

Tema A4 Termofluidos: Combustión

Análisis de motores tipo HCCI y su modelado con biocombustibles

Juan C. Prince^{a,*}, Mario Díaz^a, Guillermo Ovando^a, Abelardo Rodríguez^a

^aInstituto Tecnológico de Veracruz, M. A. de Quevedo 2779, Veracruz, Ver., C. P. 91860, México

*Autor contacto. Dirección de correo electrónico: jcpa@itver.edu.mx

RESUMEN

En este trabajo se estudia un motor de combustión interna tipo HCCI (Homogeneous charge compression ignition): su eficiencia energética asociada a una menor generación de contaminantes, así como su modelado y simulación numérica para el proceso de ignición de mezclas de n-butanol/aire. Uno de los objetivos de esta investigación radica en aplicar un mecanismo de combustión reducido para esta mezcla de combustible y, posteriormente, probar su efectividad al implementarlo en un software basado en el método de los elementos finitos que simule motores de combustión interna. El uso de mecanismos reducidos en lugar de mecanismos detallados de los combustibles, permitirá que futuras simulaciones más complejas de motores tipo HCCI se puedan realizar sin requerir equipos de cómputo sofisticados. Para el modelo numérico, las ecuaciones de masa y energía con generación de calor debido a la ignición fueron incluidas. Los resultados de la simulación muestran que la auto-ignición de la mezcla depende de su temperatura de entrada a la cámara de combustión del motor tipo HCCI.

Palabras Clave: Combustión, biocombustible, cinética química, modelado computacional, HCCI.

ABSTRACT

In this work we analyze the internal combustion engine type HCCI (homogeneous charge compression ignition): its energy efficiency associated with a lower generation of pollutants, as well as its modeling and numerical simulation for the ignition process of n-butanol/air mixtures. One of the objectives of this research is to apply a reduced combustion mechanism for this fuel mixture and then test its effectiveness by implementing it in a software based on the finite element method that simulates internal combustion engines. The use of reduced mechanisms instead of detailed fuel mechanisms will allow future more complex simulations of HCCI-type engines to be carried out without requiring such sophisticated computer equipment. For the numerical model, mass and energy equations with heat generation due to ignition were included. The results of the simulation show that the auto-ignition of the mixture depends on its inlet temperature of entrance to the combustion chamber of the HCCI engine.

Keywords: Combustion, bio-fuel, chemical kinetics, computational modeling, HCCI.

1. Introducción

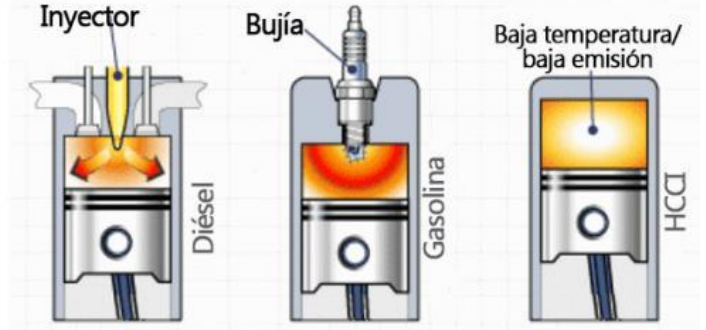
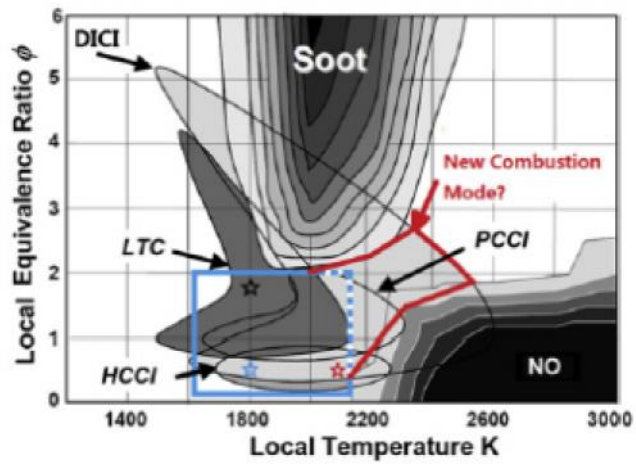
Los motores de combustión interna son las principales fuentes de energía en vehículos de transporte, barcos marinos, equipos de construcción y maquinarias agrícolas, entre otros [1]. Estos motores consumen grandes cantidades de combustible para producir energía y emiten gases contaminantes o dañinos, que incluyen CO, hidrocarburos no quemados (HC), óxidos de nitrógeno (NOx), partículas de hollín (PM) y bióxido de carbono (CO₂).

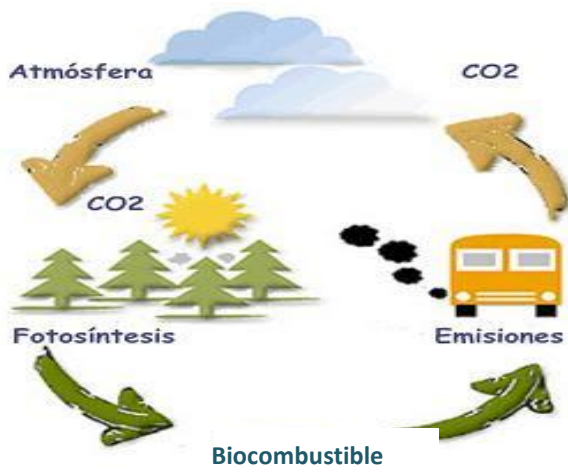
En las últimas dos décadas, investigaciones a nivel mundial en las industrias del motor y del automóvil se han dedicado a encontrar una mayor eficiencia de la combustión y menores emisiones, así como el desarrollo de combustibles alternativos renovables debido a la cantidad finita de combustibles fósiles. Las tecnologías de reducción de

emisiones han mejorado los índices de contaminantes, pero el gasto de combustible no ha sido más económico. Como resultado, la eficiencia térmica de motores no ha mejorado significativamente a pesar de los rápidos avances de la industria automotriz y los campos de ingeniería de fabricación. Esta situación agrava la escasez de combustibles para vehículos y aumenta las emisiones de gases de efecto invernadero (CO₂).

Entonces, la mejora de la utilización de la energía que además minimice todos los tipos de contaminantes se ha convertido en un objetivo clave científico en el campo de los motores de combustión interna.

Algunos investigadores han indicado que el ahorro de combustible de los motores de pistón tradicionales tiene el potencial para una mejora adicional en un 25 % o más (mientras que reduce las emisiones dañinas a aproximadamente cero), mediante la innovación con tecnología avanzada de combustión.





2. Desarrollo del mecanismo de combustión

Combustión, definida como la dinámica de fluidos químicamente reactantes, comprende áreas interdisciplinarias como termodinámica, mecánica de fluidos y cinética química; en una clasificación general de los fenómenos de combustión se tienen: llamas, ignición y explosiones.

El tiempo de ignición térmica, es uno de los parámetros más importantes para muchas aplicaciones de combustión. Este tiempo controla la ignición en motores de combustión interna, donde si el tiempo de ignición es menor que el tiempo de residencia de la mezcla aire/combustible entonces la ignición se llevará en la parte baja y no en la parte alta de la cámara de combustión.

El modelado y simulación de estos problemas se basan en la complejidad matemática de la física de los fluidos y en la cinética química de las especies que intervienen como reactantes y como gases de combustión. Por lo que el entendimiento de la evolución de las especies químicas y de sus reacciones de combustión puede ayudar a mitigar las emisiones dañinas y a mejorar la eficiencia de este proceso de conversión de energía.

La cinética química de la oxidación de hidrocarburos es muy compleja: una mezcla de combustible y aire pueden reaccionar ya sea a través de un proceso de combustión lento o a través de un incremento exponencial no controlado dando lugar a una ignición, y solo mediante el uso de cinética química apropiada es como estos fenómenos pueden ser bien descritos.

Dos puntos de vista extremos pueden ser adoptados para el desarrollo de mecanismos de cualquier combustible. Uno de ellos consiste en descripciones de cinética química detallada para procesos de ignición y llamas que involucran un gran número de pasos elementales [3-20]. La complejidad resultante del sistema de ecuaciones necesarias para describir estos procesos de combustión muchas veces sobrepasa las capacidades computacionales. El otro consiste en descripciones simplificadas de la cinética química que retenga los elementos esenciales de los fenómenos de combustión, compatible con los actuales recursos computacionales [24-27]. Este segundo punto es el empleado en este trabajo de investigación.

Para el desarrollo del mecanismo reducido de reacciones del n-butanol, se tomó como base el modelo químico de la Universidad de California, San Diego (UCSD) <http://combustion.ucsd.edu> [28-29], que abarca hasta el alcano C₃, y ha sido probado para un rango de presiones de 1 a 100 bar y para relaciones de equivalencia de la mezcla iso-butano/aire de 0.5 a 3. es la razón de la relación combustible/aire real con respecto a la relación combustible/aire estequiométrica. Su versión completa, hasta C₃, implica sólo 245 reacciones y 40 especies. Este mecanismo de UC San Diego ha sido previamente usado y extendido para el análisis de ignición y llamas del etano, propano y heptano tanto a altas temperaturas como para bajas temperaturas [28-29].

Para la obtención de las reacciones y especies químicas

importantes del presente estudio, diferentes mecanismos químicos detallados fueron consultados. Para propósitos de consistencia, se trató de usar reacciones químicas y datos termodinámicos de un solo mecanismo detallado, recientemente formulado [7], el cual contiene alrededor de 2500 reacciones para modelar el n-butanol. Algunas constantes de reacciones de otros mecanismos [3] fueron tomadas, sobre todo para mejorar las predicciones de los tiempos de ignición. Estas reacciones, adicionadas al mecanismo de UCSD, generaron un mecanismo detallado para el combustible propuesto (C₄H₉OH).

Después, con análisis de sensibilidad, el tamaño del mecanismo detallado propuesto fue reducido al eliminar sistemáticamente las especies y reacciones que tienen muy poca influencia en los fenómenos de combustión (llamas e ignición), descritos por las ecuaciones de conservación de energía y especies, respectivamente,

$$\dots c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \dots \rho u \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\dots \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum_{k=1}^N h_i \omega_i, \quad (1)$$

$$\dots \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \dots u \frac{\partial Y_i}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} (\dots Y_i V_i) + \omega_i. \quad (2)$$

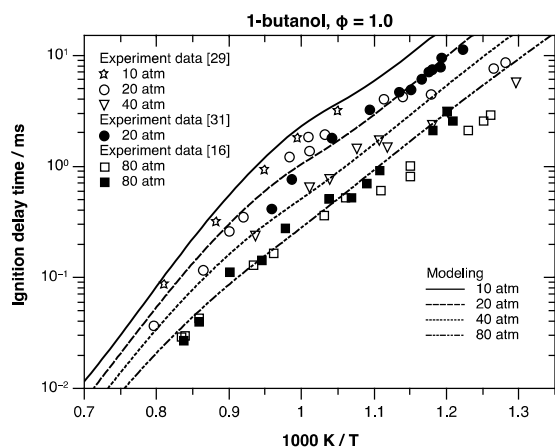
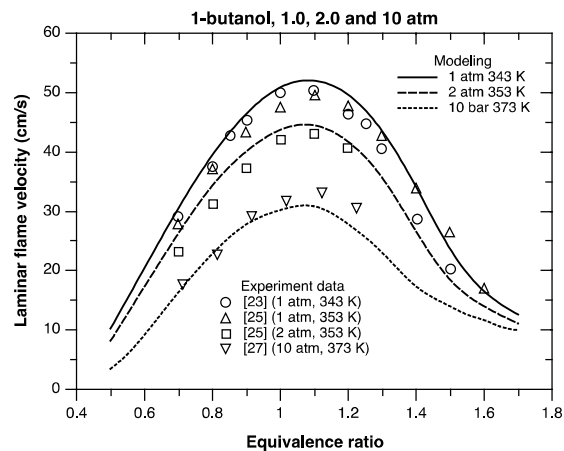
Donde T , Y_i , y ω_i son la temperatura, fracción molar y velocidad de reacción de las especies i , respectivamente. N es el número total de especies, y t es el tiempo. c_p es el calor específico a presión constante y ρ es la densidad de la mezcla, y h_i representa la entalpía específica de las especie i . La velocidad de reacción ω_i de las especie i esta dada por

$$\dot{\omega}_i = \sum_{j=1}^M K_j(T) \nu_{ij}' \prod_{i=1}^N C_i^{\nu_{ij}}, \quad (3)$$

$$K_j(T) = B_j T^{\Gamma_j} \exp(-E_j / RT). \quad (4)$$

Aquí, M es el número total de reacciones químicas elementales y C_i la concentración molar de la especie i . K y ν_i' son la constante de velocidad de reacción y los coeficientes estequiométricos del reactante i en la reacción química j . Es más importante eliminar especies que reacciones, porque esto directamente reduce el número de ecuaciones de conservación que deben ser resueltas. Para el caso de ignición, por ejemplo, el vector de coeficientes de sensibilidad normalizado, S_j , se calculó con el tiempo de ignición, t_i , como parámetro principal; esto es $S_j = (K_{j0}/t_j) \partial t_i / \partial K_j$, donde K_j , corresponde a la constante de velocidad de reacción modificada de la reacción j , a la temperatura inicial, y $K_j = K_{j0}(1 + \varepsilon)$, con $\varepsilon \ll 1$. De similar manera, el análisis de sensibilidad se aplicó en el fenómeno de llamas, donde el parámetro principal es la velocidad de la llama S_L . Para los procedimientos y estrategias de análisis para obtener mecanismos reducidos de reacciones se emplea el código FlameMaster [30], que es comúnmente usado por la comunidad científica en el área de combustión.

No.	Reacción	B_j	j	E_j
1	$\text{NC}_4\text{H}_9\text{OH}(+\text{M}) \leftrightarrow \text{NC}_3\text{H}_7 + \text{CH}_2\text{OH}(+\text{M})$	3.02E+23	-1.88	85710
2	$\text{NC}_4\text{H}_9\text{OH} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{HO}_2$	2.00E+13	0.00	46800
3	$\text{NC}_4\text{H}_9\text{OH} + \text{HO}_2 \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{H}_2\text{O}_2$	6.00E+12	0.00	16000
4	$\text{NC}_4\text{H}_9\text{OH} + \text{O} \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{OH}$	1.45E+05	2.47	876
5	$\text{NC}_4\text{H}_9\text{OH} + \text{OH} \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{H}_2\text{O}$	5.56E+10	0.500	-380
6	$\text{NC}_4\text{H}_9\text{OH} + \text{H} \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{H}_2$	1.79E+05	2.530	3420
7	$\text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} \leftrightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{C}_2\text{H}_5$	3.00E+11	0.000	31000
8	$\text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}_2\text{CO} + \text{C}_2\text{H}_6 + \text{HO}_2$	4.40E+11	0.000	5000
9	$\text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1O}_2$	1.00E+12	0.000	0.000
10	$\text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1O}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \text{C}_2\text{H}_6 + \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	2.50E+11	0.000	25000
11	$\text{C}_4\text{H}_8\text{OH-1O}_2 \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_7\text{OH-1OOH-4}$	4.69E+09	0.000	21950
12	$\text{C}_4\text{H}_7\text{OH-1OOH-4} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{C}_4\text{H}_7\text{OH-1OOH-4O}_2$	4.52E+12	0.000	0.000
13	$\text{C}_4\text{H}_7\text{OH-1OOH-4O}_2 \leftrightarrow \text{C}_4\text{OHKET1-4} + \text{OH}$	1.56E+09	0.000	13650
14	$\text{C}_4\text{OHKET1-4} \leftrightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} + \text{CO}_2 + \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	1.00E+16	0.000	39000



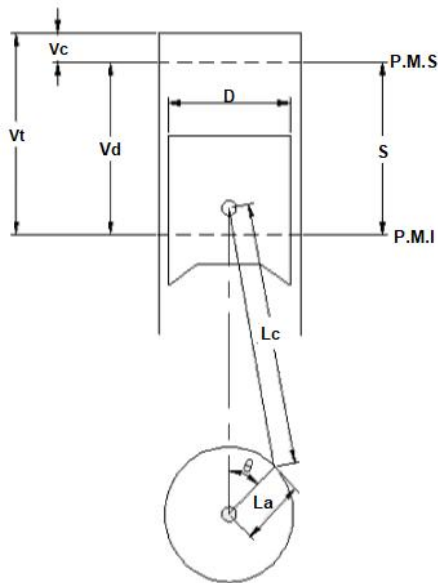
$$V_d = f D^2 S / 4$$

"

$$RC = \frac{\text{Vol. Max. Cilindro}}{\text{Vol. Mín. Cilindro}} = \frac{V_d + V_c}{V_c} = \frac{V_t}{V_c}$$

$$R = Lc / La$$

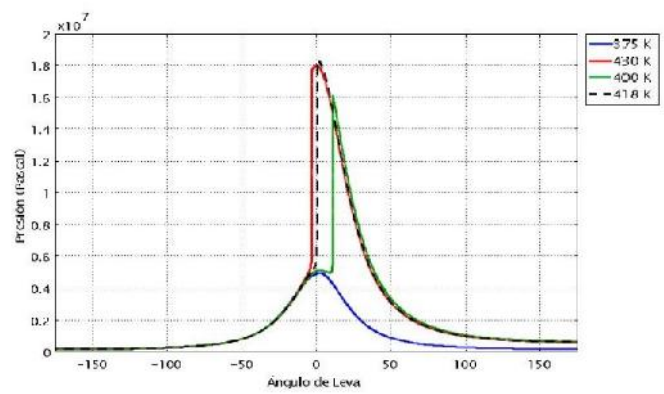
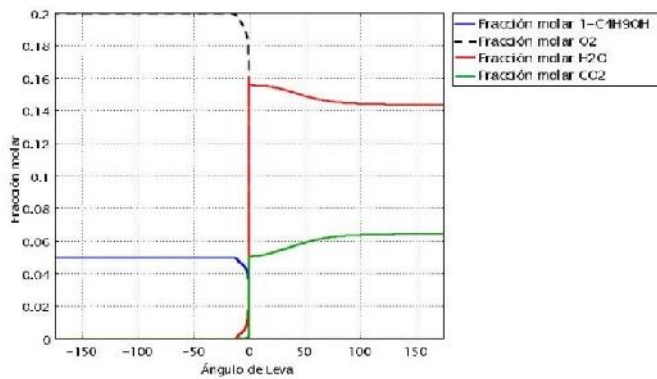
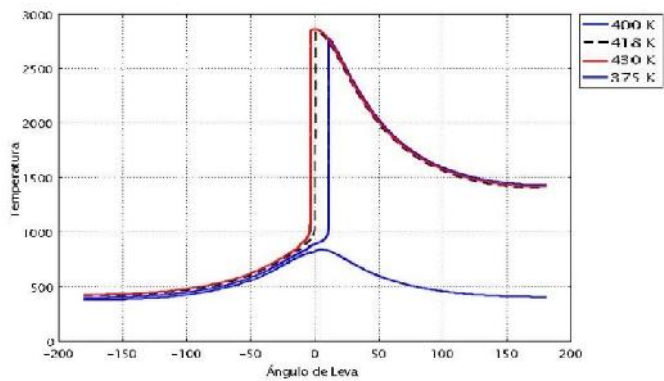
$$\frac{V}{V_c} = 1 + \frac{(RC - 1)}{2} \left[R + 1 - \cos \theta - \sqrt{R^2 - \text{sen}^2 \theta} \right]$$



Especificaciones del motor	Nombre de la variable	Valor
Diámetro del pistón	D	13 cm
Carrera	S	16 cm
Barra conectora	Lc	26.93 cm
Brazo de manivela	La	8 cm
Velocidad motor	N	1500 rpm
Relación de compresión	RC	15

$$\theta = 2\pi Nt / 60$$

t



REFERENCIAS

- [1] Reitz, R. D. (2013). Directions in internal combustion engine research. *Combustion and Flame*, 1(160), 1-8.
- [2] Bergthorson, J. M., & Thomson, M. J. (2015). A review of the combustion and emissions properties of advanced transportation biofuels and their impact on existing and future engines. *Renewable and sustainable energy reviews*, 42, 1393-1417.
- [3] Yao, M., Zheng, Z., & Liu, H. (2009). Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(5), 398-437.
- [4] Saxena S and Bedoya ID. Fundamental phenomena affecting low temperature combustion and HCCI engines, high load limits and strategies for extending these limits. *Progress in Energy & Combustion Science* 39:457-488 (2013).
- [5] Komninos, N. P., & Rakopoulos, C. D. (2016). Heat transfer in hcci phenomenological simulation models: A review. *Applied Energy*, 181, 179-209.
- [6] Gan, S., Ng, H. K., & Pang, K. M. (2011). Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion: implementation and effects on pollutants in direct injection diesel engines. *Applied Energy*, 88(3), 559-567.
- [7] Martínez-Frías J., Aceves S. M., Flowers D.L., 2007, "Improving Ethanol Live Cycle Energy Efficiencies by Direct Utilization of Wet Ethanol in HCCI Engines", *ASME: Journal of Energy Resources Technology*, pp. 332-337.
- [8] Yalmaz N., Donaldson A. B., 2007, "Modeling of Chemical Processes in a Diesel Engine With Alcohol Fuels", *Journal of Energy Resources Technology*, *ASME*, Vol. 129: pp. 355-359.
- [9] Dagaut, P.; Sarathy, S. M.; Thomson, M. J. A chemical kinetic study of n-butanol oxidation at elevated pressure in a jet stirred reactor. *Proc. Combust. Inst.*, 2009, 32, 229-237.
- [10] Sarathy, S. M.; Thomson, M. J.; Togbé, C.; Dagaut, P.; Halter, F.; Mounaim-Rousselle, C. An experimental and kinetic modeling study of n-butanol combustion. *Combust. Flame*, 2009, 156, 852-864.
- [11] K.M. Van Geem; S.P. Pyl; G.B. Martin; M.R. Harper; W.H. Green, Accurate high-temperature reaction networks for alternative fuels: butanol isomers, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2010, 49, 10399–10420.
- [12] Black, G.; Curran, H. J.; Pichon, S.; Simmie, J. M.; Zhukov, V. Bio-butanol: Combustion properties and detailed chemical kinetic model. *Combust. Flame*, 2010, 157, 363-373.
- [13] Grana, R.; Frassoldati, A.; Faravelli, T.; Niemann, U.; Ranzi, E.; Seiser, R.; Seshadri, K. An experimental and kinetic modeling study of combustion of isomers of butanol. *Combust. Flame*, 2010, 157, 2137-2154.
- [14] Harper, M. R.; Van Geem, K. M.; Pyl, S. P.; Marin, G. B.; Green, W. H. Comprehensive reaction mechanism for n-butanol pyrolysis and combustion. *Combust. Flame*, 2011, 158, 16-41.
- [15] Weber, B. W.; Kumar, K.; Zhang, Y.; Sung, C. J. Autoignition of n-butanol at elevated pressure and low-to-intermediate temperature. *Combust. Flame*, 2011, 158, 809-819.
- [16] Vranckx, S.; Heufer, K. A.; Lee, C.; Olivier, H.; Schill, L.; Kopp, W. A.; Fernandes, R. Role of peroxy chemistry in the high-pressure ignition of n-butanol – Experiments and detailed kinetic modelling. *Combust. Flame*, 2011, 158, 1444-1455.
- [17] Yasunaga, K.; Mikajiri, T.; Sarathy, S. M.; Koike, T.; Gillespie, F.; Nagy, T.; John M. Simmie; Curran, H. J. A shock tube and chemical kinetic modeling study of the pyrolysis and oxidation of butanol. *Combust. Flame*, 2012, 159, 2009-2027.
- [18] Sarathy, S. M.; Vranckx, S.; Yasunaga, K.; Mehl, M.; Oßwald, P.; Metcalfe, W. K.; Curran, H. J. A comprehensive chemical kinetic combustion model for the four butanol isomers. *Combust. Flame*, 2012, 159, 2028-2055.
- [19] Merchant, Shamel S.; E.F. Zanoelo; R.L. Speth; M.R. Harper; K.M. Van Geem; W.H. Green, Combustion and pyrolysis of iso-butanol: experimental and chemical kinetic modeling study, *Combust. Flame*, 2013, 160, 1907–1929.
- [20] Welz, Oliver; Judit Zádor; John D. Savee; Leonid Sheps; David L. Osborn; Craig A. Taatjes. Low-temperature combustion chemistry of n-butanol: principal oxidation pathways of hydroxybutyl radicals. *J. Phys. Chem. A*, 2013, 117, 11983-12001.
- [21] Alam, Fahd E.; Y.C. Liu; C.T. Avedisian; F.L. Dryer; T.I. Farouk n -Butanol droplet combustion: numerical modeling and reduced gravity experiments, *Proc. Combust. Inst.*, 2015, 35, 1693–1700.
- [22] Liu, Yu Cheng; F.E. Alam; Y. Xu; F.L. Dryer; C.T. Avedisian; T.I. Farouk. Combustion characteristics of butanol isomers in multiphase droplet configurations, *Combust. Flame*, 2016, 169, 216–228.
- [23] Veloo, Peter S.; Wang, Y. L.; Egolfopoulos, F. N.; Westbrook, C. K. A comparative experimental and computational study of methanol, ethanol, and n-butanol flames. *Combust. Flame*, 2010, 157, 1989-2004.
- [24] Veloo, Peter S.; Egolfopoulos, Fokion N. Flame propagation of butanol isomers/air mixtures. *Proc. Combust. Inst.*, 2011, 33, 987-993.
- [25] Liu, Wei; Kelley, Andrew P.; Law, Chung K. Non-premixed ignition, laminar flame propagation, and mechanism reduction of n-butanol, iso-butanol, and methyl butanoate. *Proc. Combust. Inst.*, 2011, 33, 995-1002.
- [26] Wu, Fujia; Law, Chung K. An experimental and mechanistic study on the laminar flame speed, Markstein length and flame chemistry of the butanol isomers. *Combust. Flame*, 2013, 160, 2744-2756.
- [27] Beeckmann, J.; Cai, L.; Pitsch, H. Experimental investigation of the laminar burning velocities of methanol, ethanol, n-propanol, and n-butanol at high pressure. *Fuel*, 2014, 117, 340-350.
- [28] Prince, Juan C.; Treviño, César; Williams, Forman A. A reduced reaction mechanism for the combustion of n-butane. *Combust. Flame*, 2017, 175, 27-33.
- [29] J. C. Prince, F. A. Williams, G. E. Olando, A short mechanism for the low-temperature ignition of n-heptane at high pressures, *Fuel* 149 (2015), 138-142.
- [30] H. Pitsch. FlameMaster, Computer program for 0D-1D combustion calculations.
- [31] Zhu, Yangye; Davidson, David Frank; Hanson, Ronald K. 1-Butanol ignition delay times at low temperatures: an application of the constrained-reaction-volume strategy. *Combust. Flame*, 2014, 161, 634-643.
- [32] COMSOL Multiphysics® software.