia de movimiento (Figura 4-10b2); para corregir posteriormente, mediante aproximaciones experimentales, la interacción existente (Figura 4-10 a).

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \frac{d(m \cdot \vec{v}_{esf})}{dt} = m \frac{d\vec{v}_{esf}}{dt} = -\frac{C_d}{2} \cdot \rho_{gas} \cdot A \cdot |\vec{v}_{gas} - \vec{v}_{esf}| \cdot (\vec{v}_{gas} - \vec{v}_{esf}) \quad (4-24)$$

Donde,

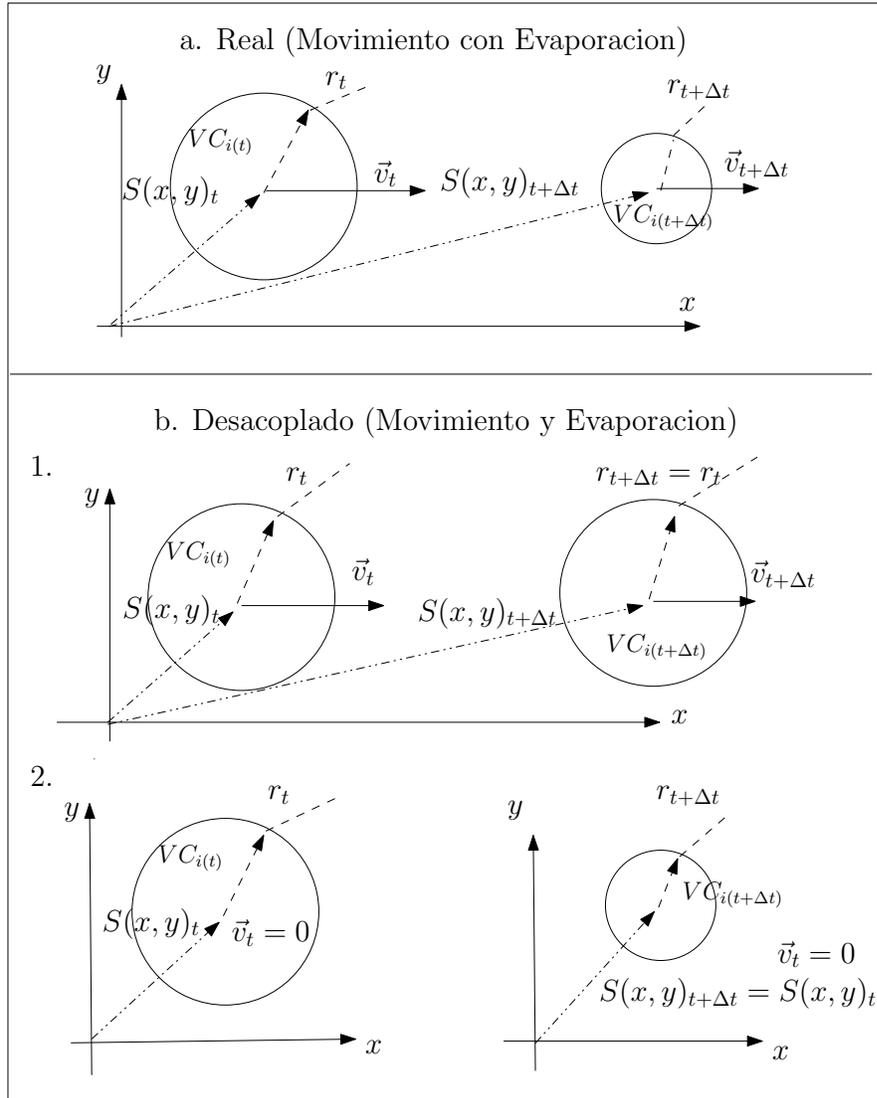
$C_d = f(Re)$  = Coeficiente de fricción para esferas sólidas. [Adm]

$\rho_{gas}$  = Densidad del gas.  $[\frac{kg}{m^3}]$

$A = \pi \cdot r^2$  Area frontal de la esfera.  $[m^2]$

$m$  = Masa del VC.  $[kg]$   $\vec{v}_{gas}$  = Velocidad de los gases.  $[\frac{m}{s}]$

$\vec{v}_{esf}$  = Velocidad del VC.  $[\frac{m}{s}]$



**Figura 4-10.:** Esquema del VC para: **a.** la simultaneidad de los procesos de evaporación y movimiento **b.** separación de los mismos para la aproximación abordada.

Acorde a lo anterior, la primera suposición (movimiento en ausencia de evaporación) se consigue considerando que la masa en el VC ( $m$  en la Ec.4-24) permanece constante para la condición ( $t \rightarrow 0$ ). De igual forma, considerando que la velocidad y densidad de los gases ( $\vec{v}_{gas}$ ,  $\rho_{gas}$ ) así como el coeficiente de fricción  $C_d$  no varían, para el mismo intervalo de tiempo, se obtiene una Ecuación Diferencial Ordinaria (EDO). (La segunda suposición, se mostrará más adelante en la descripción de la evaporación).

En el presente modelo, buscando la descripción del movimiento del VC con la expresión mencionada, aún en los instantes posteriores a la evaporación del líquido, se considera la masa de aire, vapor y productos como parte del VC y son utilizados como constituyentes de la esfera sólida acorde a la Ec.4-25. Esto, apoyándose en la suposición de Flujo Local Homogéneo (LHF, de su sigla en inglés) [113, 114, 115], planteada para la descripción del chorro de inyección en un modelo multidimensional bajo un marco de referencia Euleriano. Aproximación en la cual, debido al tamaño del VC elegido, se considera que cualquier propiedad del fluido de trabajo en el VC puede ser representada por la media geométrica de sus constituyentes sin importar la fase en la que estos se encuentren.

$$m_{LHF} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \rho_{LHF} \cdot r_{LHF}^3 = m_{comb-l} + m_{comb-v} + m_{comb-q} + m_{aire-f} + m_{aire-q} \quad (4-25)$$

Donde,

$$\rho_{LHF} = \frac{(\rho_{comb-l} \cdot m_{comb-l}) + (\rho_{comb-v} \cdot m_{comb-v}) + \dots + (\rho_{aire-q} \cdot m_{aire-q})}{m_{comb-l} + m_{comb-v} + \dots + m_{aire-q}}$$

Ya que la formación de la mezcla  $A/F$  depende principalmente, de la razón de evaporación y de la disponibilidad de oxígeno [98], resulta necesario describir el ingreso de aire a cada uno de los VCs definidos previamente. Para ello, basándose en la consideración de presión uniforme en el chorro de inyección, propuesta por Abramovich [7] y en el planteamiento de Hiroyasu et al. [9], la descripción del ingreso de aire al VC se realiza teniendo en cuenta la conservación del momento del VC ( $\frac{d\vec{J}_{VC}}{dt} = 0$ ) (Figura 4-2). Para ello, la Ec.4-16 nuevamente presentada en la Ec.4-26 permanece válida.

$$m_{aireVC_i} = m_{combVC_i} \cdot \left( v_0 \cdot \frac{dt}{dS} - 1 \right) \quad (4-26)$$

Donde,

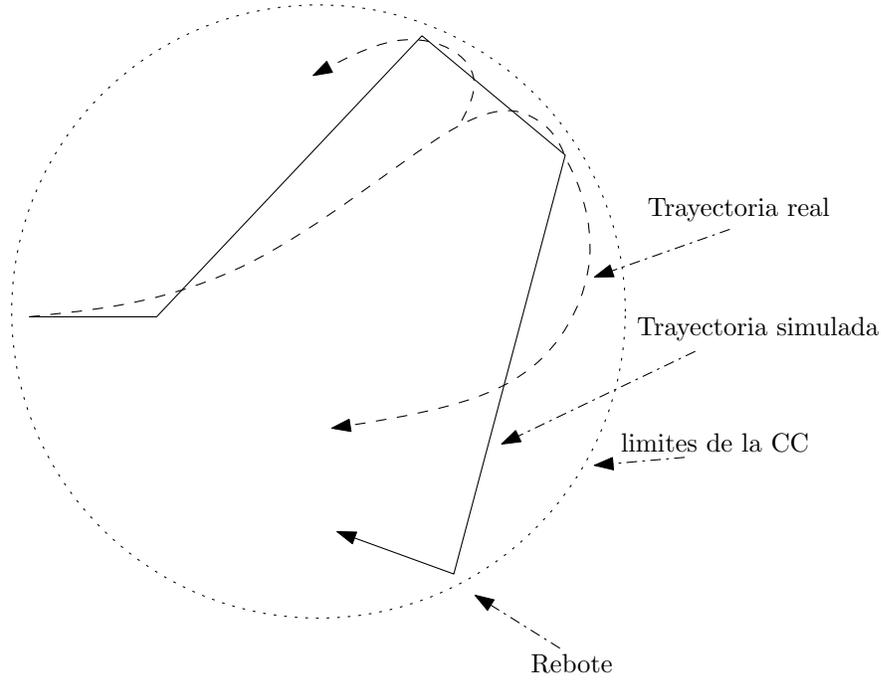
$m_{combVC_i}$  = Masa de combustible en el VC (líquido, vapor, productos de combustión). [kg]

$v_0$  = Velocidad inicial del VC. [ $\frac{m}{s}$ ]

$$\frac{dt}{dS} = \frac{1}{\frac{dS}{dt}} = \frac{1}{\frac{d}{dt} \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}}$$

Permitiendo de esta forma la determinación de la masa de aire que ingresa al VC y así, teniendo en cuenta velocidades infinitas de mezclado entre el combustible evaporado y el aire que ingresa al VC, la formación y disponibilidad de la mezcla  $A/F$  dentro de este.

Un caso especial considerado en el presente, hace referencia al instante en el cual el VC alcanza los límites físicos de la CC. Esto es, cuando la posición del VC equivale o excede la frontera del VC global se supone que se presenta un rebote elástico entre el VC y la pared de la CC, para lo cual se utilizaron las expresiones de dinámica del movimiento de una partícula (Figura 4-11).

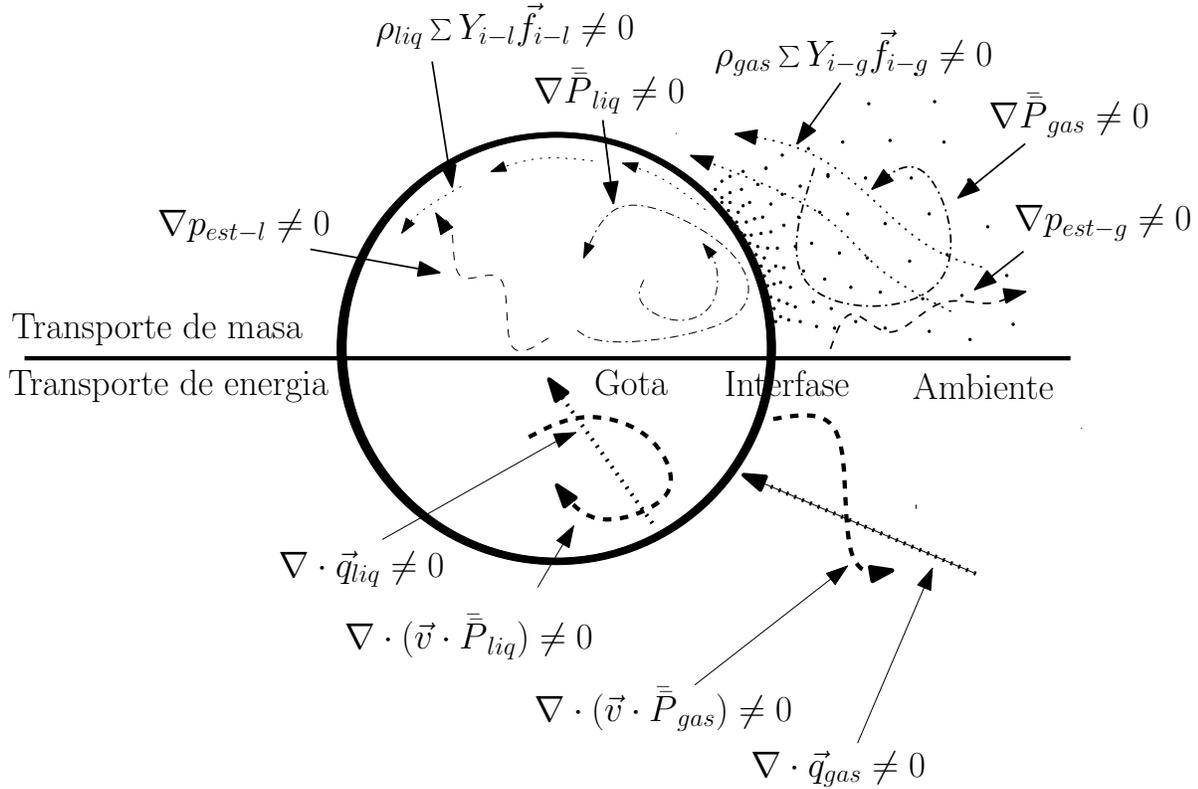


**Figura 4-11.:** Trayectoria simulada considerando el rebote elástico entre el VC y la pared de la CC.

### 4.2.3. Evaporación

La evaporación de una gota, involucra la coexistencia e interacción de 3 fenómenos diferentes: Transporte de masa, de energía y cambio de fase (Fig.4-12). Fenómenos que se pueden presentar por presencia de gradientes de temperatura o de concentración en el ambiente. Denominando el líquido y el ambiente como l y g, respectivamente; y considerando que para que exista equilibrio entre ambas fases se debe cumplir que  $P_{sat} \leq p_{est-g}$  [116]. En el primer caso, ( $\nabla T_g \neq 0$ ), implica un flujo de calor hacia l, el cual da lugar a la evaporación ( $P_{sat} > p_{est-g}$ ) mediante la modificación de la presión de vapor en la interfase, ya que  $P_{sat} = f(T)$ . En el segundo caso, la presencia de un gradiente de concentración ( $\nabla \rho_g \neq 0$ ) en ausencia de ( $\nabla T_g \neq 0$ ), implica transporte de masa. Con lo cual se disminuye la densidad y con ello la presión estática en la interfase (ya que  $P = \rho_g RT$ ) ocasionando que  $P_{sat} > p_{est-g}$  y con esto la evaporación de l. Un caso especial se consigue cuando  $\nabla T_g \neq 0$ ; ya que, teniendo en cuenta la dependencia de la densidad con la temperatura ( $\rho_g = f(T)$ ) se presenta que  $\nabla \rho_g = f(\nabla T_g)$ . Finalmente, un fenómeno de transporte de momento ocasionado por fuerzas externas como una corriente de aire ( $\rho_g \sum Y_{i-g} \vec{f}_{i-g}$ ), que implica modificación de la velocidad (Ec.3-3), da lugar a  $\nabla \rho_g \vec{v} \neq 0$  (Ec.3-2), con ello  $\frac{\partial \rho_g}{\partial t} \neq 0$  y así  $P_{sat} > p_{est-g}$ , mediante  $P = \rho_g RT$  ya que si  $\rho_g = f(\vec{v})$  se tiene que  $p_{est-g} = f(\vec{v})$ .

Como consecuencia del flujo de calor entre el ambiente (g) y la gota (l), se presenta un



**Figura 4-12.:** Procesos involucrados en la evaporación de una gota. (liq,l=líquido; gas,g=mezcla de gases; i=especie i.;  $p_{est}$ =presión estática).

fenómeno adicional que es el calentamiento de l. Ya que, la diferencia de temperatura entre la superficie de l y otro punto al interior de la gota (c), actúa como potencial de energía. Ocasionando el transporte de energía y masa al interior de l (Figura 4-12). En este caso, el mecanismo por el que se presentan estos fenómenos es equivalente al presentado previamente para la descripción de la evaporación en presencia de un gradiente de temperatura ( $\nabla T \neq 0$ ). En principio, en un fluido en reposo ( $\vec{v} = 0$ ), la diferencia de temperaturas implica un flujo de calor entre la superficie y el interior de la gota que puede describirse en mediante ( $\nabla q_l$ ) en la (Ec.3-4). Sin embargo, considerando la modificación de la densidad con la temperatura ( $\rho_l = f(T_l)$ ), se obtiene un gradiente de concentraciones ( $\nabla \rho_l \neq 0$ ) y con ello  $\nabla p_{est-l} \neq 0$ , lo cual da como resultado la modificación de la velocidad en la Ec.3-3 ( $\frac{\partial \rho_l \vec{v}}{\partial t} \neq 0$ ). De igual forma, la presencia de un flujo externo o un flujo ocasionado por una fuerza externa ( $\rho_g \sum Y_{i-l} \vec{f}_{i-l}$  en la Ec.3-3) que involucra la modificación de la velocidad, dará como resultado que  $\frac{\partial \rho_l}{\partial t} \neq 0$  y con ello nuevamente  $\nabla \rho_l \neq 0$ .

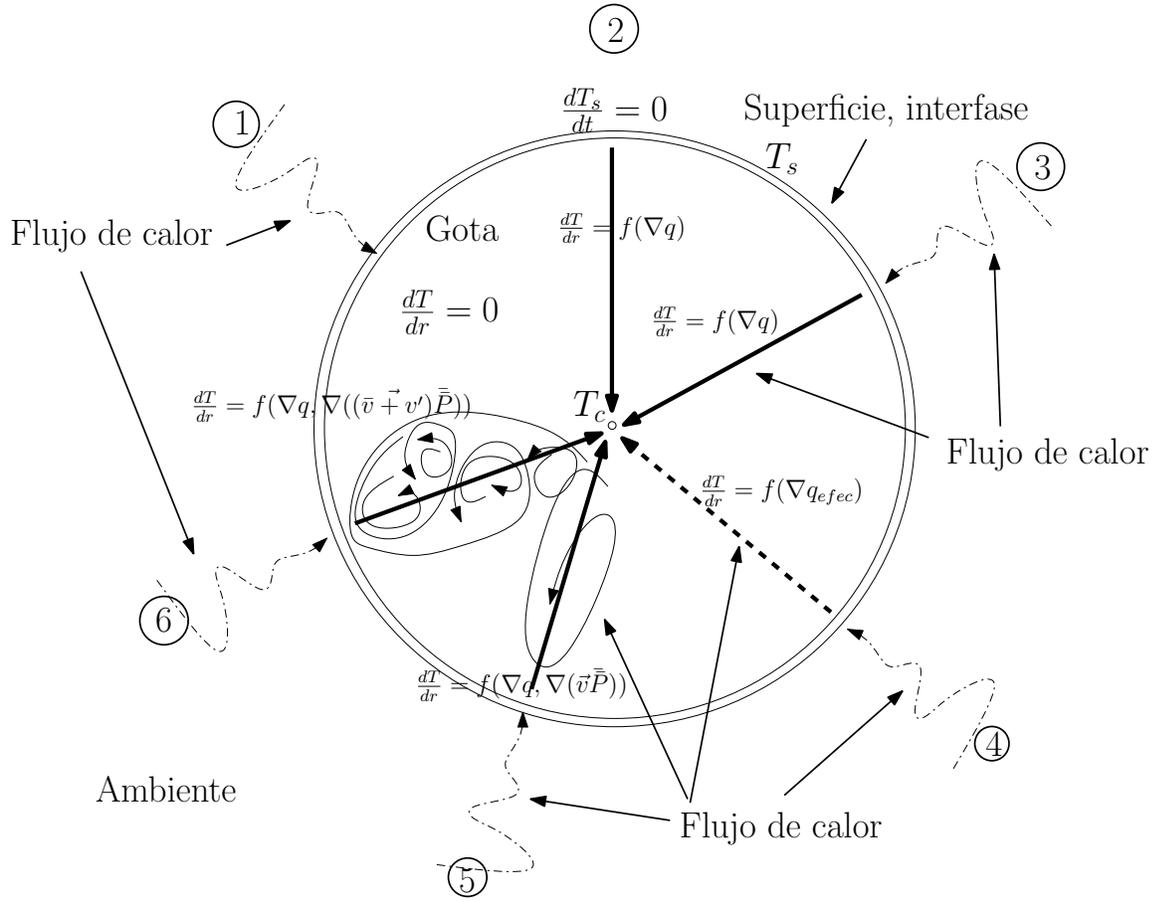
Los modelos para la descripción del calentamiento, acorde con Sirignano [117] y Sazhin [118], se pueden clasificar en seis grupos (Figura 4-13):

1. Asumiendo que no existe gradiente de temperatura al interior de la gota (Resistencia interna despreciable) ( $T_{liq} = f(t)$ ).
2. Los que asumen que la temperatura de la superficie de la gota es constante en el tiempo ( $dT_{s-liq} = cte$ ).
3. Considerando la existencia de gradientes de temperatura al interior de la gota, unicamente contemplando el mecanismo de conducción ( $\frac{dT_{liq}}{dt} = \nabla q$ ).
4. Considerando gradiente interno, recirculación al interior de la gota (conducción y convección), utilizando propiedades efectivas (modelos de conductividad efectiva).
5. Considerando los dos fenómenos (conducción y convección), utilizando las ecuaciones fundamentales de la mecánica de los fluidos para describirlo.
6. Considerando gradiente interno, recirculación al interior y utilizando modelos de dinámica de vortices para describir este último fenómeno.

En el presente estudio, la utilización de un modelo que abarque todos los fenómenos presentados previamente, desborda el alcance del mismo. Por otra parte, la necesidad de resolver dicho modelo tantas veces como gotas (o VCs) se encuentren en el interior de la CC, representa una disminución radical en la eficiencia computacional del modelo propuesto. Por ello considerando el balance en la relación fidelidad-eficiencia, se opta por la utilización de un modelo unidimensional de evaporación que contemple parcialmente el efecto de algunos de los fenómenos citados en el interior y exterior de la gota (Figura 4-14), acoplándolo a un modelo de calentamiento de conductividad térmica infinita al interior de esta (Figura 4-15).

Acorde a lo expuesto previamente, el modelo de evaporación utilizado (Ec.4-27), obedece al planteamiento realizado por Borman y Johnson [119]. En el cual, se considera que la energía que fluye hacia la gota ( $\dot{q}_{cal-esf}$ ), es utilizada para calentar ( $\dot{q}_{cal-liq}$ ) y evaporar ( $\dot{q}_{eva}$ ). Como se presenta en la Figura 4-16, el modelo obedece inicialmente (Figura 4-16-a) al calentamiento de una esfera sólida que se encuentra en presencia de un flujo de aire ( $v_{rel} \neq 0$ ), el cual permite obtener el flujo de calor para dicho fenómeno ( $\dot{q}_{cal}$ ). Sin embargo, debido al transporte de calor asociado al transporte de masa en la capa de vapor [116], se tiene en cuenta la disminución ( $\dot{q}_{cal-vap}$ ) en tal flujo (Figura 4-16-b). Resultando un flujo de calor ( $\dot{q}_{cal-esf}$ ) que alcanza la superficie de la gota. Finalmente, debido al fenómeno de cambio de fase, el flujo de calor afectado disponible ( $\dot{q}_{cal-esf}$ ), es utilizado para calentar el líquido ( $\dot{q}_{cal-liq}$ ) y para evaporar ( $\dot{q}_{eva}$ ) (Figura 4-16-c).

$$\frac{dq_{cal-esf}}{dt} = \frac{dq_{cal-liq}}{dt} + \frac{dq_{eva}}{dt} \quad (4-27)$$



**Figura 4-13.:** Clasificación de los modelos utilizados para describir el calentamiento de una gota.

Teniendo en cuenta lo anterior, el flujo de calor hacia la gota ( $dq_{cal-esc}$ ) en la Ec.4-29 puede describirse mediante un balance de energía planteado para un proceso de TC no evaporativo ( $\frac{dq_{cal}}{dt}$ ); corregido por el factor experimental ( $\frac{\zeta}{e^\zeta - 1}$ ) [116]. El cual, es introducido para tener en cuenta la diferencia en el coeficiente de TC por convección ( $\alpha$ ), cuando este se determina utilizando una correlación del coeficiente adimensional de TC ( $Nu$ ) planteada para el caso no evaporativo ( $Nu_{nev}$ , Ec.4-36) [118, 120, 116].

$$\frac{dq_{cal}}{dt} = \frac{\alpha \cdot A_{liq}}{\rho_{liq} \cdot V_{liq} \cdot C_{p_{liq}}} (T_{gas} - T_{liq}) = \pi \cdot d_{gota} \cdot k_{gas}^- \cdot (T_{gas} - T_{liq}) \cdot Nu_{nev} \quad (4-28)$$

$$\frac{dq_{cal-esc}}{dt} = \frac{dq_{cal}}{dt} \cdot \frac{\zeta}{e^\zeta - 1} \quad (4-29)$$

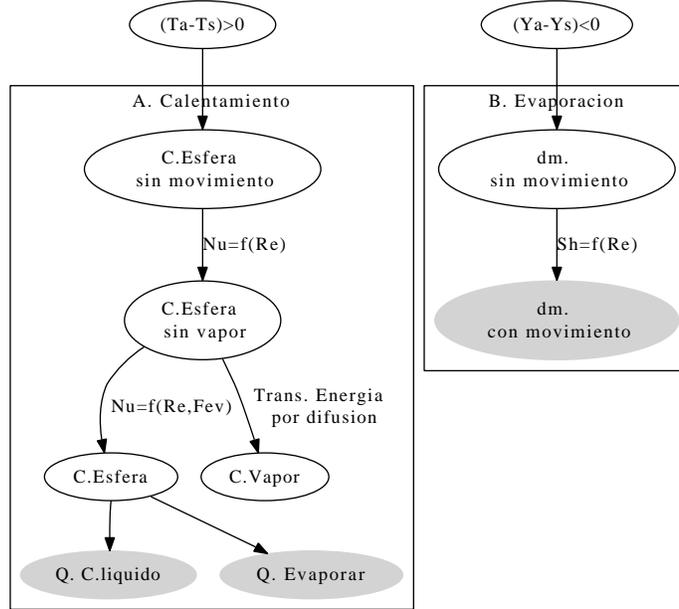


Figura 4-14.: Esquema del modelado de los diferentes procesos (A. Transporte de Energía B. Transporte de masa)

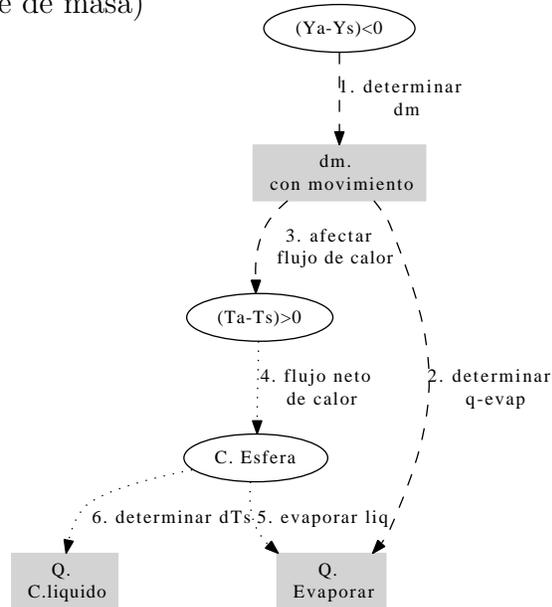
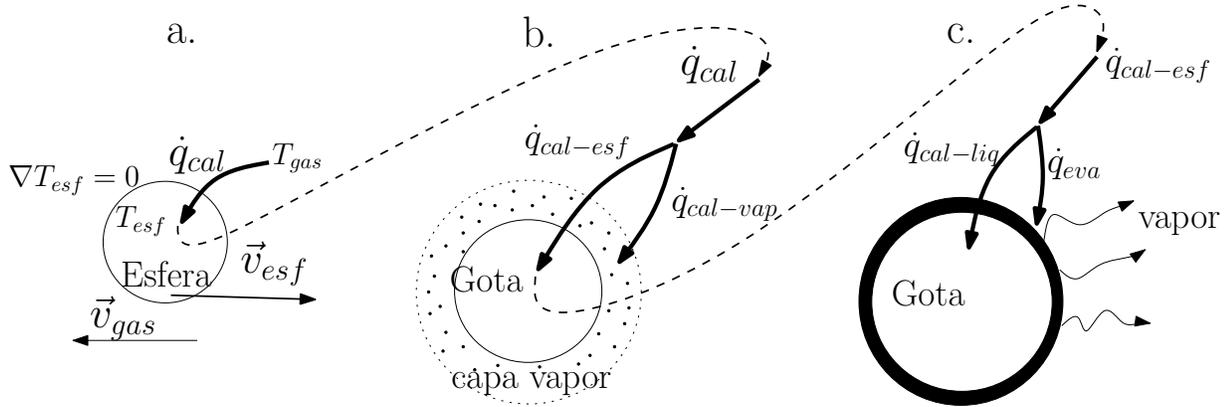


Figura 4-15.: Acoplamiento de los modelos de transporte de masa y energía para describir el fenómeno de evaporación.

Donde,

$$\zeta = \frac{-\frac{dm_{gota}}{dt} \cdot C_{p_{vap}}}{\pi \cdot d_{gota} \cdot k_{gas} \cdot Nu_{nev}} \tag{4-30}$$



**Figura 4-16.:** Esquema de la composición de los flujos de energía en el modelo para: a. Calentar una esfera sólida en movimiento; b. Considerar el calentamiento de la capa de vapor; c. Repartir la energía entre el calentamiento de la gota y el cambio de fase del líquido.

Donde,

$A_{liq}$  = Área de la gota. [ $m^2$ ]

$V_{liq}$  = Volumen de la gota. [ $m^3$ ]

$\rho_{liq}$  = Densidad de líquido. [ $\frac{kg}{m^3}$ ]

$C_{p_{liq}}$  = Calor específico de la gota. [ $\frac{J}{kgK}$ ]

$C_{p_{vap}}$  = Calor específico a presión constante del vapor. [ $\frac{J}{kgK}$ ]

$T_{gas}$  = Temperatura de la mezcla de gases. [ $K$ ]

$T_{liq}$  = Temperatura de la gota. [ $K$ ]

$d_{gota}$  = Diámetro de la gota. [ $m$ ]

$k_{gas}$  = Conductividad térmica del gas [ $\frac{W}{mK}$ ]

El término en la Ec.4-27 que representa la energía utilizada para el proceso de evaporación ( $\frac{dq_{eva}}{dt}$ ) (cambio de fase) es descrito partiendo de un balance de especies (Ec.4-31) en la capa límite para describir la razón de evaporación ( $\frac{dm_{gota}}{dt}$ ) (Figura 4-17). Con lo cual se considera inicialmente que el fenómeno de cambio de fase es controlado por la difusión de la masa. Sin embargo, un análisis similar se obtiene partiendo de la Ec.3-4 y utilizando suposiciones análogas para el balance de energía en la capa límite, en cuyo caso el número de Lewis se considera igual a la unidad ( $Le = 1$ ) y por tanto el número de Sherwood y de Nusselt son equivalentes ( $Sh = Nu$ ) [66, 117]. (A continuación se presenta el análisis basado en el primer caso).

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i (\vec{v} + \vec{V}_i)) = \omega_i \quad (4-31)$$

Donde,

$\rho$  = Densidad media de la mezcla.  $[\frac{kg}{m^3}]$

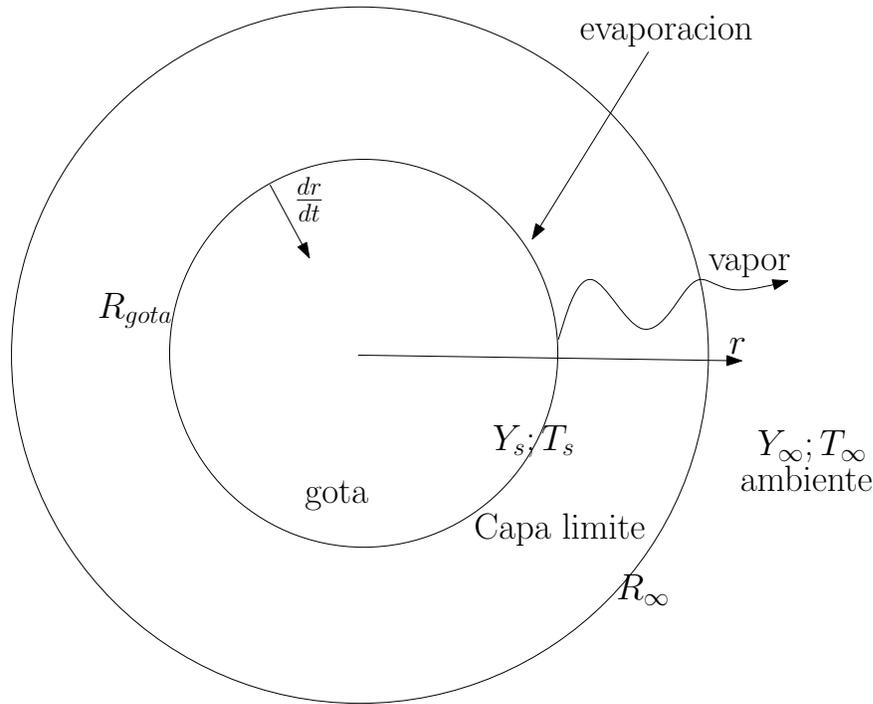
$Y_i = \frac{\rho_i}{\sum \rho_i}$  Fracción másica de la especie i.  $[Adm]$

$\vec{v} = \frac{\sum \rho_i \vec{v}_i}{\sum \rho_i}$  Velocidad media de la mezcla.  $[\frac{m}{s}]$

$\vec{v}_i$  = Velocidad de la especie i.  $[\frac{m}{s}]$

$\vec{V}_i$  = Velocidad de difusión de la especie i.  $[\frac{m}{s}]$

$\omega_i$  = Velocidad de reacción de la especie i.  $[\frac{kg}{s}]$



**Figura 4-17.:** Esquema del modelo para el fenómeno de evaporación.

Partiendo de la Ec.4-31, teniendo en cuenta que no se considera reacción química de la especie i ( $\omega_i = 0$ ), acumulación de la especie en la capa límite ( $\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = 0$ ) y que acorde a la ley de Fick  $Y_i \vec{V}_i = D_{ab} \nabla Y_i$  (Ec.4-32). Por otra parte, como se menciona previamente, el movimiento del VC y la evaporación de las gotas, se describen considerando inicialmente que no se presenta interacción entre ambos. Por ello, para la evaporación, se considera que no existe velocidad relativa entre la gota y el gas ( $v_{gota} - v_{gas} = 0$ ), permitiendo de esta forma simplificar el problema a un caso unidimensional en coordenadas esféricas ( $\nabla = \frac{d}{dr}$ ), donde no existe una fuerza externa ( $\sum Y_i \vec{f}_i$ ). Adicionalmente, debido a que ( $\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = 0$ ), se cumple que  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$  y  $\nabla \vec{v} \rho = 0$  en la Ec.3-2; con lo cual la velocidad media de las especies ( $\vec{v}$ ) es

equivalente a la velocidad de reducción del radio de la gota ( $\vec{v} = \frac{dr}{dt}$ ).

$$\frac{d}{dr} (\rho Y_i \vec{v} - \rho D_{ab} \nabla Y_i) = 0 \quad (4-32)$$

Donde,

$D_{ab}$  = Coeficiente de difusión binaria.  $\left[ \frac{kg}{m^2s} \right]$

Considerando la forma de la Ec.4-32, integrando y evaluando en los límites  $Y_{s,r} = Y(r_s)$  y  $Y_\infty = Y(r_\infty)$  se obtiene la Ec.4-33, con la cual es posible describir el proceso de evaporación mencionado.

$$\frac{dm_{gota-vr0}}{dt} = -\frac{dm_{vap}}{dt} = -\dot{m}_{vap} = -4 \cdot \pi \cdot r_{gota} \cdot \rho_{vap} \cdot D_{ab} \cdot \log \left( \frac{Y_\infty - 1}{Y_{s,r} - 1} \right) \quad (4-33)$$

Donde,

$\frac{dm_{gota-vr0}}{dt}$  = Razón de evaporación de la gota para velocidad relativa cero.  $\left[ \frac{kg}{s} \right]$   $r_{gota}$  = Radio de la gota.  $[m]$

$Y_{infty}$  = Fracción másica del vapor fuera de la capa límite.  $[Adm]$

$Y_{s,r}$  = Fracción másica del vapor en la interfase.  $[Adm]$

Acorde con Ranz y Marshall [121], citados por [63, 118, 117], la utilización del número de Sherwood ( $Sh$ ) permite incluir la influencia de la velocidad relativa entre la gota y el aire, al ser utilizado como factor de modificación de la razón de evaporación (Ec.4-34). Esto, considerando que el número de Sherwood ( $Sh$ ) se determina en función del número de Reynolds de la gota ( $Sh = f(Re)$ ) (Ec.4-37).

$$\frac{dm_{gota}}{dt} = Sh \cdot \frac{dm_{gota-vr0}}{dt} \quad (4-34)$$

Retomando el término de interés ( $\frac{dq_{eva}}{dt}$  en la Ec.4-27) y considerando al Ec.4-33, es posible determinar la energía utilizada para evaporar la gota teniendo en cuenta la velocidad relativa entre esta y el gas Ec.4-35.

$$\frac{dq_{evap}}{dt} = -\frac{dm_{gota}}{dt} \cdot h_{fg} \quad (4-35)$$

Donde,

$h_{fg}$  = Entalpia de vaporización.  $\left[ \frac{J}{kg} \right]$

La determinación de las propiedades para el líquido, vapor y la mezcla, se realiza considerando la temperatura media ( $T = \frac{T_{liq} + T_{gas}}{2}$ ) según lo sugerido por Assanis y Jung [104], ya que la ausencia de concenso respecto a la temperatura idónea para la determinación de las propiedades en la capa límite según la ley  $\frac{1}{3}$  ( $\psi_{cl} = \frac{2\psi_{liq} + \psi_{vap}}{3}$ ), como se observa en [118] y [26], es una situación que puede llegar a enmascarar la razón de evaporación y con ello los resultados del modelo. Por otra parte, la obtención de los números adimensionales se realiza según las relaciones experimentales de Ranz y Marshall (Ec.4-36 y Ec.4-37) [121] para considerar los efectos de la velocidad relativa sobre los fenómenos descritos [118, 117].

$$Nu_{nev} = 2 + 0,6 \cdot Re^{1/2} \cdot Pr^{1/3} \quad (4-36)$$

$$Sh = 2 + 0,6 \cdot Re^{1/2} \cdot Sc^{1/3} \quad (4-37)$$

Donde, los números adimensionales se determinan como: Reynolds ( $Re = \frac{r_{gota} \cdot v_{rel}}{\nu_g}$ ); Schmidt ( $Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g \cdot D_{vg}}$ ) y Prandtl ( $Pr = \frac{\mu_g \cdot C_{pg}}{\lambda_g}$ ).

Finalmente, considerando el balance propuesto (Ec.4-27), el cambio de temperatura de la gota viene dado por:

$$\frac{dT_{liq}}{dt} = \frac{1}{m_{gota} \cdot C_{pliq}} \cdot \frac{dq_{calen}}{dt} \quad (4-38)$$

En el presente estudio, considerando los requerimientos computacionales que demanda la descripción del fenómeno citado previamente, al contemplar los procesos de cada gota dentro del VC de forma independiente y según lo obtenido en la etapa preliminar de programación; se planteó el esquema de parcela utilizado ampliamente en los modelos de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, de su sigla en inglés). De esta forma, en las expresiones presentadas previamente que son utilizadas dentro del modelo de evaporación, se reemplaza la dimensión característica del fenómeno (diámetro de la gota,  $d_{gota}$ ) por la dimensión característica de una entidad representativa en los procesos de atomización como lo es el Diámetro Medio de Sauter (SMD, de su sigla en inglés) o el Radio Medio de Sauter (SMR, de su sigla en inglés) [105].

### SMR

Como se menciona previamente, la utilización del SMR obedece en gran parte a los requerimientos computacionales que exige la descripción de los procesos involucrados de manera independiente. Por ello, acorde con Sauter [105] la entidad característica del chorro atomizado que permite una descripción adecuada de los procesos es el SMR. El cual, representa el radio de una gota que posee la misma razón volumen/area que todas las gotas presentes en

el chorro o en este caso en el VC (Ec.4-39). De esta forma, para la descripción del proceso de evaporación en el VC, no se considera el fenómeno individual para cada una de las gotas en el VC, sino que se considera la masa evaporada para la gota característica (Ec.4-40) y se multiplica por el número de gotas características posibles en el VC (Ec.4-41).

$$\frac{Volumen_{got-VC}}{Area_{got-VC}} = \frac{n_{smr} \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \rho_l \cdot SMR^3}{n_{smr} \cdot 4 \cdot \pi \cdot SMR^2} = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \rho_l \cdot \sum r_i^3}{4 \cdot \pi \sum r_i^2} \quad (4-39)$$

$$SMR = \frac{\sum r_i^3}{\sum r_i^2} \quad (4-40)$$

$$n_{smr} = \frac{\sum r_i^3}{SMR^3} \quad (4-41)$$

#### 4.2.4. Combustión

La oxidación del combustible se realiza considerando dos condiciones principalmente:

- Para tener en cuenta el efecto de la disponibilidad de oxígeno sobre la LC, que el combustible a quemar lo haga entre los límites de flamabilidad (límite pobre (LP) y límite rico (LR)). De esta forma, se consume únicamente la cantidad de aire y/o combustible que corresponde a dichos límites. Con lo cual considerando como criterio de oxidación el valor de la relación de equivalencia local ( $\phi_{VC}$ ), es posible encontrar 3 situaciones:
  1. ( $LR < \phi_{VC} < LP$ ), esto es, la mezcla  $AF_{VC}$  se encuentra entre los límites de flamabilidad del combustible. En cuyo caso, todo el combustible evaporado y el aire fresco se queman a las condiciones actuales.
  2. ( $\phi_{VC} < LR$ ), este caso obedece a una mezcla rica en el VC. Bajo esta condición, el combustible que se quema obedece únicamente a la cantidad de combustible que satisface la condición  $\phi = LR$  dada por la cantidad de aire disponible en el VC. Situación que permite que la razón de evaporación y de LC sea controlada por el ingreso de aire al VC.
  3. ( $\phi_{VC} > LP$ ), Para este último caso, la oxidación del combustible se realiza en una condición equivalente al valor del límite pobre ( $\phi = LP$ ). Condición que representa la LC controlada por la razón de evaporación del combustible.
- Por otra parte, en pro de considerar la energía necesaria para que se produzca la autoinflamación, se hace necesario que la mezcla  $AF_{VC}$  haya alcanzado la temperatura de autoencendido del combustible.

De esta forma, la consideración de una expresión del tipo de Arrhenius no se utiliza como sucede en la mayoría de los casos [29, 9, 104, 83]. Esto, debido principalmente a la ausencia de constantes de la cinética para el B20 en la literatura y a que su determinación no hace parte del presente estudio. Por ello, la utilización del mismo criterio de encendido y sostenimiento de la llama dentro del VC, permite una comparación más centrada en la viscosidad del combustible como factor de interés, considerando que la adición de biodiesel puede llegar a modificar las razones de evaporación y mezclado dentro del VC y con ello la LC. Ya que, La oxidación de la masa de combustible y aire dentro de cada VC se considera que ocurre instantaneamente en las condiciones *AF* locales y no es controlada por la cinética química involucrada en el proceso. Finalmente, la energía liberada en cada VC por el proceso de oxidación se obtiene del planteamiento de un modelo de equilibrio químico (Ec.4-42) para 8 especies ( $j = CO_2; CO; H_2O; H_2; OH; O_2; NO; N_2$ ), y el combustible ( $C_x, H_y, O_z$ ) (AnexoB).

$$\frac{dq_{comb}}{dt} = \sum_{j=1}^{especies} \frac{dY_j}{dt} \cdot h_{formacion} \quad (4-42)$$

### 4.3. Acoplamiento de los diferentes modelos

En pro de conseguir la descripción adecuada de los diferentes procesos y fenómenos citados en los VCs, se utiliza un balance de energía para cada uno (Ec.4-43). En el cual, los términos de LC ( $\frac{dQ_{comb-k}}{dt}$ ); flujos de masa y su energía asociada ( $\sum_{i=1}^{flujos} \frac{dm_{i-k}}{dt} h_{i-k}$ ); y TC ( $\frac{dQ_{TC-k}}{dt}$ ), se obtienen acorde a lo presentado en las secciones (4.2.4,4.2.2,3.3.2), respectivamente. Mientras que el cambio de propiedades de transporte y termodinámicas, se obtiene acorde a lo presentado la Sección (3.3.2) y el Anexo (B).

$$Cp_k \cdot m_k \frac{dT_k}{dt} = \left( \frac{dQ_{comb-k}}{dt} \right) - \left( \sum_{i=1}^{flujos} \frac{dm_{i-k}}{dt} h_{i-k} \right) - \left( \frac{dQ_{TC-k}}{dt} \right) + \left( m_k \cdot R_k \cdot \frac{d}{dt} \left( \frac{R_k}{Cv_k} + 1 \right) - \frac{Cp_k \cdot m_k}{R_k} \cdot \frac{dR_k}{dt} - Cp_k \cdot \frac{dm_k}{dt} - \frac{R_k \cdot m_k}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \right) T_k \quad (4-43)$$

Donde, los términos son equivalentes a los incluídos en la Ec.3-7

Por otra parte, para realizar el acoplamiento entre este esquema individual y el esquema global del cilindro; la energía total del fluido de trabajo al interior del cilindro ( $E_{cil}$ ) se obtiene mediante la suposición de una mezcla uniforme de los contenidos de cada VC y con ello, dicha energía se determina como la sumatoria de las energías individuales de los

diferentes VCs utilizados (Ec.4-44).

$$E_{cil} = \sum_{k=1}^{zonas} E_k \quad (4-44)$$

Haciendo uso de la Ec.4-43 en cada VC, la Ec.4-44, la consideración que  $E_k = m_k \cdot Cv_k \cdot T_k$  y por ende aplica  $E_{cil} = m_{cil} \cdot Cv_{cil} \cdot T_{cil}$ . Donde según sea el caso, los términos se obtienen como una sumatoria  $m_{cil} = \sum_{k=1}^{zonas} m_k$  o como una media geométrica sobre los VCs individuales  $Cv_{cil} = \frac{\sum_{k=1}^{zonas} Cv_k \cdot m_k}{\sum_{k=1}^{zonas} m_k}$ , permitiendo así determinar la temperatura media del fluido de trabajo en el cilindro según la Ec.4-45.

$$T_{cil} = \frac{\sum_{k=1}^{zonas} Cv_k \cdot m_k \cdot T_k}{\sum_{k=1}^{zonas} Cv_k \cdot m_k} \quad (4-45)$$

La interacción entre la cinemática del movimiento del pistón (Sec.3.3.1), que produce el cambio en el volúmen del fluido de trabajo en el cilindro, el cambio de volumen de los VCs individuales y la energía involucrada en este proceso, se describe teniendo en cuenta la suposición de gas ideal (Ecs.4-46, 4-47).

$$P_{cil} = \frac{\left( \sum_{k=1}^{zonas} m_k \right) \cdot \left( \frac{\sum_{k=1}^{zonas} m_k \cdot R_k}{\sum_{k=1}^{zonas} m_k} \right) \cdot \left( \frac{\sum_{k=1}^{zonas} Cv_k \cdot m_k \cdot T_k}{\sum_{k=1}^{zonas} Cv_k \cdot m_k} \right)}{V_{cil}} \quad (4-46)$$

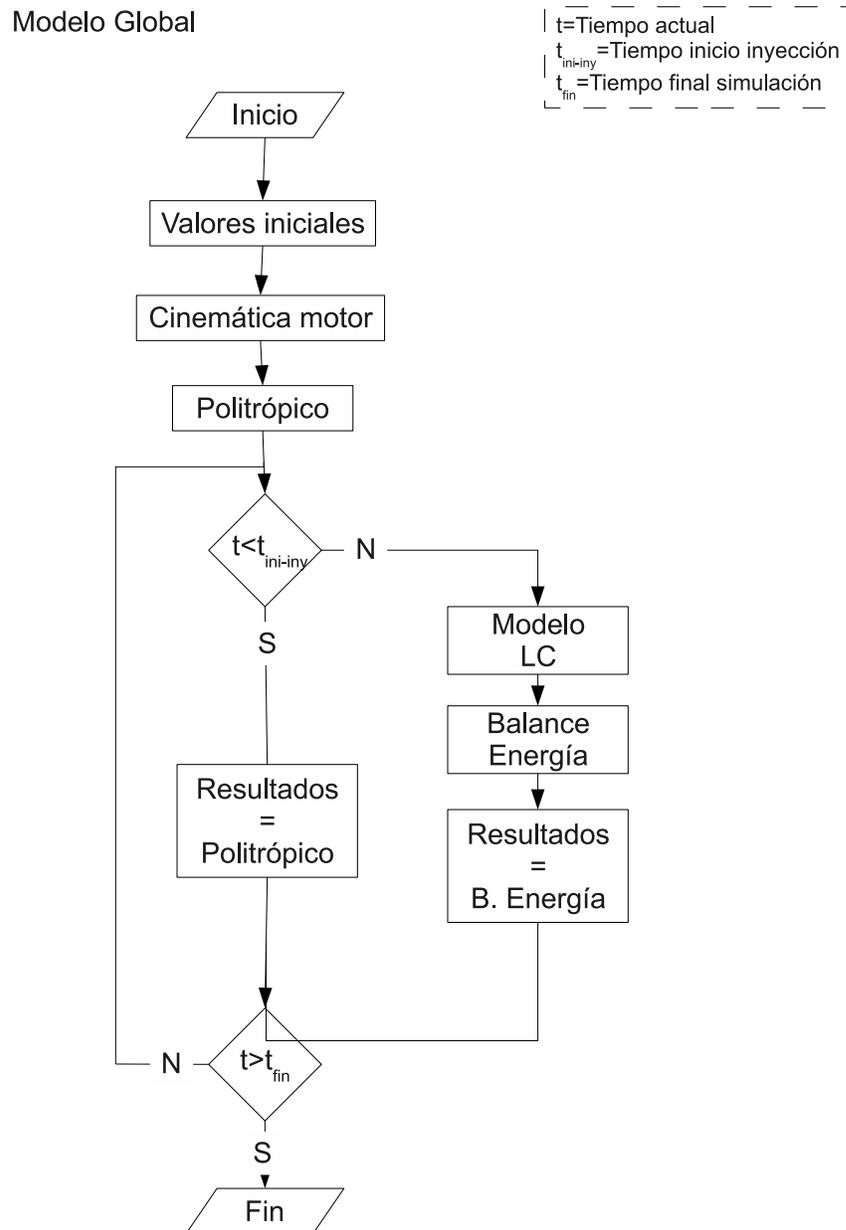
$$\frac{dP_{cil}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{m_{cil} \cdot R_{cil} \cdot T_{cil}}{V_{cil}} \right) \quad (4-47)$$

Finalmente, la determinación de la temperatura de cada VC y la presión en el cilindro, se obtiene mediante la solución simultánea de las k EDOs de los balances de energía (k=número de zonas, Ec.4-43) y la Ec.4-47.

## 4.4. Implementación computacional

La implementación de la solución para el modelo planteado se realizó en MATLAB, según el diagrama mostrado en la Figura 4-18. Donde, como se presento previamente, los modelos utilizados para la liberación de calor y el balance de energía son utilizados únicamente despues del inicio de la inyección del combustible, previo a esto, se considera un proceso politrópico en un único VC para la zona de aire fresco [26](Sec.3.3.1).

Para la implementación del modelo de liberación de energía, se considera el esquema descrito en la Fig.4-19. Donde, se realizó la paralelización del código para los submodelos de



**Figura 4-18.:** Diagrama general de la implementación del modelo propuesto.

cinemática, rompimiento, evaporación y combustión.

La programación de los submodelos de inyección y cinemática, rompimiento, evaporación y combustión, se realiza acorde a los diagramas presentados en las Figs.( 4-20, 4-21, 4-22, 4-23, 4-24, 4-25, 4-26).

Para la solución del sistema de ecuaciones no lineales obtenido en el modelo de equilibrio

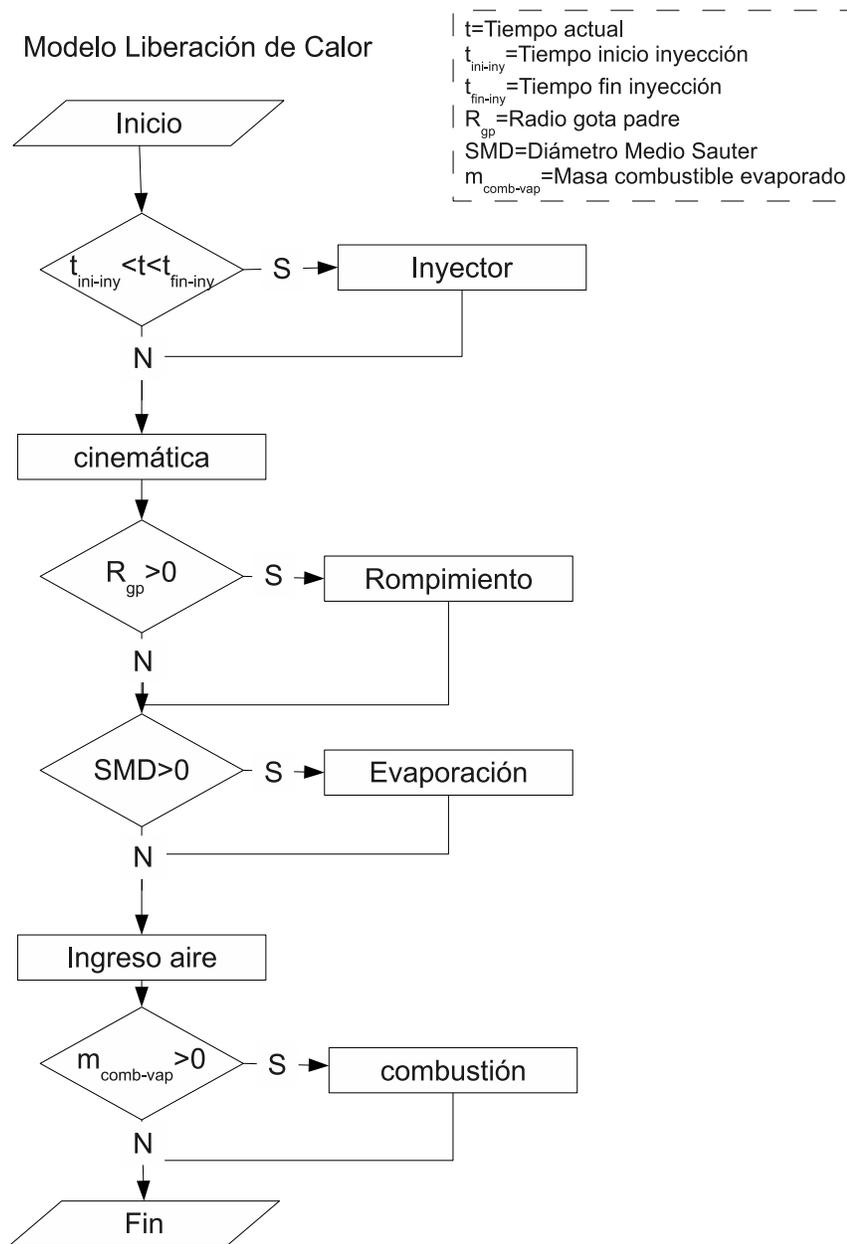


Figura 4-19.: Esquema de la implementación del modelo de liberación de energía.

químico se utilizó la función *fsolve* incluida en el módulo de optimización de MATLAB. Por su parte, la solución simultánea de las k-EDOs obtenidas en los balances de energía planteados para cada VC, se determina mediante el método de Runge-Kutta de cuarto orden. En cuyo caso, considerando la temperatura como variable independiente (Ec.4-48), todos los términos restantes son considerados como una función exclusiva del tiempo, la cual es determinada mediante la interpolación entre el estado final e inicial de la variable

(Ecs.4-49; 4-50), obtenidos en los demás submodelos planteados.

$$\frac{dT}{dt} = A(t) \cdot T + B(t) \quad (4-48)$$

$$A(t)_{\Delta t_i} = \frac{A_{t1} - A_{t0}}{\Delta t} \cdot (t - t_0) + A_{t0} \quad (4-49)$$

$$B(t)_{\Delta t_i} = \frac{B_{t1} - B_{t0}}{\Delta t} \cdot (t - t_0) + B_{t0} \quad (4-50)$$

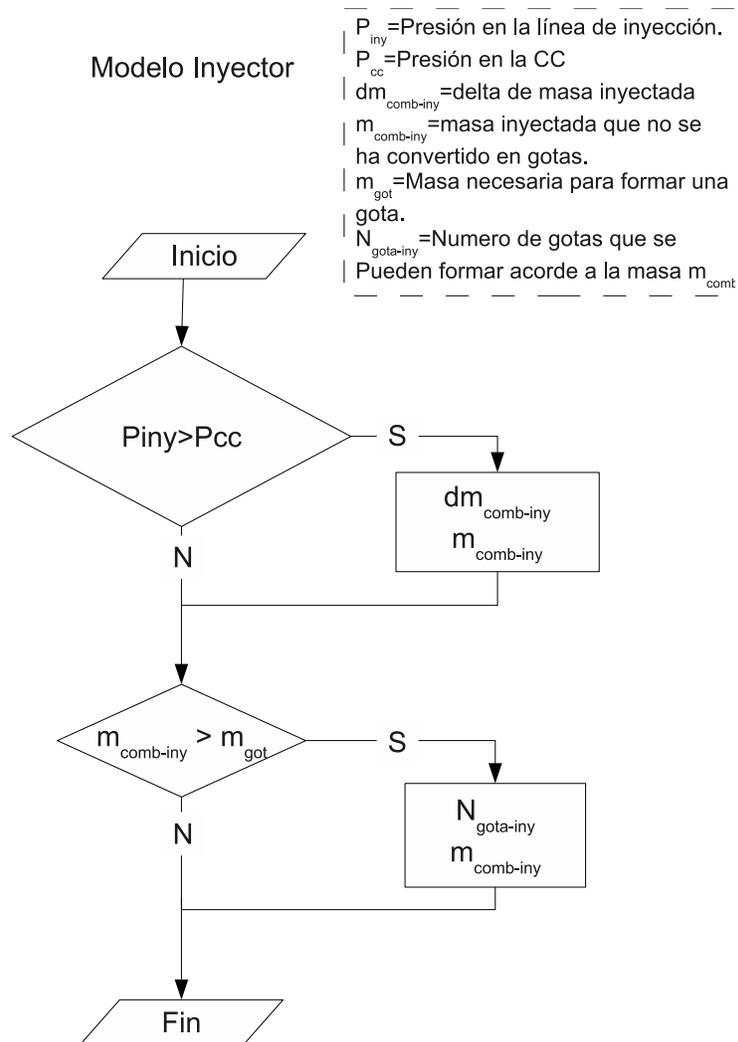


Figura 4-20.: Esquema de la implementación del modelo de inyección.

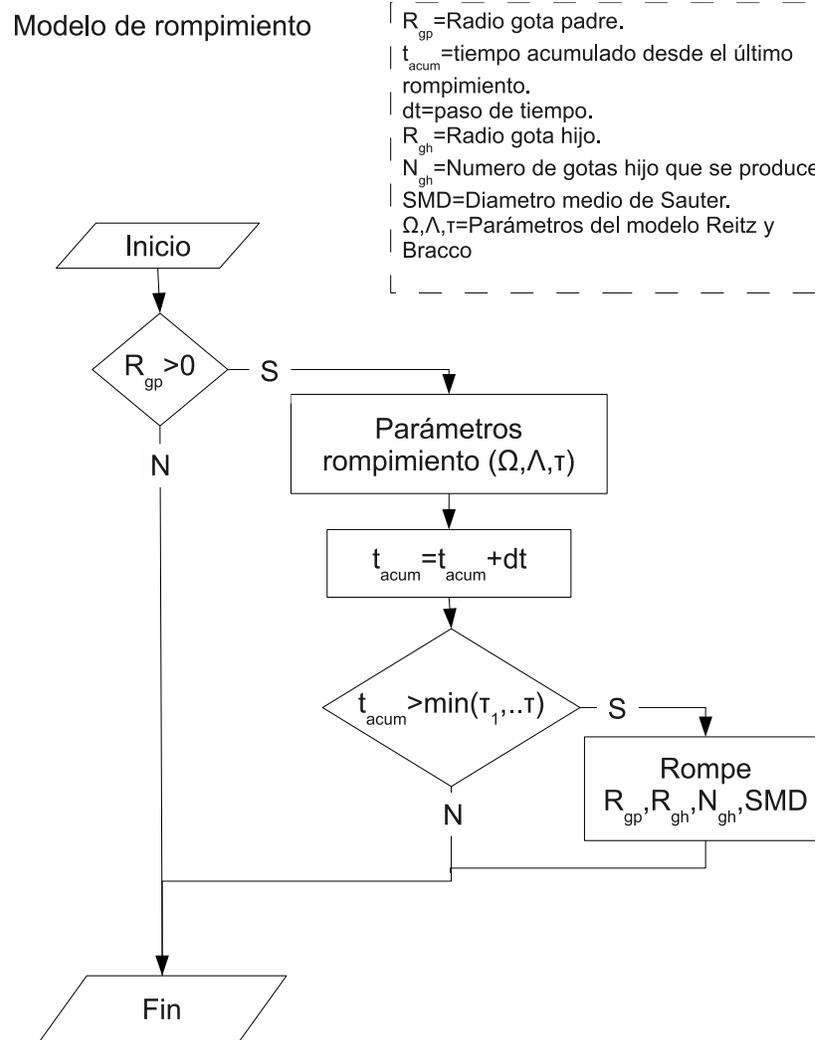
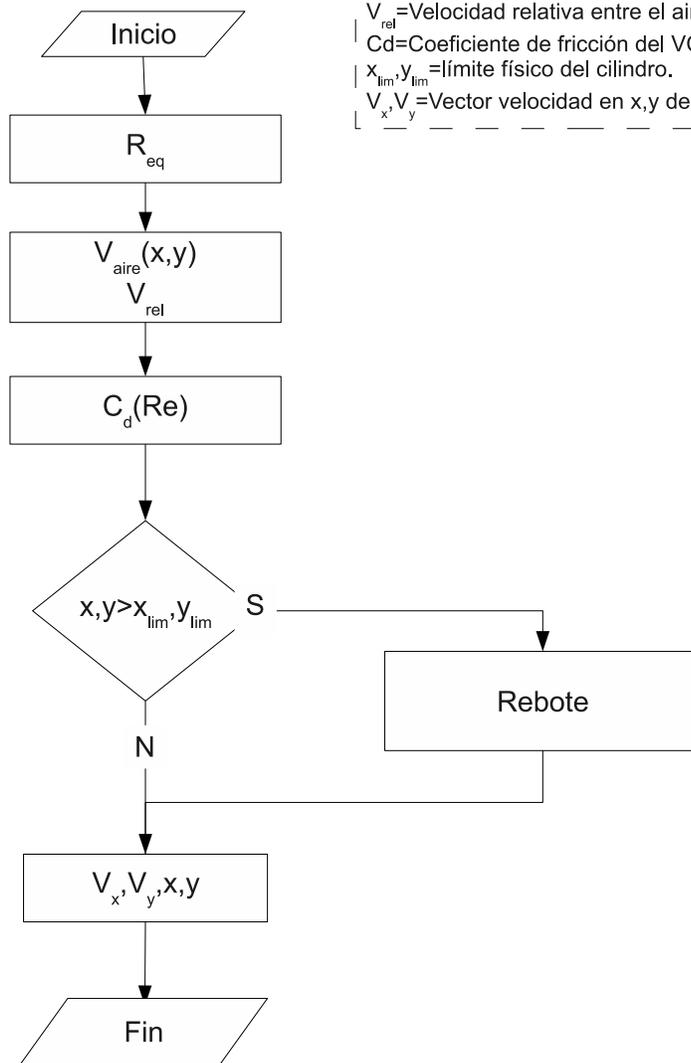


Figura 4-21.: Esquema de la implementación del modelo de rompimiento de las gotas.

Modelo de cinemática VC



$R_{eq}$  = Radio equivalente del VC.  
 $x, y$  = Coordenadas  $x, y$  del VC.  
 $V_{aire}$  = Vectores de velocidad del aire  $f(x, y)$   
 $V_{rel}$  = Velocidad relativa entre el aire y el VC  
 $C_d$  = Coeficiente de fricción del VC.  
 $x_{lim}, y_{lim}$  = límite físico del cilindro.  
 $V_x, V_y$  = Vector velocidad en  $x, y$  del VC.

Figura 4-22.: Esquema de la implementación del modelo de cinemática del VC.

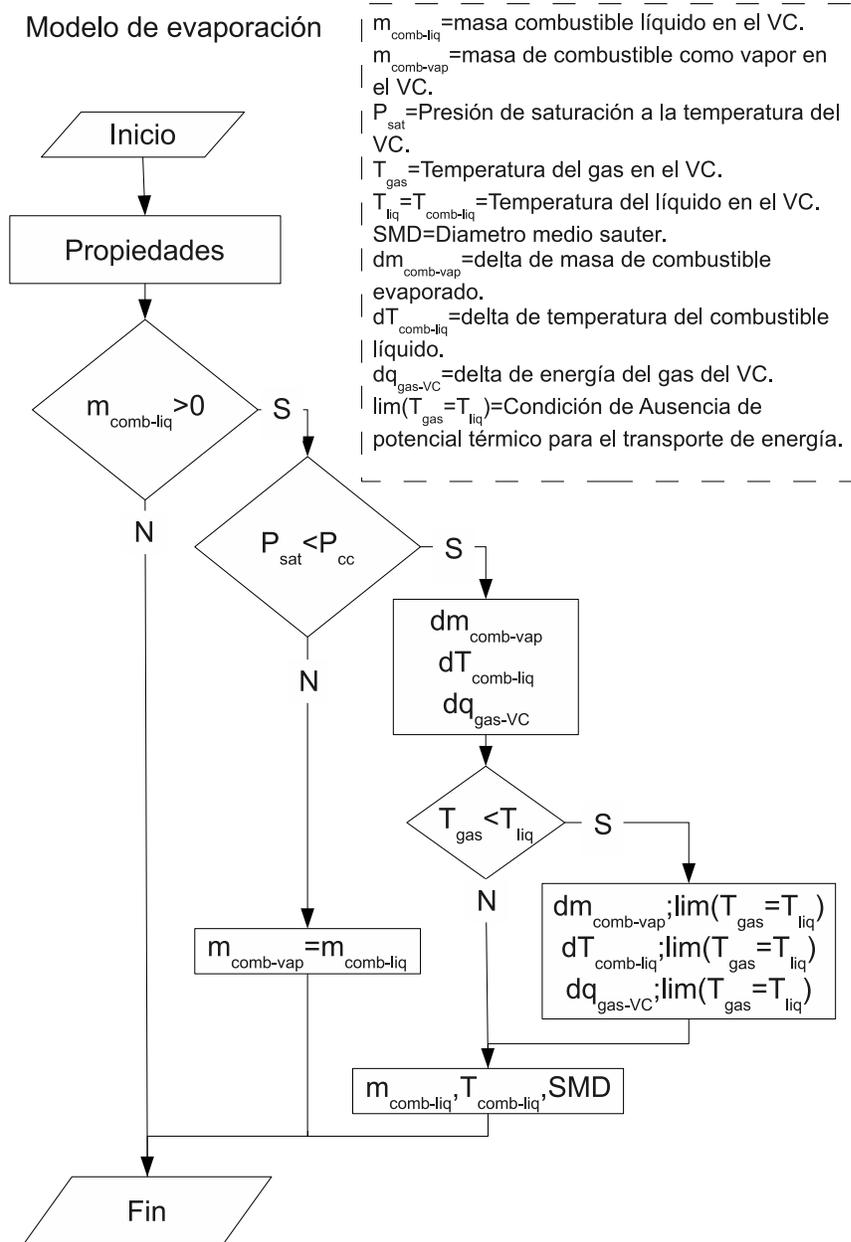


Figura 4-23.: Esquema de la implementación del modelo de evaporación de combustible líquido.

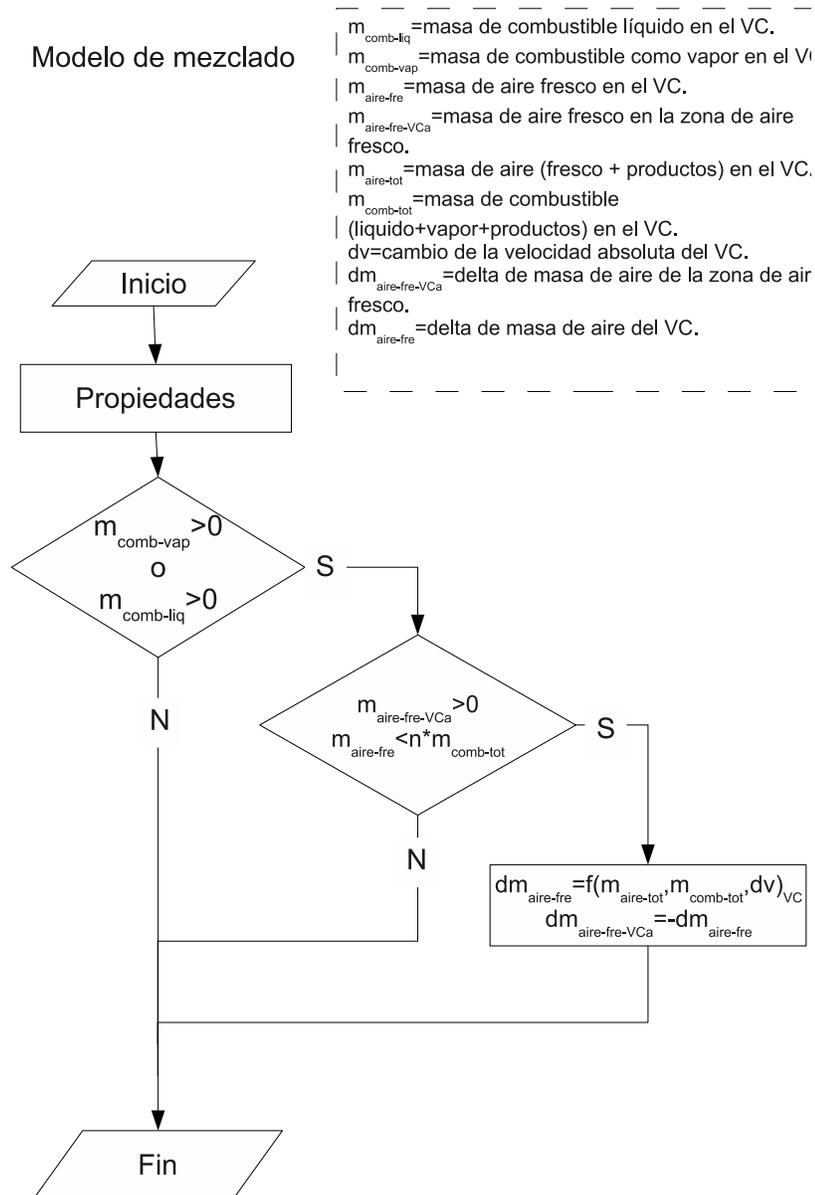


Figura 4-24.: Esquema de la implementación del modelo de mezclado de combustible y aire en el VC.

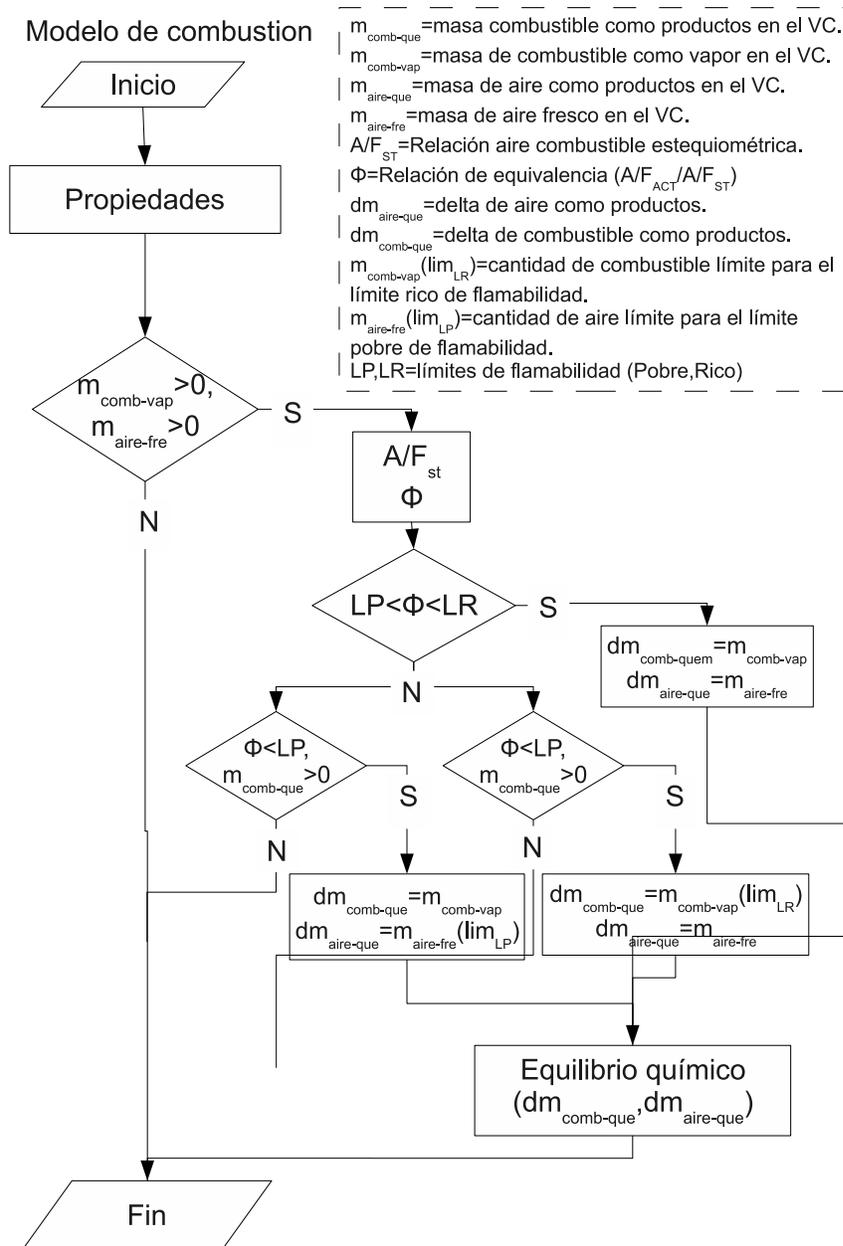


Figura 4-25.: Esquema de la implementación del modelo de combustión en el VC.

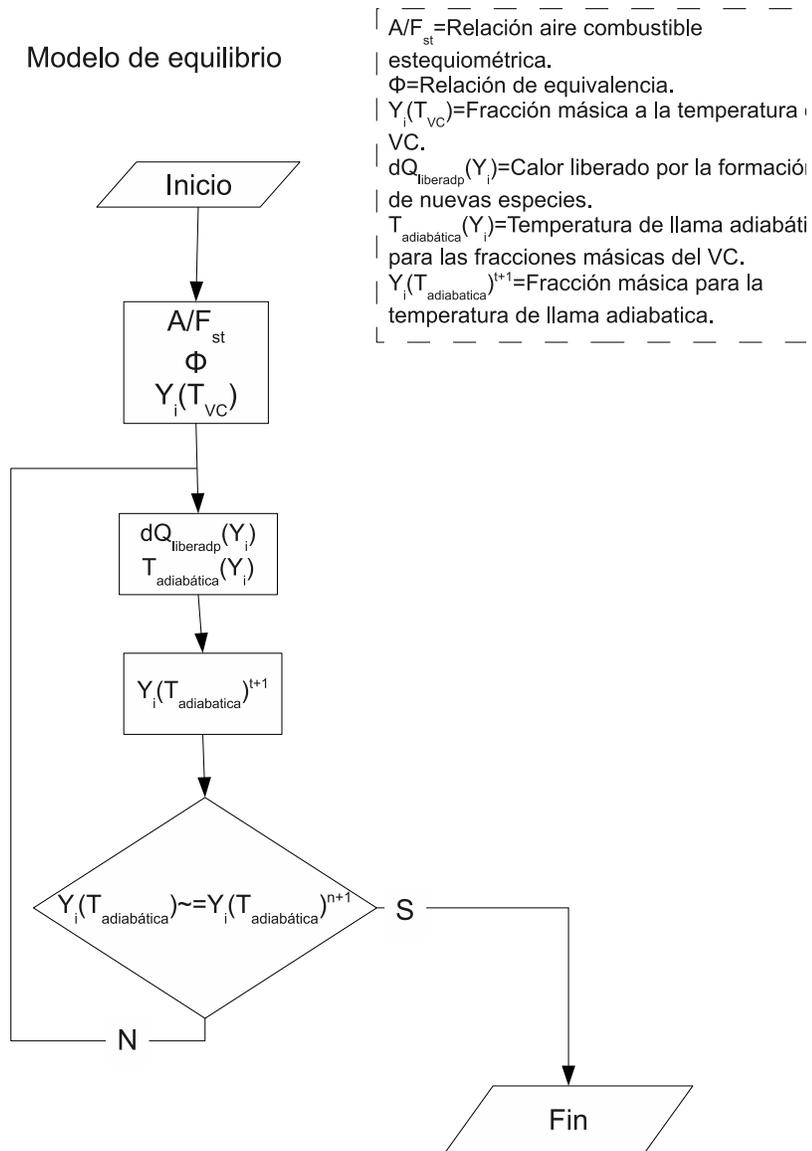


Figura 4-26.: Esquema de la implementación del modelo de equilibrio.

## 5. Resultados

Tras la implementación computacional del modelo propuesto en el capítulo anterior, se contrastaron los resultados obtenidos contra los presentados por Hiroyasu et al [1]. Con lo cual se buscó identificar la diferencia existente entre los obtenidos en el modelo propuesto y los presentados por el autor citado. Posteriormente, se realiza la simulación del motor seleccionado, considerando la existencia o no de algunos de los fenómenos modelados utilizando B20 como combustible, buscando determinar la relevancia de estos dentro de los parámetros que se utilizarán para la presentación de los resultados. Más adelante, se presentan las simulaciones y el análisis de los resultados para B0 y B20; esto bajo condiciones de operación estándar y de Bogotá. Finalmente, se contrastan los resultados obtenidos en el modelo y los resultados esperados en la hipótesis propuesta; terminando con la determinación de las constantes de la función de Vibe para las diferentes combinaciones utilizadas.

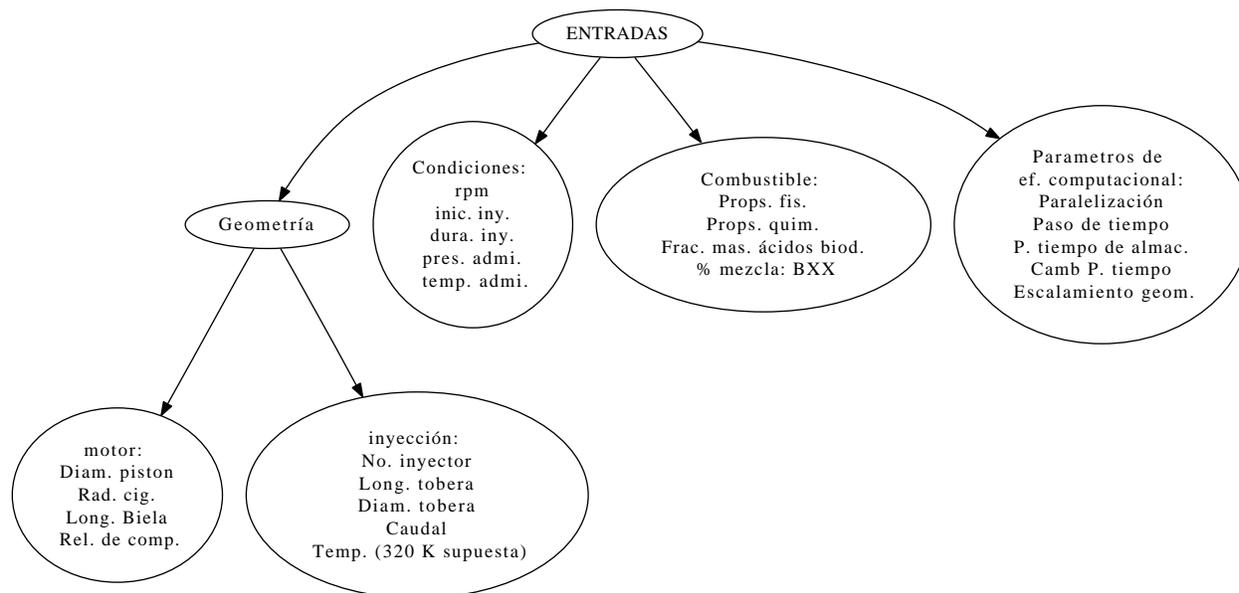
### 5.1. Validación del modelo

Debido a la necesidad de darle credibilidad a los resultados obtenidos en el modelo, se convierte en un requisito, comparar los mismos con resultados experimentales. En el presente estudio, la validación con este tipo de resultados no se realizó directamente y en su lugar, se compararon los obtenidos con los publicados por Hiroyasu et al [1].

#### 5.1.1. Descripción general

Acorde al planteamiento, el modelo presentado busca describir la LC en un MCI-EC , basándose en sus características geométricas, las propiedades físico-químicas del combustible (Anexo B) y las condiciones de operación como se muestra en la Figura 5-1. La obtención de las figuras contenidas en el presente capítulo se realiza teniendo en cuenta las diferentes variables para el caso de interés.

La importancia del modelo propuesto radica en que los resultados obtenidos (Figura 5-2) y que permiten la comparación de las diferentes variables consideradas relevantes en el análisis realizado a continuación; son dependientes únicamente de las entradas mencionadas previamente. Permitiendo así la determinación de las propiedades y estados del fluido de trabajo en un modelo cero dimensional, basándose no solo en la geometría y las condiciones de operación, sino también en las propiedades relevantes en la dinámica del rompimiento y la evaporación de las gotas de combustible. Adicionalmente, se deja de lado la necesidad de la



**Figura 5-1.:** Entradas necesarias en el modelo para la simulación.

obtención de constantes experimentales para la LC y se somete el desarrollo de dicho proceso a la evolución de ésta dinámica.

Debido a los requerimientos computacionales que se llegaron a exigir cuando se considero el total de combustible y la totalidad del fluido de trabajo en el cilindro, se opto por realizar un escalamiento geométrico del cilindro. De esta forma, las variables extensivas involucradas en este y que son utilizadas en el modelo (masa,dimensiones,etc), fueron reducidas por un factor equivalente al del número de agujeros del inyector. Con lo cual, fue posible reducir el tiempo de ejecución del modelo para el caso del motor simulado en un 60 %. Así mismo, como se menciona en el capítulo anterior, se procuró por la paralelización del código programado en los instantes donde fue posible. Con lo cual, en un equipo con capacidad de procesamiento paralelo es posible reducir aún más el tiempo de la solución. El cual, utilizando un computador con un procesador de 32 bits, de doble nucleo, bajo Ubuntu-Linux; fue reducido de aproximadamente 15 a 4 horas en promedio, para un motor y las condiciones presentadas en la sección subsiguiente.

Finalmente, cabe resaltar que la metodología abordada para la implementacion computacional, permite la modificación de manera sencilla de los diferentes submodelos utilizados (evaporación, cinemática del movimiento, rompimiento, etc). Dando la oportunidad de vincular modelos que describan con mayor fidelidad la cinética de reacción, múltiples mecanismos de rompimiento de las gotas, considerar efectos al interior del inyector,etc.

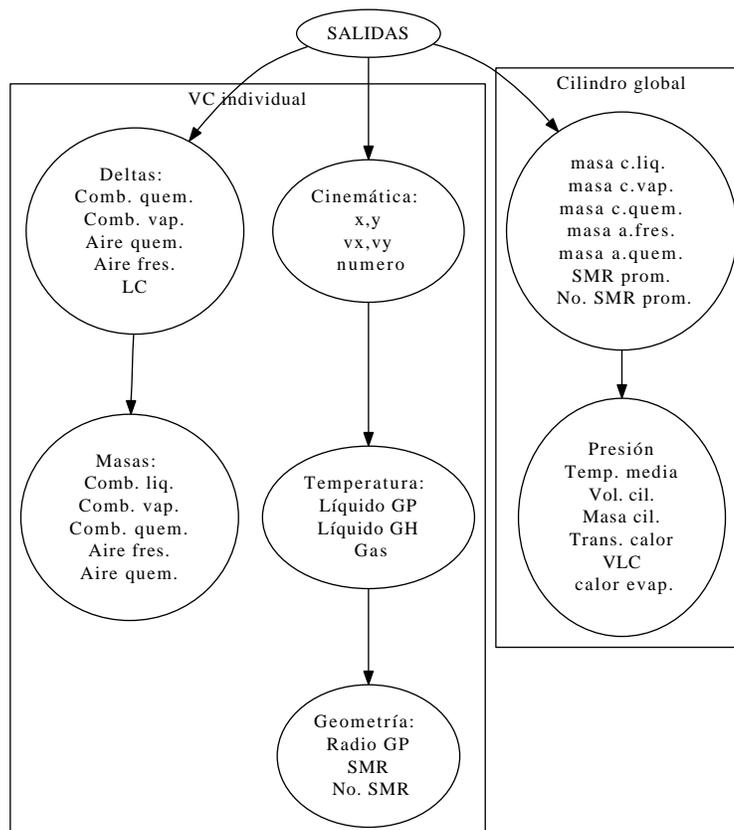


Figura 5-2.: Resultados del modelo para cada simulación.

### 5.1.2. Comparación

Para la comparación de los resultados del modelo, se utilizaron las variables geométricas (Tabla.5-1) y las condiciones mostradas en la Tabla5-2, como entradas en la simulación. De esta forma, se compararon los resultados obtenidos en el modelo con los existentes en la publicación citada.

En la simulación presentada por Hiroyasu et al [1], se observa en la Fig.5-3 en el intervalo previo al PMS, la misma tendencia de comportamiento, presentándose diferencias en los valores obtenidos. Es importante resaltar que en esta parte de la curva, el modelo se basa en un proceso politrópico. En cuyo caso, las diferencias son atribuibles exclusivamente al cálculo o el valor, del exponente politrópico utilizado y las variables que pueden modificarlo (p.ej. Composición) y no se presentan en el documento citado.

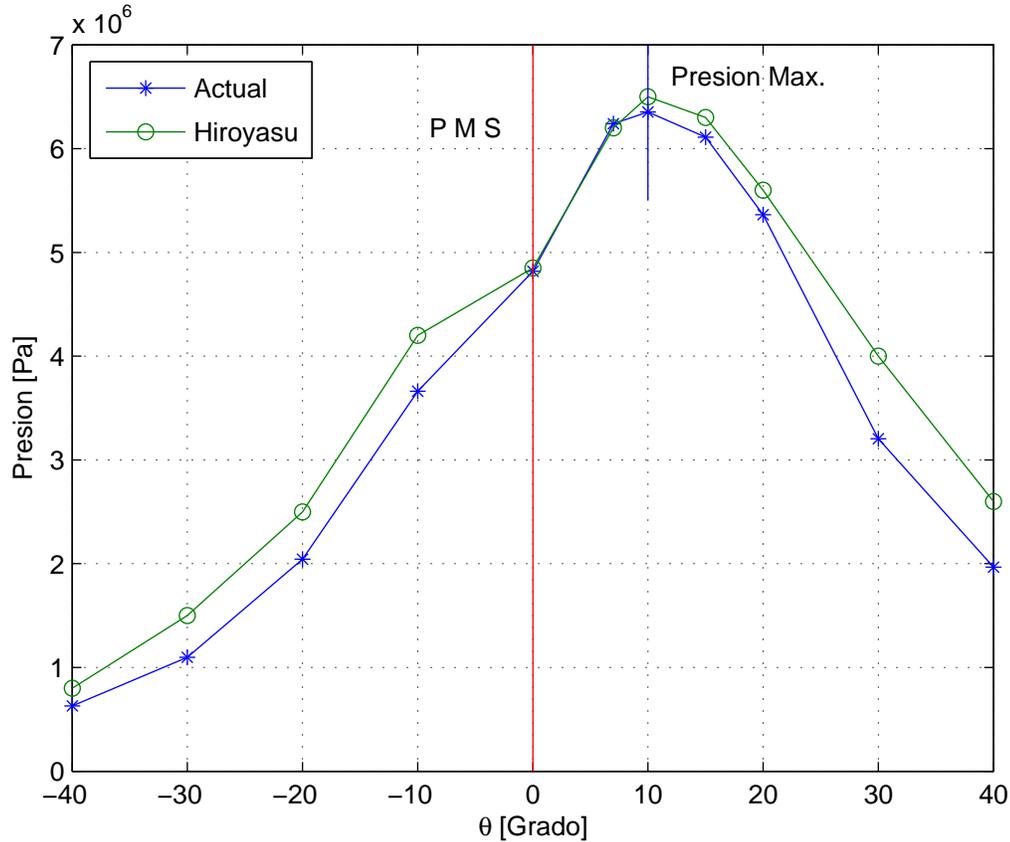
Posterior al PMS, se identifica que la tendencia aunque es similar, comienza a diferir partiendo desde (PMS+8). Este hecho puede ser explicado considerando dos factores: En primer lugar, ya que el modelo no controla la LC basándose en la cinética de la reacción o el mez-

**Tabla 5-1.:** Características del motor utilizado por Hiroyasu et al [1].

<b>Característica</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidad</b>
<i>Diámetro pistón</i>	$102 \times 10^{-3}$	m
<i>Radio cigueñal</i>	$105 \times 10^{-3}$	m
<i>Longitud biela</i>	$110 \times 10^{-3}$	m
<i>Relación de compresión</i>	14,5	Adm
<i>Velocidad del motor</i>	1800	rpm
<i>Número de Swirl</i>	2,2	Adm
<i>Diámetro del inyector</i>	$2,9 \times 10^{-4}$	m
<i>Número de inyectores</i>	4	Adm
<i>Flujo de combustible</i>	0,042	kg/s

**Tabla 5-2.:** Condiciones de la simulación realizada. (\* Respecto al PMS.)

<b>Condición</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidad</b>
<i>Angulo Inicio Inyección*</i>	-5	Grado
<i>Duración inyección</i>	18	Grado
<i>Temperatura inicial</i>	298,15	K
<i>Presión inicial</i>	$101,3 \times 10^3$	Pa



**Figura 5-3.:** Comparación de los resultados obtenidos en el modelo propuesto y los obtenidos por Hiroyasu et al [1].

clado de los reactantes, tienen lugar VLC posiblemente muy elevadas, que consideran la evaporación como el fenómeno que define el tiempo característico. Por otra parte, las diferencias en el calor total liberado por unidad de masa, que se pueden presentar al considerar como B0 al Dodecano y no al Diesel.

En el resto de la curva, se encuentra que existe la misma tendencia, pero una disminución más drástica en la presión para el modelo propuesto. Hecho que, puede aparecer asociado a lo mencionado previamente (VLC elevadas e influencia Dodecano). Ya que, si en el modelo el combustible se quema muy rápido y libera menos energía, la presión al interior del cilindro no se sostiene cercano a un valor determinado como se observa en el caso experimental. Con ello, el cambio de volumen ocasionado por el movimiento del pistón, provoca una disminución más severa en dicha presión al interior del cilindro. Dando como resultado un aumento progresivo en la diferencia entre las dos curvas. Sin embargo, es importante resaltar que tal efecto, se evidencia de manera importante cuando  $\theta_{Cig} > 30$ . Momento en el cual, acorde a

los resultados que se presentan más adelante, el proceso de combustión ha terminado y los efectos de la viscosidad como factor de modificación ya han ocurrido. Adicionalmente, las implicaciones de lo presentado previamente, son factores que afectarán los resultados para los dos combustibles. Con lo cual, a menos de la existencia de una interacción importante entre combustible-efecto, las consecuencias generarán una imprecisión equivalente para los dos utilizados.

Teniendo en cuenta lo anterior, en adelante se considera que el modelo describe aproximadamente el comportamiento de las diferentes variables citadas. Permitiendo de esta forma, realizar la prueba de la hipótesis planteada en el presente estudio.

## 5.2. Influencia de los fenómenos modelados

Previo a la comparación y análisis de los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas modificando el combustible, se presentan a continuación los obtenidos en el área superficial de las gotas, el SMR, el número de gotas del SMR, la Masa Evaporada de combustible (ME) y la Velocidad de Evaporación de la misma (VE); al considerar o no algunos de los fenómenos modelados. De esta forma, se realizaron simulaciones utilizando B20 como combustible para los siguientes casos.

- En ausencia de rompimiento y combustión (SC-SB).
- En ausencia de combustión (SC).
- considerando todos los fenómenos (CC).

Dichos resultados se obtuvieron considerando condiciones estándar de presión y temperatura en la admisión. La razón de estas condiciones obedece a que el desacoplamiento de la obtención de la VE del balance de energía del VC daba como resultado en condiciones de Bogotá una VE muy baja, que llegaba a tiempos de residencia de líquido muy extensos. Con lo cual, en las etapas avanzadas de la expansión en los cuales el gas se caracteriza por una baja densidad energética, aún se presentaba el fenómeno de evaporación y la disminución de la temperatura del VC a causa de este. Dando como resultado oscilaciones numéricas en las cuales la solución estaba compuesta por números complejos ( $i$ ). Desafortunadamente, la metodología abordada para resolver esta problemática carecía de sustento y por ello los resultados obtenidos mediante esta no se presentan. En su lugar, se analizan los obtenidos en condiciones estándar en los cuales no se presentaron los inconvenientes mencionados previamente.

El efecto de la viscosidad ( $\nu$ ) en el proceso de LC se tiene en cuenta dentro del modelado mediante las Ecs.4-18,4-19,4-20 donde se hace presente en el número de Ohnesorge ( $Z$ ) y la definición análoga del número de Taylor ( $T = Z \cdot \sqrt{We_{gas}}$ ). El cual presenta una relación directamente proporcional con esta propiedad ( $Z \propto \nu$ ). De esta forma la relación no lineal y proporcional de  $Z$  en la Ec.4-18, involucra un aumento en la longitud de onda ( $\Lambda$ ) causado por un incremento en la viscosidad ( $\nu$ ). Así mismo, la relación inversamente proporcional de la velocidad de crecimiento de la onda ( $\Omega$ ) con  $Z$  en la Ec.4-19, resalta el efecto amortiguante de la propiedad sobre el proceso de desintegración de la columna. Este hecho pone en evidencia los efectos que la viscosidad puede tener sobre la combustión y la LC; esto es, incrementar el tamaño promedio de las gotas que se separan de la columna líquida (debido a la relación existente entre  $\Lambda$  y el radio de la GH) y disminuir la frecuencia a la que estas se producen. Dando como resultado una reducción en la cantidad y aumento en el tamaño de las gotas producidas para un tiempo determinado. Con lo cual se espera una disminución en la razón de evaporación, la masa evaporada, la masa quemada y con esta de la LC.

En las figuras mostradas se referencia con una línea vertical y se denomina con  $\theta_{10\%-B0}$  el punto donde en el tercer caso (CC) se alcanzó el 10% de la LC para el B0. Esto se presenta principalmente, buscando tener un punto de referencia para las secciones posteriores en las cuales, se modifican los combustibles.

Para llevar a cabo el análisis comparativo de los casos mencionados, se utilizaron las Ecs.5-1;5-2 y 5-3 para identificar de forma porcentual las diferencias existentes entre los casos mencionados. Los resultados de la aplicación de estas expresiones se muestran en la parte inferior de cada una de las figuras mostradas. Debido a la presencia de resultados cercanos a cero en el denominador se alcanzan valores diferenciales muy elevados, por ello en algunas figuras se observa que las curvas sobrepasan los límites de estas. Presentación que se adopta buscando mantener la resolución de las gráficas en los instantes relevantes para el análisis. A manera de referencia, la denominación de los diferentes instantes dentro de las figuras presentadas se realiza respecto al PMS, de esta forma el momento en el cual la posición del cigüeñal se encuentra  $X$  grados previo al PMS se denomina como  $-X_{PMS}$  y  $Z$  grados posterior al PMS como  $+Z_{PMS}$ .

$$D1 = \frac{\Psi_{CC} - \Psi_{SC}}{\Psi_{CC}} \cdot 100 \quad [\%] \quad (5-1)$$

$$D2 = \frac{\Psi_{CC} - \Psi_{SC-SB}}{\Psi_{CC}} \cdot 100 \quad [\%] \quad (5-2)$$

$$D3 = \frac{\Psi_{SC} - \Psi_{SC-SB}}{\Psi_{SC}} \cdot 100 \quad [\%] \quad (5-3)$$

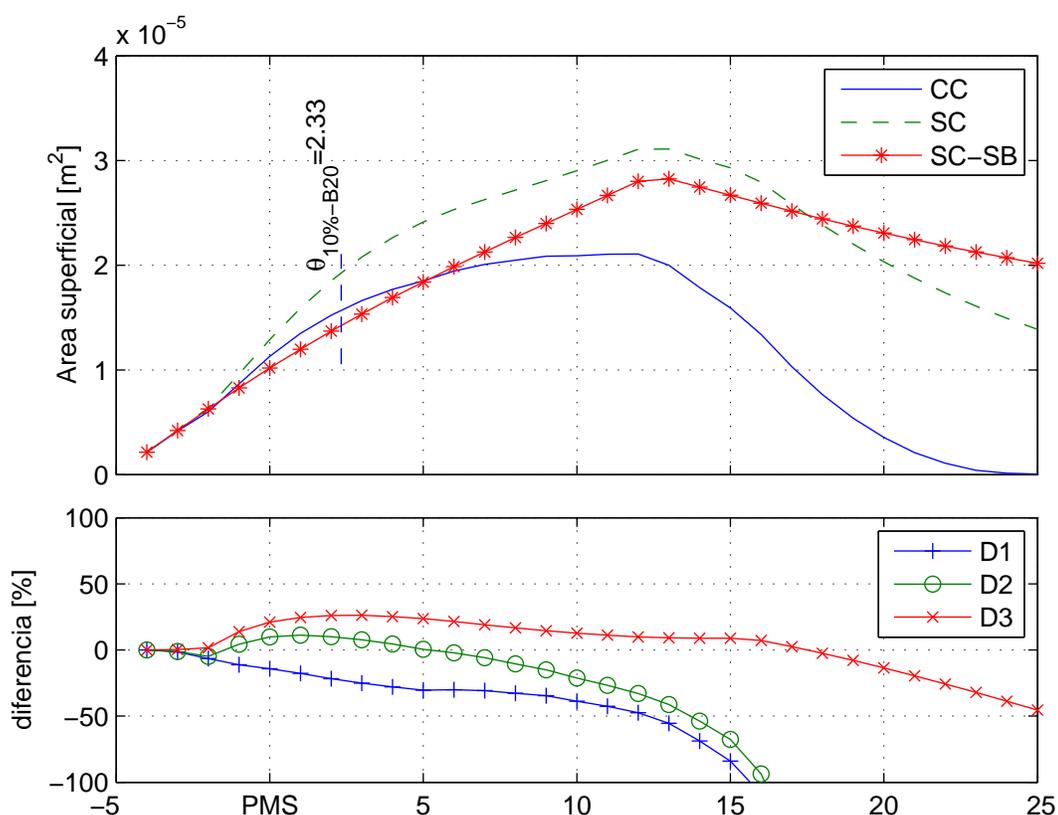
Donde,

$\Psi$  = Propiedad o característica a comparar.

Tomando como punto de partida área superficial de las gotas presentes en el chorro (Fig. 5-4) y designando los intervalos de comparación para  $-5_{PMS}$  a  $+5_{PMS}$ ,  $+5_{PMS}$  a  $+15_{PMS}$  y  $+15_{PMS}$  a  $+25_{PMS}$ ; como I1, I2 e I3, respectivamente. Se observa que el efecto del rompimiento de las gotas en el cual se considera influye la viscosidad, se percibe inicialmente en I1 desde aproximadamente  $-2_{PMS}$ . Dando como resultado un incremento aproximado en dicha área para los casos SC de 25 % y CC de 30 %, respecto a SC-SB. De igual forma, al considerar los casos CC y SC es posible afirmar que dentro de este intervalo el efecto de la combustión disminuye el área de las gotas presentes en cerca de un 30 %. Dentro de I2 se observa que aproximadamente en  $+13_{PMS}$  en los tres casos se alcanza el máximo valor de dicha característica geométrica, siendo mayor y menor para los casos SC y CC, respectivamente. Para I3, la desaparición de las gotas para el caso CC y SC, dan como resultado una disminución drástica del área respecto a SC-SB, como se observa en la gráfica diferencial. Un análisis general de los casos SC y CC, muestra una tendencia similar para ambos, siendo diferentes por los instantes en los que ocurren modificaciones de dicha tendencia (máximo, mínimo, etc). A manera de síntesis, se puede afirmar que el efecto del rompimiento sobre el área superficial es el incremento de ésta (CC y SC vs SC-SB). Con lo cual acorde con lo citado previamente se espera una relación inversa entre viscosidad y área. Por otra parte, como consecuencia de la combustión se disminuye el tiempo en el que ocurren las modificaciones a la tendencia del comportamiento de la curva de área superficial de las gotas presentes en el chorro de inyección (SC vs CC).

Respecto al SMR (Figura 5-5-A) y el número de gotas correspondientes a este (Figura 5-5-B); se observa dentro de los tres intervalos (I1, I2 y I3) que siempre el SMR es mayor y el número de gotas menor para el caso SC-SB hasta  $(+20_{PMS})$ . Así mismo, considerando la Figura 5-5-A, dentro de (I2 y I3) el efecto del rompimiento disminuye en cerca de 40 % el SMR, mientras que la combinación del rompimiento y la combustión produce una disminución de hasta un 50 % en el SMR para el mismo intervalo. Hecho que también se puede ver asociado con la viscosidad al considerar el incremento en la temperatura del líquido para CC y la relación inversa entre la viscosidad y la temperatura. Teniendo en cuenta la Figura 5-5-B, se observa que si bien los efectos del rompimiento en el número de gotas se presentan de forma temprana ( $-2_{PMS}$ ) con un incremento que llega a ser cercano al 70 % en el número de estas (SC vs SC-SB); el efecto de la combustión (SC vs CC) se hace significativo más adelante sobre este parámetro ( $+10_{PMS}$  a  $+15_{PMS}$ ).

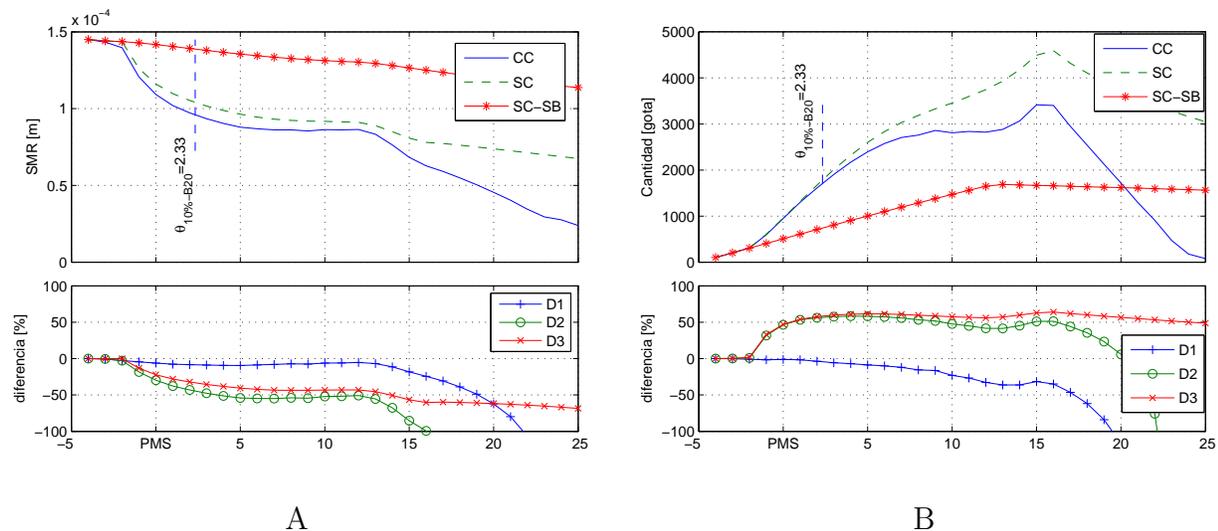
Es importante resaltar que el número de gotas correspondientes al SMR (Figura 5-5-B) obedece a un cálculo matemático y no a una característica propia del chorro de inyección. De esta forma, mientras que la comparación apoyada en el área superficial y el SMR pone



**Figura 5-4.:** Area superficial de las gotas presentes en el chorro de inyección.

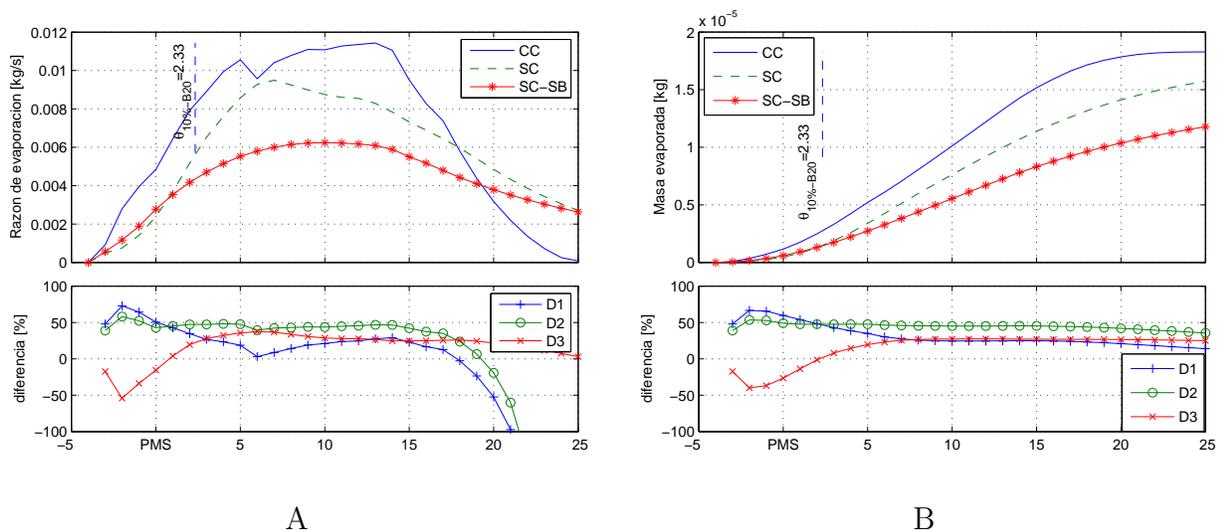
en evidencia la cantidad y calidad de la atomización; el número de gotas correspondientes al SMR, obedece a una relación entre estas dos variables ( $Area_{chorro}/Area_{SMR}$ ) y en algunos casos resulta en un parámetro de comparación ambiguo. Por ello, la Figura y el análisis de la misma solo se realiza en esta oportunidad y se omiten en las secciones posteriores.

La razón de evaporación (RE, Figura 5-6-A) y la Masa Evaporada (ME, Figura 5-6-B) muestran en I1, como el efecto del rompimiento se manifiesta sobre estas dos variables. Ya que, al comparar los resultados obtenidos entre SC y SC-SB, se observa que el efecto del rompimiento no favorece la RE ni la ME en los instantes iniciales (hasta aproximadamente  $+1_{PMS}$ ) dando como resultado valores inferiores hasta en un 50% para el primer caso. Sin embargo, posterior a estos instantes se evidencia el efecto sobre la RE y la ME (25%) del incremento del área superficial y la reducción del SMR para el caso SC comparado contra SC-SB. Por otra parte y contrario a lo observado previamente, al considerar el fenómeno de combustión se presenta un aumento significativo y superior a 50% respecto a SC-SB y a SC en la VE y la RE; el cual, se mantiene hasta las etapas finales de la evaporación para



**Figura 5-5.:** A. Radio Medio de Sauter y B. Número de gotas correspondientes al SMR para las gotas presentes en el chorro de inyección

el primer caso y en el segundo disminuye hasta un 25 % aproximadamente. Lo observado en estos resultados muestra que, si bien el fenómeno del rompimiento y así de la viscosidad, puede llegar a tener una influencia importante en la VE y la RE, en el presente caso no se evidencia en las etapas iniciales de la evaporación. De igual forma, no se puede dejar de lado el efecto que sobre tales variables puede llegar a tener la combustión y la disponibilidad de energía que la acompaña.



**Figura 5-6.:** A. Velocidad de evaporación y B. Masa evaporada de las gotas presentes en el chorro de inyección

Como resultado general de los tres casos simulados en la presente sección se puede afirmar que si bien el efecto del rompimiento es el incremento del área superficial de las gotas del chorro (Figura 5-4), dicho incremento no es sinónimo de mejor atomización (Figura 5-5-A). Así mismo, la existencia de una mayor área superficial o un menor SMR, no implican una velocidad superior en la evaporación del combustible; como se observa de manera particular en I1 para el caso SC. El cual posee en las etapas iniciales del intervalo la mayor área superficial, un SMR intermedio y la menor RE. En contraste de este, en CC se observa para el mismo intervalo, un área superficial inferior, el menor SMR y la mayor RE y ME. Finalmente, es importante resaltar que al considerar los casos SC y SC-SB; y apoyándose en la hipótesis propuesta se puede esperar una mayor RE para el primer caso. Sin embargo, los resultados obtenidos muestran que pese a la existencia de una mayor área superficial y menor SMR (los cuales se presentan acorde con dicha hipótesis), inicialmente la RE es menor para SC durante los primeros 5 grados de inyección.

### 5.3. Resultados con mezclas de biodiesel

La comparación de los resultados obtenidos en el modelo planteado se realiza en dos etapas. La primera que obedece a los resultados en condiciones estándar y la segunda a condiciones de Bogotá. De esta forma, se trata de mostrar las diferencias existentes no solamente por la modificación del combustible, sino también, las que se presentan debido a la interacción del factor combustible y las condiciones iniciales de operación.

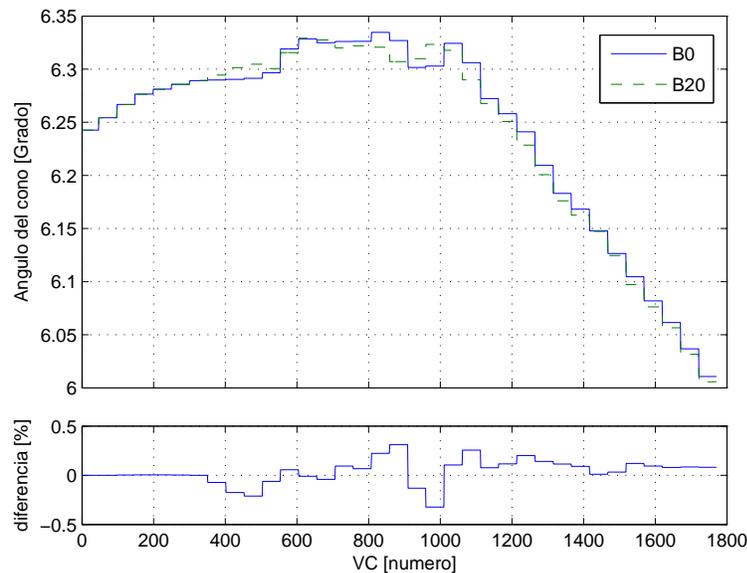
Al igual que en la sección previa, para realizar el análisis del comportamiento de las diferentes variables se utilizó la Ec.5-4. Por medio de la cual, se determinaron las diferencias porcentuales que se presentan en la parte inferior de cada una de las figuras mostradas.

$$Dif = \frac{\Psi_{B0} - \Psi_{B20}}{\Psi_{B0}} \cdot 100 \quad [\%] \quad (5-4)$$

El primer resultado encontrado que es equivalente para las dos condiciones simuladas es la cantidad de masa de combustible inyectado. Situación que se presenta asociada a la diferencia en las densidades entre los dos combustibles utilizados. Teniendo en cuenta una temperatura de inyección constante de 320 K, las diferencias en densidades encontradas son inferiores a  $6 \text{ kg/m}^3$  (AnexoB). Con lo cual, considerando el motor mencionado y un flujo volumétrico constante en la inyección, se obtiene una media de 1700 gotas inyectadas aproximadamente. Dando una diferencia de masa asociada a las densidades inferior a  $7 \times 10^{-11} \text{ kg}$  por gota y a  $2 \times 10^{-7} \text{ kg}$  en total, resultados que representan una diferencia de masa inyectada inferior al 0,1 % para los dos combustibles.

Otro de los resultados común para las dos condiciones es el ángulo del cono de inyección (Figura 5-7). Acorde a lo obtenido en las dos simulaciones realizadas, no se observa una

tendencia definida a modificar dicho ángulo cuando el combustible se cambia. Así mismo, teniendo en cuenta que no se consideran interacciones entre los diferentes VC utilizados, de existir una posible influencia causada por las leves oscilaciones observadas en el valor del ángulo del cono, el modelo no tiene la capacidad de captarla. Por otra parte, es importante resaltar que para la obtención del ángulo del cono en estas simulaciones se utilizó la Ec.4-23 planteada por Siebers y Higgins [112]; en la cual, las únicas variables del combustible que modifican el cono de inyección son las densidades del aire y del líquido. De esta forma, el efecto de la viscosidad no se puede ver reflejada en dicho ángulo. La justificación a la elección de esta expresión radica en que para la utilización de la Ec.4-22 propuesta por Reitz y Bracco [10], es necesario conocer la longitud de la tobera del inyector, variable que no se encuentra incluida en la publicación citada para la obtención de los parámetros del motor y la validación del modelo propuesto.



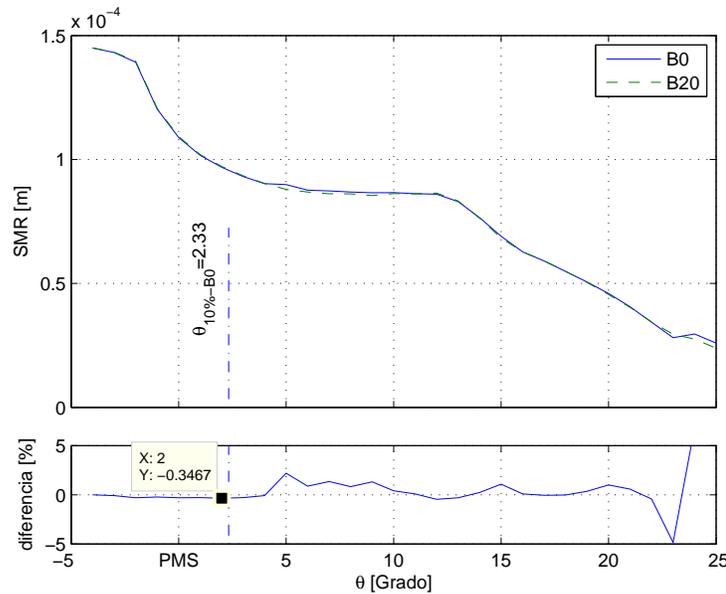
**Figura 5-7.:** Ángulo máximo del cono de inyección ( $\theta/2$ ) en los diferentes VCs utilizados para describir la LC en condiciones de Bogotá.

### 5.3.1. Estándar

Para llevar a cabo la comparación de los resultados en condiciones estándar, se utilizaron como entradas de la simulación una presión en la admisión e inicial para la simulación de 101,3 kPa; y una temperatura inicial de 298,15 K. De esta forma y acorde con las características del modelo, estas dos condiciones definen no solamente estos dos valores iniciales, sino también las demás variables relacionadas con estas y en especial la masa de aire admitido; variable

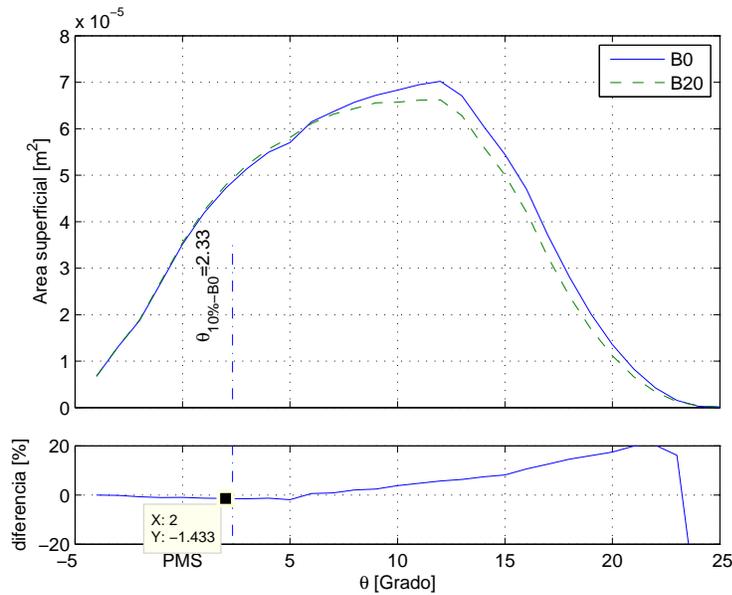
que puede llegar a ser importante en la eficiencia que se obtenga del proceso de combustión.

Al modificar los combustibles en condiciones estándar se observa que el SMR medio de las gotas presentes en el chorro de inyección (Figura 5-8), es ligeramente superior para el B20 (menos de 1 %) hasta que se alcanza el punto referenciado como 10 % de la combustión con B0 ( $\theta_{10\%-B0}$ ). Posterior a esto y acorde con lo observado en la sección anterior, aproximadamente en el intervalo entre  $+3_{PMS}$  a  $+12_{PMS}$ , se mantiene un SMR constante para ambos combustibles, siendo mayor para el B0. De igual forma, al considerar este resultado y el área superficial (Figura 5-9) dentro del primer intervalo mencionado ( $< +3_{PMS}$ ), se observa que la utilización de B20 hasta este punto, que se caracteriza por un SMR mayor ocasionado por la viscosidad, se encuentra acompañada por un área superficial mayor (1,4 %); hecho que solo puede ser explicado por la presencia de una mayor cantidad de combustible líquido para el B20. Por el contrario, en el intervalo siguiente  $+3_{PMS}$  a  $+12_{PMS}$  y prácticamente hasta el final, se observa un incremento significativo del Area Superficial (AS) y como se menciona antes un incremento del SMR para el B0. Con lo cual, a diferencia de lo planteado en dicho intervalo, se presenta menor cantidad de combustible como líquido y menor SMR para el B20.



**Figura 5-8.:** Radio Medio de Sauter para las gotas presentes en el chorro de inyección para condiciones estándar de operación del motor.

Los resultados obtenidos en la ME (Figura 5-10) y RE (Figura 5-11) permiten sustentar mejor lo observado previamente. De esta forma, en el primer intervalo citado ( $< +3_{PMS}$ ) donde no se observó diferencia significativa en el SMR o el AS, se muestran valores de ME y VE superiores para el B0 cercanos a 8 %. Lo cual acorde con lo anterior se presenta debido a

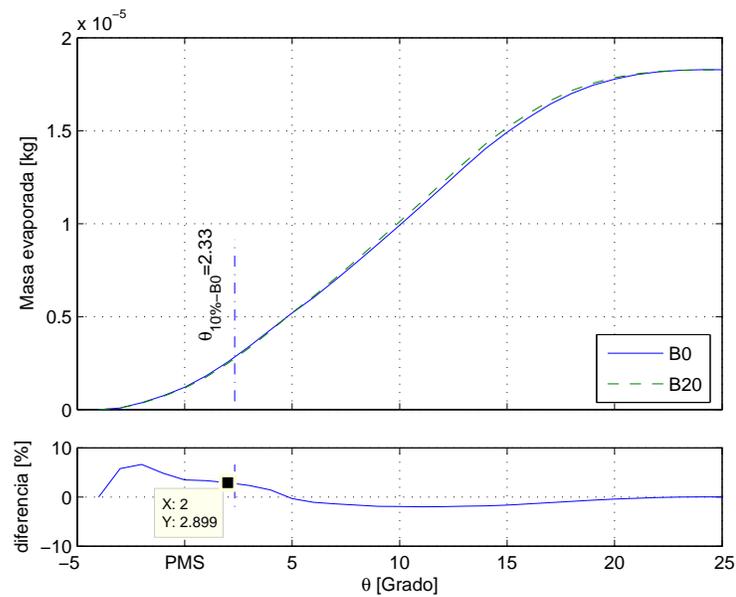


**Figura 5-9.:** Area superficial para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones estándar.

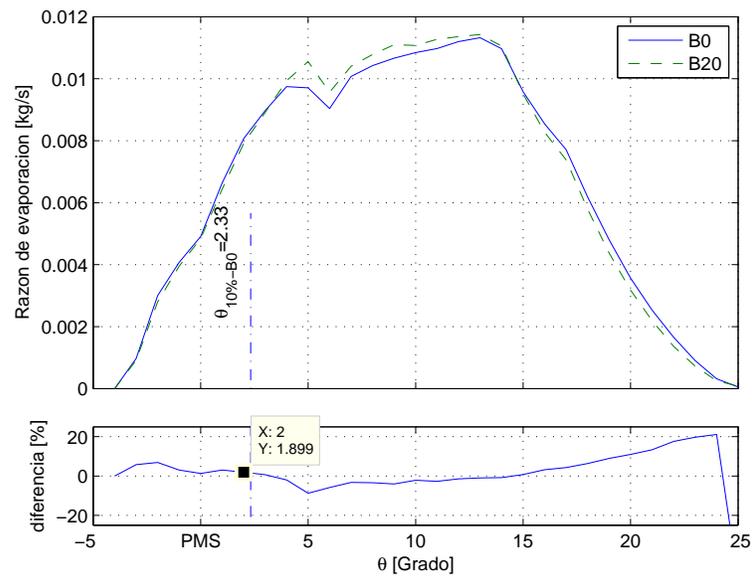
una menor cantidad de combustible como líquido y más como vapor para el B0. Posterior a este intervalo ( $> -3P_{MS}$ ), se presenta para el B20 un aumento importante (cercano al 10 %) en la VE y efecto sobre la ME es un valor superior en hasta un 2 % en dicho intervalo. Si bien, el resultado obtenido en el primer intervalo se presenta acorde con la hipótesis propuesta (mayor viscosidad, mayor SMR, menor VE), no se puede pasar por alto el comportamiento de las variables en el segundo de los intervalos mencionados, ya que pone en evidencia un efecto compensatorio de lo observado en el primero de estos. De igual forma, es importante tener en cuenta que si en los primeros 10 grados se presenta una mayor cantidad de combustible evaporado y menor SMR para el B0, en prácticamente los 20 subsiguientes la ME es mayor y el SMR es menor para el B20.

La masa de Combustible Quemado (MQ, Figura 5-12 ) y la Razon de Quemado (RQ, Figura 5-13), muestran dentro de los primeros instantes del primer intervalo ( $< +3P_{MS}$ ), un comportamiento similar al observado en RE y ME. Comportamiento que se presenta acorde con la hipótesis planteada, en la cual se considera una dependencia directa entre la disponibilidad de combustible (ME) y el quemado de este (MQ). Sin embargo, a diferencia de esto en los instantes previos a  $+3P_{MS}$  donde acorde a la Figura 5-10 y Figura 5-11 son mayores ME y RE, se produce un incremento importante en la MQ y la RQ (5 % y 21 % aproximadamente) para el B20. Con lo cual, también se hace cuestionable la dependencia citada entre ME y MQ.

La presión (Figura 5-14) y la temperatura media al interior del cilindro (Figura 5-15), muestran leves diferencias que se hacen importantes partiendo desde  $+3P_{MS}$ . Resulta importante



**Figura 5-10.:** Masa evaporada para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones estándar.



**Figura 5-11.:** Velocidad de evaporación para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones estándar.

tener en cuenta que si bien la trayectoria de las curvas en las figuras mostradas es diferente para los dos combustibles, en este punto las diferencias porcentuales se hacen muy pequeñas

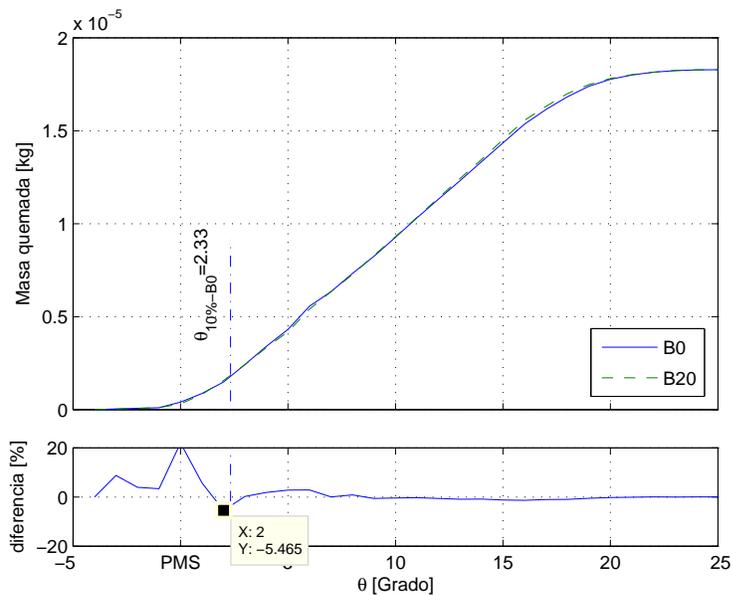


Figura 5-12.: Masa quemada en condiciones estándar de operación.

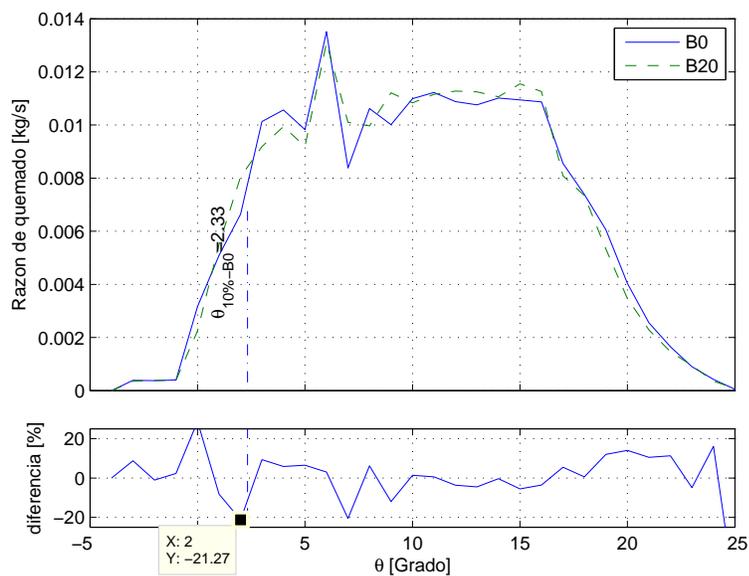
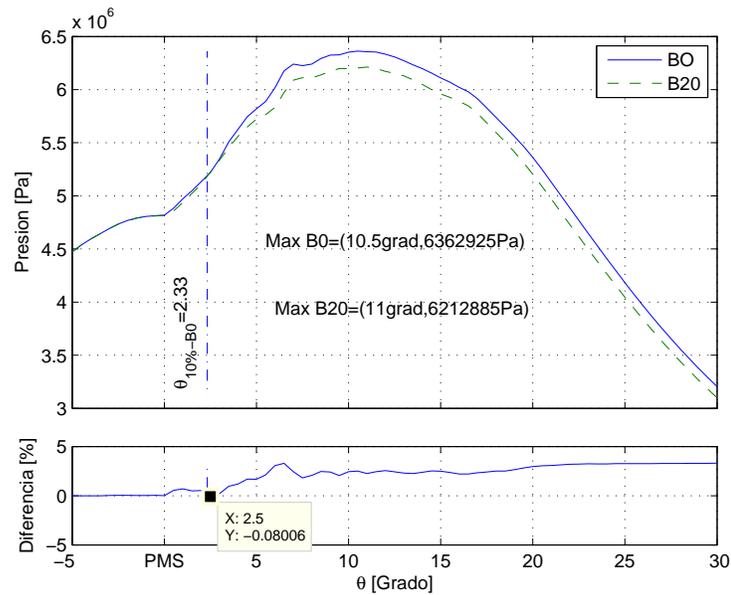


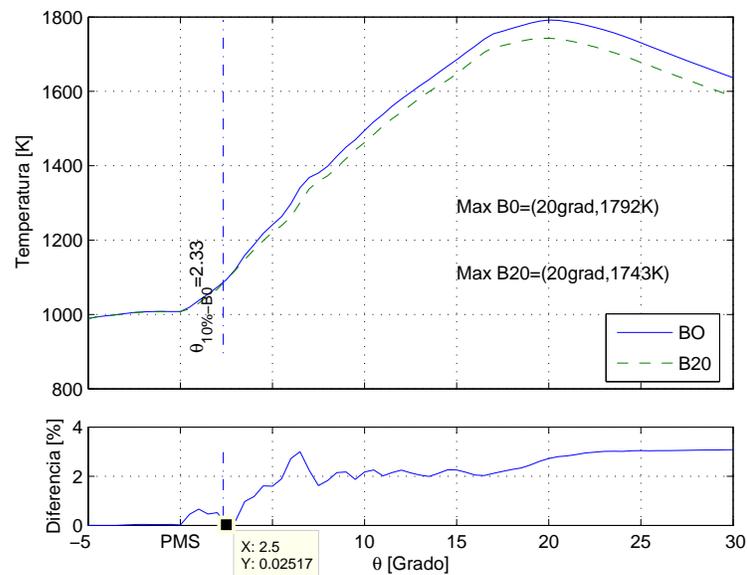
Figura 5-13.: Velocidad de quemado de combustible en condiciones estándar.

comparadas con el resto de lo observado en cada figura. Con lo cual, es posible cuestionar la relevancia de la viscosidad del líquido en la presión al interior del cilindro en lo previo a este punto; donde hasta el momento se ha presentado un comportamiento acorde a la hipótesis propuesta, en las variables dependientes directa o indirectamente de la viscosidad (AS, SMR,

ME, MB).



**Figura 5-14.:** Presión al interior del cilindro en condiciones de operación estándar.

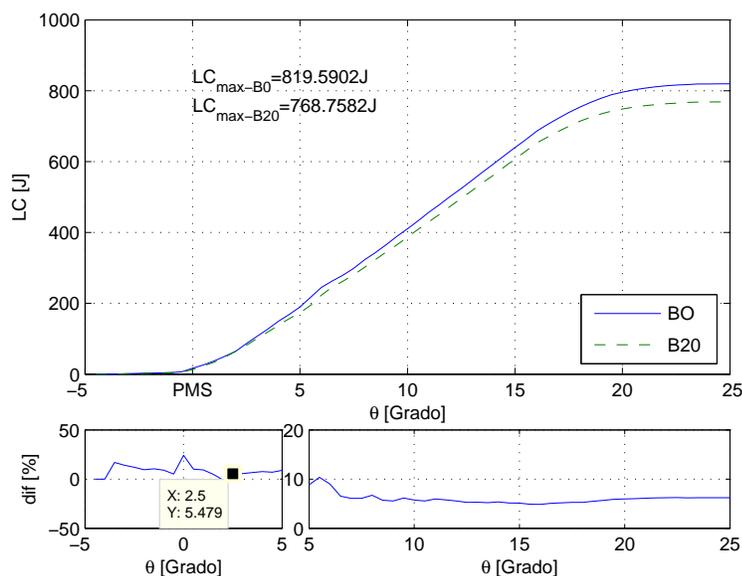


**Figura 5-15.:** Temperatura media del fluido de trabajo al interior del cilindro en condiciones estándar.

Los resultados obtenidos en la LC (Figura 5-16) y la LC normalizada (Figura 5-17, equi-

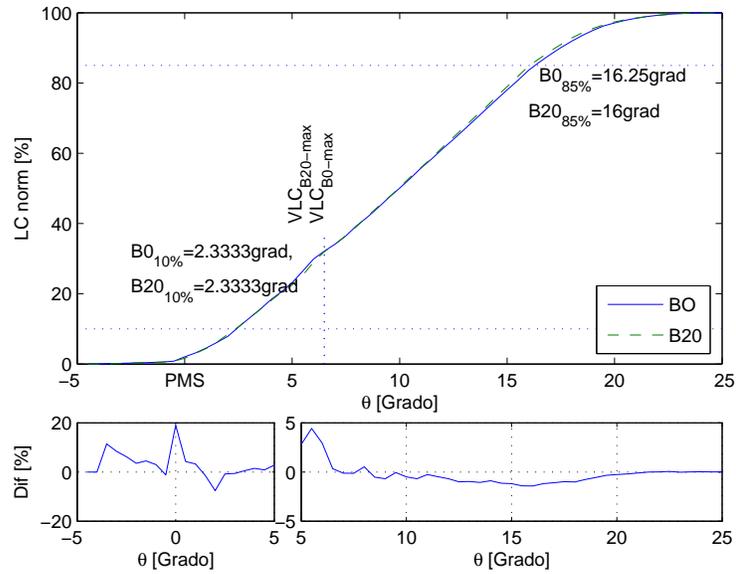
valente a la función de Vibe  $\chi$ ) muestran que, en el primer intervalo utilizado ( $< +3_{PMS}$ ) donde se presentan oscilaciones de hasta 25 % la LC es superior para el B0 en cerca de 6 % para dicho punto y se comporta de manera similar hasta el punto final ( $+25_{PMS}$ ). Sin embargo, al comparar dichos resultados con la LC normalizada, se observa que coinciden para los dos combustibles los instantes donde se alcanza el 10 % de LC. Así mismo, considerando el punto donde se alcanza el 85 % de LC ( $BX_{85\%}$ ) se puede suponer un proceso de LC más veloz para el B20, ya que se presenta 0,25 grados antes para este combustible.

Resulta importante resaltar la diferencia que se puede percibir al realizar la comparación con la LC (Figura 5-16) y la LC normalizada (Figura 5-17); en la primera, se observa siempre un valor superior para el B0 de forma que se supone un proceso de LC más eficiente y/o veloz para dicho combustible; en la segunda, por el contrario se alcanzan a percibir oscilaciones en torno al cero para los dos combustibles. De esta forma es posible separar parcialmente el efecto de la densidad energética del combustible (PCS o PCI) de los demás fenómenos considerados. Esto teniendo en cuenta que uno de los efectos observados de esta propiedad sobre el fenómeno de combustión, es el incremento de la diferencia de temperatura entre el líquido y el gas, con lo cual se acelera de forma importante la RE.



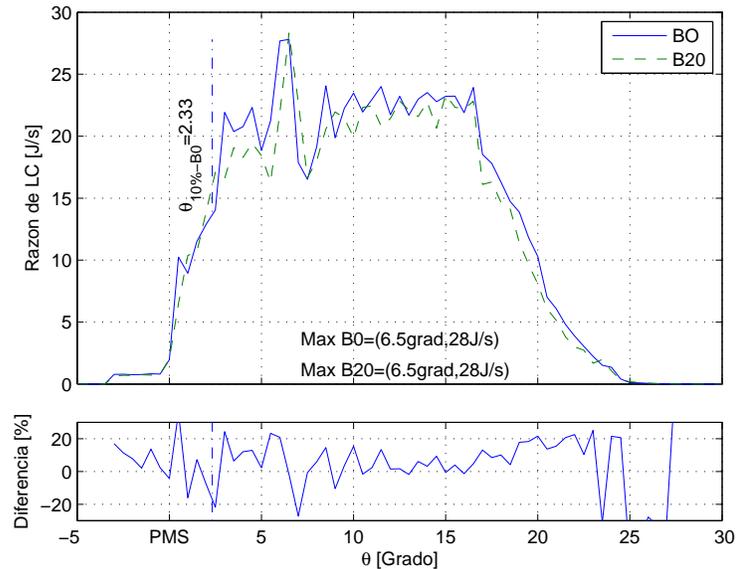
**Figura 5-16.:** Liberación de calor en condiciones estándar de operación.

La razón de liberación de calor o VLC, muestra que en el intervalo inicial considerado no se evidencia una tendencia de comportamiento general. De esta forma, se observan oscilaciones de hasta 25 % en la VLC hasta el punto  $+3_{PMS}$ . Posterior a este y en adelante se nota una leve tendencia a presentar una VLC más elevada para el B0. Es importante tener en cuenta



**Figura 5-17.:** Liberación de calor normalizada ( $\chi$ ) para condiciones estándar.

la tendencia general observada en el comportamiento de la VLC para los dos combustibles. Ya que, si bien se evidencia una misma tendencia en dicho comportamiento, se muestra a menor escala y levemente retrasada para el B20.



**Figura 5-18.:** Velocidad de LC en condiciones estándar.

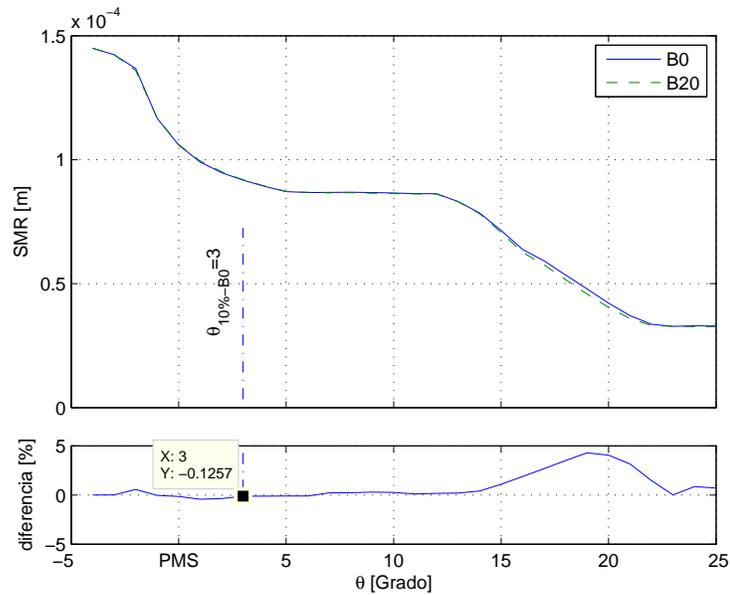
Según los resultados obtenidos en condiciones estándar, se puede afirmar que acorde con lo esperado, la modificación del combustible y la viscosidad asociada a este, implica un leve incremento (menor a 1%) en el SMR de las gotas presentes en el chorro de inyección. El cual, se presenta acompañado de una disminución de hasta 8% en la ME en la etapa inicial de la combustión. Sin embargo, se evidencia también que a diferencia de lo esperado, no se presenta una dependencia directa entre la ME y la MQ en la etapa inicial de la combustión; considerando instantes como  $+2_{PMS}$  donde se observa menor cantidad de ME y mayor cantidad de MQ para el B20. Posterior a este instante, se presenta una leve dependencia entre la ME y la MQ. Así mismo, los resultados de la LC muestran que si bien se presentan diferencias de hasta 20% en la parte inicial de la combustión, los cuales no fueron dependientes de la cantidad de ME y por ende del SMR; posterior a aproximadamente  $+5_{PMS}$  la diferencia se hace más estable y tiende a un valor más marcado por la diferencia en la cantidad de energía almacenada en el combustible (LHV). Ya que, después de este punto, no se observan oscilaciones importantes en las diferencias de la MQ para los dos combustibles.

### 5.3.2. Bogotá

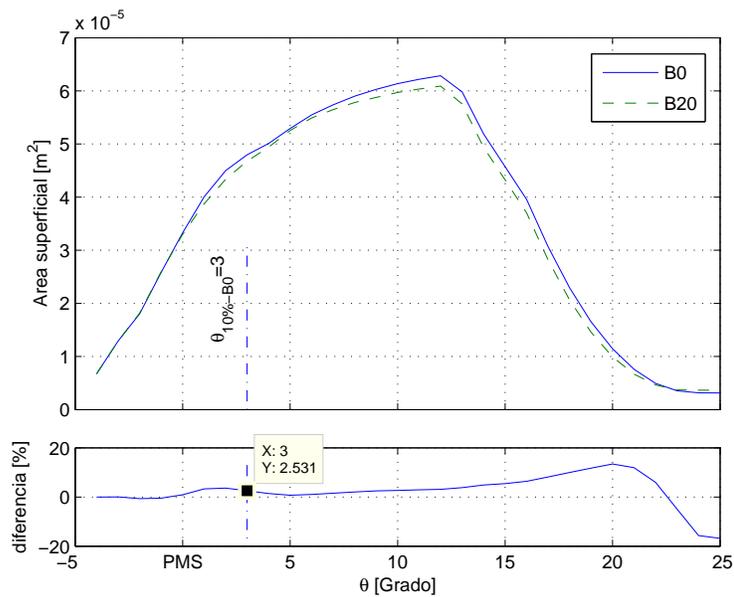
La comparación del comportamiento de las diferentes variables en condiciones de Bogotá se llevo a cabo considerando la presión en la admisión como  $P_{ad} = 0,75 \times 101,3 \text{ kPa}$  y la temperatura del aire admitido como  $T_{ad} = 288,15 \text{ K}$ . No se realizaron consideraciones adicionales respecto a humedad o concentración de componentes del aire admitido. Al igual que en el caso anterior, las características del modelo modifican no solamente estas dos condiciones sino también las diferentes variables dependientes de estas. Buscando un desarrollo similar del análisis para los dos casos considerados (Estándar y Bogotá), el orden de aparición y la metodología empleada para llevarlo a cabo se plantea de forma similar.

El SMR (Figura 5-19) y la AS (Figura 5-20), muestran previo al PMS una tendencia diferente a la observada en condiciones estándar. Esto es, menor SMR y mayor área para el B20, lo cual evidencia mejor atomización (más AS y más gotas). Posterior a este punto y hasta aproximadamente  $+8_{PMS}$ , una disminución en el SMR para el B0 acompañada de un aumento en el AS, caso contrario al anterior. Es importante tener en cuenta el resultado observado en la Figura 5-20, en la cual para la mayoría del intervalo mostrado ( $> PMS$ ) se presenta un AS mayor para el B0. Teniendo en cuenta los resultados obtenidos, como comentario general de las figuras referenciadas, es posible afirmar que las condiciones iniciales utilizadas modificaron el comportamiento de la atomización del combustible.

En los resultados obtenidos en la ME (Figura 5-21) y la RE (Figura 5-22), se evidencia lo citado previamente. Esto es, considerando una dependencia directa entre el SMR y la AS con la ME y la VE, en el primer intervalo se espera mayor cantidad de masa evaporada para el B20 y en el segundo mayor para el B0. Hecho que, acorde a los resultados en la ME y RE, no se presenta en esta oportunidad. Dicha situación sugiere la existencia de un factor



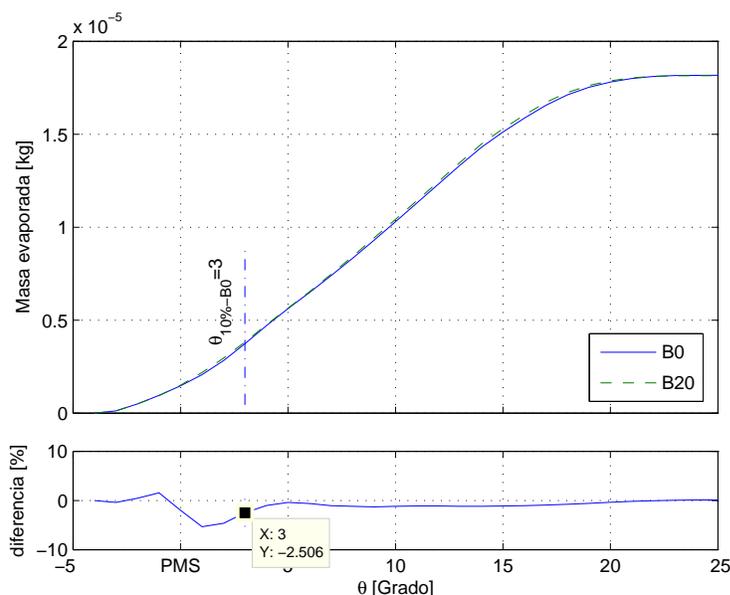
**Figura 5-19.:** Radio Medio de Sauter para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de operación de Bogotá.



**Figura 5-20.:** Area superficial para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de Bogotá.

adicional a los contemplados que puede llegar a modificar de manera importante estas dos variables. Teniendo en cuenta que la tendencia inicial en la ME y VE es igual para los dos

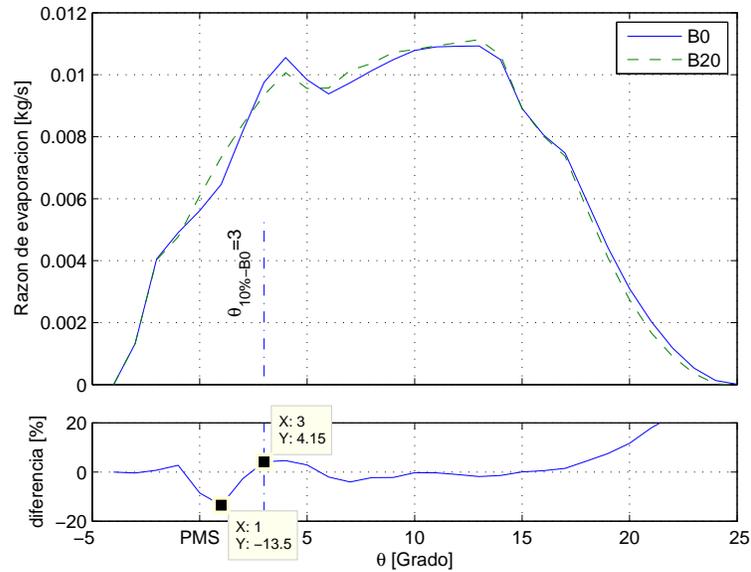
casos simulados (Estándar y Bogotá) donde se presenta una diferencia superior para el B0 cercana al 2% y 4% en los primeros instantes y posteriormente de casi 5% y 13% para el B20. Esto sin dejar de lado las diferencias observadas en el AS y el SMR. Adicional a lo anterior, es importante resaltar que posterior al punto  $-1_{PMS}$  y en adelante hasta prácticamente el final del intervalo mostrado, se observa mayor cantidad de masa evaporada para el B20.



**Figura 5-21.:** Masa evaporada para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de Bogotá.

Acorde a lo observado en la MQ (Figura 5-23) y la RQ (Figura 5-24), es posible afirmar que contrario al caso anterior, la MQ se ve asociada a la disponibilidad de ME. Así mismo, se observan diferencias muy elevadas (superiores al 50%) en los instantes iniciales, que se ven reducidas a medida que evoluciona el fenómeno de la combustión. Vale la pena resaltar que al igual que con la ME, la MQ se mantiene superior durante todo el intervalo para el B20. Los resultados obtenidos hasta este punto muestran que, en condiciones de Bogotá no se evidencia una dependencia marcada entre el SMR, AS y la ME y MQ. Sin embargo, muestran que es posible que un factor no considerado previamente permita tener ME y MQ similares y hasta superiores para el B20.

En general, una de las características más resaltadas del biodiesel es la presencia de oxígeno en su molécula. El cual, en condiciones estándar debido a una mayor cantidad de masa de aire admitido y con ello de oxígeno, puede no resultar significativo. Sin embargo, en condiciones de Bogotá, donde la presión atmosférica disminuye la densidad del aire y la



**Figura 5-22.:** Velocidad de evaporación para las gotas presentes en el chorro de inyección en condiciones de Bogotá.

masa admitida es inferior, un requerimiento inferior de oxígeno para la combustión puede permitir un encendido más temprano del B20 o una combustión más eficiente. Con lo cual y acorde con lo observado en las Figura 5-6-A,B; el fenómeno de evaporación se ve acelerado a causa de un entorno con mayor temperatura. De esta forma, un encendido temprano de la mezcla, permite contrarrestar eficientemente el efecto de la modificación de la viscosidad y su influencia sobre el fenómeno de rompimiento y evaporación.

Los resultados obtenidos en la presión (Figura 5-25) y temperatura media al interior del cilindro (Figura 5-26), permiten reforzar lo expuesto previamente. Esto es, al considerar el primer intervalo ( $< PMS$ ), no se percibe una diferencia importante en la presión y/o temperatura. Sin embargo, al tener en cuenta el instante en el que se alcanza una diferencia importante en la MQ para el B20 ( $-1_{PMS}$ ), se observa que el efecto de esto, es un incremento de hasta 2% en la presión y la temperatura en la simulación para dicho combustible. Lo que da como resultado un incremento (cercano al 14%) en la RE como se muestra en la Figura 5-22. Así mismo, dicho efecto se percibe en adelante en una mayor cantidad de ME hasta prácticamente el final del intervalo mostrado para el B20. Una tendencia similar se observa para el B0 en el intervalo comprendido entre  $+3_{PMS}$  a  $+5_{PMS}$ , donde se presenta una mayor RQ (Figura 5-24) para el B0 (15% aproximadamente), la cual se manifiesta con un incremento de la presión y la temperatura para este intervalo en cerca de 2% (Figura 5-25 y Figura 5-26) y finalmente se observa una mayor RE (4%) para dicho combustible (Figura 5-22).

En la LC Figura 5-27 y la LC normalizada Figura 5-28, se observa el efecto de lo expues-

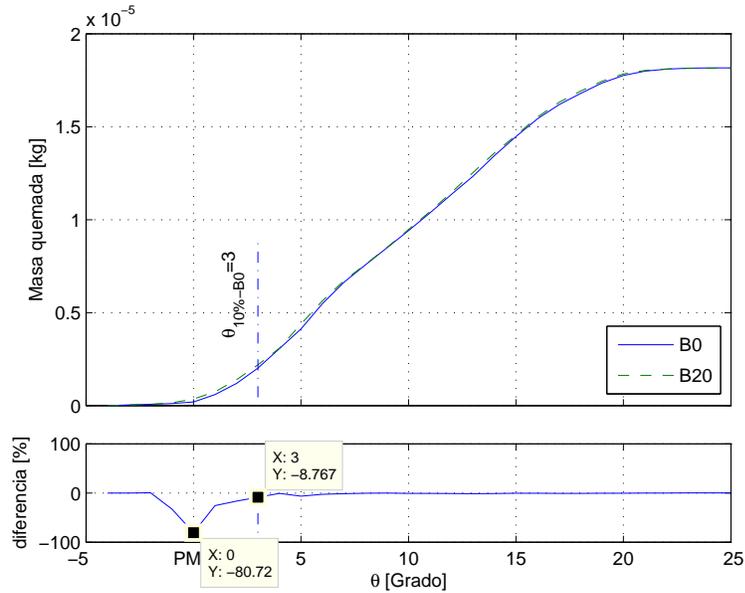


Figura 5-23.: Masa de combustible quemado en condiciones de operación de Bogotá.

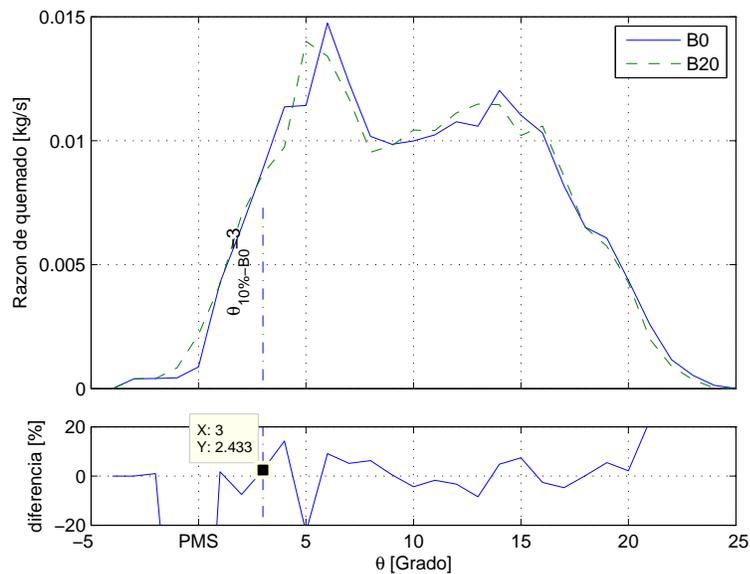


Figura 5-24.: Velocidad de quemado de combustible en condiciones de Bogotá.

to previamente. Esto es, la posibilidad de una interacción adicional a la considerada en la hipótesis propuesta entre disponibilidad de oxígeno, inicio de la combustión, incremento de temperatura y masa evaporada. De esta forma, se observa que en la etapa inicial de la combustión ( $<\theta_{10\%-B0}$ ) donde se presenta un incremento cercano a 80 % en la MQ para el B20,

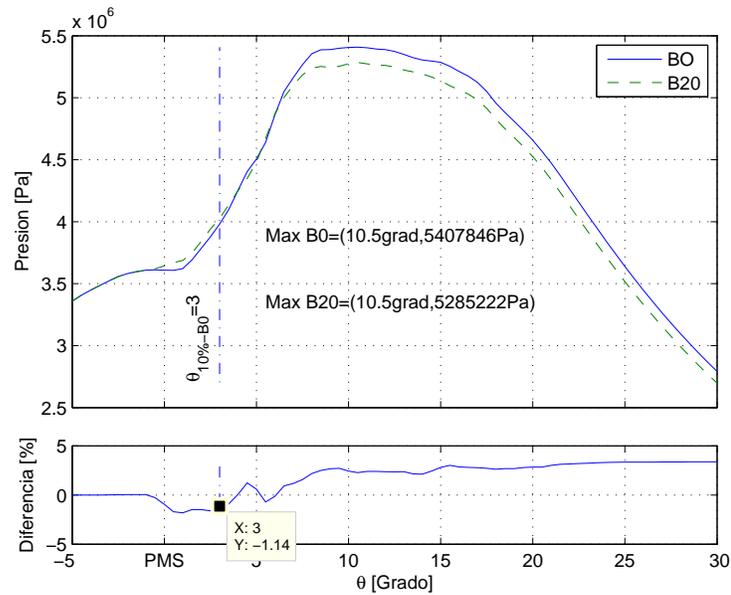


Figura 5-25.: Presión al interior del cilindro en condiciones de operación de Bogotá.

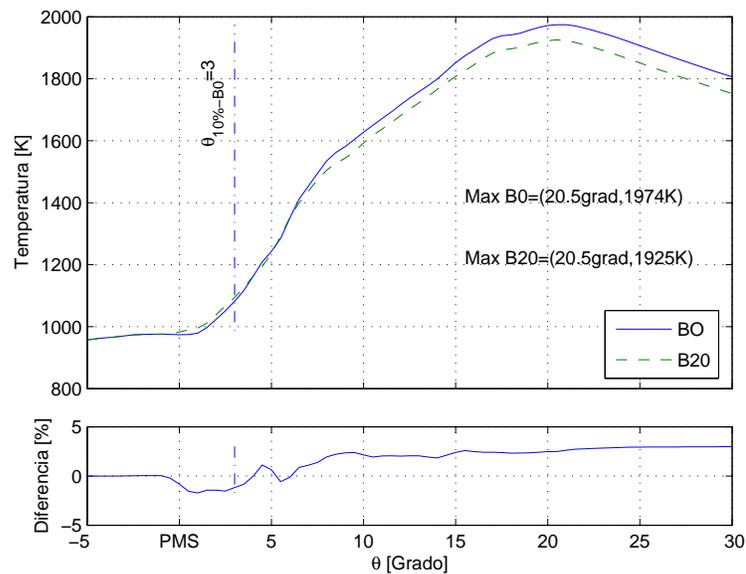
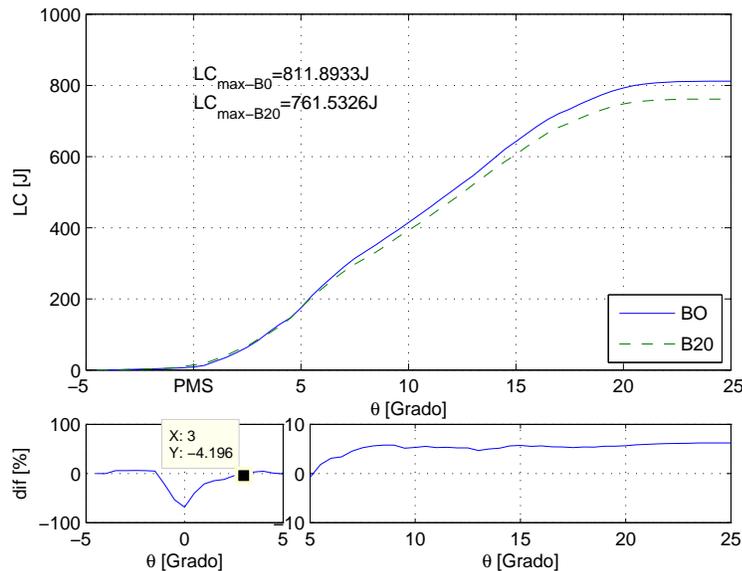


Figura 5-26.: Temperatura media del fluido de trabajo al interior del cilindro en condiciones de Bogotá.

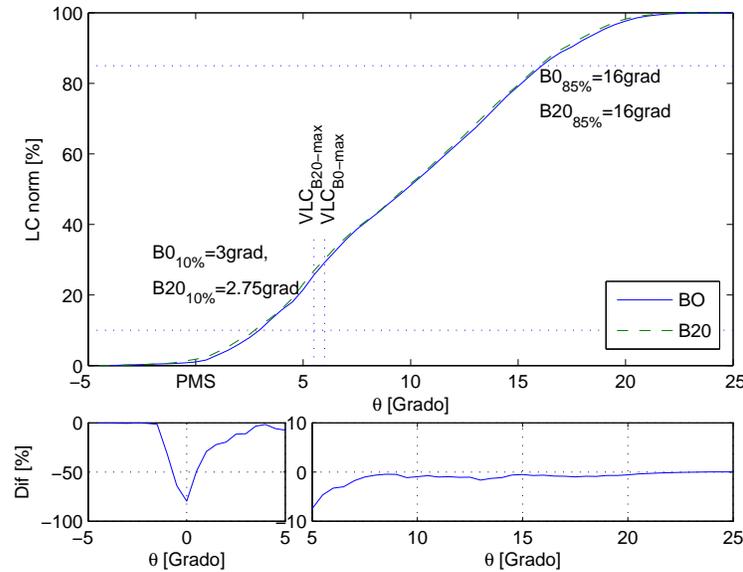
la LC alcanza un valor próximo a 60 %. De esta forma, se evidencia que el requerimiento de oxígeno inferior que ocasiona un incremento en la MQ o en la eficiencia de la combustión para el B20, permite compensar el efecto negativo que tiene la viscosidad del combustible

sobre la ME (Figura 5-21). Sin embargo, debido a la densidad energética inferior del B20, el efecto de esta compensación en la ME se ve atenuado o desaparece en presencia del incremento de la temperatura asociado a la energía liberada por unidad de masa quemada para un combustible como el B0. Una visión general de esta situación se evidencia al comparar la LC, la LC normalizada, la ME y la MQ; donde se observa en principio ( $< +5_{PMS}$ ) mayor cantidad de LC y de LC normalizada para el B20. Lo cual sustenta la afirmación menor oxígeno, mayor MQ o más eficiente LC; mayor MQ, mayor LC; mayor LC, mayor temperatura; y finalmente mayor temperatura, mayor ME. Sin embargo, cuando la temperatura media al interior del cilindro pasa a valores muy elevados respecto a las condiciones iniciales (de 950 a 1200, aproximadamente); las velocidades de evaporación se hacen muy similares para los dos combustibles, permitiendo así mantener las diferencias marcadas en la etapa inicial en la ME, MQ y LC normalizada. Así mismo, pese a la diferencia marcada en la MQ y ME en dicha etapa, cuando la ME y la RE se hacen muy similares el factor que se torna relevante es la densidad energética del combustible.



**Figura 5-27.:** Liberación de calor para condiciones de operación de Bogotá.

Los resultados obtenidos en la VLC Figura 5-29 para Bogotá, muestran como inicialmente la razón de LC se encuentra dominada por la disponibilidad de masa de combustible evaporado. De esta forma, previo al PMS, la VLC es superior para el B0. Sin embargo, cuando la interacción mencionada previamente juega un papel importante, se observa que la VLC no es controlada por la disponibilidad de ME sino por la de oxígeno. Dando como resultado un adelantamiento en los eventos que definen el comportamiento de la VLC (máximos, mínimos, etc) para el B20. Un aspecto que refuerza la afirmación presentada previamente, es el punto donde se alcanza el valor máximo de VLC el cual, pese a tener un valor inferior,



**Figura 5-28.:** Liberación de calor normalizada ( $\chi$ ) para condiciones de Bogotá.

ocurre primero en el B20. De igual forma, volviendo a la Figura 5-28, se puede observar que a diferencia de los resultados en condiciones estándar, el combustible que alcanza primero el 10 % de energía liberada es el B20.

Finalmente, al comparar las VLC para condiciones estándar (Figura 5-18) y de Bogotá (Figura 5-29), es posible afirmar que si bien existe una tendencia similar en el comportamiento de la grafica para los dos combustibles en las mismas condiciones; y como se menciona previamente, se presenta un efecto de escalamiento para el B20; la diferencia particular encontrada es que en condiciones estándar (posiblemente a causa de la disponibilidad de combustible) los efectos de la viscosidad retrasan la ocurrencia de los eventos para el B20. En contraste, en condiciones de Bogotá se observa que si el efecto de la viscosidad afecta negativamente la disponibilidad de combustible, la presencia de oxígeno favorece la combustión temprana y con esta el incremento en la RE; dando como resultado un atenuamiento del posible efecto de la viscosidad y así un adelantamiento en los eventos que definen la VLC para el B20.

### 5.3.3. Evolución de la masa de combustible

Considerando los resultados obtenidos previamente, donde se evidencia de forma leve el efecto de la viscosidad que involucra un incremento en el SMR y la disminución del AS para las gotas presentes en el chorro de inyección. A continuación, se presenta de forma comparativa los resultados obtenidos en las masas de combustible para condiciones estándar Figura 5-30 y de Bogotá Figura 5.3.3. La presentación utilizada obedece a la misma con la que se

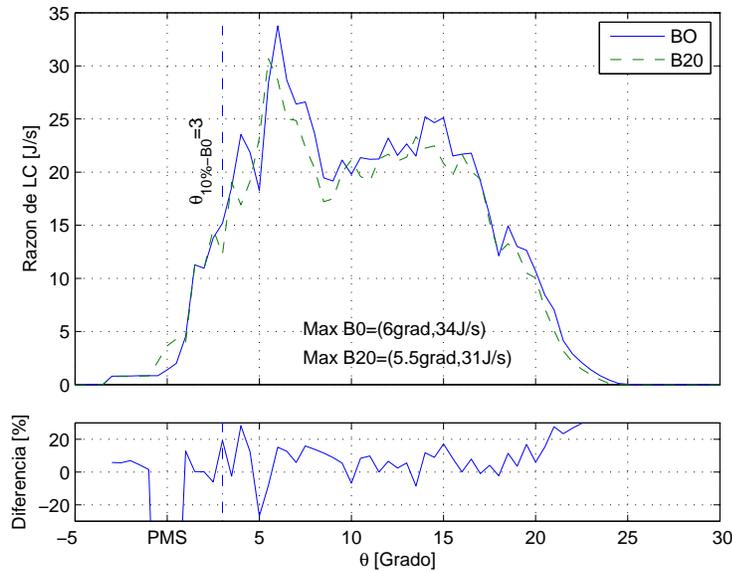


Figura 5-29.: Velocidad de LC en condiciones de Bogotá.

planteó la hipótesis inicial. De esta forma se busca un contraste puntual entre lo supuesto basándose en la revisión bibliográfica y lo obtenido mediante el modelo propuesto.

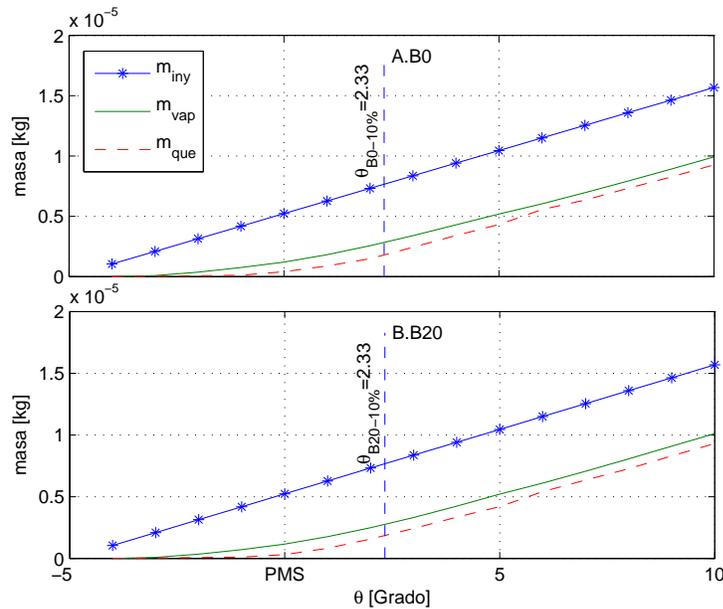
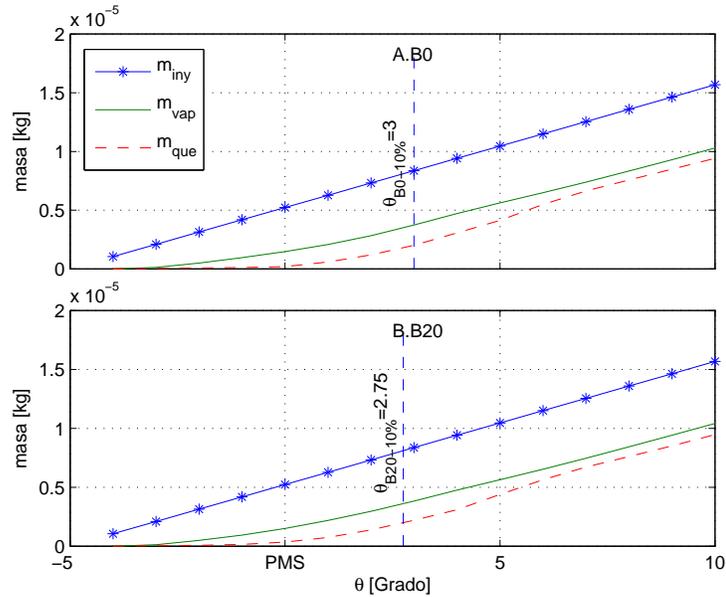


Figura 5-30.: Evolución de la masa de combustible para condiciones Estándar

Los resultados obtenidos en condiciones estándar muestran que acorde con la dinámica plan-



**Figura 5-31.:** Evolución de la masa de combustible para condiciones de Bogotá.

teada inicialmente, la viscosidad disminuye levemente la cantidad de masa evaporada y quemada en los instantes iniciales de la combustión ( $< PMS$ ). Hecho que se evidencia en especial en el cruce de las curvas de ME y MQ con la vertical del PMS (Figura 5-30). El cual se presenta en valores inferiores para el B20. Posterior a este punto, considerando el intervalo entre PMS a  $+10_{PMS}$ ; y en especial el cruce con las verticales de  $+5_{PMS}$  y  $+10_{PMS}$ , se observa un incremento leve en la ME para el B20, que no se acompaña de un aumento en la MQ. Este hecho, evidencia la posibilidad de un factor adicional a la disponibilidad de combustible evaporado que tiene influencia en el quemado de la masa de combustible.

Por otra parte, en condiciones de Bogotá (Figura 5.3.3) se observa en los 3 puntos definidos como referencia en el párrafo anterior, las masas de combustible ME y MQ tienen un comportamiento diferente al mostrado en condiciones estándar. Esto es, mientras que para condiciones estándar, se observa mayor cantidad de combustible evaporado y quemado para el B0 al final del primer intervalo; en condiciones de Bogotá para este punto, se observa mayor cantidad de combustible evaporado y quemado para el B20. Situación que se presenta de igual forma, en el cruce con la vertical de  $+5_{PMS}$ .

Un factor adicional que se observa es como al final del intervalo mostrado ( $+10_{PMS}$ ) las curvas ME y MQ, aparentemente presentan valores similares en el cruce con dicha vertical para los dos combustibles. Lo que, al igual que en condiciones estándar, muestra la existencia de un factor adicional a los considerados, que modifica la velocidad de evaporación y quemado del combustible.

En las figuras mostradas, se observa que mientras que en condiciones estándar, el tiempo en el que se alcanza el 10 % de liberación de energía para B0 ( $\theta_{10\%-B0}$ ) y para B20 ( $\theta_{10\%-B20}$ ) coincide en el valor de  $\theta_{10\%} = 2,33$  grados para los dos combustibles; en condiciones de Bogotá se presenta un retraso en este valor (más tiempo entre inicio de la inyección y ocurrencia del suceso). Adicionalmente, dicho retraso es superior para el B0, con  $\theta_{10\%-B0} = 3$  grados frente a  $\theta_{10\%-B0} = 2,75$  grados para el B20.

Una explicación tentativa al comportamiento mostrado en las simulaciones realizadas (en las cuales la LC o VLC no se hicieron dependientes de constantes amparadas en la cinética del mecanismo de reacción), se puede plantear considerando los factores que se tuvieron en cuenta para describirlas. En condiciones estándar, debido a la presión y temperatura en la admisión, la masa de aire al interior del cilindro y la disponibilidad de oxígeno es más elevada. Con lo cual, el inicio y evolución de la LC en los primeros momentos de la combustión, se hace dependiente de la cantidad de combustible que se encuentre evaporado. Situación que, acorde a la hipótesis planteada y los resultados obtenidos, se ve levemente afectada por las características geométricas del chorro de inyección (SMR, AS, etc) y estas por la viscosidad del combustible. Sin embargo, como se observa en la Sección 5.2, no se presenta una dependencia directa entre SMR, AS y RE para el chorro de inyección (en especial en los primeros instantes); de forma que la suposición inicial de la disminución de la RE vinculada a menor AS y mayor SMR ocasionados por el incremento de la viscosidad del combustible no es sustentable a la luz de los resultados obtenidos.

Por otra parte, en condiciones de Bogotá la disponibilidad de oxígeno en el aire admitido, resulta a diferencia del anterior en un factor de mayor importancia en las primeras etapas de la LC. Razón por la cual, es posible que el efecto del cambio de combustible se refleje en la VLC en condiciones estándar, como dependiente de la cantidad evaporada; y en Bogotá por el contrario, se vea atenuado o no se perciba debido a una deficiencia más importante de oxígeno que de combustible evaporado.

Así mismo, menor presión, temperatura y aire en la admisión; dan como resultado un valor inferior de presión y temperatura en el aire cuando el pistón se encuentra en las cercanías del PMS. De esta forma, el entorno en el que ingresa el combustible a evaporar disminuye la energía disponible para tal proceso en una cantidad cercana al 25 %. Lo cual acorde con los resultados obtenidos, modifica la LC en los instantes iniciales (Figura 5-32 y Figura 5-33) debido a la disponibilidad de oxígeno, lo que implica que el encendido se demora más que en condiciones estándar. A su vez, el incremento de temperatura de los gases asociado al aporte de energía de la combustión, sufre un retraso ocasionado por el mismo factor, dando como resultado la disminución de la RE asociada a un diferencial inferior de temperatura entre el gas y el líquido. Si bien, esta consecuencia no es causada por la modificación del

combustible, según los resultados obtenidos, el retraso en los instantes iniciales en la LC para el B0 (Figura 5-32) es más marcado que para el B20 (Figura 5-33). Permitiendo suponer que en condiciones de Bogotá, la disponibilidad de oxígeno y la presencia de oxígeno en la molécula del biodiesel, interactúan para corregir un posible efecto adverso de la viscosidad sobre la RE y así sobre la LC.

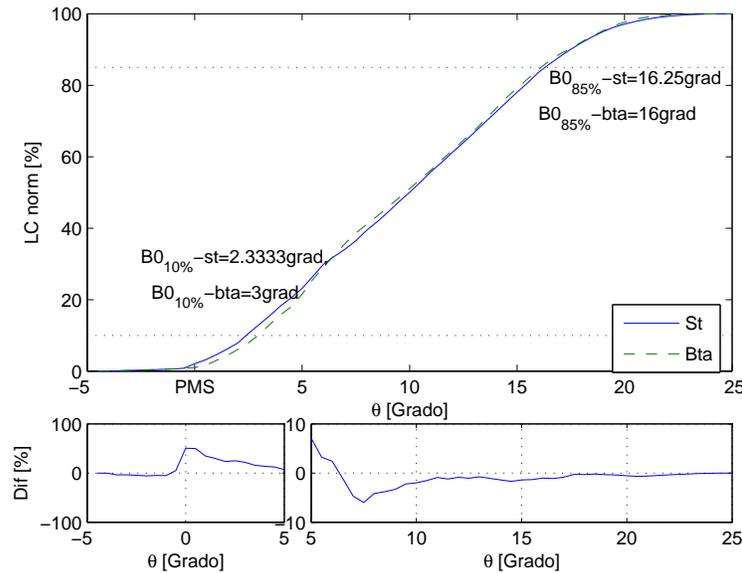
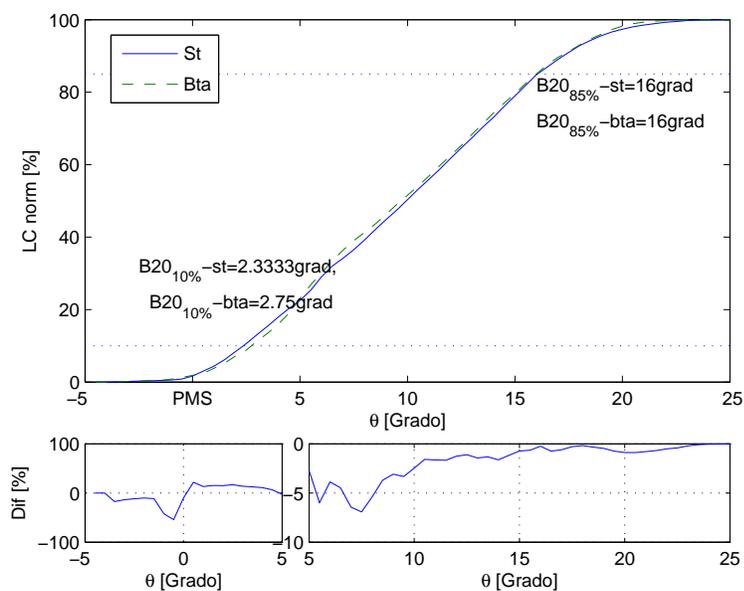


Figura 5-32.: LC normalizada para condiciones de operación de Bogotá y estándar para B0.

## 5.4. Función de Wiebe

La determinación de las constantes de la función de Wiebe (Tabla 5-3), se realiza considerando la metodología propuesta por Klein [79]. De forma que, el conocimiento de la duración del fenómeno de combustión ( $\Delta\theta$ ) y dos puntos de la curva de fracción de masa quemada ( $\chi$ ) o de la LC normalizada, denominados ángulo de desarrollo de llama ( $\Delta\theta_d$ ) y ángulo de quemado rápido ( $\Delta\theta_b$ ), donde la LC ha alcanzado el 10 % y 85 %, respectivamente; permiten determinar las constantes ( $a, b$ ) de la función de Wiebe (Ec.5-7) para simular la combustión.

$$b = \frac{\ln\left(\frac{\ln(1-0,1)}{\ln(1-0,85)}\right)}{\ln(\Delta\theta_d) - \ln(\Delta\theta_d + \Delta\theta_b)} - 1 \quad (5-5)$$



**Figura 5-33.:** LC normalizada para para condiciones de Bogotá y estándar para B20.

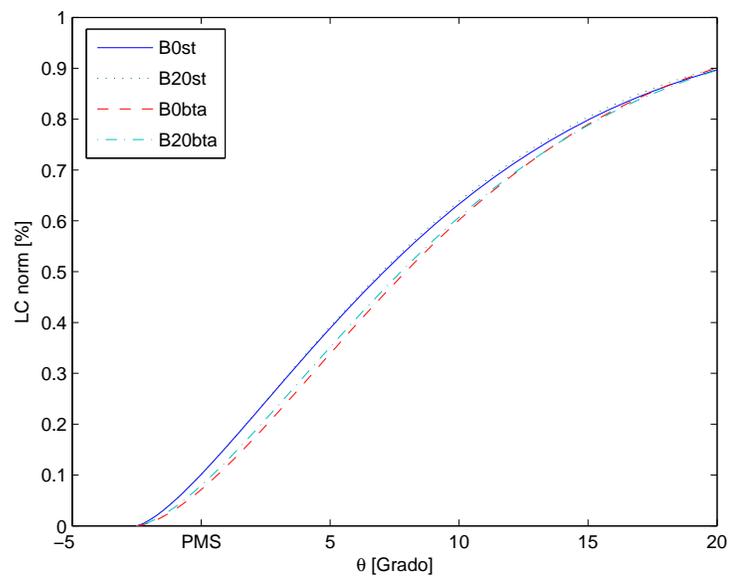
$$a = -\ln(1 - 0, 1) \cdot \left( \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_d} \right)^{b+1} \quad (5-6)$$

$$\chi = 1 - e^{-a \left( \frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta} \right)^{b+1}} \quad (5-7)$$

Utilizando los resultados obtenidos en el modelo propuesto, las constantes determinadas para las diferentes situaciones y combustibles se presentan en la Tabla 5-3. Así mismo, se presentan en la Figura 5-34 las diferentes curvas de fracción de masa quemada obtenidas en su utilización. En estas, se puede observar como el efecto del cambio de combustible en condiciones estándar no se percibe de forma importante; mientras que en condiciones de Bogotá, el cambio del combustible altera levemente el comportamiento de la etapa inicial y media de la función citada.

**Tabla 5-3.:** Constantes de la función de Wiebe para las condiciones y combustibles simulados.

parámetro	$B_{0_{st}}$	$B_{20_{st}}$	$B_{0_{bta}}$	$B_{20_{bta}}$
a	2,6311	2,6873	2,7245	2,6535
b	0,39229	0,40144	0,56608	0,50589



**Figura 5-34.:** Fracciones de masa quemada para los combustibles y condiciones simuladas.

## 6. Conclusiones

En el presente estudio se realizó un planteamiento alternativo para la simulación de la combustión en un MCI-EC , buscando una descripción cero dimensional que pudiera capturar parcialmente algunos de los detalles de la dinámica de la formación y atomización del chorro de inyección. De esta forma se obtuvo información pertinente para determinar el efecto del cambio de una propiedad del combustible sobre el proceso de liberación de energía asociada a la oxidación de este. En el presente capítulo, se reúnen las conclusiones más relevantes obtenidas relativas al planteamiento, al modelo y a los resultados de las simulaciones.

- Se obtuvo una expresión análoga a la obtenida de un balance de la primera ley de la termodinámica, partiendo de las ecuaciones de conservación para un volumen de control diferencial.
- Se formuló una expresión para validar el supuesto de presión uniforme.
- Se determinaron las propiedades fisico-químicas del biodiesel de palma y sus mezclas con n-dodecano, basándose en la composición de cada una de estas.
- Se planteó la dinámica de creación y destrucción de las gotas de combustible en un modelo cero dimensional como una sucesión de eventos dependientes del histórico de las condiciones al interior del cilindro y no como un evento catastrófico. Lo cual se obtuvo, mediante la integración de las expresiones utilizadas en los modelos multidimensionales basadas en la teoría de inestabilidad hidrodinámica de Kelvin-Helmholtz en un modelo multizona.
- Acorde a lo observado en condiciones estándar para el B20, el fenómeno de rompimiento donde se manifiesta el efecto de la viscosidad de líquido del combustible (con o sin combustión), incrementa el área superficial y disminuye el SMR de las gotas presentes en el chorro de inyección. Sin embargo, no fue evidente la relación entre mayor área, menor SMR y mayor velocidad de evaporación de las gotas.
- En condiciones al interior del cilindro simuladas para las etapas iniciales de la inyección con B20, la presencia del fenómeno de combustión, incrementó la velocidad de evaporación de las gotas en valores superiores al 50 % respecto a los mismos instantes en ausencia de dicho fenómeno.

- 
- En condiciones estándar, el efecto de la modificación del combustible y su viscosidad, se presentó como:
    - En los primeros instantes de la combustión ( $\theta_{Cig} < \theta_{10\%-LC}$ ) con el incremento del SMR (menor al 1 %), aumento del área superficial (menor al 2 %), disminución de la velocidad de evaporación (hasta 8 %) y de la masa de combustible evaporado (cerca de 7 %). Sin embargo, la disminución de la cantidad de masa de combustible evaporado no ocasionó al final de este intervalo o del total en el que se presentó la combustión; que se alcanzará menor cantidad de masa de combustible quemado o porcentaje de energía liberada. Hecho que posiblemente se encuentre asociado a un requerimiento inferior de oxígeno, el cual permite el quemado de mayor cantidad de combustible con menor cantidad de este; dando como resultado un efecto que compensa mediante el incremento del gradiente de temperatura, las consecuencias adversas sobre el SMR y el área superficial de la viscosidad del combustible.
    - Posterior al punto donde se alcanzó  $\theta_{Cig} = \theta_{10\%-LC}$ ; se observó para B20 una disminución del SMR, acompañada de un incremento en la velocidad de evaporación y con este de la masa de combustible evaporada. Sin embargo, inicialmente no se presentó influencia de este hecho en la LC sino hasta instantes posteriores y el efecto de una mayor densidad de energía en el combustible para el B0, opacó el posible incremento en la velocidad de LC para el B20.
  - En condiciones de admisión del aire para la ciudad de Bogotá, el efecto de la modificación del combustible y su viscosidad se presentó como:
    - Un retraso para los dos combustibles en el tiempo en el cual se alcanzó el punto de ( $\theta_{Cig} < \theta_{10\%-LC}$ ). Sin embargo, fue menor para el B20.
    - En los instantes iniciales ( $\theta_{Cig} \ll \theta_{10\%-LC}$ ) una tendencia similar a la observada en condiciones estándar. Para el B20 mayor SMR y área superficial; menor velocidad de evaporación y de masa evaporada. Aunque, la superposición del efecto de menor requerimiento de oxígeno, mayor cantidad de combustible quemado y la interacción entre energía liberada, incremento de temperatura y con este de la velocidad de evaporación; evidenció en este caso, un efecto compensatorio al adverso que se asocia a la viscosidad, mucho más significativo que en condiciones estándar. El cual permitió que el B20: Alcanzara primero los puntos de 10 % de energía liberada  $\theta_{Cig} = \theta_{10\%-LC}$ ; presión máxima en el cilindro  $\theta_{Cig} = \theta_{P.max}$  y máxima velocidad de liberación de calor  $\theta_{Cig} = \theta_{VLC-max}$ . Así mismo, durante la mayoría del intervalo donde se presentó la combustión, se observó para un mismo punto, mayor cantidad de masa evaporada, de masa quemada y porcentaje de energía liberada para el B20.
    - Considerando el intervalo en el que se presentó la combustión, se observó que a

partir del punto  $\theta_{Cig} = \theta_{10\%-LC}$  el comportamiento de la presión y temperatura media en el cilindro, se hace dependiente de la cantidad de energía que se libera del combustible y no de la masa que se quema para ello. De esta forma, así exista mayor área superficial, menor SMR, mayor cantidad de masa evaporada y/o quemada para el B20; el efecto de la densidad de energía se hace dominante sobre cualquier otro.

- Al considerar el efecto de la modificación de las condiciones iniciales en las simulaciones, se observa que la disminución de la presión y temperatura en la admisión aumenta el SMR, disminuye el área superficial y las velocidades iniciales de evaporación. Efecto que se ve más marcado en el B0 debido a los requerimientos de oxígeno y el retraso que este ocasiona al instante en el cual, la cantidad de energía liberada es suficiente para modificar de forma significativa el entorno de las gotas al interior de la CC.

# A. Supuesto de presión uniforme

La suposición de ausencia de gradiente de presión, es como se presento en el Capitulo 3, una de las característica más relevantes de los modelos cero dimensionales. Por ello, garantizar la validez de esta en los intervalos de tiempo donde la presión sufre cambios significativos a causa de la combustión, es uno de los factores iniciales a tener en cuenta en las simulaciones realizadas.

Acorde con Prandtl [106] la velocidad de propagación de una pequeña perturbación de presión es independiente de la magnitud de la perturbación y su valor, en un fluido en reposo, es igual al de la velocidad local del sonido (Ec.A-1).

$$v_{son} = \sqrt{\gamma \cdot R \cdot T_{cil}} \quad (\text{A-1})$$

Para considerar la validez del supuesto, se tiene en cuenta que el avance de la perturbación generada al interior del cilindro, cumple con el planteamiento presentado previamente y que dicha perturbación debe recorrer una longitud  $L_{car}$  asociada a las condiciones instantáneas del mismo. La determinación de la longitud característica, se asocia al volumen instantáneo del cilindro, suponiendo que la onda generada debe recorrer la distancia equivalente al radio de una esfera cuyo volumen ( $V_{esf}$ ) es equivalente al del cilindro ( $V_{cil}$ ) en el tiempo determinado (Ec.A-2). Dicha consideración, se realiza teniendo en cuenta que se desconoce un criterio específico para tal fin y que la velocidad de propagación se puede modificar a causa de la velocidad del flujo de los gases al interior del cilindro.

$$L_{car} = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot V_{cil}(\theta)}{4 \cdot \pi}} \quad (\text{A-2})$$

Ya que los fenómenos que tienen lugar al interior del cilindro modifican las 3 variables relacionadas en la obtención de  $v_{son}$ , la determinación de la validez del supuesto se realiza bajo condiciones simuladas y como una función del tiempo. La obtención de la temperatura ( $T_{cil}$ ) se realiza siguiendo la metodología propuesta por Matekunas [122], donde la curva de presión al interior del cilindro puede ser representada como una función de la presión en el proceso politrópico y un factor de multiplicación dinámico  $\Psi(\theta)$  a causa de la presencia de combustión (Ec.A-3).

$$P_{comb}(\theta) = \Psi(\theta) \cdot P_{pol}(\theta) \quad (\text{A-3})$$

Suponiendo que el gas al interior del cilindro se comporta como ideal ( $P \cdot V = m \cdot R \cdot T$ ), el proceso politrópico puede ser descrito acorde a la Ec.A-4.

$$P_{pol} = P_0 \cdot \left( \frac{V_{cil0}}{V_{cil}} \right)^\gamma \quad (A-4)$$

Así, partiendo de una traza de presión conocida, es posible determinar la función  $\Psi(\theta)$ . Por otra parte, considerando que la distancia que recorre la perturbación en un tiempo  $\Delta t$  es  $d_{per} = v_{son} \cdot \Delta t$ ; es posible afirmar que el tiempo necesario para que se equilibre la presión en el cilindro se satisface cuando se cumple:

$$d_{per} \geq L_{car} \quad (A-5)$$

La cual, acompañada de la Ec.A-1 y la Ec.A-4, así como la función  $\Psi(\theta)$  y que el paso de tiempo en función del ángulo del cigüeñal ( $\theta$ ) viene dado por  $\Delta\theta = 6 \cdot rpm \cdot \Delta t$ , permite determinar el criterio de selección del paso de tiempo mínimo (Ec. A-6) que satisface la condición  $\nabla P = 0$ .

$$\Delta\theta_{min} = \frac{6 \cdot \sqrt[3]{\frac{3 \cdot \pi}{4}} \cdot rpm \cdot (V_{cil})^{\frac{3\gamma-1}{6}}}{\sqrt{\gamma \cdot R \cdot V_{cil0} \cdot T_{cil0} \cdot \Psi}} \quad (A-6)$$

Donde,

$V_{cil} = V_{cil}(\theta)$  =Volumen instantáneo del cilindro [ $m^3$ ]

$rpm$  =Velocidad del motor [ $\frac{rev}{min}$ ]

$\gamma = \gamma(\theta)$  =razón de calores específicos del gas [ $Adm$ ]

$R = R(\theta)$  =Constante de gas para la mezcla de gases en el cilindro [ $\frac{J}{kg \cdot K}$ ]

$\Psi = \Psi(\theta)$  =Función de multiplicación de la traza de presión acorde a Matekunas [122] [ $Adm$ ]

Como se menciona previamente, para el motor citado en el presente estudio, se considera que es necesaria la validez del supuesto cuando menos en los intervalos de tiempo en los cuales la presión tiene cambios significativos en su magnitud ocasionados por el proceso de combustión. Para lo cual, acorde al criterio presentado los valores del paso mínimo de tiempo ( $\Delta\theta_{min}$ ) se obtienen como función de la velocidad del cigüeñal en el motor utilizado por Hiroyasu et al [1] (Figura **A-1**).

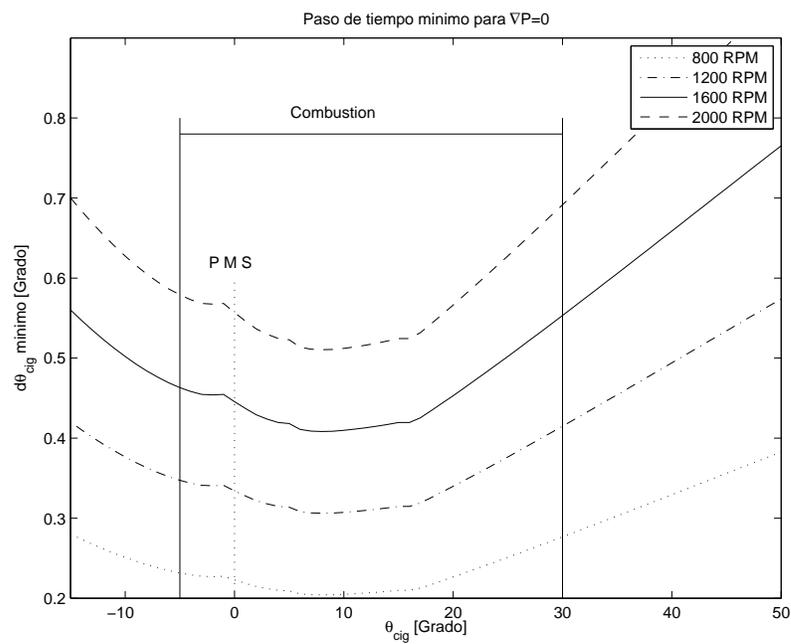


Figura A-1.:  $\Delta\theta$  mínimo para garantizar la validez del supuesto  $\nabla P = 0$  en el motor utilizado en el presente estudio.

## B. Combustible

Para la representación del combustible utilizado en las simulaciones, se parte de la suposición de una mezcla homogénea, simbolizada por una molécula  $(C_x, H_y, O_z)$ , donde las variables  $x, y, z$  representan el número de átomos de Carbono, Hidrógeno y Oxígeno necesarios para conformar una molécula que contenga proporciones equivalentes de estos elementos a las de una mol de la mezcla de combustible ( $B20 = 0,8 \cdot B0 + 0,2 \cdot B100$ ). Donde las propiedades individuales de cada uno de los componentes (p.ej.  $\nu$ ) permiten la obtención de una propiedad média para la mezcla como  $\nu_{BXX} = f(\nu_{B100}, \nu_{B0})$ . Para la obtención de las propiedades del combustible, se considera que el diesel petrolero puede ser representado como en gran cantidad de simulaciones en MCI-EC por el n-dodecano ( $C_{12}H_{26}$ ). Para el biodiesel de palma, se utiliza una mezcla de ácidos grasos que representa la composición del biodiesel (Tabla. **B-1**). Para ello y debido a la ausencia de bibliografía en algunos de los parámetros necesarios para la obtención de las diferentes propiedades, se consideran para la composición de la mezcla aquellos que proporcionalmente representan la mayor cantidad de dicha composición acorde con lo reportado por Benjumea et al [11].

En todos los casos presentados, se considera que la mezcla de las propiedades de los diferentes componentes del combustible permite representar la propiedad de la mezcla de combustible.

**Tabla B-1.:** Composición del biodiesel de palma utilizado para las simulaciones.

Metil ester	Molécula	$Y_i$ (Presente)
<i>Linoléico</i>	$C_{18}H_{30}O_2$	0,1381
<i>Oléico</i>	$C_{18}H_{34}O_2$	0,4027
<i>Palmítico</i>	$C_{16}H_{32}O_2$	0,4593
<i>Linolénico</i>	$C_{18}H_{32}O_2$	0
<i>Esteárico</i>	$C_{18}H_{36}O_2$	0

## B.1. Determinación de la mezcla y propiedades críticas

Para el cálculo de las propiedades del combustible líquido es necesario determinar las propiedades de punto pseudocrítico de la mezcla ( $P_{CR}, T_{CR}, V_{CR}$ ) acorde a las Ecs.B-1,B-2,B-3), considerando para ello las reglas de mezclado para la ecuación de tres parámetros de Lee-Kesler [123]. Con la cual, los cálculos de las propiedades pueden realizarse como si la mezcla fuera una sustancia pura (Reid et al [6]).

$$T_{CRm} = \frac{1}{V_{CRm}^{\frac{1}{4}}} \sum_i \sum_j X_i \cdot X_j \cdot V_{cij}^{\frac{1}{4}} \cdot T_{cij} \quad (\text{B-1})$$

$$V_{CRm} = \sum_i \sum_j X_i \cdot X_j \cdot V_{cij} \quad (\text{B-2})$$

$$P_{CRm} = \frac{(0,2905 - 0,085 \cdot \omega_m) \cdot R \cdot T_{CRm}}{V_{CRm}} \quad (\text{B-3})$$

Donde,  $T_{cij} = \sqrt{T_{CRi} T_{CRj}} k_{ij}^*$

$$V_{cij} = \frac{1}{8} \left( V_{CRi}^{\frac{1}{3}} + V_{CRj}^{\frac{1}{3}} \right)^3$$

$$\omega_m = \sum_i X_i \cdot \omega_i$$

$$\omega_i = \frac{\alpha}{\beta}$$

$$\alpha = -\ln(P_{CRi}) - 5,9724 + \frac{6,0964}{\theta} + 1,28862 \cdot \ln(\theta) - 0,169347 \cdot \theta^6$$

$$\beta = 15,2518 - \frac{15,6875}{\theta} - 13,4721 \cdot \ln(\theta) + 0,43577 \cdot \theta^6$$

$$\theta = \frac{T_{Bi}}{T_{CRi}}$$

$X_i$  = Fracción molar del componente i. [Adm]

$k_{ij}^*$  = Parámetro para considerar la interacción binaria que se supone igual la unidad al no existir literatura al respecto [2].

Con los subíndices  $i, j, CR, B$ ; que representan al componente puro i o j, propiedad del punto crítico y propiedad en el punto de ebullición, respectivamente.

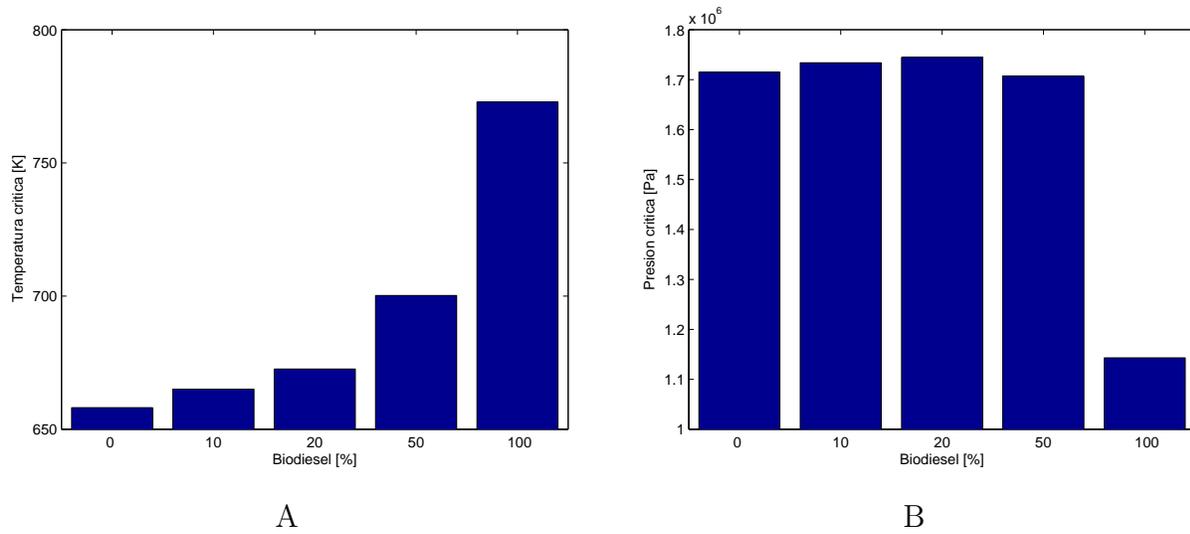
De esta forma, conociendo las propiedades en el punto crítico de las diferentes sustancias puras que componen el combustible (Tabla.B-2), se pueden determinar las propiedades pseudocríticas de la mezcla Figura B-1.

## B.2. Propiedades de líquido

Las propiedades del líquido se determinan para los casos de viscosidad, densidad y calor específico con base en relaciones experimentales. Mientras que la presión de saturación,

**Tabla B-2.:** Propiedades individuales de los componentes del combustible \*[2]; \*\*[3]; \*\*\*[4]

Metil Ester	$T_{CR}[K]$	$P_{CR}[bar]$	$V_{CR}[\frac{ml}{mol}]$	$T_{boil}[K]$	$h_{f,295}^o[\frac{J}{mol}]$	$\bar{M}W[\frac{g}{mol}]$
<i>Linoléico</i>	795,3*	11,91 *	1085,5*	639,15*	-485762,4*	294,5 ***
<i>Oléico</i>	772,3*	11,68*	1105,5*	622,15*	-615884,8*	296,5***
<i>Palmítico</i>	767,1 *	12,5*	1013,5*	611,15*	-559400,8*	270,4***
<i>Linoléico</i>	797,2 *	12,14*	1065,5*	639,15*	-358150,4*	292,5***
<i>Estearico</i>	774,2 *	11,46*	1125,5*	625,15*	-714823,2*	298,5***
<i>n-dodecano</i>	658,1 **	18,17 **	757,81 **	489,35 **	-290871,6 **	170 **

**Figura B-1.:** Propiedades del punto crítico para las mezclas de B0 y B100. A. Temperatura ; B. Presión.

tensión superficial y entalpía de vaporización, se determinan con base en el principio de los estados equivalentes y la metodología de Lee-Kesler [6, 123], donde la propiedad se determina como función de las propiedades pseudocríticas y según una expresión general de la forma de la Ec.B-4.

$$\Psi_m = k_0 \cdot f^0 + k_1 \cdot \omega_m \cdot f^1 \quad (\text{B-4})$$

Donde,

$f^0, f^1$  = Funciones de las propiedades críticas acorde a la propiedad a determinar.  $\omega_m$  = Factor de acentricidad [123].

### B.2.1. Presión de Saturación

En la determinación de la presión de saturación, los factores y funciones a considerar en la Ec.B-4 se toman como [6]:

$$\ln \left( \frac{P_{sat-m}}{P_{CR-m}} \right) = f^0 + \omega_m \cdot f^1 \quad (\text{B-5})$$

Donde,

$$f^0 = 5,92714 - \frac{6,09648}{T_R} - 1,28862 \cdot \ln(T_R) + 0,169347 \cdot T_R^6$$

$$f^1 = 15,2518 - \frac{15,6875}{T_R} - 13,4721 \cdot \ln(T_R) + 0,43577 \cdot T_R^6$$

$$T_R = \frac{T_m}{T_{CRm}} \text{ Temperatura reducida de la mezcla. [Adm]}$$

$$P_{CR-m} \text{ Presión pseudocrítica de la mezcla. (Ec.B-3) [bar]}$$

Los resultados de la presión de saturación en función de la temperatura para las mezclas consideradas se presentan en la Figura B-2.

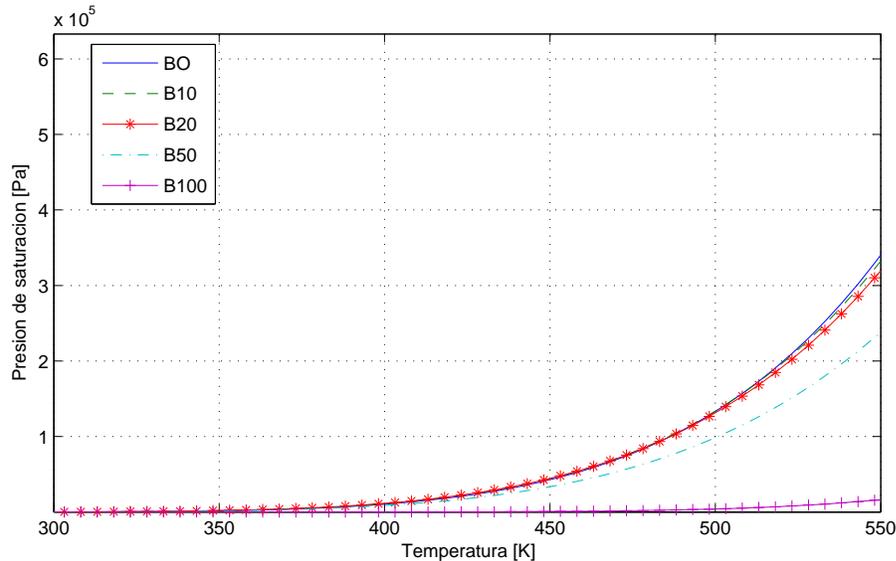


Figura B-2.: Presión de saturación para distintas mezclas de B0 con B100.

### B.2.2. Entalpía de vaporización

Al igual que en el caso anterior, la entalpía de vaporización, se obtiene teniendo en cuenta una expresión de la forma de la Ec.B-4. Sin embargo, la exactitud en la predicción de la entalpía de vaporización con este modelo (Ec.B-6) solo es aceptable en el rango en el que se cumple la condición  $T_R > 0,6$  [6]. Por ello, para la determinación de la propiedad a bajas temperaturas se utiliza el modelo propuesto por Fish y Lielmezs (Ec.B-7) [6].

las propiedades pseudocríticas de la mezcla [6]. En cuyo caso, si la expresión dada por la Ec.B-6 es válida, de lo contrario es necesario determinarla por medio de la Ec.B-7.

$$h_{fg} = R \cdot T_{CRm} \left( (7,08 \cdot (1 - T_R)^{0,354}) + (10,95 \cdot \omega_m (1 - T_R)^{0,456}) \right) \left[ \frac{J}{mol} \right] \quad (B-6)$$

$$h_{fg} = h_{fg-BP} \cdot \frac{T_R}{T_{BR}} \left( \frac{\chi + \chi^{0,35298}}{1 + \chi^{0,13856}} \right) \left[ \frac{J}{mol} \right] \quad (B-7)$$

Donde,

$$\chi = \frac{T_{BR}}{T_R} \cdot \frac{1-T_R}{1-T_{BR}}$$

$$h_{fg-BP} = \text{Entalpía de vaporización a temperatura de ebullición.} \left[ \frac{J}{mol} \right]$$

$$T_R = \frac{T_m}{T_{CR-m}} \text{ Temperatura reducida de la mezcla. [Adm]}$$

$$T_{BR} = \frac{T_{B-m}}{T_{CR-m}} \text{ Temperatura de ebullición reducida de la mezcla. [Adm]}$$

Los resultados de la entalpía de vaporización para las diferentes mezclas se presentan en la Figura B-3.

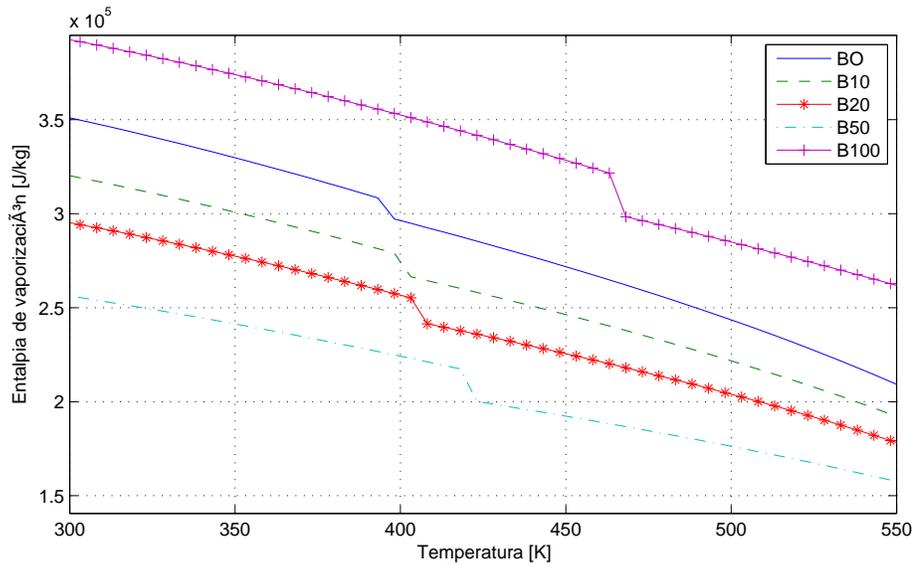


Figura B-3.: Entalpía de vaporización para las diferentes mezclas de B0 con B100.

### B.2.3. Densidad

La determinación de la densidad de líquido los componentes individuales del biodiesel se realizó mediante la Ec.B-8. Donde, las constantes determinadas para los diferentes ácidos

**Tabla B-3.:** Coeficientes utilizados para determinar la densidad de los componentes del biodiesel[5].

Metil Éster	m	B
<i>Linoléico</i>	$-7,3373 \times 10^{-4}$	1,1088
<i>Oléico</i>	$-7,3373 \times 10^{-4}$	1,0938
<i>Palmítico</i>	$-7,3929 \times 10^{-4}$	1,0818
<i>Linolénico</i>	$-7,3373 \times 10^{-4}$	1,1238
<i>Esteárico</i>	$-7,3373 \times 10^{-4}$	1,0804

son presentados en la TablaB.2.3.

$$\rho_i = m \cdot T + B; \quad (\text{B-8})$$

Donde,

$m, B$  se obtienen para cada sustancia acorde a la TablaB.2.3.

Debido a la relevancia de la densidad del combustible en el modelo, se busco la relación más cercana a los resultados obtenidos en las pruebas realizadas a los combustibles. Así, para determinar la densidad del diesel en función de la temperatura, se utilizó la correlación presentada por Tat y Van Gerpen [124] (Ec.B-9).

$$\rho = 999,0247 \cdot (0,8527 + ((-6,4097 \times 10^{-4}) \cdot (T - 273,15))) [kg/m^3]; \quad (\text{B-9})$$

La densidad de la mezcla de ácidos que constituyen el biodiesel ó de la mezcla de biodiesel-diesel se determinó acorde a la Ec.B-10.

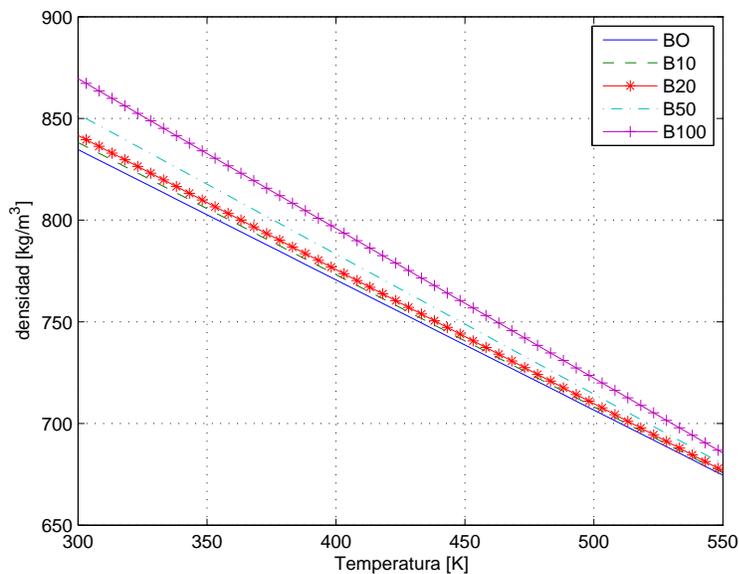
$$\rho_m = \sum \rho_i \cdot Y_i \quad (\text{B-10})$$

Donde,

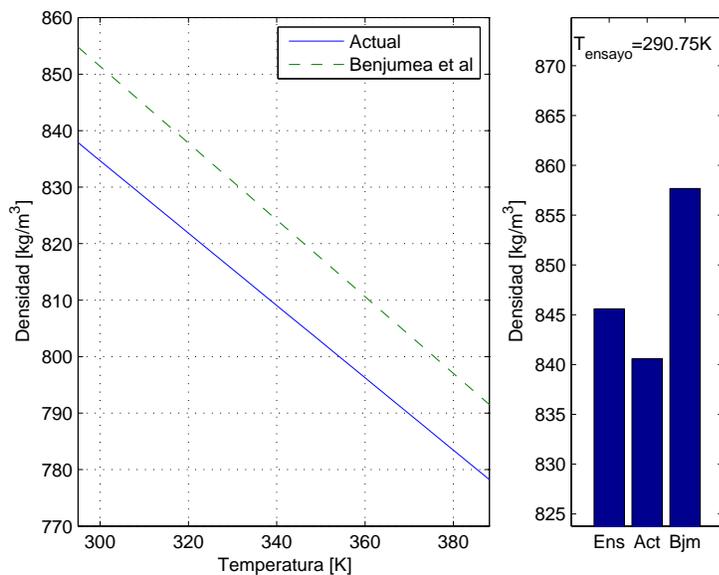
$Y_i$  = Fracción másica de la sustancia  $i$  [ $Adm$ ].

Los resultados obtenidos siguiendo esta metodología se presentan en la Figura **B-4**.

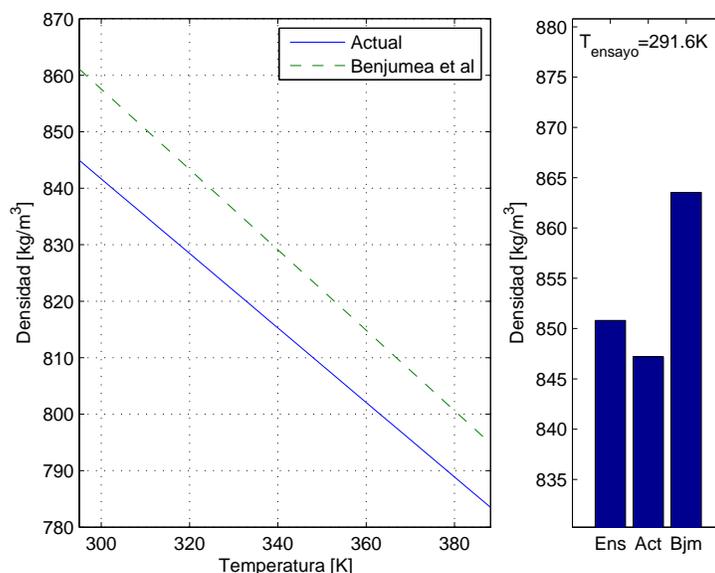
De esta forma, se obtiene una razón de densidades equivalente (Figura **B-7**) y con valores cercanos a los obtenidos en las pruebas de caracterización realizadas experimentalmente (Figura **B-5** y Figura **B-6**). Como referencia, se utilizan las relaciones propuestas por Benjumea et al [11] para mezclas de B0 y B100 de biodiesel de palma.



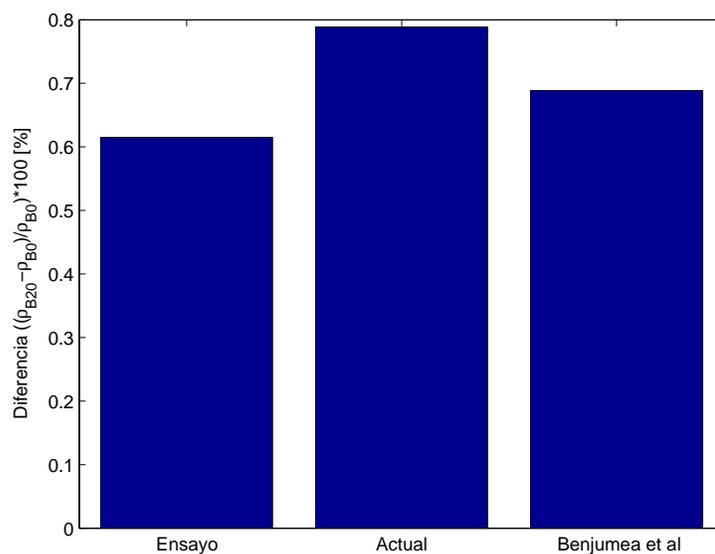
**Figura B-4.:** Densidad de líquido en función de la temperatura para diferentes mezclas de B0 y B100.



**Figura B-5.:** Densidad del diesel colombiano obtenida con la relación propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11].



**Figura B-6.:** Densidad de la mezcla B20 de diesel y biodiesel de palma, obtenida con la relacion propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11].



**Figura B-7.:** Razones de densidad entre el B20 y el B0 para las situaciones presentadas (Experimental, Propuesta y según Benjumea et al [11]).

#### B.2.4. Viscosidad

La viscosidad cinemática de los componentes del biodiesel se determinó acorde a la ecuación de Vogel (Yuan et al [5]). Donde, se utilizan las constantes para los diferentes ácidos

**Tabla B-4.:** Constantes para determinar la viscosidad cinemática de los componentes del biodiesel mediante la Ec.B-11 [5]

Metil Éster	A	B	C
<i>Linoléico</i>	-2,373	633,578	-133,942
<i>Oléico</i>	-2,380	627,236	-144,840
<i>Palmítico</i>	-2,150	507,905	-167,220
<i>Linolénico</i>	-2,380	652,309	-124,223
<i>Esteárico</i>	-3,503	1091,641	-97,640

**Tabla B-5.:** Constantes para determinar la viscosidad cinemática de los componentes del diesel mediante la Ec.B-11 [6]

Hidrocarburo	A	B	Yi
<i>Dodecano</i>	-4,562	$1,454 \times 10^3$	1/3
<i>Tetradecano</i>	-4,615	$1,588 \times 10^3$	1/3
<i>Heptadecano</i>	-4,642	$1,745 \times 10^3$	1/3

presentadas en la Tabla.B-4.

$$\ln \mu_i = A + \frac{B}{T + C} \quad (\text{B-11})$$

Al igual que en el caso anterior y al ser la viscosidad el factor central del presente estudio, se intento utilizar una relación lo más cercana posible a los resultados obtenidos en las pruebas de caracterización. De esta forma, para predecir la viscosidad del diesel, se utiliza una mezcla de 3 hidrocarburos (1/3 dodecano, 1/3 tetradecano y 1/3 heptano) acorde con la Ec.B-13. Considerando para cada componente la Ec.B-12 y la TablaB-5.

$$\ln \mu_i = A + \frac{B}{T} \quad (\text{B-12})$$

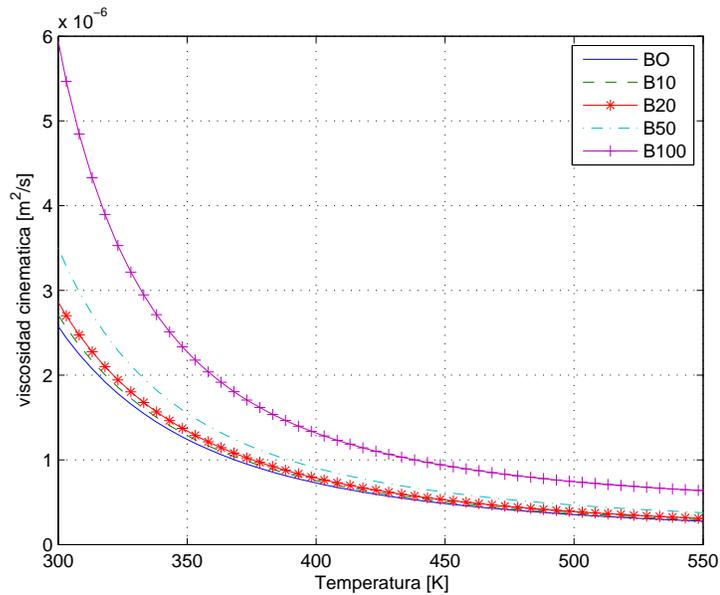
La propiedad de la mezcla de ácidos para biodiesel ó para la mezcla diesel-biodiesel se determina acorde a la Ec.B-13 [5].

$$\mu_m = e^{\sum X_i \cdot \ln \mu_i} \quad (\text{B-13})$$

Donde,

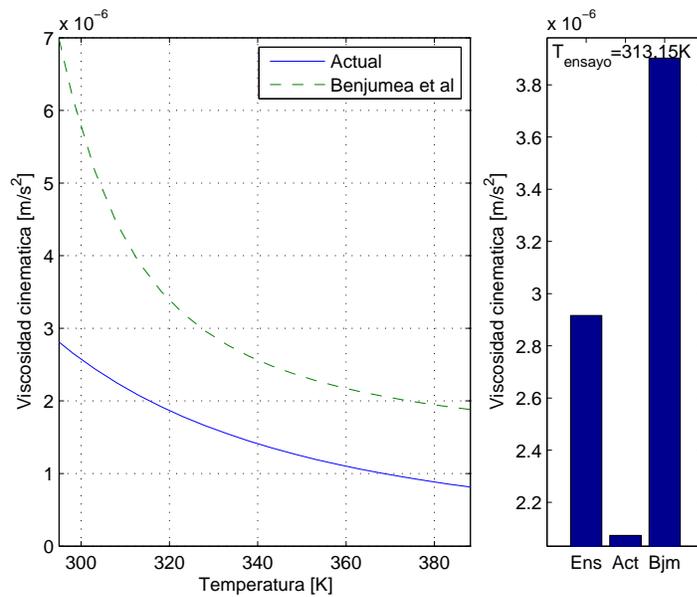
$X_i$  = Fracción molar del componente i. [Adm]

Con la cual, la razón de la viscosidad entre B0 y B20 conserva una relación que difiere en menos de 3% con lo obtenido en las pruebas de caracterización (Figura B-11). La viscosidad simulada de las diferentes mezclas se presenta en la Figura B-8. Por otra parte, los resultados obtenidos con la metodología propuesta se presentan acompañados de los determinados con las relaciones propuestas por Benjumea et al [11] para mezclas entre B0 y B100 (Figura B-9 y Figura B-10).

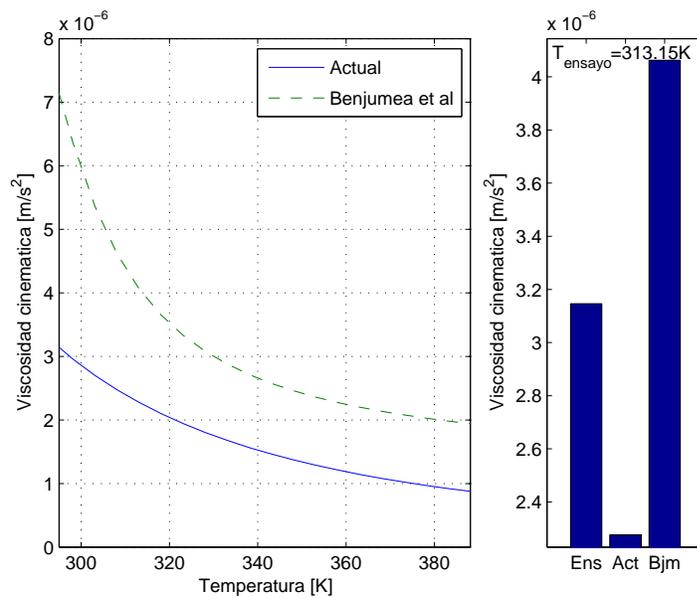


**Figura B-8.:** Viscosidad cinemática de líquido para las diferentes mezclas de B0 y B100.

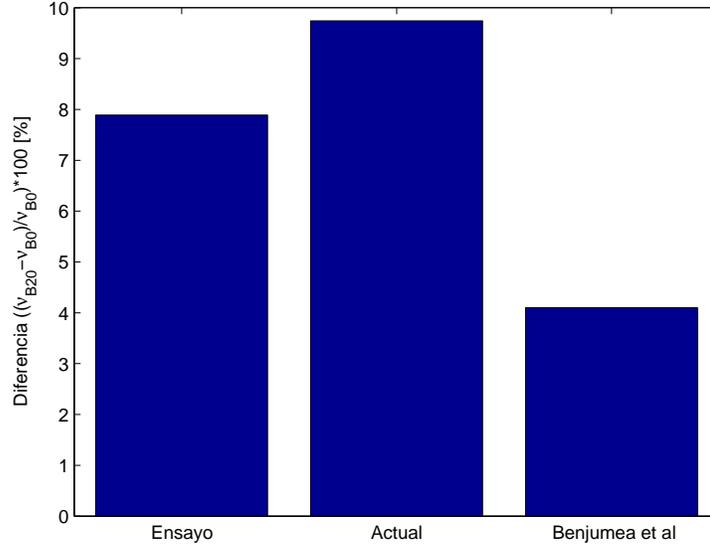
La selección de esta metodología para determinar las relaciones



**Figura B-9.:** Viscosidad del diesel colombiano obtenida con la relacion propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11].



**Figura B-10.:** Viscosidad de la mezcla B20 de diesel y biodiesel de palma, obtenida con la relacion propuesta en el presente, en laboratorio y según Benjumea et al [11].



**Figura B-11.:** Razones de viscosidad entre el B20 y el B0 para las situaciones presentadas (Experimental, Propuesta y según Benjumea et al [11]).

### B.2.5. Tensión superficial

Acorde a Sastri y Rao (Poling et al. [125]) la tensión superficial de los componentes (ácidos y/o n-dodecano) se determina según la Ec.B-14.

$$\sigma_i = 0,158 \cdot P_{CR-i}^{0,5} \cdot T_{B-i}^{-1,5} \cdot T_{CR-i}^{1,85} \cdot \left( \frac{1 - T_{R-i}}{1 - T_{BR-i}} \right)^{\frac{11}{9}} \left[ \frac{N}{m} \right] \quad (\text{B-14})$$

Donde,

$T_{B-i}$  = Temperatura de ebullición de la sustancia i. [K]

$T_{BR-i} = \frac{T_{B-i}}{T_{CR-i}}$  Temperatura de ebullición reducida de la sustancia i. [K]

$T_{R-i} = \frac{T_i}{T_{CR-i}}$  Temperatura reducida de la sustancia i. [K]

El subíndice CR representa las propiedades del punto crítico.

La propiedad representativa de la mezcla se determina acorde a Hadden (Poling et al. e[125]) como:

$$\sigma_m = \sum \sigma_i \cdot X_i \left[ \frac{N}{m} \right] \quad (\text{B-15})$$

La tensión superficial obtenida para las mezclas en función de la temperatura se presenta en la Figura B-12.

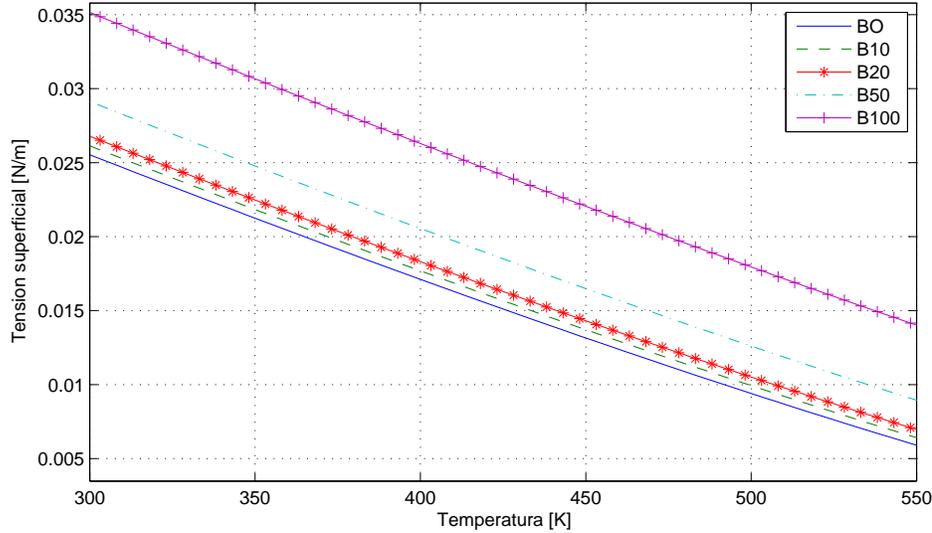


Figura B-12.: Tensión superficial para las diferentes mezclas de B0 y B100.

### B.2.6. Calor específico

La ausencia de relaciones para la determinación del calor específico de líquido para el biodiesel, impide la utilización de una relación para este. Sin embargo, en el presente estudio se considera que esta propiedad es equivalente a la del n-dodecano. En cuyo caso, se determina acorde a la relación presentada por Sazhin [118] Ec.B-16.

$$C_{pl} = 803,42 + 5,076 \cdot T - 0,00221 \cdot T^2 + 1,673 \times 10^{-6} \cdot T^3 \quad (\text{B-16})$$

## B.3. Propiedades de vapor

Las propiedades de transporte determinadas para el vapor de combustible y los gases, se obtienen acorde a la teoría de cinética de gases [66, 73, 126]. De esta forma, la determinación de las diferentes propiedades se basa en la interacción molecular de las componentes de la mezcla.

### B.3.1. Viscosidad dinámica

La determinación de la viscosidad dinámica de los diferentes componentes individuales del vapor se realiza acorde con la Ec.B-17 .

$$\mu_i = 2,6693 \times 10^{-26} \frac{\sqrt{T \cdot MW_i}}{\sigma_i^2 \cdot \Omega_{1,1-i}} \quad (\text{B-17})$$

Donde,

$$\Omega_{1,1} = \frac{1,16145}{(T^*)^{0,14874}} + \frac{0,52487}{\exp(0,7732 \cdot T^*)} + \frac{2,16178}{\exp(2,43787 \cdot T^*)} \text{ Integral de colisión. [Adm]}$$

$$T^* = \frac{T}{\left(\frac{\epsilon_{AB}}{k_B}\right)} \text{ Temperatura adimensional.}$$

$$\frac{\epsilon}{k} = 0,77 \cdot T_{CR}$$

$$\sigma = 113,75 \times 10^{-10} \left(\frac{T_{CR}}{P_{CR}}\right)^{\frac{1}{3}} \text{ radio de colisión [m]}$$

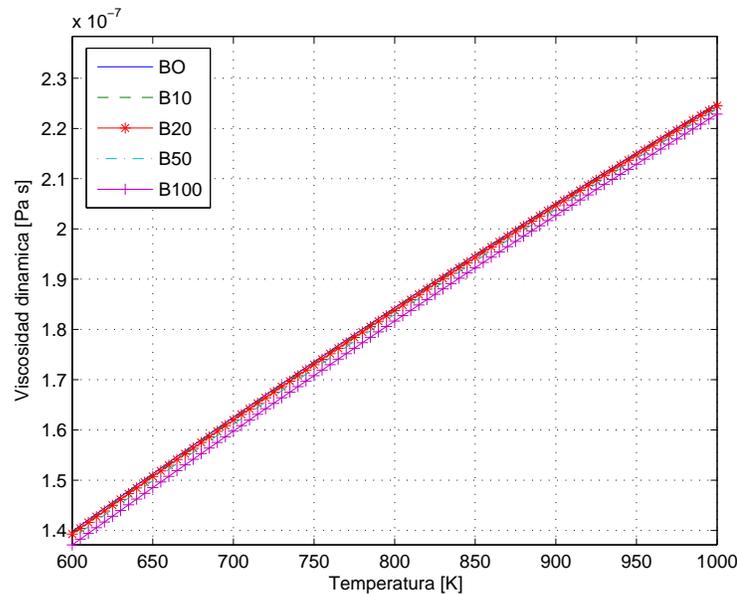
$MW_i$  = Masa molecular de la sustancia i.  $\left[\frac{kg}{mol}\right]$  Para la mezcla, la Ec.B-20

$$\mu_m = \sum_i \frac{Y_i \cdot \mu_i}{\sum_j Y_j \cdot \Phi_{ij}} \quad (\text{B-18})$$

Donde,

$$\Phi_{ij} = \frac{\left(1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{MW_j}{MW_i}\right)^{\frac{1}{4}}\right)^2}{2\sqrt{2} \left(1 + \frac{MW_i}{MW_j}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

Los resultados de viscosidad dinámica para el vapor de combustible se presentan en la Figura B-13.



**Figura B-13.:** Viscosidad dinámica del vapor para las diferentes mezclas de B0 y B100.

### B.3.2. Conductividad térmica

Para la predicción de la conductividad térmica, se utilizó la Ec.B-19.

$$\lambda_i = 8,3224 \times 10^{-22} \frac{\sqrt{T/MW_i}}{\sigma_i^2 \cdot \Omega_{1,1-i}} \quad (\text{B-19})$$

Donde, las diferentes variables se encuentran definidas en la Ec.B-17 y similar al anterior, la conductividad de la mezcla se obtiene acorde a la Ec.B-20.

$$\lambda_m = \sum_i \frac{Y_i \cdot \lambda_i}{\sum_j Y_j \cdot \Phi_{ij}} \quad (\text{B-20})$$

Los resultados obtenidos para la conductividad térmica acorde con esta metodología se presentan en la Figura B-14.

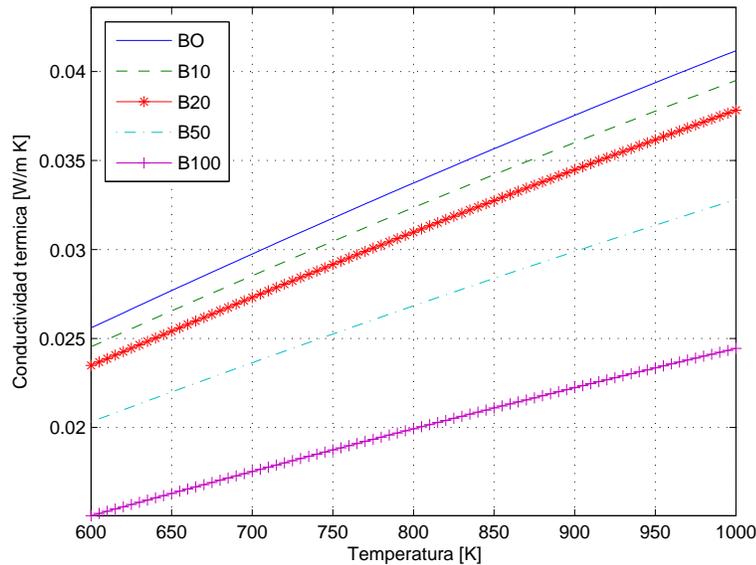


Figura B-14.: Conductividad térmica del vapor para las diferentes mezclas de B0 y B100.

### B.3.3. Difusividad binaria

En la determinación del coeficiente de difusividad binaria, se considera interacción binaria únicamente entre una mezcla de vapor de combustible y el gas en el VC. Por ello, a diferencia de la viscosidad y conductividad, el coeficiente de difusividad no se determina para cada sustancia involucrada. Por el contrario, acorde a la metodología presentada en la Sección B.1,

se determinan las propiedades críticas de la mezcla de combustible, las cuales son utilizadas en la Ec.B-21 para determinar dicho coeficiente [126].

$$D_{AB} = 1,8829 \times 10^{-22} \frac{\left(T^3 \left(\frac{1}{MW_A} + \frac{1}{MW_B}\right)\right)^{\frac{1}{2}}}{p \cdot \sigma_{AB}^2 \cdot \Omega_{2,2}} \quad (\text{B-21})$$

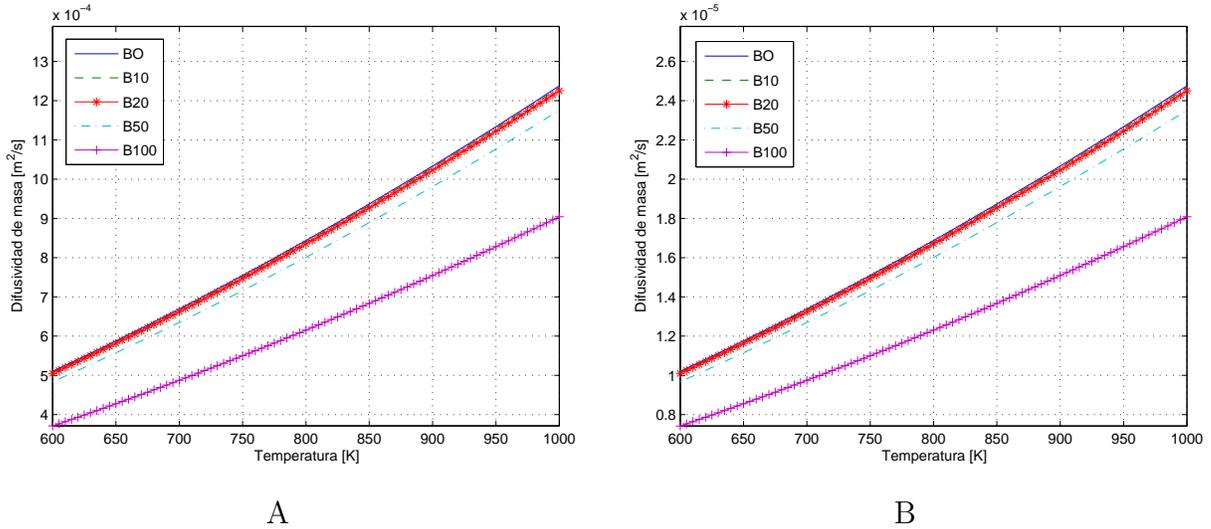
Donde,

$$\Omega_{2,2} = \frac{1,06036}{(T^*)^{0,1561}} + \frac{0,193}{\exp(0,47635 \cdot T^*)} + \frac{1,03587}{\exp(1,529 \cdot T^*)} + \frac{1,76474}{\exp(3,89411 \cdot T^*)}$$

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2} (\sigma_A + \sigma_B) \text{ Radio de colisión. [m]}$$

$$\epsilon_{AB} = (\epsilon_A \cdot \epsilon_B)^{\frac{1}{2}}$$

Los resultados del coeficiente de difusividad binaria para dos presiones diferentes se presentan en la Figura B-15-A,B



**Figura B-15.:** Coeficiente de difusividad binaria para las diferentes mezclas de B0 y B100 a presión de: A. 1 bar; B. 50 bar.

### B.3.4. Entalpía de formación

En el modelo de equilibrio, la obtención del calor liberado a ser aportado a cada VC se realiza con base en la entalpía de formación de las especies que intervienen en la reacción. En este caso, el combustible  $C_x H_y O_z$ , cuya entalpía de formación se determina acorde a la Ec.B-22, donde las entalpías de formación ( $h_{f,295-i}^o$ ) de las diferentes sustancias se presentan

en la Tabla.B-2.

$$h_{f,295}^o = \sum_i h_{f,295-i}^o \cdot X_i \left[ \frac{J}{mol} \right] \quad (\text{B-22})$$

Donde,

$X_i$  =Fracción molar de la sustancia i.[*Adm*]

# Bibliografía

- [1] T. Hiroyasu, H. Hiroyasu, and M. Miki. Reduction of heavy-duty diesel engine emission and fuel economy with multi-objective genetic algorithm and phenomenological model. *SAE paper*, (2004-01-0531), 2004.
- [2] W. Yuan, A. C. Hansen, and Q. Zhang. Predicting the physical properties of biodiesel for combustion modeling. *Transactions of the ASAE*, 46(6):1487–1493, 2003.
- [3] NIST. Libro del web de química del NIST. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. Última visita: 2010.05.20.
- [4] Antoine Osmont, Laurent Catoire, and Iskender Gokalp. Thermochemistry of methyl and ethyl esters from vegetable oils. *International Journal of Chemical Kinetics*, 39(9):481–491, 2007.
- [5] W. Yuan, A.C. Hansen, and Q. Zhang. Predicting the temperature dependent viscosity of biodiesel fuels. *Fuel*, 88(6):1120–1126, June 2009.
- [6] R.C. Reid, J. M. Prausnitz, and B. E. Poling. *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill, 4 edition, 1987.
- [7] G.N. Abramovich. *The theory of turbulent jets*. Mit Press, 1 edition, 1963.
- [8] W.S. Chiu, S.M. Shaded, and W.T. Lyn. A transient mixing model for diesel combustion. *SAE paper*, (760128), 1976.
- [9] H. Hiroyasu, T. Kadota, and M. Arai. Development and use of a spray combustion modeling to predict diesel engine efficiency and pollutant emission. *JSME.*, 26:569–575, 1983.
- [10] R.D. Reitz and F. V. Bracco. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Phy. Fluids.*, 25, 1982.
- [11] Pedro Benjumea, John Agudelo, and Andrés Agudelo. Basic properties of palm oil biodiesel-diesel blends. *Fuel*, 87(10-11):2069–2075, August 2008.
- [12] A.K. Agarwal. Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines (review). *Progress in Energy and Combustion Science*, 10:1016, 2006.

- 
- [13] E. Lois. Definition of biodiesel. *Fuel*, 86:1212–1213, 2007.
- [14] ICONTEC. *Norma tecnica colombiana NTC 1438*. Petrolero y sus derivados. Combustibles para motores diesel.
- [15] Ley 639., 2001. Normas sobre uso de alcoholes carburantes, se crean estímulos para su producción, comercialización y consumo.
- [16] Ley 939., 2004. Se estimula la producción y comercialización de biocombustibles de origen vegetal o animal para uso en motores diesel.
- [17] Proyecto de ley 048, 2005. Se expiden normas sobre biocombustibles renovables de origen biológico para motores diesel.
- [18] M. Graboski and R. McCormick. Combustion of fat and vegetable oil derived fuels in diesel engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 24:125–164, 1998.
- [19] M. Canacki. Combustion characteristics of a turbocharged di compression ignition engine fueled with petroleum diesel fuels and biodiesel. *Bioresource Technology*, 98:1167–1175, 2007.
- [20] Y.C. Lin, W.J. Lee, and H.C. Hou. Pah emissions and energy efficiency of palm-biodiesel blends fueled on diesel generator. *Atmospheric Environment*, 40:3930–3940, 2006.
- [21] C.D. Rakopoulos, K.A. Antonopoulos, D.C. Rakopoulos, D.T. Hounatalas, and E.G. Giakoumis. Comparative performance and emissions study of a direct injection diesel engine using blends of diesel fuel with vegetable oils or biodiesels of various origins. *Energy Conversion and Management*, 47:3272–3287, 2006.
- [22] R. Altin, S. Cetinkaya, and H.S. Yucesu. The potential of using vegetable oil fuels as fuel for diesel engines. *Energy Conversion and Management*, 42:529–538, 2001.
- [23] L.C. Lichty. *Internal Combustion Engines*. McGraw Hill Book Company, Tokio, international edition, 1951.
- [24] F.E. Mahallawy and S.ED. Habik. *Fundamentals and technology of combustion*. Elsevier, Oxford, 1 edition, 2002.
- [25] S.J. Araque and J.O. Fygueroa. *El proceso de combustion en motores de combustion interna*. Merida, Venezuela, 1 edition, 2005.
- [26] P.G. Merker, C. Schwarz, G. Stiesch, and F. Otto. *Simulating Combustion*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 1 edition, 2006.

- [27] A. Demirbas. Progress and recent trends in biofuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 33:1–18, 2007.
- [28] H. Masjuki, Abdulmuin M.Z., and H.S. Sii. Investigations on preheated palm oil methyl esters in the diesel engine. *ProcIMEchE*, J Power Energy:8–131, 1996.
- [29] C.D. Rakopoulos, K.A. Antonopoulos, and D.C. Rakopoulos. Multi-zone modeling of diesel engine fuel spray development with vegetable oil, bio-diesel or diesel fuels. *Energy conversion and management*, 47:1550–1573, 2006.
- [30] ASTM. *Designation D6751-02.*, 2002. Standard specification for biodiesel fuel (B100) blend stock for distillate fuels.
- [31] *EN 14214.*, 2003. Automotive Fuels, Fatty Acid Methyl Esters (FAME) for Diesel engines - Requirements and test Methods.
- [32] S.L. Cheah. Analysis of engine performance using palm oil methyl ester. Master's thesis, University of Southern Queensland, 2004.
- [33] M.A. Kalam and H.M. Masjuki. Biodiesel from palm oil an analysis of its properties and potential. *Biomass an Bioenergy.*, 23:471–479, 2002.
- [34] C.E. Ejim, B.A. Fleck, and A. Amirfalzi. Analytical study for atomization of biodiesels and their blends in a typical injector: Surface tension and viscosity effects. *Fuel*, 86:1534–1544, 2007.
- [35] A.A. Aziz, M.F. Said, and M.A. Avang. Performance of palm oil based biodiesel fuels in a single cylinder direct injection engine. *Palm Oil Developments.*, 42:15–27, 2005.
- [36] G. Knothe, J. Van Gerpen, and J. Krahl. *The biodiesel handbook*. AOCS Press, 1 edition, 2005.
- [37] oiltek. [www.oiltek.com.my.](http://www.oiltek.com.my), 2007. Ultima visita: 2007.09.15.
- [38] R. Awang and C.Y. May. Effect of hydroxylated compounds on properties and emission of palm biodiesel. *American Journal of Applied Science.*, 4:99–101, 2007.
- [39] Enffue. <http://www.carotino.com/enffue/>, 2006. Ultima visita: 2007.10.12.
- [40] ASTM. *D93, Flash point by pensky-martens closed cup tester*, 2007.
- [41] ASTM. *D2500 Cloud point of petroleum products*, 2005.
- [42] ASTM. *D97 Pour point of petroleum products*, 2006.
- [43] ASTM. *D613 Cetane number of diesel fuel oil*, 2005.

- 
- [44] S.C.A. de Almeida, C. Rodrigues, M.V.G. Nascimento, L.S.R. Vierira, and G. Fleury. Performance of a diesel generator fuelled with palm oil. *Fuel.*, 81:2097–2102, 2002.
- [45] John Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1 edition, April 1988.
- [46] E.M.A. Test specifications for biodiesel fuel. Technical report, Engine Manufacturers Association., 2006.
- [47] Chevron. Diesel fuel technical review. [www.chevron.com](http://www.chevron.com), 2007.
- [48] Auto fuels-petrol and diesel. [www.petroleumbazaar.com](http://www.petroleumbazaar.com), 2007. Ultima visita: 2007.10.20.
- [49] D.G. Li, H. Zhen, L. Xingcai, Z. Wu-gao, and Y. Jian-guang. Physico-chemical properties of ethanol-diesel fuel and its effect on performance and emissions of diesel engines. *Renewable Energy.*, 30:967–976, 2005.
- [50] Worldwide fuel charter., 9 2006. Fourth Edition.
- [51] K. Yamane, A. Ueta, and Y. Shimamoto. Influence of physical and chemical properties of biodiesel fuel on injection, combustion and exhaust emission characteristics in a di-ci engine. In *COMODIA*, 2001.
- [52] C. Carrareto, A. Macor, A. Mirandola, A. Stoppato, and S. Tonon. Biodiesel as alternative fuel: Experimental analysis and energetic evaluations. *Energy.*, 29:2195–2211, 2004.
- [53] K.W. Scholl and S.C. Sorenson. Combustion of soyabean oil methyl ester in a direct injection diesel engine. *ProcIMEchE*, J Power Energy:8–131, 1996.
- [54] FAIR. Contrato no. fair-ct95-0191. Technical report, Advanced Combustion Research from Vegetable Oils, 2001.
- [55] D. Bajpai and V.K Tuagi. Biodiesel: Source, production, composition, properties and its benefits. *Journal of Oleo Science.*, 55:487–502, 2006.
- [56] Y.B. Zeldovich. The oxidation of nitrogen in combustion and explosions. *Acta Physicochimica USSR.*, 21:577–628, 1946.
- [57] M.P. Walsh. The impact of fuel parameters in vehicle emissions. In *5th. China/Asia Clean Fuels International Conference*, 2004.
- [58] ASTM. *D445 Kinematic viscosity of transparent and opaque liquids*, 2005.

- 
- [59] K. Rodjanakid and C. Charoenphonphanich. Performance of an engine using biodiesel from refined palm oil stearin and biodiesel from crude coconut oil. In *International Conference on Sustainable Energy and Environment SEE*, 2004.
- [60] J. Walton. The fuel possibilities of vegetable oils. *Gas and Oil Power*, 1938. Whitehall press, london.
- [61] A. Monyem and Van Gerpen J.H. The effect of biodiesel oxidation on engine performance and emissions. *biomass an Bioenergy*, 20:317–325, 2001.
- [62] Kalam M.A. and Masjuki H.H. Biodiesel from palmoil-an analysis of its proprieties and potential. *Biomass and Bioenergy*, 23:471–479, 2002.
- [63] C. Baumgarten. *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer, Berlin, 1 edition, 2006.
- [64] B. Kegl. Numerical analysis of injection characteristics using biodiesel fuel. *Fuel.*, 85:2377–2387, 2006.
- [65] L.V. Streeter. *Mecanica de los fluidos*. McGraw Hill Book Company, Madrid, 3 edition, 1968.
- [66] C. K. Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 1 edition, 2006.
- [67] F. Durst. *Fluid Mechanics*. Springer, 1 edition, 2008.
- [68] Mohamed Gad-el-Hak. Questions in fluid mechanics: Stokes’hypothesis for a newtonian, isotropic fluid. *Journal of Fluids Engineering*, 117(1):3–5, March 1995.
- [69] I. Wiebe. Brennverlauf und kreisprozeb von verbrennungsmotoren. Technical report, VEB Verlag Technik Berlin., 1970.
- [70] J.D. Annand. Heat transfer in the cylinder of reciprocating internal combustion engines. *Proc. Inst. Mech. Eng.*, 177:973–990, 1963.
- [71] G. Woschni. Universally aplicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine. *SAE*, (670931):3065–3083, 1967.
- [72] G.F. Hohenberg. Advanced approaches for heat transfer calculations. *SAE*, 88:529–538, 1979.
- [73] F.A. Williams. *Combustion theory*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., 2 edition, 1985.
- [74] G.L. Borman and K. Nishiwaki. Internal combustion engine heat transfer. *Progress in Energy an Combustion Science.*, 13:1–46, 1987.

- 
- [75] T. Oguri and I. Shigewo. Radiant heat transfer in diesel engines. *SAE.*, 81(728123):23, 1972.
- [76] D.T. Hountalas, C.D. Rakopoulos, and E.G. Pariotis. Sensitivity analysis of multi-zone modeling for combustion and emissions formation in diesel engines. *SAE paper*, 01(2006-01-1383), 2006.
- [77] J.A. Gatowski, E.N. Balles, K.m. Chun, F.E. Nelson, J.A. Ekchian, and J.B. Heywood. Heat release analysis of engine pressure data. *SAE.*, 13(841359):59, 1984.
- [78] H.M. Cheung and J.B. Heywood. Estimating heat-release and mass of mixture burned from spark-ignition engine pressure data. *Progress in Energy and Combustion Science.*, 54:133–143, 1987.
- [79] Marcus Klein. *A specific heat ratio model and compression ratio estimation*. PhD thesis, Linkoping University, Linkoping, Sweden, 2004.
- [80] A. Burcat and B. Ruscic. Third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables. Technical report, Argonne national laboratory, 2005.
- [81] G. Renner and R.R. Maly. A universal model for spray characteristics of technical diesel sprays. In *COMODIA*, pages 385–390, 1994.
- [82] N. Ashgriz, C. H. Chiang, and S. K. Aggarwal. Flame structure in fuel rich mono dispersed sprays. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 15:765–772, 1988.
- [83] Hiroyuki Hiroyasu. Diesel engine combustion and his modeling. In *COMODIA*, 1985.
- [84] P.-K. Wu, L.-P. Hsiang, and G. M. Faeth. Structure and breakup properties of sprays. *International Journal of multiphase flow*, 21:99–127, 1995.
- [85] G. M. Faeth. Spray combustion phenomena. 26:1593–1612, 1996.
- [86] E.D. Bachalo. Injection, dispersion and combustion of liquid fuels. *Symposium (International) on Combustion*, 25:333–344, 1994.
- [87] R.D. Reitz and S.P. Lin. drop and spray formation from a liquid jet. *Annual Review Fluid Mech.*, 30:85–105, 1998.
- [88] H. P. Trinh. Modeling of turbulence effect on liquid jet atomization. Technical Report 215189, NASA, Marshall Space Flight Center, Alabama, 2007.
- [89] W.A. Sirignano and C. Mehring. Review of theory of distortion and disintegration of liquid streams. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26:609–655, 2000.

- 
- [90] S.A. Krzeczkowski. Measurement of liquid droplet disintegration mechanisms. *International Journal of multiphase flow*, 6:227–239, 1980.
- [91] W. A. Sirignano. An integrated approach to spray combustion model development. *Combustion Science and Technology*, 58:231–251, 1988.
- [92] M. Tabata, H. Fujii, M. Arai, and H. Hiroyasu. Mean drop diameter of a diesel spray in a vaporizing process. *JSME*, 34(3):369–378, 1991.
- [93] C. J. Rutland and Y. Wang. Turbulent liquid spray mixing and combustion - fundamental simulations. *Journal of physics publishing*, 46:28–37, 2006.
- [94] A. Sadiki, M. Chrigui, J. Janicka, and M. R. Maneshkarimi. Modeling and simulation of effects of turbulence on vaporization, mixing and combustion of liquid fuel sprays. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75:105–130, 2005.
- [95] B.F. Magnussen and BW Hjertager. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. In *19th AIAA Aerospace Meeting, St. Louis, USA*, 1981.
- [96] A. K. Oppenheim. *Dynamics of combustion systems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2006.
- [97] R. S. Benson and N. D. Whitehouse. *Internal combustion engines*. Pergamon Press, 1 edition, 1979.
- [98] ND Whitehouse and RGB Way. Rate of heat release in diesel engines and its correlation with fuel injection data. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers—Part 3J*, 184:17–27, 1969.
- [99] F. G Chmela, G. H Pirker, and A. Wimmer. Zero-dimensional ROHR simulation for DI diesel engines-A generic approach. *Energy Conversion and Management*, 48(11):2942–2950, 2007.
- [100] T.Ahmad and A.C. Alkidas. A simple correlation for mixing and combustion rates in diesel engines. In *COMODIA*, 1985.
- [101] B. F. Magnussen and B. Grimsmo. Numerical calculation of turbulent flow and combustion in an otto engine using the eddy dissipation concept. 90:65–73, 1990.
- [102] U.S. Ertesvag and B.F. Magnussen. The eddy dissipation turbulence energy cascade model. *Combustion Science and Technology*, 159:1213–1235, 2000.
- [103] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 1 edition, 2000.

- 
- [104] D. N. Assanis and D. Jung. Multizone di diesel spray combustion model for cycle simulation studies of engine performance and emissions. *SAE TRANSACTIONS*, 01(2001-01-1246):1246, 2001.
- [105] J. Sauter. Determining the efficiency of atomization by its fineness and uniformity. Technical report, NACA, 1927.
- [106] L. Prandtl. *Prandtls essentials of fluid mechanics*. Springer Verlag, 2 edition, 2004.
- [107] E. M. Greitzer, C. S Tan, and M. B Graf. *Internal flow: concepts and applications*. Cambridge Univ Pr, 1 edition, 2004.
- [108] S.S. Yoon and S.D. Heister. Categorizing linear theories for atomizing round jets. *Atomization and sprays*, 13:499–516, 2003.
- [109] R.D. Reitz. Computer modeling of sprays. In *Spray technology short course*, 1996.
- [110] R.D. Reitz. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomization and spray technology*, 3:309–337, 1987.
- [111] RD Reitz and R. Diwakar. Structure of high-pressure fuel sprays. In *Society of Automotive Engineers international congress and expo*, volume 23, Detroit, 1987. SAE.
- [112] D. L Siebers and B. Higgins. Flame lift-off on direct-injection diesel sprays under quiescent conditions. *SAE TRANSACTIONS*, 110(3):400–421, 2001.
- [113] AJ Shearer, GM Faeth, and H. Tamura. Evaluation of a locally homogeneous model of spray evaporation. Technical Report 3198, NASA, 1978.
- [114] G. M. Faeth. Mixing, transport and combustion in sprays. *Progress in energy and combustion science*, 13(4):293–345, 1987.
- [115] J. Abraham, S. L. Post, and V. A. Iyer. Is the liquid penetration in diesel sprays mixing controlled. *Proceedings of the combustion institute*, 28:1111–1118, 2000.
- [116] M. M El Wakil, O. A. Uyehara, and P. S. Myers. A theoretical investigation of the heating-up period of injected fuel droplets vaporizing in air. *NACA TN*, 3179, 1954.
- [117] W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1 edition, 1999.
- [118] Sergei S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science.*, 32:162–214, 2006.
- [119] GL Borman and JH Johnson. Unsteady vaporization histories and trajectories of fuel drops injected into swirling air. *Burning a wide range of fuels in diesel engines*, 2:13, 1967.

- 
- [120] A.D. Gosman and R.J.R. Johnson. Computer analysis of fuel-air mixing in direct-injection engines. *SAE*, 800091:581–596, 80.
- [121] W.E. Ranz and W.R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48:141–146, 1952.
- [122] F. A. Matekunas. Modes and measures of cyclic combustion variability. *SAE transactions*, 92(1):1–1139, 1983.
- [123] Michael G. Kesler, Byung Ik Lee, and Stanley I. Sandler. A third parameter for use in generalized thermodynamic correlations. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 18(1):49–54, February 1979.
- [124] Mustafa Tat and Jon Van Gerpen. The specific gravity of biodiesel and its blends with diesel fuel. *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, 77(2):115–119, February 2000.
- [125] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O’Connell. *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill, 5 edition, 2004.
- [126] R. S. Brodkey and H. C. Hershey. *Transport phenomena*. McGraw-Hill, international edition, 1998.

# Declaración

Me permito afirmar que he realizado la presente tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados en la propia tesis. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Bogotá, D.C., 21.07.2010

---

(Felipe Ortiz V.)