

PREDICCIÓN Y ANALISIS DE LOS PRODUCTOS DE LA COMBUSTIÓN EN UN MOTOR DE ENCENDIDO POR CHISPA MEDIANTE LA MODELACIÓN MATEMÁTICA

Guillermo Lira Cacho – Héctor Vásquez Santa Cruz
Instituto de Motores de Combustión Interna
Facultad de Ingeniería Mecánica – Universidad Nacional de Ingeniería
E-mails: glira@uni.edu.pe – mauriciovox@latinmail.com

RESUMEN

Se presentan los fundamentos teóricos de un modelo matemático de simulación numérica cero-dimensional para la predicción y análisis de las principales emisiones de los productos de combustión en un motor de combustión interna de encendido por chispa (E.CH.). El modelo se basa en la solución numérica de las ecuaciones de conservación de la energía, continuidad y ecuación de estado de gases ideales. En la fase de combustión, se considera que ésta se realiza en dos zonas. Durante las fases de combustión y expansión, se utilizan ecuaciones de equilibrio químico para la zona de gases, productos de la combustión. Además, en la determinación de los monóxidos de nitrógeno (NO) y de carbono (CO) se utilizan ecuaciones de cinética química para contemplar el efecto de "congelamiento". Finalmente, se presenta el análisis de los resultados obtenidos a partir del programa desarrollado.

ABSTRACT

The theoretical foundations of a mathematical model are presented for the simulation and prediction of the combustion products in spark-ignition engines. The model is based on the equations of conservation of the energy, continuity and equation of state of ideal gases. In the combustion phase, it is considered that this is carried out in two regions (region of combustion gases and region of unburned mixture). During the combustion phases and expansion, equations of chemical equilibrium are used for the region of combustion gases. Equations of chemical kinetics are used to determine the formation of the NO. Finally some results of the concentration in ppm are presented for the NO and CO.

INTRODUCCION

Los motores de combustión interna (MCI) que se emplean en los automóviles son los principales causantes del alto grado de la contaminación ambiental en el mundo. Los contaminantes más usuales que emiten los vehículos son el monóxido de carbono (CO), los óxidos de nitrógeno (NO_x), los compuestos orgánicos volátiles y las macropartículas. En lo que se refiere a estas emisiones, el transporte en los países desarrollados representan entre el 30 y el 90% del total. En EUA, un 80% del CO y un 40% de los NO_x e hidrocarburos emitidos a la atmósfera proceden de la combustión de la gasolina y el petróleo diesel (gasóleos) en los motores de los automóviles y camiones. Por esta razón, muchos países tienen normas sobre la calidad del aire con respecto a las sustancias peligrosas que pueda contener. Estas normativas marcan los niveles máximos de concentración que permiten garantizar la salud pública. También se han establecido nor-

mas para limitar las emisiones contaminantes del aire que producen las diferentes fuentes de contaminación, principalmente, los automóviles.

En vista de haber surgido este grave problema, así como por la escasez de los combustibles fósiles, se han incrementado notablemente los requisitos de calidad en la producción de los MCI, que permitan reducir estos problemas. Con la finalidad de reducir los costos y el tiempo de investigaciones y pruebas de nuevos motores, sus sistemas auxiliares y accesorios, más eficientes y "ecológicamente" más limpios, la modelación matemática se constituye en una herramienta complementaria de suma importancia.

FUNDAMENTOS DEL MODELO

El modelo matemático desarrollado se basa en la solución de las ecuaciones de la conservación de la ener-

gía (primera ley de la termodinámica) y masa mediante métodos numéricos, las cuales sirven además para calcular la concentración de cada uno de los productos de la combustión, valiéndonos para ello de las ecuaciones de equilibrio químico.

Los cálculos se realizaron sobre la base de la modelación de los procesos de admisión, compresión, combustión, expansión y escape, tomando como volumen de control el interior del cilindro, es decir, el volumen que hay entre la culata y la cabeza del pistón.

La primera ley de la termodinámica en su forma diferencial, para el volumen de control considerado, de una forma general, está dada por:

$$\delta Q_c - \delta Q_w + \sum_1^n h_i dm_i = dU + \delta W + h_e dm_e \quad (1)$$

donde: δQ_c es el diferencial de calor desprendido durante la combustión; δQ_w es el diferencial de calor que se pierde por efecto de la refrigeración; $\sum_1^n h_i dm_i$ es el diferencial de energía (entalpía) aportada por las masas que ingresan al volumen de control durante el proceso de admisión; $h_e dm_e$ es el diferencial de energía (entalpía) que se llevan los productos de la combustión durante el proceso de escape.

La ecuación (1), para efecto de calcular la variación de la presión en función del ángulo de giro del cigüeñal ($dp/d\varphi$), es posible transformarla haciendo uso de algunas relaciones y definiciones de los gases ideales y considerando que el trabajo realizado o consumido por los gases se puede calcular como en los procesos reversibles, es decir, $\delta W = pdV$ [4].

Así mismo, a partir de la cinemática del émbolo y de algunos parámetros geométricos del motor se puede calcular el volumen instantáneo ocupado por los gases dentro del cilindro, así como el área instantánea de transferencia de calor A_w [4,5].

Para calcular la rapidez del intercambio de calor entre el fluido de trabajo y el medio exterior (al sistema de enfriamiento), se usó la relación de Newton:

$$\frac{\delta Q_w}{\delta t} = A_w h (T - T_w) \quad (2)$$

Donde, el coeficiente de transferencia de calor por convección h se puede calcular mediante diferentes fórmulas. De éstas, las más utilizadas son las propuestas por Woschni y Annand [1,4,5,6].

Los procesos de admisión y escape se modelaron bajo la hipótesis de un sistema abierto, considerando que el flujo a través de las válvulas es isoentrópico, por lo que para el cálculo de la masa que entra o sale del sistema se puede utilizar la fórmula del flujo de gas a través de un orificio [1,4,5].

Las fórmulas generales para el cálculo de $dp/d\varphi$, obtenidas a partir de la aplicación de la primera ley de la termodinámica, tanto durante la fase cerrada del ciclo (procesos de compresión, combustión y expansión), como durante la fase abierta (procesos de admisión y escape), son [4]:

a) En la fase cerrada del ciclo.-

$$\frac{dp}{d\varphi} = \frac{k-1}{V} \left(\frac{\delta Q_c}{\delta\varphi} - \frac{\delta Q_w}{\delta\varphi} \right) - k \frac{p}{V} \frac{dV}{d\varphi} + \frac{p}{k-1} \frac{dk}{d\varphi} \quad (3)$$

donde: φ es el ángulo de giro del cigüeñal del motor para un instante dado, el cual es directamente proporcional al tiempo t ; p , V y k son la presión, el volumen de la cámara de combustión y el exponente adiabático, respectivamente, en un instante determinado.

b) En la fase abierta del ciclo.-

$$\frac{dp}{d\varphi} = \frac{k}{V} \left(R_i T_i \frac{dm_i}{d\varphi} - R_e T_e \frac{dm_e}{d\varphi} - \frac{pdV}{\delta\varphi} - \frac{k-1}{k} \frac{\delta Q_w}{\delta\varphi} \right) \quad (4)$$

donde: R , T y m son la constante de los gases, la temperatura y la masa, respectivamente; los subíndices i y e se refieren al ingreso y salida del motor, respectivamente.

Una vez que se remplacen todos los términos de las ecuaciones 3 y 4 en función de p se pueden integrar, empleando métodos de integración numérica, para finalmente obtener los valores de la presión, temperatura, así como otros parámetros, en función del ángulo de giro del cigüeñal φ , o en función del tiempo.

Modelación de la combustión E.CH.- La modelación del proceso de combustión es uno de los aspectos claves y fundamentales en cualquier simulación numérica de los ciclos de trabajo de los motores de combustión interna. Hay que tomar en cuenta que todos los parámetros de operación de los motores están influenciados por el desarrollo del proceso de combustión.

El modelo de la combustión utilizado en este caso es cero-dimensional [1,6], en el cual se asume que durante la combustión hay dos zonas (ver figura 1): la zona "quemada" y la zona "no quemada", separadas por una estrecha zona luminosa llamada "frente de llama", donde las temperaturas son cercanas a las temperaturas finales de la combustión T_z . En esta zona se quema la mezcla aire combustible, altamente diluida con los productos de combustión completa o parcial de la zona quemada.

En la zona quemada, se consideran que los productos de la combustión se encuentran en estado de equilibrio químico. En la modelación se asume que toda la cámara de combustión se encuentra a una misma presión (equilibrio mecánico) en cualquier instante, pero que ambas zonas tienen diferentes temperaturas.

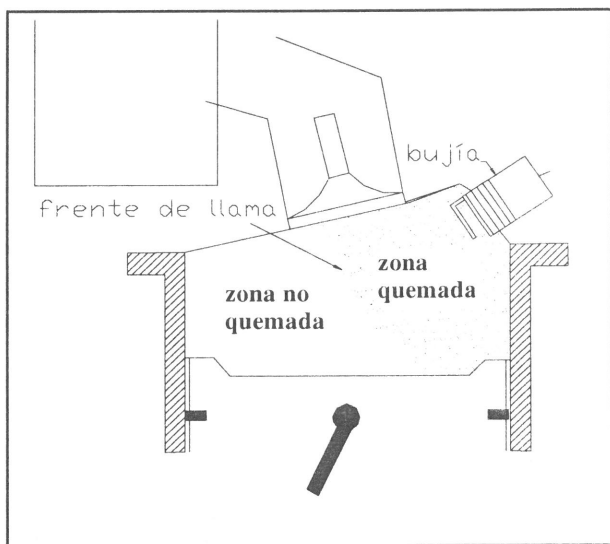


Fig. 1 Esquema de la combustión "bizonal"

La ecuación de la conservación de la energía (en su forma diferencial) en este proceso es:

$$\delta Q_c = pdV + dU + \delta Q_w \quad (5)$$

donde: δQ_c es el diferencial de calor desprendido durante la combustión. La derivada de Q_c con respecto a ϕ es [4]:

$$\frac{\delta Q_c}{\delta \phi} = g_{sc} \cdot H_u \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \phi} \quad (6)$$

donde: g_{sc} es el suministro cíclico de combustible. Siendo

$$\left. \begin{aligned} H_u' &= H_u - \Delta H_u \\ \Delta H_u &= 114 \cdot (1 - \lambda) L_0 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

donde: H_u es el poder calorífico bajo del combustible; ΔH_u son las pérdidas de calor por combustión incompleta (sólo si $\lambda \leq 1$) [2], en MJ/kg; L_0 es la relación estequiométrica, en kmol/kg; y λ es el coeficiente de exceso de aire.

El coeficiente de exceso de aire (λ) se define como el cociente entre la relación aire combustible real con respecto a la relación estequiométrica.

El coeficiente χ es el coeficiente de desprendimiento de calor, y se calcula mediante la función de Wiebe:

$$\chi(\phi) = 1 - \exp \left[-c \left(\frac{\phi - \phi_{ic}}{\Delta \phi_z} \right)^{m+1} \right] \quad (8)$$

donde: c es el parámetro de la eficiencia de la combustión (factor de quemado), que indica cuánto combustible se quema durante el periodo $\Delta \phi_z$ (duración de la combustión); m es el factor de forma de la cámara, que determina la rapidez de la combustión; mientras que ϕ_{ic} es el ángulo de giro del cigüeñal que corresponde al inicio de la combustión.

Los coeficientes de la ecuación (8) se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1: Parámetros de Wiebe para calcular el coeficiente de desprendimiento de calor [4].

m	$\Delta \phi_z$	c
2,5 - 4,0	40 - 60	(-6,908) - (-4,605)

Es importante señalar que la función de Wiebe determina también la proporción de mezcla que se está quemando en un determinado instante, es decir, define las masas de mezcla quemada y no-quemada para un determinado instante.

La energía interna del sistema (U) se calcula sumando la energía interna de la zona de mezcla quemada U_b , más la energía interna de la mezcla no quemada U_u , según la siguiente ecuación (considerando que a

$T=0$ K, la energía interna de los gases $U=0$):

$$U = U_b + U_u = m [C_{v,b} \cdot T_b \cdot \chi + C_{v,u} \cdot T_u \cdot (1 - \chi)] \quad (9)$$

donde: $C_{v,b}$, T_b y $C_{v,u}$, T_u son el calor específico a volumen constante y la temperatura en la zona quemada y la zona no quemada, respectivamente; y m es la masa total que se encuentra en la cámara.

Para el cálculo de la temperatura T_u , se puede asumir que la mezcla no quemada, se comprime casi adiabáticamente durante la combustión [1,2,7], es decir:

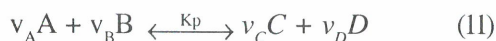
$$\frac{T_u}{T_{ic}} \approx \left(\frac{P}{P_{ic}} \right)^{\left(\frac{k_u - 1}{k_u} \right)} \quad (10)$$

donde: T_{ic} y P_{ic} , son la presión y temperatura en un estado referencial (inicio de la combustión); y k_u es el exponente adiabático de la mezcla no quemada.

EQUILIBRIO QUIMICO DE LOS PRODUCTOS DE LA COMBUSTION

En los motores E.CH. se puede considerar (aproximadamente) que los gases producidos por la combustión se mantienen en equilibrio químico.

La constante de equilibrio químico para mezclas de gases ideales.- Para una reacción química en equilibrio, de cuatro componentes (gases ideales) A, B, C y D, a una determinada presión y temperatura, tal como la que se muestra:



La constante de equilibrio está dada por la siguiente expresión:

$$K_p(T) = \frac{y_C^{v_C} y_D^{v_D}}{y_A^{v_A} y_B^{v_B}} \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^{v_C + v_D - v_A - v_B} \quad (12)$$

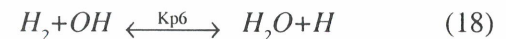
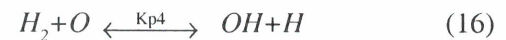
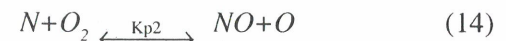
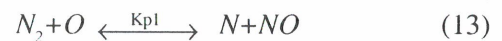
donde: y_i es la fracción molar del componente i ; y P_{ref} es una presión de referencia.

Productos de la combustión.- En los productos de la combustión en un motor E.CH., en mayor o me-

nor grado, se encuentran los siguientes componentes: CO , CO_2 , N_2 , NO , N_2O , N , H_2 , H , H_2O , OH , O_2 , NH_3 , HNO_3 , O e hidrocarburos de diferente naturaleza. La mayor parte de estos componentes se encuentran en los productos de la combustión en pequeñas cantidades e influyen insignificadamente sobre el efecto térmico de la reacción cuando la mezcla aire combustible es pobre, es decir, cuando $\lambda \geq 1$ [2].

En caso de $\lambda < 1$, el efecto térmico de la reacción disminuye como resultado de la formación del CO .

Para la formación del CO y NO los más importantes de estos componentes son las siguientes once especies: CO , CO_2 , N_2 , N , NO , H_2 , H , OH , O_2 , O , H_2O [1,3,5]. Las reacciones químicas de equilibrio consideradas para el cálculo de las concentraciones de estas 11 especies son [3]:



donde, K_{p1} ,... K_{p7} son las constantes de equilibrio de las reacciones químicas propuestas.

Todos los componentes, excepto los monóxidos de carbono (CO) y de nitrógeno (NO) y el nitrógeno atómico (N), durante los procesos de combustión y expansión prácticamente se encuentran en condiciones de equilibrio químico. Esto permite plantear las ecuaciones para la determinación de sus concentraciones sobre la base de la ley de conservación de la masa. A partir de las ecuaciones estequiométricas (13,14,..., 19) se obtienen siete ecuaciones para la determinación de las concentraciones molares instantáneas de los diversos productos de la combustión:

$$K_{p1} = [N][NO]/[N_2][O] \quad (20)$$

$$K_{p2} = [NO][O]/[N][O_2] \quad (21)$$

$$K_{p3} = [NO][H]/[N][OH] \quad (22)$$

$$K_{p4} = [OH][H]/[H_2][O] \quad (23)$$

$$K_{p5} = [H]^2/[H_2] \cdot \prod_1^n [M_i] \quad (24)$$

$$K_{p6} = [H_2O][H]/[H_2][OH] \quad (25)$$

$$K_{p7} = [CO_2][H]/[CO][OH] \quad (26)$$

donde: $[J]$, representa la concentración de una especie cualquiera, en mol/cm³; M_i representa la concentración del componente i de los productos de la combustión.

Además de estas ecuaciones, es necesario plantear las 4 ecuaciones del balance de masa de los elementos contenidos en los reaccionantes iniciales (ver Tabla 2).

Tabla 2: Ecuaciones de balance de masa.

Balance de	Ecuación
Oxígeno	$[CO_2] + \frac{[CO]}{2} + [O_2] + \frac{[O]}{2} + \frac{[H_2O]}{2} + \frac{[OH]}{2} + \frac{[NO]}{2} = 0,21 \cdot \chi \cdot \frac{\eta_v V_h \rho_0}{V_p \mu_a}$
Hidrógeno	$[H_2] + \frac{[H]}{2} + \frac{[OH]}{2} + [H_2O] = \frac{H}{2} \cdot \frac{1}{\lambda L_0} \cdot \chi \cdot \frac{\eta_v V_h \rho_0}{V_p \mu_a}$
Nitrógeno	$[N_2] + \frac{[NO]}{2} + \frac{[N]}{2} = 0,79 \cdot \chi \cdot \frac{\eta_v V_h \rho_0}{V_p \mu_a}$
Carbono	$[CO] + [CO_2] = \frac{C}{12} \cdot \frac{1}{\lambda L_0} \cdot \chi \cdot \frac{\eta_v V_h \rho_0}{V_p \mu_a}$

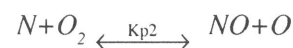
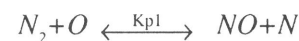
donde: χ es la fracción de combustible (o aire) que se ha quemado hasta un instante dado; V_p es el volumen que ocupan los productos de la combustión en la cámara de combustión; μ_a es la masa molecular del aire; ρ_0 es la densidad del aire a las condiciones atmosféricas estándares; C y H son las fracciones gravimétricas (en masa) de carbono y de hidrógeno en el combustible, respectivamente; η_v es el coeficiente de llenado (eficiencia volumétrica); y V_h es la cilindrada unitaria del motor.

El factor $\eta_v V_h \rho_0 / (V_p \mu_a)$ representa la cantidad de aire (en mol) que ingresa a un cilindro del motor, en un ciclo, por unidad de volumen que ocupan los productos de la combustión (en cm³).

MECANISMO DE FORMACION DEL NO

El 99% de los óxidos de nitrógeno NO_x (NO , NO_2 , N_2O_x , etc.) que se forman en los motores E.CH., está constituido por el monóxido de nitrógeno (NO) [2]. La formación del dióxido de nitrógeno NO_2 se realiza, básicamente, en el tubo de escape del motor y en la atmósfera. Es por este motivo que en el presente trabajo se considera que en los productos de la combustión sólo se encuentra el NO . Puesto que las gasolinas prácticamente no contienen nitrógeno, la presencia de NO en los gases de escape está vinculada con el nitrógeno del aire.

La formación del NO a partir del nitrógeno del aire es de carácter térmico [2]. Según la teoría de Zeldóvich el NO se produce mediante las reacciones en cadena (reacciones 13 y 14):

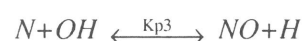


La velocidad de estas reacciones en cadena está determinada principalmente por la primera, la cual es una reacción endotérmica, que requiere una gran cantidad de calor ($\Delta H = +316$ kJ/mol), mientras que la segunda es exotérmica ($\Delta H = -136$ kJ/mol).

Estas dos reacciones se pueden expresar como (reacción bimolecular):



Complementariamente, con las ecuaciones (13) y (14) se puede considerar la influencia del radical hidróxilo (OH) a través de la reacción exotérmica ($\Delta H = -207$ kJ/mol) (15):



Las reacciones de la formación del monóxido de nitrógeno son reversibles, con el aumento de temperatura la concentración del NO crece. La velocidad de la reacción de formación del NO depende de la concentración de oxígeno atómico y, por lo tanto, del contenido de CO_2 . Por este motivo, el máximo contenido del NO en los productos de la combustión corresponde a mezclas aire combustible ligeramente pobres ($\lambda = 1,04-1,07$). Con el enriquecimiento de la mezcla ($\lambda \approx 0,90-0,95$), a pesar que se alcanzan las temperaturas máximas del ciclo, la concentración de NO disminuye debido a la falta de oxígeno.

La energía de activación de la reacción de formación del NO , ecuación (13), supera el valor de 500 MJ/kmol, por lo que la velocidad de la reacción química fuertemente depende de la temperatura. La disminución de la temperatura de 2.600 a 1.500 K origina (a igualdad de las otras condiciones) la disminución de la velocidad de reacción en $3,7 \times 10^6$ veces. Como consecuencia de esto, se produce un fenómeno denominado “congelamiento” del equilibrio, el cual consiste en que al enfriarse rápidamente los productos de la combustión durante el proceso de expansión, el equilibrio químico de la reacción de formación del óxido nítrico no tiene tiempo suficiente para desplazarse, y más adelante ya no puede hacerlo debido a la extraordinaria lentitud de la reacción a relativas bajas temperaturas. En virtud de esto, la concentración del NO en los productos de la combustión, al final del proceso de expansión, corresponde a la concentración en el estado de equilibrio a altas temperaturas.

La fuerte dependencia de la velocidad de oxidación del nitrógeno con la temperatura determina la necesidad de considerar el alejamiento de estas reacciones de las condiciones de equilibrio. Diversas investigaciones [1,2,3,8] han demostrado que las concentraciones del NO en estado de no-equilibrio en los motores de encendido por chispa se determinan con suficiente exactitud a través del mecanismo propuesto por Zeldóvich.

Las constantes de la velocidad de la reacción directa e inversa (k_i^+ y k_i^- , respectivamente) para estas reacciones han sido calculadas en numerosos estudios experimentales. Valores recomendados para estas constantes son mostrados en la Tabla 3.

La constante de equilibrio (K_p) para cada reacción se calcula: $K_{p,i} = k_i^+ / k_i^-$.

Empleando las reacciones (13), (14) y (27) se puede calcular la rapidez de la formación de NO [1,5,6]:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_1^+[O][N_2] + k_2^+[N][O_2] + k_3^+[N][OH] - k_1^-[NO][N] - k_2^-[NO][O] - k_3^-[NO][H], \dots (28)$$

Una ecuación similar a la expresión (28) puede ser escrita para calcular la formación del N :

$$\frac{d[N]}{dt} = k_1^+[O][N_2] - k_2^+[N][O_2] - k_3^+[N][OH] - k_1^-[NO][N] + k_2^-[NO][O] + k_3^-[NO][H], \dots (29)$$

Resultados experimentales muestran que el valor de $[N]$ es mucho más pequeño en comparación con las concentraciones que presentan de las otras especies de interés ($\approx 10^{-8}$ en fracción molar). Por esta razón, es factible igualar la ecuación (29) a cero y usarla para eliminar $[N]$ de la ecuación (28). Así, la ecuación (28) se convierte en:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_1^+[O][N_2] \cdot \frac{1 - [NO]^2 / (K[O_2][N_2])}{1 + k_1^-[NO] / (k_2^+[NO] + k_3^+[OH])} \quad (30)$$

donde: $K = (k_1^+ / k_1^-)(k_2^+ / k_2^-)$.

Según las referencias [1,3], se puede asumir que el proceso de formación del NO es aproximadamente proporcional a los valores de concentración en equilibrio químico de O , O_2 , OH , H y N_2 a la presión y temperatura local.

Entonces, tomando en cuenta esto, la ecuación (28) finalmente se transforma en:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R_1 \{1 - ([NO]/[NO]_e)^2\}}{1 + ([NO]/[NO]_e)R_1 / (R_2 + R_3)} \quad (31)$$

donde:

- $R_1 = k_1^+[O]_e[N_2]_e = k_1^-[NO]_e[N]_e$
- $R_2 = k_2^+[N]_e[O_2]_e = k_2^-[NO]_e[O]_e$
- $R_3 = k_3^+[N]_e[OH]_e = k_3^-[NO]_e[H]_e$
- $[]_e$ representa la concentración en equilibrio de una especie cualquiera.

$[NO]/[NO]_e$ es la relación entre la concentración de moles de NO calculados según la cinética química y la concentración de moles de NO en equilibrio químico.

Tabla 3: Constantes de las velocidades de las reacciones del mecanismo de formación del NO en el motor E.CH. [1,5,6].

Reacción	Constante, cm ³ /(mol·s)	Rango de temperatura, K	Incertidumbre, %
$O + N_2 \rightarrow NO + N$ $N + NO \leftarrow N_2 + O$	$k_1^+ = 7,6 \times 10^{13} \exp[-38.000/T]$ $k_1^- = 1,6 \times 10^{13}$	2.000-5.000 300-5.000	2 ± 20% a 300 K 2 a 2.000-5.000 K
$N + O_2 \rightarrow NO + O$ $N + NO \leftarrow O_2 + N$	$k_2^+ = 6,4 \times 10^9 \exp[-3.150/T]$ $k_2^- = 1,5 \times 10^9 \exp[-19.500/T]$	300-3.000 1.000-3.000	± 30% a 300-1.500 K 2 a 3.000 K ± 30% a 1.000 K 2 a 3.000 K
$H + OH \rightarrow NO + H$ $H + NO \leftarrow OH + N$	$k_3^+ = 4,1 \times 10^{13}$ $k_3^- = 2,0 \times 10^{14} \exp[-23.650/T]$	300-2.500 2.200-4.500	± 80% 2

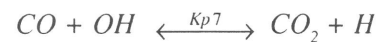
MECANISMO DE FORMACION DEL CO

El factor determinante en la concentración del monóxido de carbono (CO) en los productos de la combustión se considera el valor del coeficiente de exceso de aire (λ). Mientras más incompleta sea la combustión (lo cual depende de λ), mayor será la concentración de CO en los gases de escape. La formación de CO también puede ocurrir con mezclas pobres ($\lambda > 1$), como consecuencia de la disociación del CO₂ a altas temperaturas (>2.000 K), aunque en cantidad despreciable si se la compara con las concentraciones que tienen los demás productos de combustión. También es posible la formación de CO en las capas cercanas a las paredes de la cámara, donde las temperaturas son suficientemente altas para el desarrollo de las primeras etapas de la combustión, pero insuficientes para la transformación de CO en CO₂. El efecto de "congelamiento" del CO se produce sólo si la temperatura de los productos de la combustión $T \leq 1.000$ K [8]. Esto origina que la concentración de CO en los motores E.CH., como regla general, alcance el valor correspondiente al equilibrio químico, correspondiente a la temperatura de los gases al final del proceso de expansión; como resultado de lo cual el contenido de CO en los gases de escape casi no depende de otros factores del motor, tales como la relación de compresión, la velocidad de rotación del cigüeñal, o el ángulo de adelanto del encendido, y que prácticamente sea sólo función de λ .

Es interesante señalar que en el rango de $\lambda = 1,15-1,30$ es posible que nuevamente aumente la concentración de CO, lo que se debería a que cerca del límite inferior de inflamabilidad del combustible, el encendido y la combustión (ciclo a ciclo) se vuelven inestables, provocando esto combustión incompleta.

Los niveles de CO en los gases de escape de un motor E.CH. son más bajos que los máximos valores de éstos en el interior de la cámara de combustión, pero son significativamente más altos que los valores obtenidos considerando un estado de equilibrio químico en el momento del escape de gases.

La principal reacción, que gobierna la formación del CO es (reacción 19):



A partir de la anterior ecuación de equilibrio químico, se debe considerar una ecuación de cinética química que gobierne la formación del CO cuando la temperatura de los gases al final del proceso de expansión $T \leq 1.000$; esta ecuación tiene la forma siguiente [3]:

$$\frac{d[CO]}{dt} = -k_1^+ \cdot [CO] \cdot [OH] \quad (32)$$

donde: k_1^+ es la constante de la velocidad de la reacción directa ($k_1^+ = 7,10 \times 10^{12} \cdot \exp(-32.200/(\bar{R} T))$), en cm³/(mol·s)), \bar{R} es la constante universal de los gases [8].

DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROGRAMA PRINCIPAL DE CALCULO

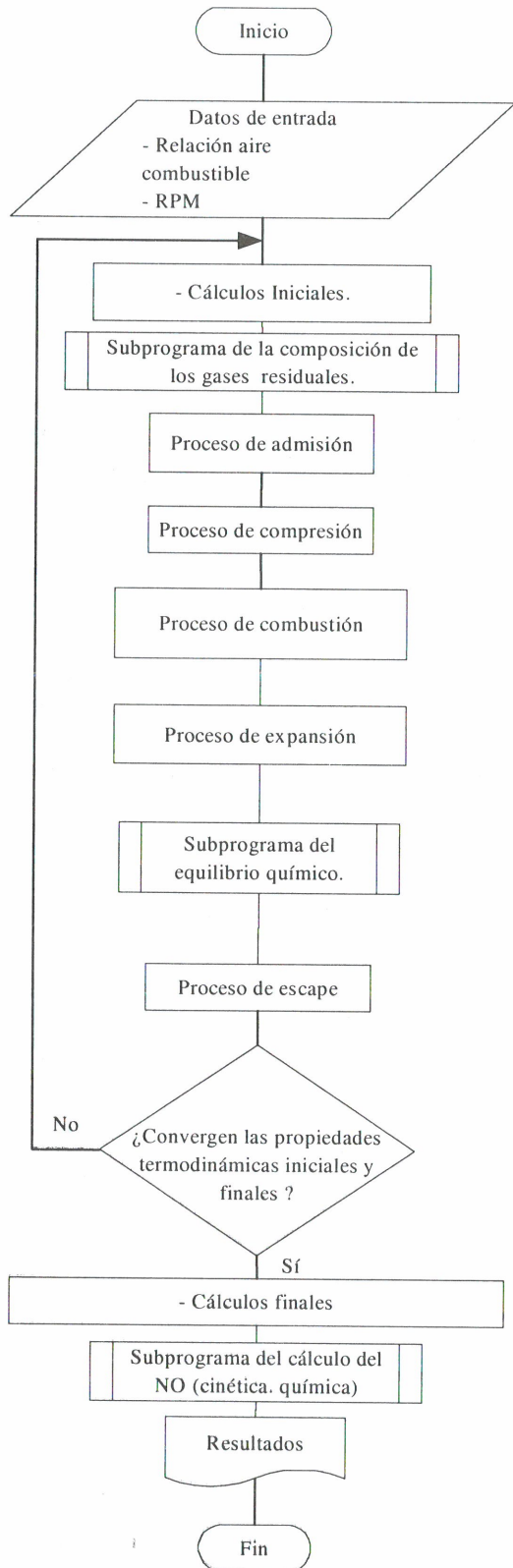


Diagrama de flujo del subprograma de cálculo del equilibrio químico.-

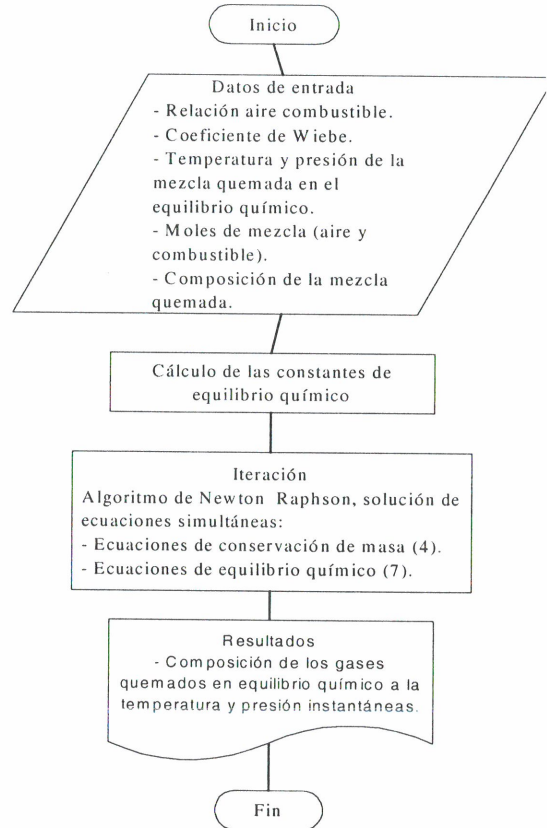


Diagrama de flujo del subprograma de cálculo de los gases residuales.-

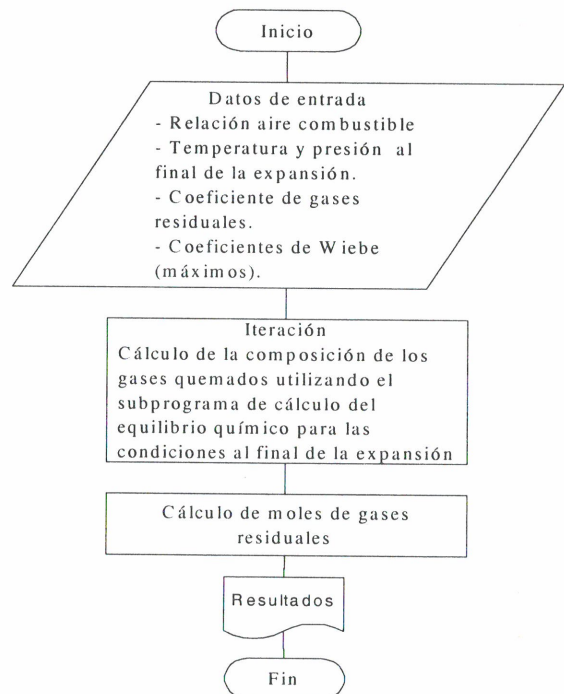
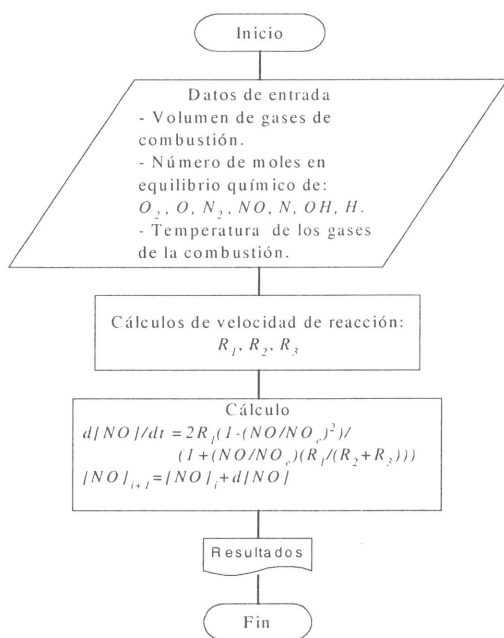


Diagrama de flujo del subprograma de cálculo del NO según la cinética química.-



RESULTADOS OBTENIDOS

El programa de computación de simulación numérica se implementó en Matlab. El programa desarrollado se corrió para un motor E.CH. con las siguientes características generales:

- Diámetro del cilindro (D): 82 mm.
- Carrera (S): 76 mm.
- Relación de compresión (ϵ): 8,5/1.
- Relación radio-manivela: 0,3.
- Número de cilindros (i): 4.
- Cilindrada ($Vh.i$): 1605 cm³.

En la figura 2 se muestra la variación de la presión y la temperatura de los gases en la cámara de combustión para un valor de $\lambda = 1,0$ considerando la combustión en 2 zonas.

En la figura 3 se muestra la variación de la concentración del NO (calculada a partir de la teoría cinética de las reacciones químicas) en partes por millón (ppm) en función del ángulo de giro del cigüeñal (φ). En ella se puede comparar los resultados obtenidos de la modelación con resultados experimentales [1]. Como se puede apreciar, al final de la combustión ($\varphi = 440^\circ$) los resultados difieren muy poco ($\approx 2\%$).

En este gráfico se puede apreciar claramente el efecto de congelamiento o “freezing” que sufre el NO du-

rante el proceso de expansión. Este efecto sólo se consigue a partir de la aplicación en el modelo de conceptos de la cinética química; por el contrario, si se considera que el NO se mantiene en equilibrio químico, entonces se obtienen valores despreciables al final de la expansión, lo que está en clara contradicción con los resultados experimentales [1,2].

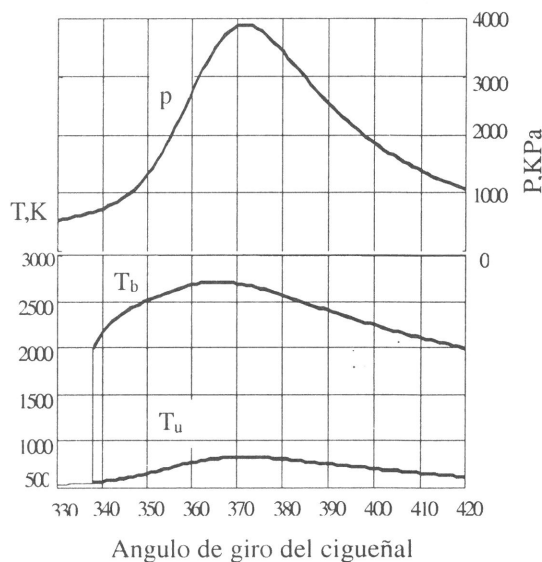


Fig. 2 Variación de las temperaturas (T_b y T_u ; zona quemada y no-quemada, respectivamente) y presión (p) de los gases durante la combustión.

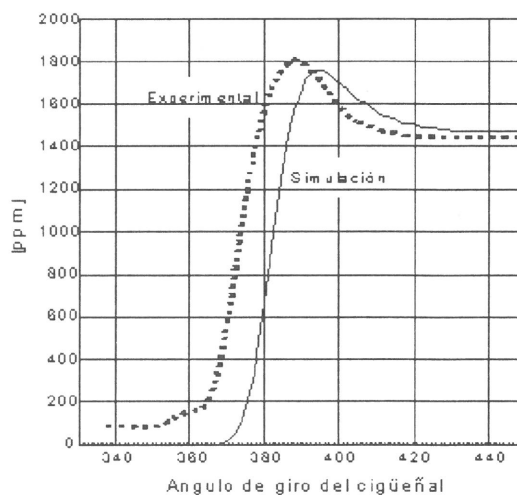


Fig. 3 Concentración de NO (PPM) en función del ángulo de giro del eje cigüeñal, $n = 2.500$ RPM; $\lambda = 0,9$. Los gráficos corresponden a valores experimentales [1] y a la modelación.

En la figura 4, se muestra la variación de la concentración de NO (en ppm) al final de la carrera de expansión en función del coeficiente de exceso de aire λ . Se pueden comparar los resultados obtenidos de la modelación con los resultados experimentales [9]. En esta figura se observa que las concentraciones máximas de NO (modelación y experimental) se produce cuando $\lambda \approx 1,06-1$. La diferencia de λ , donde se obtienen los máximos valores del NO ($\Delta\lambda \approx 0,05$), origina que las diferencias de las concentraciones del NO aumenten en la zona de las mezclas ricas ($\lambda < 1$), lo que obliga a perfeccionar el modelo.

En la figura 5, se muestra la variación de la concentración de CO (ppm) en equilibrio en función del ángulo de giro del cigüeñal para diferentes valores de λ . Analizando la gráfica de la variación del CO en función del ángulo de giro del cigüeñal, ésta tiene una tendencia aceptable, ya que para valores de $\lambda < 1$ la concentración del CO aumenta a medida que la mezcla aire combustible se enriquece. El efecto "freezing" en la formación del CO sólo se observa si las temperaturas al final de la fase de expansión son $T \leq 1.000$ K, lo cual es muy poco frecuente en la práctica, en cuyo caso se debe aplicar una ecuación de cinética química (análisis similar al NO).

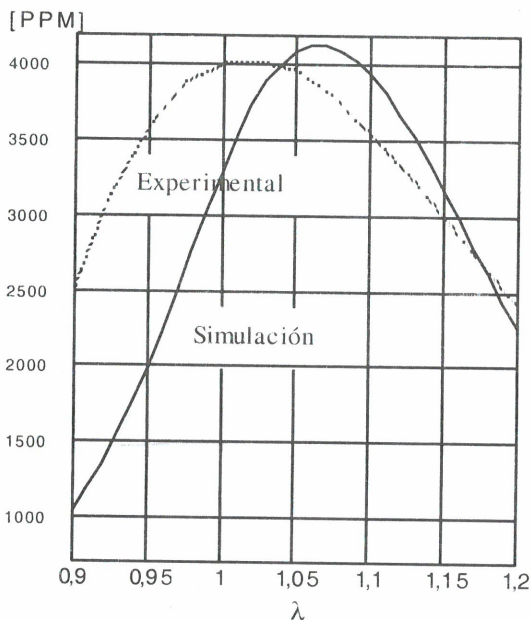


Fig. 4 Concentración de NO (en ppm) en función de λ ; $n=1600$ RPM. Los gráficos corresponden a valores experimentales [9] y a la modelación.

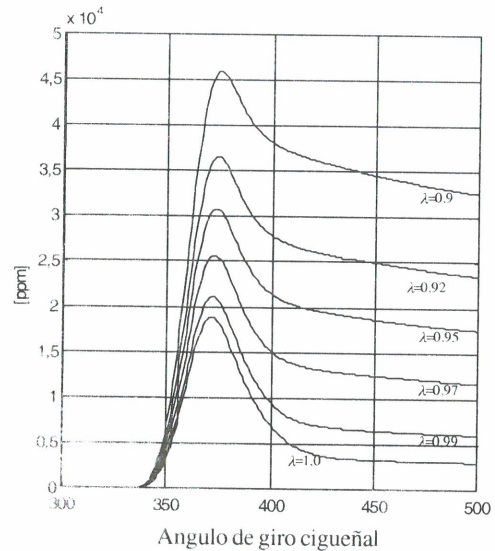


Fig. 5 Concentraciones de CO (considerando equilibrio químico) en función del ángulo del cigüeñal para distintos valores de λ .

En la figura 6 se muestra la concentración de CO_2 , CO (en %) al final de la carrera de expansión. En ella se pueden comparar los resultados obtenidos de la modelación con resultados experimentales [2,9]. Las divergencias entre los resultados no supera el 7% (con respecto a los valores experimentales) para $\alpha \neq 1$. Nótese que la concentración de CO para valores de $\lambda \geq 1$ es casi despreciable; esto se debe básicamente a que la combustión se realiza con exceso de aire.

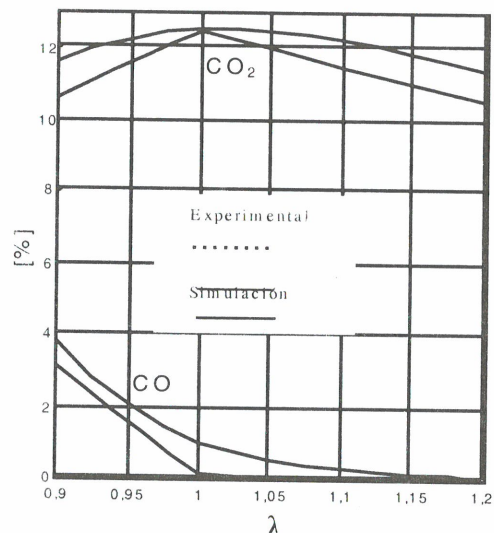


Fig. 6. Concentración de CO_2 , CO y O_2 (en %) en función de λ . Los gráficos corresponden a valores experimentales [2,9] y a la modelación.

CONCLUSIONES

1. El modelo matemático desarrollado es relativamente sencillo y ha demostrado ser una herramienta adecuada para la predicción y análisis de los principales productos de la combustión de un motor E.CH. en función de los parámetros constructivos y de operación más importantes del motor.
2. La modelación "bizonal" de la combustión permite simular con mayor propiedad y precisión a este complejo proceso y, por ende, a la determinación de los principales productos de la combustión.
3. Para la determinación de la concentración del monóxido de nitrógeno (NO), es imprescindible tomar en cuenta la teoría de la cinética química, ya que las condiciones del equilibrio químico son insuficientes para obtener resultados concordantes con la realidad.
4. La máxima concentración de NO se obtiene con mezclas ligeramente pobres ($\lambda \approx 1,07-1$). Todos aquellos parámetros que incrementan la máxima temperatura del ciclo de trabajo del motor, tales como la relación de compresión del motor, el adelanto del ángulo de encendido, la carga del motor, la aceleración del motor, etc., contribuyen al aumento de la concentración de NO .
5. La emisión de monóxido de carbono CO depende principalmente del coeficiente de exceso de aire (λ). Para $\lambda < 1$, mientras más rica sea la mezcla mayor es la concentración de CO ; para $\lambda > 1$, la concentración de CO se reduce notablemente y se considera despreciable.

REFERENCIAS

1. Heywood, J. B., "Internal Combustion Engine Fundamentals", McGraw-Hill Inc., New York, 1988.
2. Jóvaj, M.S., "Motores de automóvil", Editorial MIR, Moscú, 1982.
3. Kondrashov, V., "Motores de carburador de dos tiempos", Editorial Mashinostroenie, Moscú, 1990 (en ruso).
4. Lira, J. G., "Un modelo matemático para motores diesel de aspiración natural", Revista TECNIA Vol. 9, No 2, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, 1999.
5. Nigro, N. M., "Influence of combustion modeling over emission and performance parameters in spark ignition internal combustion engines", XII Congreso Chileno de Ingeniería Mecánica, Concepción, 1998.
6. Stone, R., "Introduction to Internal Combustion Engines", Society of Automotive Engineers, Inc., Warrendale, Pa., U.S.A., 1999.
7. Taylor, C.F., "The Internal Combustion Engine in Theory and Practice", Volume 2, MIT Press, Massachusetts, 1984.
8. Voinov, A.H., "La Combustión de los Motores de Pistón Rápidos", Editorial Mashinostroenie, Moscú, 1977 (en ruso).
9. Evonov, V.A., "Toxicidad de los motores de Combustión Interna", Editorial Mashinostroenie, Moscú, 1981 (en ruso).

