



Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Energética

Tesis Doctoral

**Contribución a la Simulación de la Combustión HCII en
Motores de Combustión Interna Alternativos mediante Modelos
Multizona**

José Antonio Vélez Godiño

Diciembre 2015

Departamento de Ingeniería Energética

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla

Tesis presentada por D. José Antonio Vélez Godiño para la
obtención del Grado de Doctor

Directores de Tesis:

Prof. Dr. D. Francisco José
Jiménez-Espadafor Aguilar

Prof. Dr. D. Miguel Torres
García

Doctorando:

D. José Antonio Vélez Godiño

A mis padres, por empujar.

A mi esposa, por aguantar.

A mi hija, que sin saberlo contribuyó enormemente.

Agradecimientos

Al Grupo de Máquinas y Motores Térmicos de la Universidad de Sevilla, por los medios puestos a disposición para la elaboración de este trabajo, así como a sus integrantes, por su continuo mensaje de aliento.

Al Dr. D. Miguel Torres García, por su pragmatismo y por haber sentado las bases de este trabajo.

Al Dr. D. Francisco José Jiménez-Espadafor Aguilar, por su permanente disposición y sus brillantes consejos, sin su incansable ayuda este trabajo no hubiera sido viable.

A todos ellos, mi más sincera gratitud.

Índice de contenidos

Índice de contenidos	I
Índice de figuras	VII
Índice de tablas	XVII
Glosario.....	XIX
Introducción.....	1
1.1. Contexto.....	1
1.2. Objetivo	3
1.3. Alcance	5
1.4. Metodología aplicada	6
Fundamentos y desarrollo actual de la combustión en modo HCCI.....	9
2.1. Fundamentos de la combustión en modo HCCI.....	9
2.2. Limitaciones asociadas a la combustión en modo HCCI.....	13
2.3. Antecedentes de la combustión en modo HCCI.....	15
2.4. Estrategias de control de la combustión en modo HCCI.....	18
2.4.1 Control de la temperatura	18
2.4.2. Relación de compresión y distribución variables	19
2.4.3. Modificación de los combustibles	20

2.4.4. Recirculación de gases de escape	21
2.5. Preparación de la mezcla para la combustión en modo HCCI	26
2.5.1. Inyección temprana	29
PREDIC	30
MULDIC & HiMICS	31
UNIBUS	32
MULINBUMP	32
NADI	34
2.5.2. Inyección tardía	34
2.5.3. Combinación de premezcla e inyección directa.....	35
2.6. Modelos aplicados al análisis de la combustión en modo HCCI	36
2.6.1. Modelos unizona.....	37
2.6.2. Modelos multizona.....	38
2.6.3. Modelos basados en códigos fluido-dinámicos	42
2.6.4. Modelos de base estadística	43
2.7. Control aplicado a la combustión en modo HCCI.....	44
2.7.1. Desarrollo de controladores.....	44
2.7.2. Transiciones entre modos de combustión	47
2.8. Biocombustibles en la combustión en modo HCCI	49
2.8.1. Definiciones básicas.....	50
2.8.2. Introducción a los biocombustibles	50

2.8.3. Análisis experimental de los biocombustibles en MCIA.....	53
2.8.4. Análisis numérico de los biocombustibles en MCIA.....	54
Análisis experimental	59
3.1. Introducción al análisis experimental.....	59
3.2. Análisis de la configuración early HCCI	61
3.2.1. Antecedentes a la configuración early HCCI	61
3.2.2. Resultados asociados a la configuración early HCCI	63
3.3. Análisis de la configuración late HCCI	71
3.2.1. Antecedentes a la configuración late HCCI	71
3.3.2. Resultados asociados a la configuración late HCCI	74
Descripción del modelo multizona.....	91
4.1. Necesidades asociadas al modelado	91
4.2. Fundamentos del modelo multizona propuesto.....	93
4.3. Variables principales	99
4.3.1. Presión	99
4.3.2. Temperatura	100
4.3.3. Masa.....	100
4.3.4. Inicio de la combustión	103
4.3.5. Formulación del problema	103
4.4. Ecuaciones de gobierno.....	104
4.4.1. Primer Principio de la Termodinámica	105

4.4.2. Ecuación de Estado.....	108
4.4.3. Balances de masa total en cada zona	109
4.4.4. Balances de especies en cada zona	110
4.4.5. Formulación del inicio de la combustión	111
4.4.6. Problema formulado	112
4.5. Ecuaciones auxiliares.....	113
4.5.1. Relaciones termodinámicas.....	113
4.5.2. Tasa de liberación de calor.....	114
4.5.3. Transferencia de calor	114
4.5.4. Fugas de masa	117
4.5.5. Inyección de combustible	118
4.5.6. Formación de óxidos de nitrógeno.....	119
4.5.7. Formación de monóxido de carbono	121
4.6. Algoritmo de resolución.....	122
Validación del modelo multizona	131
5.1. Necesidades de calibración	131
5.2. Caracterización de los subvolúmenes.....	135
5.3. Resultados del modelo multizona optimizado	139
Modelo predictivo	155
6.1. Objetivo del modelo predictivo	155
6.2. Desarrollo del modelo predictivo	156

6.3. Validación del modelo multizona predictivo.....	164
6.4. Aplicación del modelo predictivo	171
6.4.1. Obtención de mapas de operación en modo HCCI	172
6.4.2. Evolución de la temperatura y las pérdidas de calor	183
6.4.3. Evolución de la masa alojada en la cámara de combustión	189
Conclusiones y desarrollos futuros.....	195
7.1. Conclusiones.....	196
7.2. Desarrollos futuros	199
Características del montaje experimental	203
A.1 Introducción	203
A.2 Banco de ensayos	204
A.3 Motor experimental	210
Propiedades de los fluidos de trabajo	213
Valores óptimos de los coeficientes de ajuste.....	219
Publicaciones	229
Biodiesel effects on homogeneous charge compression ignition combustion mode using retarded injection strategies and high EGR rate	229
Experimental analysis of low temperature combustion mode with diesel and biodiesel fuels: a method for reducing NOx and soot emissions	229
Numerical study of HCCI combustion fueled with diesel oil using a multizone model approach	229
Referencias	257

Índice de figuras

Figura 1. 1: Legislación vigente en relación a las emisiones de los motores diésel [1].....	2
Figura 1. 2: Comparativa de las curvas de presión en cámara obtenidas experimentalmente y mediante un modelo cinético-químico a través del software Chemkin [7].....	4
Figura 1. 3: Representación esquemática de la metodología aplicada.	6
Figura 2. 1: Diagramas de las combustiones en MEC, MEP y en modo HCCI [9].	11
Figura 2. 2: Regímenes de operación de los motores para diferentes modos de combustión [11] [12].	13
Figura 2. 3: Estrategia de combustión UNIBUS [80].	33
Figura 2. 4: Inyección multi-pulso del sistema MULINBUMP [80].	33
Figura 2. 5: Esquema de un modelo unizona, incluyendo el planteamiento del primer principio de la termodinámica [93].....	37
Figura 2. 6: Esquema de un modelo multizona, incluyendo el planteamiento del primer principio de la termodinámica [93].....	40
Figura 2. 7: Modelo multizona empleado por Fiveland et al. [96].	41
Figura 2. 8: Arquitectura típica de un controlador basado en un modelo termodinámico [116].....	47

Figura 2. 9: Curvas de presión durante un ensayo de transición entre modos de operación [119].....	49
Figura 2. 10: Comparativa entre los sistemas energéticos basados en combustibles de origen fósil y en biocombustibles [121].....	52
Figura 3. 1: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par de 20 N·m y 0% de EGR.	65
Figura 3. 2: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad variable, par de 20 N·m y 0% de EGR.	66
Figura 3. 3: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 1200 rpm, carga variable y 0% de EGR.	66
Figura 3. 4: Evolución de la presión para la configuración early HCCI con gasoil, 1800 rpm, combustible entregado constante (par inicial de 10 N·m) y EGR variable.....	69
Figura 3. 5: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI con gasoil, 1800 rpm, combustible entregado constante (par inicial de 10 N·m) y EGR variable.	69
Figura 3. 6: EGR que causa inestabilidad para distintos grado de carga y velocidad, para la configuración early HCCI, con gasoil.	70
Figura 3. 7: Evolución de las emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad variable, par inicial de 20 N·m y EGR variable.....	70
Figura 3. 8: Evolución de las emisiones de monóxidos de carbono para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad variable, par inicial de 20 N·m y EGR variable.....	71
Figura 3. 9: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con gasoil, 2100 rpm, dosado relativo 0,6 y 0% de EGR.....	74

Figura 3. 10: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.....	77
Figura 3. 11: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.	77
Figura 3. 12: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.....	78
Figura 3. 13: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.	78
Figura 3. 14: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), velocidad variable, dosado relativo 0,6 y 0% de EGR.....	79
Figura 3. 15: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), velocidad variable, dosado relativo 0,6 y 0% de EGR.	79
Figura 3. 16: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), 2100 rpm, dosado relativo variable y 0% de EGR.....	80
Figura 3. 17: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), 2100 rpm, dosado relativo variable y 0% de EGR.	80
Figura 3. 18: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.	82
Figura 3. 19: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.....	82
Figura 3. 20: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 65% biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.	83
Figura 3. 21: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 65% biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.....	83

Figura 3. 22: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.	84
Figura 3. 23: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.....	84
Figura 3. 24: Ángulo correspondiente al máximo de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.	85
Figura 3. 25: Máximo de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.	85
Figura 3. 26: Duración de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.....	86
Figura 3. 27: Emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración late HCCI, con biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y EGR variable.....	88
Figura 3. 28: Emisiones de monóxido de carbono para la configuración late HCCI, con biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y EGR variable.	89
Figura 4. 1: Representación esquemática de la discretización de la cámara de combustión en el modelo multizona propuesto [182].	96
Figura 5. 1: Diagrama de flujo asociado al proceso de calibración de los coeficientes de las leyes funcionales de inicio de la combustión y de tasa de liberación de calor [182].	133
Figura 5. 2: Distribución de volumen acumulado en función del número de zonas consideradas en el modelo.....	136

Figura 5. 3: Estudio paramétrico del número de subvolúmenes para un ensayo con gasoil (early HCCI), 2100 rpm, 15 N·m, 36% EGR.....	137
Figura 5. 4: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par de 15 N·m y 36% de EGR.	138
Figura 5. 5: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par de 15 N·m y 36% de EGR.	139
Figura 5. 6: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 1800 rpm, par inicial de 10 N·m y EGR variable.	142
Figura 5. 7: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 1800 rpm, par inicial de 10 N·m y EGR variable.	142
Figura 5. 8: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par inicial de 20 N·m y EGR variable.	143
Figura 5. 9: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par inicial de 20 N·m y EGR variable.	143
Figura 5. 10: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil, 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.....	144
Figura 5. 11: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con gasoil, 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable. ...	144
Figura 5. 12: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 30% de biodiésel (B30), 1800 rpm, dosado relativo de 0,20 y EGR variable.	145
Figura 5. 13: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 30% de biodiésel (B30), 1800 rpm, dosado relativo de 0,20 y EGR variable.....	145
Figura 5. 14: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 65% de biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.	146

Figura 5. 15: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 65% de biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.....	146
Figura 5. 16: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% de biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.	147
Figura 5. 17: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 100% de biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.....	147
Figura 5. 18: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración early HCCI alimentados con gasoil.	149
Figura 5. 19: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con gasoil.	150
Figura 5. 20: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con biodiésel al 30% (B30).....	150
Figura 5. 21: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con biodiésel al 65% (B65).....	151
Figura 5. 22: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con biodiésel al 100% (B100).....	151
Figura 5. 23: Comparativa de las emisiones de óxidos de nitrógeno experimentales y las derivadas del modelo optimizado para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad de 1200 a 2100 rpm, par inicial de 5 a 20 N·m y EGR variable.	153

Figura 5. 24: Comparativa de las emisiones de óxidos de nitrógeno experimentales y las derivadas del modelo optimizado para la configuración late HCCI, con combustible variable, 2100 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.....	153
Figura 5. 25: Emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración early HCCI, con gasoil, 1200 rpm, par variable y EGR nulo.	154
Figura 5. 26: Emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración late HCCI, con combustible variable, 2100 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.	154
Figura 6. 1: Superficie de respuesta del coeficiente A_c para los ensayos early HCCI.	162
Figura 6. 2: Superficie de respuesta del coeficiente A_D para los ensayos early HCCI.	162
Figura 6. 3: Superficie de respuesta del coeficiente A_c para los ensayos late HCCI.	163
Figura 6. 4: Superficie de respuesta del coeficiente A_D para los ensayos late HCCI.	163
Figura 6. 5: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para gasoil (early HCCI), 1500 rpm y dosado relativo 0,34.	166
Figura 6. 6: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para gasoil (early HCCI), 1800 rpm y dosado relativo 0,34.	167
Figura 6. 7: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para gasoil (late HCCI), 2400 rpm y dosado relativo 0,60.	167
Figura 6. 8: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para biodiésel 30% (late HCCI), 1800 rpm y dosado relativo 0,20.	168

Figura 6. 9: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para biodiésel 65% (late HCCI), 2100 rpm y dosado relativo 0,45.	168
Figura 6. 10: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para biodiésel 100% (late HCCI), 2400 rpm y dosado relativo 0,45.	169
Figura 6. 11: BSFC simulado para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	178
Figura 6. 12: Presión máxima simulada para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	178
Figura 6. 13: Emisiones de óxidos de nitrógeno simuladas para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	179
Figura 6. 14: EGR que optimiza el par generado para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	181
Figura 6. 15: BSFC optimizado para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	182
Figura 6. 16: Presión máxima con EGR óptimo para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	182
Figura 6. 17: Emisiones de óxidos de nitrógeno con EGR óptimo para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).	183
Figura 6. 18: Evolución de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,41 y 0% EGR.	187
Figura 6. 19: Evolución de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,41 y 30% EGR.	187

Figura 6. 20: Evolución de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,54 y 0% EGR.	188
Figura 6. 21: Evolución espacial de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,41 y 0% EGR (en relación al radio de la cámara, 0% representa la pared de la cámara y 100% el centro de la misma).	188
Figura 6. 22: Evolución del flujo de calor a través de las paredes para gasoil (early HCCI), 1200 rpm y 0% EGR.....	189
Figura 6. 23: Evolución del flujo de masas entre subvolúmenes para gasoil (early HCCI), 2100 rpm, dosado relativo 0,76 y 0% EGR.	191
Figura 6. 24: Evolución del flujo de masas entre subvolúmenes para gasoil (early HCCI), 2100 rpm, dosado relativo 0,32 y 0% EGR.	192
Figura 6. 25: Evolución de las pérdidas de masa de la cámara de combustión (blow-by) para gasoil (early HCCI), 1800 rpm y 0% EGR.....	192
Figura 6. 26: Evolución de las pérdidas de masa acumuladas referidas a la masa total alojada en la cámara de combustión para gasoil (early HCCI), 1800 rpm y 0% EGR.	193
Figura 7. 1: Posible distribución de subvolúmenes para la discretización de la cámara de combustión [206].	200
Figura A. 1: Celda de prueba del laboratorio del GMTS de la Universidad de Sevilla.....	204
Figura A. 2: Representación esquemática del banco de ensayos [182]......	205
Figura A. 3: Analizador Fisher-Rosemount modelo NGA 2000.	209
Figura A. 4: Equipo de control de freno y adquisición de datos.....	210
Figura A. 5: Motor Deutz-Díter FL1 906.	212

Figura B. 1: Calor específico a presión constante, normalizado por R, en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo. 217

Figura B. 2: Entalpía específica en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo ($T_{REF} = 273,15$ K)..... 217

Figura B. 3: Energía interna específica en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo ($T_{REF} = 273,15$ K)..... 218

Índice de tablas

Tabla 3. 1: Condiciones de los ensayos realizados con la configuración early HCCI (inicio inyección 45° APMS; relación de compresión 15:1).....	64
Tabla 3. 2: Propiedades principales de los combustibles empleados en los ensayos con configuración late HCCI [173].	73
Tabla 3. 3: Condiciones de los ensayos realizados con la configuración late HCCI (inicio inyección 10° APMS; relación de compresión 18,4:1).....	73
Tabla 5. 1: Valores iniciales para los coeficientes de la ley funcional de inicio de combustión.....	132
Tabla 5. 2: Valores iniciales para los coeficientes de la ley funcional de tasa de liberación de calor.	132
Tabla 5. 3: Distribución de volumen para una configuración de 10 zonas.	138
Tabla 5. 4: Errores promedio obtenidos tras el proceso de optimización del modelo multizona.	148
Tabla 6. 1: Resultados de la regresión múltiple para los coeficientes correspondientes a las leyes funcionales de A_c y A_d	160
Tabla 6. 2: Errores promedio asociados a la validación del modelo predictivo.	170

Tabla A. 1: Rango de medida y la precisión del analizador Fisher-Rosemount modelo NGA 2000.....	208
Tabla A. 2: Parámetros nominales del motor Deutz-Díter FL1 906.....	211
Tabla B. 1: Coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas de los fluidos de trabajo en función de la temperatura, para el rango de 200K a 1000K.	214
Tabla B. 2: Coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas de los fluidos de trabajo en función de la temperatura, para el rango de 1000K a 6000K.	214
Tabla B. 3: Coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas del gasoil en función de la temperatura.	215

Glosario

APMS	Antes del punto muerto superior
ARC	Active radical combustion
ATAC	Active thermo-atmosphere combustion
BMEP	Presión media efectiva neta
BSFC	Consumo específico neto de combustible
CAD	Ángulo de giro del cigüeñal
CAI	Controlled auto-ignition
CFD	Código fluido-dinámico
CIHC	Compression-ignited homogeneous combustion
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
DME	Dimetil-éter
DPMS	Después del punto muerto superior
EGR	Exhaust gas recirculation
GMTS	Grupo de Máquinas y Motores Térmicos de la Universidad de Sevilla
H ₂ O	Agua

Glosario

HCCI	Homogeneous charge compression ignition
HDD	Heavy duty diesel
HiMICS	Homogeneous charge intelligent multiple injection combustion system
IMEP	Presión media efectiva indicada
MCIA	Motor de combustión interna alternativo
MEC	Motor de encendido por compresión
MEP	Motor de encendido provocado
MK	Modulated kinetics
MULDIC	Multiple stage diesel combustion
NADI	Narrow angle direct injection
N ₂	Nitrógeno molecular
NO	Monóxido de nitrógeno
NO ₂	Dióxido de nitrógeno
NO _x	Óxidos de nitrógeno
O ₂	Oxígeno molecular
PCCI	Premixed charge compression ignition
PCI	Premixed compression ignited
PMI	Punto muerto inferior
PMS	Punto muerto superior
PREDIC	Premixed lean diesel combustion
rpm	Revoluciones por minuto

TLQ	Tasa de liberación de calor
TS	Toyota-Soken
UNIBUS	Uniform bulky combustion system

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto

Entre los desafíos a los que debe hacer frente la industria del motor de combustión interna alternativo (MCIA) cabe destacar tanto la reducción de emisiones como el aumento del rendimiento, ambos derivados de las cada vez más exigentes normativas en vigor en distintas áreas geográficas [1]. De acuerdo a los datos estadísticos publicados por la Agencia Internacional de la Energía, el 28% de la energía consumida a nivel mundial está asociada al sector del transporte, del cual el 93% corresponde a combustibles derivados del petróleo [2], estimándose que esta tendencia se mantenga, al menos, hasta el año 2050 [3]. Dada la conjunción de estos dos factores, legislaciones progresivamente más exigentes y una amplia implantación en la economía moderna, se considera imperativo identificar medidas de mejora continua en el campo de los MCIA, abarcando tanto la reducción del consumo de combustible como la reducción de las emisiones de productos de la combustión nocivos para la salud y el medioambiente, a la vez que se mantienen o mejoran los costes de producción actuales.

En relación a las emisiones generadas por la combustión en los MCIA cabe destacar que los efectos adversos varían desde la contribución al calentamiento global, en el que participan sustancias tales como el dióxido de carbono, el agua, el monóxido de carbono y los hidrocarburos, los daños respiratorios causados por las emisiones de partículas derivadas de la combustión y, finalmente, el smog fotoquímico, al que contribuyen tanto los previamente mencionados hidrocarburos como los óxidos de nitrógeno (NOx).

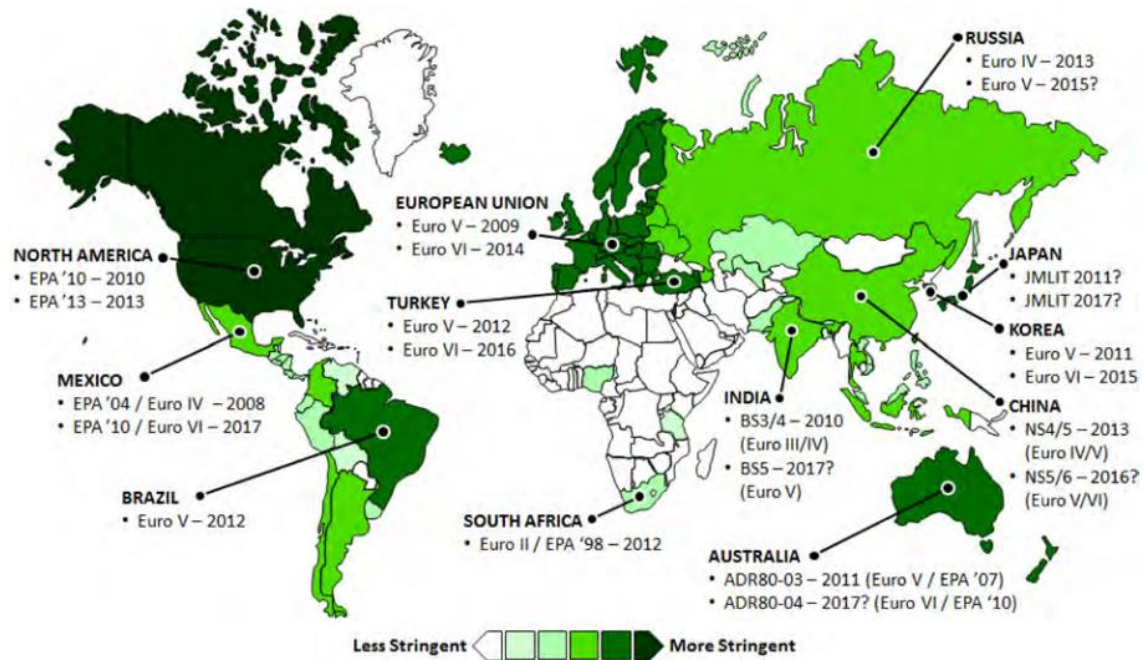


Figura 1. 1: Legislación vigente en relación a las emisiones de los motores diésel [1].

A pesar de que, como se muestra en la Figura 1. 1, las normativas más exigentes son las vigentes en Europa, EEUU y Japón, en el resto de países industrializados también existe un marco normativo para el control de las emisiones generadas por los MCIA, el cual es más exigente progresivamente. Asimismo, las distintas normativas en vigor para diferentes áreas geográficas y tipologías de motor pueden consultarse en la siguiente referencia [4].

Entre las medidas de mejora puestas en marcha por el sector de los MCIA cabe destacar la búsqueda de tecnologías alternativas a los tradicionales motores de encendido provocado (MEP) y diésel, es decir, de encendido por compresión (MEC), siendo la combustión en modo HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) una de las opciones más prometedoras [5], conjuntamente con otros modos de combustión semejantes, como es el denominado PCCI (Premixed-Charge Compression Ignition). El atractivo de la aplicación de la combustión en modo HCCI a los MCIA reside tanto en la reducción significativa de las emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas, alcanzando niveles similares a los generados en los MEP dotados de sistema de tratamiento catalítico, así como en el aumento del rendimiento de la combustión, el cual se asemeja a los estándares asociados a los MEC

convencionales. Sin embargo, a pesar de las ventajas mencionadas con anterioridad, es preciso señalar que las emisiones de hidrocarburos y de monóxido de carbono suelen ser mayores en los motores con combustión en modo HCCI [6], si bien el estado actual de la tecnología en relación a los tratamientos catalíticos permite minimizar estas emisiones mediante su oxidación. Además, cabe destacar que los motores con combustión en modo HCCI poseen un rango de operación más limitado que el correspondiente a los MEP y MEC convencionales, debido a la dificultad para controlar de forma directa el inicio de la combustión en modo HCCI. De esta forma, los motores con combustión en modo HCCI experimentan a altas cargas un incremento sustancial de las emisiones de óxidos de nitrógeno, así como una penalización del rendimiento debido al adelanto del inicio de la combustión respecto del PMS y elevados gradientes de presión, lo que “endurece” la combustión. Por otro lado, a cargas bajas los motores con combustión en modo HCCI sufren la penalización asociada a una combustión incompleta, siendo más acusado este efecto en los motores alimentados con gasolina u otros combustibles con alto número de octano.

1.2. Objetivo

Debido a las limitaciones mencionadas anteriormente en relación a la combustión en modo HCCI, la implantación desde el punto de vista comercial de ésta aún requiere esfuerzos significativos, entre los que destacan los requeridos en materia de análisis óptico de cara a la comprensión de los fenómenos que ocurren en el interior del cámara de combustión, modelado numérico para la realización de simulaciones encaminadas a la identificación de los parámetros influyentes en estos fenómenos y, finalmente, tecnologías electrónicas asociadas al control y optimización de la combustión.

En relación a las demandas asociadas a la realización de simulaciones precisas y dado que los modelos multizona han demostrado, tras una oportuna calibración, ser capaces de reproducir la combustión en modo HCCI con suficiente precisión, a la vez que los recursos computacionales requeridos no

son excesivos, el presente trabajo pretende contribuir al estado del arte mediante la elaboración de un modelo multizona fenomenológico, asociado a la combustión en modo HCCI tanto del gasoil como del biodiésel. Los resultados proporcionados por el modelo multizona propuesto consistirán en las variables termodinámicas principales, es decir, presión, temperatura y masa, así como diferentes niveles de emisiones. Gracias a su flexibilidad y su bajo coste computacional en comparación con la experimentación realizada en un banco de ensayos, entre las utilidades del modelo multizona propuesto cabe destacar su uso como herramienta base en estudios relacionados con las técnicas de control de la combustión en modo HCCI, que como se ha mencionado con anterioridad, constituye una de las principales corrientes de trabajo en la actualidad. Asimismo, cabe destacar la necesidad de herramientas de este tipo debido a la limitación de los modelos basados únicamente en mecanismos cinético-químicos en relación a la reproducción con precisión del desarrollo de la combustión en modo HCCI, como se pone de manifiesto en la Figura 1. 2. Como ejemplo adicional de las limitaciones de los modelos basados únicamente en mecanismos cinético-químicos cabe destacar su incapacidad para, aun pudiendo contemplar fenómenos de transferencia de calor, capturar el adelanto de la combustión frente a un incremento de la carga, lo cual sí queda recogido por el modelo propuesto en el presente trabajo.

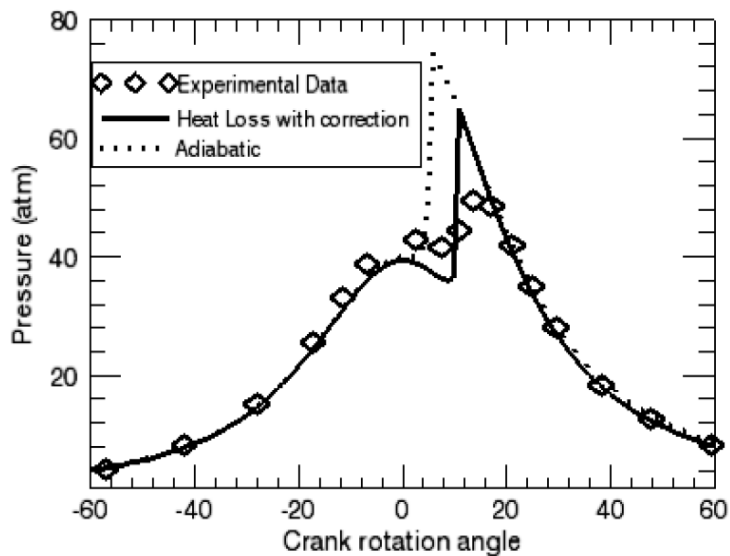


Figura 1. 2: Comparativa de las curvas de presión en cámara obtenidas experimentalmente y mediante un modelo cinético-químico a través del software Chemkin [7].

1.3. Alcance

Debido a los recursos disponibles para la realización del presente trabajo, para el desarrollo del objetivo presentado anteriormente ha sido necesario acotar el alcance del mismo, definiéndose a continuación sus principales características:

- El desarrollo del presente trabajo abarca tanto experimentación en banco de ensayos como simulaciones numéricas.
- El motor analizado es un modelo diésel monocilíndrico de cuatro tiempos e inyección directa, con refrigeración por aire y aspiración natural, al que se le han practicado diferentes modificaciones para optimizar sus prestaciones en modo HCCI.
- Los combustibles empleados son gasoil, biodiésel y mezclas de los anteriores en distintas proporciones, lo que aporta valor añadido al presente trabajo, ya que no existen excesivos estudios sobre la aplicación del biodiésel a la combustión en modo HCCI.
- Dada la relevancia de la preparación de la mezcla en los motores con combustión en modo HCCI, tanto en la experimentación desarrollada como en las simulaciones realizadas se ha tenido en cuenta la recirculación de gases de escape como estrategia para optimizar las prestaciones del motor.
- El foco del análisis desarrollado se sitúa en el periodo en el que la cámara de combustión es un volumen cerrado, es decir, en el intervalo en el que tanto la válvula de admisión como la de escape están cerradas.
- El modelo empleado para la caracterización de la combustión es de tipo fenomenológico.

1.4. Metodología aplicada

Dada su especial trascendencia en relación a los capítulos siguientes, a continuación se exponen los distintos bloques conceptuales que articulan el desarrollo del presente trabajo, los cuales se representan esquemáticamente en la Figura 1. 3.

En primer lugar cabe destacar que el fundamento sobre el que se soporta el presente trabajo consiste en una amplia revisión del estado del arte (Capítulo 2). Este análisis ha servido para disponer de conocimiento suficiente para proceder de una forma solvente en el proceso de toma de decisiones en cada una de las etapas posteriores del presente trabajo.

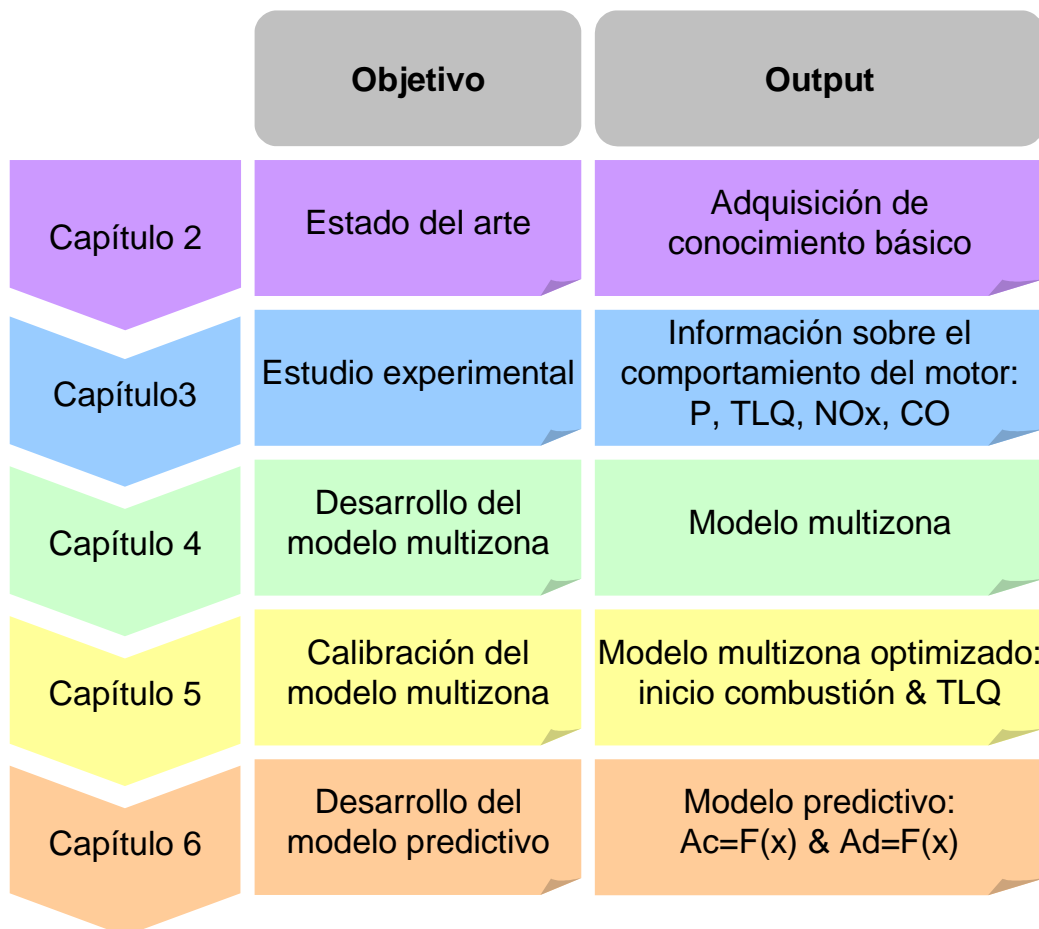


Figura 1. 3: Representación esquemática de la metodología aplicada.

Tras el análisis de las aportaciones más relevantes en relación a la combustión en modo HCCI se abordó el estudio experimental de los efectos ejercidos sobre ésta por distintos métodos de preparación de la mezcla entre el combustible y el aire (Capítulo 3). Concretamente se analizaron las implicaciones tanto de la inyección temprana (early HCCI) como de la inyección tardía (late HCCI). Además, en el caso de los ensayos late HCCI se emplearon mezclas de gasoil y biodiésel con distintas proporciones. A partir de los ensayos realizados en el laboratorio se han analizado las curvas de presión y de tasa de liberación de calor, así como los valores de las emisiones de óxidos de nitrógeno y de monóxido de carbono, permitiendo la identificación de las distintas tendencias asociadas a la combustión en modo HCCI ante cambios en distintos parámetros operativos.

En paralelo a la realización del estudio experimental se construyó un modelo numérico multizona, el cual se basa en sendas leyes funcionales para el modelado del comportamiento tanto del inicio de la combustión como de la tasa de liberación de calor (Capítulo 4).

Combinando el previamente mencionado modelo multizona y los datos obtenidos durante la fase de experimentación en el laboratorio se procedió a la calibración de las leyes funcionales del inicio de la combustión y de la tasa de liberación de calor (Capítulo 5). De esta forma se obtuvo un modelo fenomenológico que es capaz de reproducir la combustión en modo HCCI, como demuestran los resultados obtenidos para la curva de presión, la tasa de liberación de calor y las emisiones de óxidos de nitrógeno.

Finalmente, en el Capítulo 6 se procede a la elaboración y validación de un modelo predictivo, el cual permite caracterizar las leyes funcionales de inicio de la combustión y de la tasa de liberación de calor a partir de los parámetros operativos del motor. De esta forma, conociendo las condiciones en las que opera el motor, se pueden obtener predicciones para las variables más representativas del comportamiento en modo HCCI.

Capítulo 2

Fundamentos y desarrollo actual de la combustión en modo HCCI

2.1. Fundamentos de la combustión en modo HCCI

Entre los distintos sistemas avanzados de combustión, los motores con operación en modo HCCI se presentan como una alternativa ante la demanda actual consistente en lograr las altas eficiencias típicas de los MEC y las bajas emisiones de los MEP actuales, es decir, la combinación óptima de las dos tecnologías de combustión que gozan de una mayor implantación en el sector de los MCI.

La principal característica de los motores con combustión en modo HCCI reside en el hecho de que la carga fresca y el combustible, típicamente con un bajo dosado, se mezclan antes del inicio de la combustión, lo que posibilita una mezcla homogénea entre ambos, desencadenándose la combustión sin la participación de agentes externos, sino como resultado del aumento de la energía interna de la mezcla. Por consiguiente la combustión en modo HCCI guarda similitudes con los MEP, ya que ambos emplean mezclas homogéneas y con los MEC, ya que en ambos casos el inicio de la combustión deriva de la auto-ignición de la mezcla (Figura 2. 1). A pesar de que anteriormente se ha destacado la homogeneidad de la mezcla entre el aire y el combustible en los

motores con combustión en modo HCCI, es preciso destacar que actualmente el mencionado grado de homogeneidad de la mezcla es un parámetro operativo más, el cual es usado exitosamente en el control de las características de la combustión, según se expone en la Sección 2.5. Otros modos de combustión con un menor grado de homogeneidad, como el modo PCCI, son también efectivos en la tarea correspondiente a la minimización de las emisiones de óxidos de nitrógeno.

A diferencia de los MEP y MEC, la auto-ignición asociada a la combustión en modo HCCI se produce de forma simultánea en diversos puntos aleatoriamente distribuidos por la cámara de combustión y sin que exista un frente de llama que la propague, según deriva de la investigación con sistemas de análisis óptico [8] [207]. Esta metodología se basa en el estudio de la distribución espacio-temporal de formaldehídos y radicales hidroxilos, los cuales constituyen especies intermedias muy activas en la combustión de los hidrocarburos.

Las características de la combustión en modo HCCI anteriormente referidas posibilitan que ésta tenga lugar de una forma rápida, con una pequeña variación del volumen de la cámara, lo que aproxima la combustión en modo HCCI a un proceso de aportación de calor a volumen constante. Este hecho, unido a características propias de los MEC como son los elevados valores de la relación de compresión que es posible emplear y la ausencia de pérdidas significativas durante el lazo de bombeo, redundan en el incremento de la eficiencia de los motores con combustión en modo HCCI, lo que constituye una de sus principales ventajas [6]. Por el contrario, en los MEP con dosado relativo constante y muy próximo a la unidad, con la finalidad de garantizar la máxima eficacia de los catalizadores de tres vías, la regulación está basada en el estrangulamiento de la admisión de la corriente de aire, lo que conlleva un crecimiento de las pérdidas por bombeo. La combinación de estas mayores pérdidas con unas relaciones de compresión menores que las empleadas en los MEC, debido a las limitaciones derivadas de la detonación, contribuyen a que los MEP posean una eficiencia inferior a la de los anteriormente mencionados MEC y motores con combustión en modo HCCI.

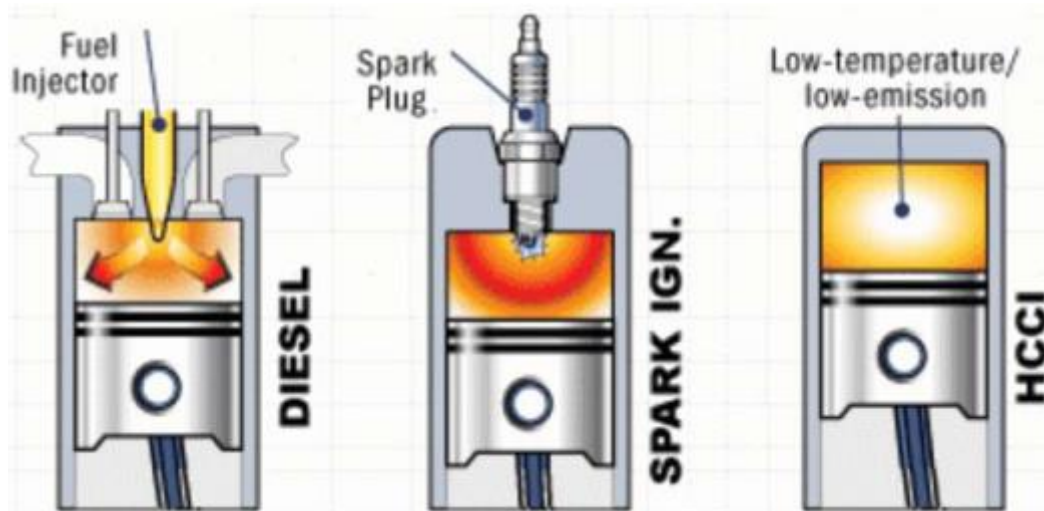


Figura 2. 1: Diagramas de las combustiones en MEC, MEP y en modo HCCI [9].

Adicionalmente, gracias a la ausencia de zonas ricas en combustible derivada de la homogeneidad de la mezcla, la combustión en modo HCCI permite prácticamente eliminar la emisión de partículas. Esta característica representa una similitud entre los motores con combustión en modo HCCI y los MEP convencionales, ya que éstos presentan igualmente unas emisiones de partículas ínfimas. Asimismo, la capacidad de los motores con combustión en modo HCCI de funcionar con dosados muy bajos y con carga homogénea, junto con la ausencia de frentes de llama, implica una reducción de la temperatura máxima alcanzada en la cámara de combustión, lo que se traduce en una reducción de las emisiones de óxidos de nitrógeno. Estas características se contraponen a las de la combustión en los MEC, donde el combustible es inyectado típicamente al final de la carrera de compresión, generando una mezcla heterogénea con el aire. Este hecho implica que en la cámara de combustión de los MEC se puedan identificar dos zonas bien diferenciadas. Una primera zona, más amplia que la otra, rica en combustible, donde el tiempo característico deriva de fenómenos difusivos y no de aspectos cinético-químicos [10]. Dada la baja concentración de oxígeno existente, en esta zona se generan unas cantidades significativas de partículas. Por el contrario, la otra zona identificada se caracteriza por una rápida mezcla entre el combustible y el aire, lo que deriva en una rápida combustión controlada por la tasa de inyección, donde se generan unas cantidades considerables de óxidos de nitrógeno. La reducción de estas elevadas emisiones de óxidos de nitrógeno

requiere tanto potenciar la homogeneidad de la mezcla entre el combustible y el aire como disminuir la temperatura media de la combustión, condiciones que pueden alcanzarse en una combustión en modo HCCI optimizada. En la Figura 2. 2 se representan en función de la temperatura de llama adiabática y del dosado local los distintos regímenes de operación de los MEC y de los motores con combustión en modo HCCI, así como de las previamente mencionadas variantes con combustión en modo PCCI, incluyendo las zonas características de formación de distintos tipos de emisiones.

Dado que los MEP requieren combustibles con una alta volatilidad y una baja tendencia a la detonación, como la gasolina, y los MEC requieren combustibles con una alta tendencia a la auto-ignición, como el gasoil, se concluye que los motores convencionales requieren el uso de combustibles específicos, a diferencia de los motores que operan en modo HCCI, los cuales pueden trabajar con una amplia gama de combustibles [13]. Finalmente, la mencionada flexibilidad para trabajar con una amplia variedad de combustibles, incluyendo combustibles de origen renovable, constituye otro de los principales atractivos de los motores con combustión en modo HCCI. A este respecto, cabe destacar, además de las realizadas con gasolina, gasoil y sus respectivos combustibles de referencia primarios (iso-octano y n-heptano), las experiencias desarrolladas con hidrógeno [14] [15], metano [16], etanol [17] [18], dimetil-éter (DME) [19], gas natural [20], gas licuado del petróleo [21], biodiésel [22] e, incluso, mezclas de gasolina y gasoil [23]. Sin embargo, dado que la combustión en modo HCCI se debe a la auto-ignición de la mezcla, las propiedades físico-químicas del combustible empleado desempeñan un papel fundamental tanto en el inicio de la combustión como en el posterior proceso de liberación de calor. La mencionada relación entre el combustible empleado y las características de la combustión en modo HCCI implican dificultades adicionales a la extensión de este tipo de combustión en aplicaciones en las que el combustible presente variaciones en su composición.

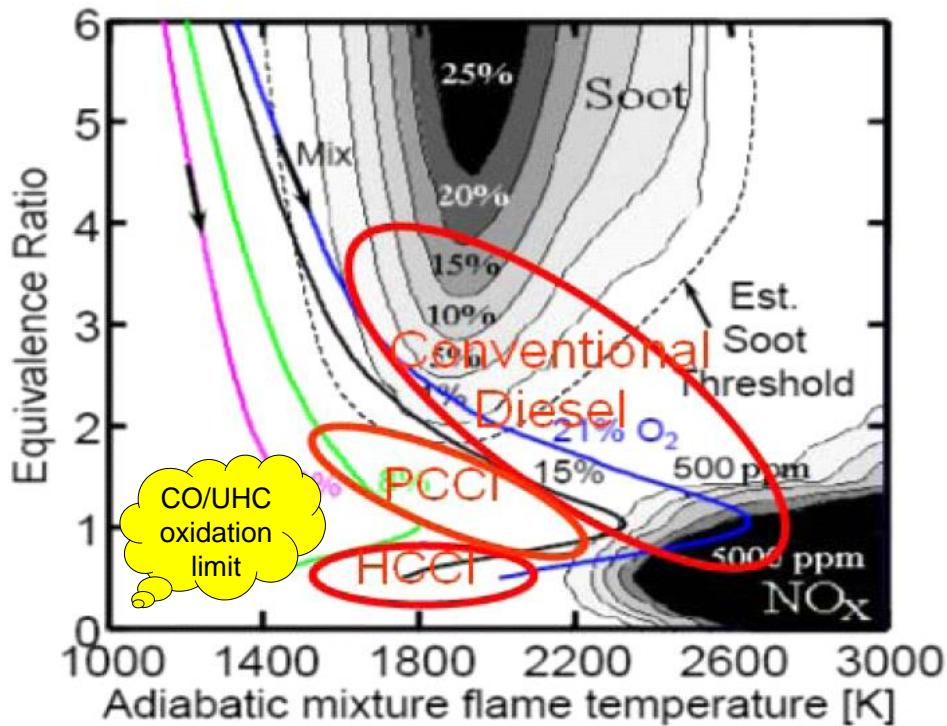


Figura 2. 2: Regímenes de operación de los motores para diferentes modos de combustión [11] [12].

2.2. Limitaciones asociadas a la combustión en modo HCCI

A pesar de las ventajas anteriormente referidas en relación al incremento de la eficiencia y a la disminución de las emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas, la combustión en modo HCCI presenta una serie de limitaciones a su implantación comercial a gran escala, las cuales se exponen someramente a continuación.

En primer lugar cabe destacar la dificultad asociada al control del inicio de combustión, ya que como se mencionó con anterioridad la combustión en modo HCCI no es desencadenada por agentes externos como ocurre en los motores convencionales con la chispa producida por una bujía (MEP) o la inyección de combustible (MEC). Por el contrario el inicio de la combustión en modo HCCI se relaciona con la temperatura en la cámara de combustión, la composición de

la mezcla y las propiedades locales de la misma [24]. La mencionada dificultad para el control del inicio de la combustión implica limitaciones en relación al rango de operación de los motores en modo HCCI, ya que, por un lado, a bajas cargas no se dispone de suficiente energía para provocar la oxidación completa del combustible [25] o, incluso, para provocar la auto-ignición de la mezcla, lo que causa baja eficiencia; y, por el otro, a altas cargas la combustión se desarrolla de una forma excesivamente rápida, ocasionando elevados gradientes de presión que pueden derivar en elevado ruido, fenómenos de detonación e, incluso, daños mecánicos al motor [26] [27], así como unas elevadas emisiones de óxidos de nitrógeno derivadas de las elevadas temperaturas máximas alcanzadas en la cámara de combustión.

Aunque a altas cargas son comparables a los niveles obtenidos en los MEP y los MEC, otra significativa desventaja de la combustión en modo HCCI reside en las elevadas emisiones de hidrocarburos sin quemar y de monóxido de carbono durante la operación a bajas cargas, si bien ambas pueden ser eliminadas prácticamente en su totalidad mediante post-tratamiento catalítico. Las emisiones de hidrocarburos sin quemar se atribuyen a dos fenómenos distintos. En primer lugar a la imposibilidad de oxidar el combustible que se aloja en los intersticios de la cámara de combustión al final de la carrera de compresión, ya que cuando retornan a la cámara de combustión las temperaturas no son suficientemente altas, a diferencia de lo que ocurre en los motores convencionales [28]. Por otro lado, las emisiones de hidrocarburos también se atribuyen al apagado local de la llama en las proximidades de las paredes de la cámara de combustión, donde las temperaturas son relativamente más bajas. De hecho, se estima que, en ausencia de técnicas avanzadas para la optimización de la mezcla entre el aire y el combustible, fracciones de hasta el 10% de éste pueden permanecer sin quemar tras la combustión en modo HCCI [29]. Las relativamente bajas temperaturas experimentadas a baja carga son también la causa de las altas emisiones de monóxido de carbono y de hidrocarburos, ya que no se dispone de suficiente energía de activación para completar su oxidación. Asimismo, cabe destacar que el sistema de alimentación de combustible juega un papel fundamental en el control de las emisiones de hidrocarburos sin quemar [30], ya que este

control requiere la consecución de una alta homogeneidad en la mezcla, evitando la deposición del combustible en las paredes de la cámara de combustión. Este requerimiento es especialmente destacable para aquellos combustibles con una baja volatilidad, como el gasoil y el biodiésel.

Dado el relevante papel de la temperatura de la mezcla, los arranques de los motores con combustión en modo HCCI también representan una significativa limitación, ya que la baja temperatura derivada de las altas pérdidas de calor a través de las paredes hace inviable la auto-ignición de la mezcla [31].

De una forma muy resumida, en esta sección se ha expuesto que, además de las dificultades asociadas al control del inicio de la combustión, el área de operación de los motores con combustión en modo HCCI está limitada a baja carga por una baja eficiencia y por unas altas emisiones de monóxido de carbono, ambas derivadas de la oxidación incompleta del combustible; mientras que a altas cargas el límite está constituido por la tendencia a la detonación y por las altas emisiones de óxidos de nitrógeno, ambas derivadas de la rápida liberación de calor y las altas temperaturas asociadas a este proceso [5].

2.3. Antecedentes de la combustión en modo HCCI

Aunque el fenómeno de la autoignición ha sido estudiado desde principios del siglo pasado, éste no se aplicaba como un modo de combustión para la generación de potencia, estando el interés centrado únicamente en el análisis de las propiedades de los combustibles [5]. No es hasta finales de la década de los 70 cuando Onishi et al. [32] aplican el concepto de la autoignición a un motor de dos tiempos alimentado con gasolina con la finalidad de mejorar su estabilidad, denominando el proceso como “Active Thermo-Atmosphere Combustion” (ATAC). Los autores lograron estabilizar la combustión tanto a cargas bajas como altas, empleando una relación de compresión de 7,5:1 y

una velocidad de giro comprendida entre 1000 y 4000 rpm. Las conclusiones de este estudio pusieron de manifiesto la necesidad de lograr tanto una temperatura suficiente para provocar la autoignición como un alto grado de uniformidad en los procesos de alimentación y de renovación de la carga.

Los primeros investigadores que establecieron que la combustión en modo HCCI se produce de forma simultánea en múltiples puntos de la cámara de combustión, sin que se detectara el avance de un frente de llama, fueron Noguchi et al. [33], quienes desarrollaron un análisis óptico mediante espectroscopio en un motor de dos tiempos. Como fruto de este trabajo la compañía Toyota propuso el concepto de combustión TS (Toyota-Soken).

La primera aplicación de la combustión en modo HCCI a un motor de cuatro tiempos data de 1983, cuando Najt et al. [34] lo aplicaron a un motor monocilíndrico, denominando el proceso como “Compression-Ignited Homogeneous Charge” (CIHC). Asimismo cabe destacar que en la referencia mencionada se documenta el uso de la recirculación de los gases de escape como medida para el control del inicio de la combustión a través de la modificación de la temperatura inicial de la carga. No obstante, los autores reportaron problemas con el control del inicio de la combustión y limitaciones en el rango de funcionamiento del motor.

Los trabajos anteriormente mencionados pusieron de manifiesto que, a diferencia de los MEP donde la combustión depende de la propagación de un frente de llama y de los MEC donde ésta está condicionada por la mezcla entre el combustible y el aire, en los motores en modo HCCI la combustión está controlada por fenómenos cinético-químicos, lo que establece una fuerte dependencia de parámetros tales como la temperatura y la composición de la mezcla [6].

El término HCCI fue empleado por primera vez en 1989 por Thring [35], quien también fue el primero en proponer el uso combinado de la combustión en modo HCCI conjuntamente con un sistema de combustión tradicional. De esta forma el motor propuesto operaba en modo HCCI a cargas parciales, mientras que a altas cargas se trataba de un MEP convencional. Los resultados

obtenidos pusieron de manifiesto una mejora en el consumo de combustible, alcanzándose valores típicos de MEC. Sin embargo, la operación en modo HCCI requería de unas elevadas temperaturas de admisión y de una considerable recirculación de gases de escape.

Cabe destacar que el previamente mencionado término PCCI (Premixed-Charge Compression Ignition) también ha sido empleado para referirse a la combustión mediante auto-ignición de mezclas pobres [36], mientras que en el caso de la combustión en modo HCCI en motores de gasolina se ha empleado la designación de CAI (Controlled Auto-Ignition) y en motores de dos tiempos el término ARC (Active Radical Combustion) [37]. Sin embargo, en el presente trabajo se emplea la designación HCCI para todos los modos anteriormente referidos, independientemente de la nomenclatura empleada por los distintos autores.

En referencia a los antecedentes de la aplicación práctica de la combustión en modo HCCI cabe destacar la propuesta realizada a mediados de los años noventa por la compañía Honda [38], la cual consistía en un motor de dos tiempos con combustión híbrida MEP/HCCI. De esta forma el motor operaba en modo HCCI hasta una carga del 75% aproximadamente, gracias a la retención de gases de escape lograda por medio de una válvula de control situada en el colector de escape. El prototipo probado, con una cilindrada de 250 cm³, demostró una considerable disminución del consumo de combustible y de las emisiones de hidrocarburos sin quemar.

Como conclusión cabe destacar que los antecedentes previamente expuestos pusieron de manifiesto que la combustión en modo HCCI está controlada por fenómenos de tipo cinético-químicos, no por la dinámica de fluidos, así como el potencial de este tipo de combustión para lograr eficiencias similares a las de los MEC, unas bajas emisiones de óxidos de nitrógeno similares a las de los MEP con catalizador y la prácticamente ausencia de partículas.

Para concluir, cabe destacar que en la Sección 2.5 se exponen las principales técnicas aplicadas históricamente para la preparación de la mezcla entre el

combustible y el aire en los motores con combustión en modo HCCI, abarcando desde los sistemas de premezcla, hasta las inyecciones temprana y tardía.

2.4. Estrategias de control de la combustión en modo HCCI

A pesar de que tradicionalmente ha resultado relativamente complejo extender su rango de operación, las características de la combustión en modo HCCI anteriormente expuestas ponen de manifiesto la relevancia de las estrategias de control de las distintas propiedades de la mezcla alojada en la cámara para superar las limitaciones asociadas a este tipo de combustión. A continuación se exponen las principales estrategias exploradas en relación al control de las propiedades de la mezcla. Sin embargo, antes de proseguir conviene destacar que para el control de la combustión en modo HCCI se usan normalmente combinaciones de estas estrategias, logrando mejores resultados que mediante la aplicación de técnicas aisladas.

2.4.1 Control de la temperatura

Ya sea bien para combustibles con un bajo número de cetano o bien para combustibles con alto número de cetano en motores con relaciones de compresión bajas, la combustión en modo HCCI requiere un cierto grado de precalentamiento de la carga. Asimismo, se ha constatado que pequeñas variaciones en la temperatura de admisión influyen en el inicio de la combustión en modo HCCI [39]. Sin embargo, un calentamiento excesivo redundaría negativamente tanto en el rendimiento volumétrico como en el inicio de la combustión, que se adelantaría en exceso, incrementando la cantidad de trabajo negativo realizado y penalizando de esta forma la eficiencia del motor. Asimismo, el incremento de las emisiones de óxidos de nitrógeno constituye otra limitación adicional al excesivo calentamiento de la carga en la admisión

[40]. Por estos motivos, el control de la temperatura en la admisión es relevante para lograr la optimización de la combustión en modo HCCI [41].

2.4.2. Relación de compresión y distribución variables

A pesar del incremento de coste que representa frente a otros sistemas, una herramienta que posibilita el control del inicio de la combustión en modo HCCI en una amplia variedad de condiciones de operación consiste en los sistemas de relación de compresión variable [13]. De esta forma, la modificación de la relación de compresión permite adaptar la temperatura media de la mezcla a cambios en las condiciones operativas, haciendo posible optimizar el inicio de la combustión [42]. No obstante, el incremento de la relación de compresión tiene asociado el incremento de las emisiones de hidrocarburos sin quemar [43] y de monóxido de carbono, debido a la reducción del tiempo de reacción disponible para la oxidación, combinado con el rápido descenso de la temperatura media de los gases en la cámara de combustión durante la carrera de expansión [44] [45]. Por su parte, Iida et al. [41] pusieron de manifiesto que, ante un aumento de la relación de compresión, el rango de operación óptimo del motor se desplaza hacia zonas de mayor velocidad de giro y menores dosados.

Análogamente, los sistemas de distribución variable permiten lograr el mismo efecto que los sistemas de relación de compresión variable [46]. De esta forma, retrasar el cierre de la válvula de admisión durante la carrera de compresión equivale a disminuir la relación de compresión efectiva, lo que implica menores temperaturas al final de la carrera de compresión y, por lo tanto el retraso del inicio de la combustión. Asimismo, la disminución de la temperatura en el interior de la cámara de combustión durante la carrera de compresión permite retrasar el punto de inyección, lo que reduce la posibilidad de que el combustible se deposite en las paredes del cilindro, reduciendo las emisiones de hidrocarburos sin quemar y soslayando la eliminación de la película de aceite lubricante de las paredes del cilindro. Como se verá con posterioridad, el uso de sistemas de distribución variable posee la ventaja añadida de permitir el

control de los gases residuales retenidos, lo que conlleva la modificación de los campos de temperatura y concentración de especies químicas en el interior de la cámara de combustión. Gracias a estos efectos se puede controlar la combustión en modo HCCI de distintos tipos de combustibles. En relación a las experiencias con sistemas de distribución variable cabe destacar los desarrollos realizados por Genzale et al. [47] y Law et al. [48]. Aunque el uso de este tipo de sistemas implica un encarecimiento del motor, la distribución variable está más extendida que los sistemas de relación de compresión variable.

2.4.3. Modificación de los combustibles

Como se ha adelantado, la combustión en modo HCCI es factible para distintos tipos de combustibles, si bien es preciso resaltar que los resultados obtenidos son muy distintos en función del combustible empleado, debido a la distinta cinética química asociada a cada proceso de combustión [49]. De hecho, el trabajo desarrollado por Yao et al. [50] pone de manifiesto que para cada grado de carga de un motor existe un número de octano que optimiza la eficiencia de la combustión en modo HCCI, siendo el número de octano una indicación de la resistencia a la detonación de un determinado combustible. En cambio, otros autores han centrado sus esfuerzos en el análisis de la influencia del número de cetano, el cual está relacionado con el tiempo que transcurre entre la inyección de un determinado combustible y su posterior ignición. De esta forma, cuanto mayor es el número de cetano de un combustible, menor es el retraso del inicio de la combustión, pudiendo resumirse que la interpretación del número de cetano es opuesta a la del número de octano. Li et al. [51] y Starck et al. [52] emplearon combustibles con un número de cetano bajo con la finalidad de retrasar la auto-ignición, posibilitando de esta forma una mejor mezcla entre el aire y el combustible, lo que permite reducir las emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas. Por el contrario, los combustibles con un número de cetano alto posibilitan extender el rango de operación a muy bajas cargas en los motores con combustión en modo HCCI e, incluso, facilitarían los

arranques en frío, si bien existen limitaciones asociadas a la operación a cargas altas.

En base a las afirmaciones anteriores se puede establecer que una alternativa para el control de los motores con combustión en modo HCCI consiste en la modificación de la composición del combustible en función de las condiciones operativas, ya sea mediante la mezcla de distintos combustibles o mediante la incorporación de aditivos a un combustible dado. De esta forma se puede influir sobre el proceso de liberación de calor mediante la modificación de las características químicas del combustible, ya sea para inhibir la combustión o para acelerarla. En referencia al estudio de los distintos aditivos que pueden ser empleados para optimizar la combustión en modo HCCI cabe destacar el trabajo desarrollado por Aceves et al. [53], quienes establecieron una clasificación de aditivos en función de su capacidad para promover el adelanto de la combustión. Asimismo, Iida et al. [54] se centraron en el uso de supresores de la ignición perteneciente al grupo de los alcoholes, tales como metanol, etanol y 1-propanol, concluyendo que el efecto causado se debe a la reducción de radicales activos durante las fases previas a la auto-ignición, lo que implica el incremento del retraso del inicio de la combustión.

2.4.4. Recirculación de gases de escape

La recirculación de gases de escape (Exhaust Gas Recirculation, EGR) constituye una de las principales técnicas empleadas tradicionalmente para reducir las emisiones de óxidos de nitrógeno en los motores de combustión interna alternativos. Sin embargo, el interés por la recirculación de gases de escape en relación a la combustión en modo HCCI no se ciñe únicamente a la reducción de las emisiones de óxidos de nitrógeno, sino que posee un atractivo añadido, ya que permite modificar tanto el inicio de la combustión como su posterior desarrollo gracias a efectos de distinta naturaleza inducidos por los productos de la combustión recirculados [55]. Por este motivo, y gracias a su relativa simplicidad, los sistemas de recirculación de gases de escape constituyen uno de los principales mecanismos empleados extensivamente

para el control de la combustión en modo HCCI, habiendo sido profusamente estudiados en el presente trabajo, como se refleja en los Capítulos 3, 5 y 6.

Sin embargo, antes de proceder a la descripción de los mencionados efectos es preciso exponer los distintos tipos de recirculación de gases de escape existentes. En primer lugar, el EGR interno o residual, es aquél originado durante el proceso de renovación de la carga por la fracción de gases de escape que permanece en la cámara de combustión. Sin embargo, la tipología empleada activamente para la realización de este trabajo consiste en el EGR externo, el cual consiste en la recirculación y, habitualmente, refrigeración de una fracción de los gases de escape desde el colector de escape hacia el sistema de admisión a través de una válvula de control de tres vías.

Según se ha mencionado con anterioridad, la recirculación de gases de escape en motores de combustión interna alternativos influye no sólo en el inicio de la combustión sino también en su posterior desarrollo. La mencionada influencia se atribuye a los distintos efectos descritos a continuación [56] [57]:

- Calentamiento de los gases alojados en la cámara de combustión, dado que los gases de escape recirculados se encuentran a una temperatura mayor que la temperatura correspondiente al aire admitido.
- Aumento de la capacidad térmica de la mezcla, ya que los valores de la capacidad térmica de las moléculas triatómicas de dióxido de carbono y vapor de agua son mayores que el correspondiente a la carga fresca.
- Dilución de la concentración de oxígeno, debida a que la recirculación de gases de escape implica el desplazamiento de una cierta cantidad de aire, lo que conlleva la reducción de la concentración de oxígeno en el interior de la cámara de combustión.
- Modificación del mecanismo cinético, ya que la presencia de especies químicas distintas del oxígeno y del nitrógeno, las cuales pueden participar en las distintas reacciones químicas que tienen lugar en el interior de la cámara como parte del proceso de combustión [58]. De hecho, la recirculación de gases de escape puede ser considerada una

suerte de modificación del combustible, según se expuso en apartados anteriores.

En referencia al impacto de los efectos anteriormente referidos cabe destacar que tanto el efecto de calentamiento como el efecto capacitivo son los que poseen una mayor influencia sobre el inicio de la combustión en modo HCCI. No obstante, los efectos inducidos por el efecto de calentamiento y por el efecto capacitivo son opuestos, ya que el calentamiento ejercido por la recirculación de gases de escape tiende a adelantar el inicio de la combustión, mientras que el efecto capacitivo conlleva que las temperaturas requeridas para el inicio de la combustión se alcancen más tarde, lo que redundaría en el retraso de éste. Asimismo, el descenso de la temperatura media en la cámara de combustión asociado al efecto capacitivo de la recirculación de gases de escape también conlleva que el proceso de combustión se desarrolle de una forma más suave, lo que implica una reducción de las emisiones de óxidos de nitrógeno. Por el contrario, no se ha constatado que los efectos de dilución y cinético tengan incidencia sobre el inicio de la combustión en modo HCCI. Sin embargo, el efecto de dilución sí posee una importante influencia sobre la tasa de liberación de calor, ya que, debido a la menor concentración de oxígeno, la combustión se produce de una forma más suave y prolongada en el tiempo. Este efecto se entiende igualmente atendiendo a la formulación de las leyes que caracterizan la cinética de la reacción, donde la concentración de oxígeno pondera directamente, frecuentemente con exponente unitario, en la velocidad de reacción. Esta modificación de la tasa de liberación de calor es especialmente atractiva cuando se pretende reducir el gradiente de presión experimentado durante la combustión o las emisiones de óxidos de nitrógeno generadas, las cuales se reducen debido al descenso de las temperaturas máximas alcanzadas en la cámara de combustión. La comparación del efecto debido a la dilución de la concentración de oxígeno y al aumento de la capacidad calorífica pone de manifiesto que la primera conlleva una mayor reducción de las temperaturas máximas en la cámara, lo que deriva en unas menores emisiones de óxidos de nitrógeno [61]. Para concluir con el análisis de los efectos provocados por la recirculación de gases de escape sobre la combustión en modo HCCI cabe destacar que estos serán mayores, cuanto

mayor sea la carga a la que opera el motor, ya que tanto la temperatura del flujo recirculado como su concentración de dióxido de carbono y vapor de agua serán mayores.

A pesar de que anteriormente se ha referido la ventaja asociada a la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno asociada a la recirculación de gases de escape [59], ésta también conlleva ciertos inconvenientes, como son el incremento de las emisiones de partículas e hidrocarburos sin quemar, la disminución de la potencia generada, el aumento del consumo específico de combustible y, a partir de determinados niveles de recirculación, el aumento de la inestabilidad del proceso de combustión [60].

Para resumir cabe destacar que la recirculación de gases de escape hace posible la combustión en modo HCCI de aquellos combustibles con baja tendencia a la auto-ignición, como la gasolina, adelantando el inicio de la combustión gracias al calentamiento de la carga admitida en el cilindro, sin necesidad de calentamiento externo. Asimismo, en estos casos la recirculación de gases de escape no sólo contribuye al control del inicio de la combustión sino que también ejerce un efecto estabilizador de la misma [62]. No obstante, para combustibles con tendencia a la autoignición, como el gasoil, el efecto de calentamiento de la recirculación de gases de escape puede ser perjudicial, ya que puede inducirse un excesivo adelanto del inicio de la combustión, lo que conlleva un aumento de las emisiones de óxidos de nitrógeno debido a las mayores temperaturas alcanzadas en el interior de la cámara de combustión. Por este motivo, en aplicaciones donde se pretende retrasar el inicio de la combustión, como es el caso del presente trabajo, se procede a la refrigeración de los gases de escape recirculados, lo que implica la anulación del previamente descrito efecto de calentamiento de la carga. De esta forma no sólo se evita el adelanto del inicio de la combustión, sino que también se soslaya la penalización del rendimiento volumétrico debido al calentamiento de la carga. Son diversos los autores que han puesto de manifiesto que la recirculación de gases de escape refrigerados en motores con combustión en modo HCCI no sólo conlleva el retraso de la auto-ignición, sino que adicionalmente implica que la liberación de calor se produzca de una manera más lenta y con menores gradientes de presión y temperatura, lo que redund

positivamente en la extensión del rango de operación a cargas altas [60]. Debido a los motivos expuestos con anterioridad, a la hora de evaluar las conclusiones de cualquier estudio en el que se emplee la recirculación de gases de escape es crítico conocer si los autores emplean refrigeración o no, ya que los comportamientos inducidos pueden ser totalmente opuestos.

A pesar de la diferenciación realizada entre aplicaciones dotadas de refrigeración de los gases recirculados y aplicaciones con gases no refrigerados, existen aplicaciones donde se combinan ambas técnicas. De este modo Shi et al. [63] combinaron los gases residuales, no refrigerados, con la recirculación externa de gases de escape en un motor con combustión en modo HCCI alimentado con gasoil. Los gases residuales eran empleados para potenciar la preparación de la mezcla entre el aire y el combustible, ejerciendo además un efecto positivo sobre las emisiones de humos. Sin embargo, las experiencias llevadas a cabo ponían de manifiesto que el aumento de los gases residuales empleados incrementa la tendencia a la detonación, lo que limita el rango de operación a altas cargas. No obstante, según se ha indicado con anterioridad, la recirculación externa de gases de escape refrigerados tiende a retrasar la auto-ignición de los combustibles con un número de cetano alto, reduciendo la tendencia a la detonación a cargas altas. Por este motivo, los gases refrigerados sirvieron tanto para expandir el rango de operación del motor ensayado como para reducir las emisiones de óxidos de nitrógeno. A pesar de las ventajas referidas, los autores reportaron el incremento de las emisiones de monóxido de carbono debido a la combustión incompleta derivada del descenso de la temperatura media de la carga y de la dilución de la concentración de oxígeno.

Finalmente, para concluir con el análisis de la recirculación de gases de escape cabe destacar que un efecto similar puede ser logrado mediante la inyección de agua en la cámara de combustión [54]. La inyección de agua provoca un descenso de la temperatura media de la carga, por lo que puede ser empleada para modificar el inicio de la auto-ignición. Asimismo, la inyección de agua conlleva el incremento de la duración de la combustión, lo que implica una liberación de calor más moderada, con unas menores temperaturas máximas que se traducen en unas menores emisiones de óxidos de nitrógeno. Sin

embargo, el mencionado descenso de la temperatura media durante la combustión provoca un aumento de las emisiones de hidrocarburos sin quemar y de monóxido de carbono, lo que penaliza el rendimiento de la combustión. Los efectos mencionados con anterioridad en relación a la inyección de agua en motores con combustión en modo HCCI fueron constatados experimentalmente por Christensen et al. [13]

2.5. Preparación de la mezcla para la combustión en modo HCCI

A continuación se proporciona una revisión de las experiencias relacionadas con la preparación de la mezcla entre el combustible y el aire, la cual posee una elevada importancia para el control de la combustión en modo HCCI. De hecho, las distintas alternativas expuestas a continuación ponen de manifiesto que la fracción de mezcla homogénea, es decir, la estratificación en la cámara de combustión, es otro parámetro que permite controlar la combustión en modo HCCI, mejorando las prestaciones del motor y disminuyendo los niveles de emisiones generados [55]. En la literatura especializada se identifican tres tipologías distintas en relación al concepto de estratificación aplicada a la combustión en modo HCCI: campo de temperaturas, concentración de combustible y, finalmente, composición del combustible [31]. Asimismo, las estrategias de control de la combustión en modo HCCI basadas en la estratificación de la mezcla pueden llegar a ser incluso más sencillas que las mencionadas en apartados anteriores.

Dado que la auto-ignición es un fenómeno de naturaleza cinética-química, el control de la combustión en modo HCCI requiere la actuación, no sólo sobre el campo de temperaturas, sino también sobre la composición química de la mezcla. De hecho, la consecución de una mezcla completamente homogénea es difícilmente alcanzable, habiéndose identificado que la presencia incluso de pequeñas no homogeneidades en los campos de temperatura y composición conlleva la alteración de la combustión en modo HCCI, repercutiendo tanto en

el instante de la auto-ignición como en el posterior proceso de liberación de calor [6]. Asimismo, Thirouard et al. [64] pusieron de manifiesto que el inicio de la combustión en modo HCCI se produce en las zonas ricas en combustible, lo que permite establecer una relación entre la estratificación de la carga y el control de la auto-ignición, lo que a su vez repercute en el proceso de liberación de calor, presentando además un efecto positivo sobre la extensión del rango de operación del motor a cargas altas y sobre la eficiencia de la combustión en modo HCCI. Sin embargo, la aplicación de la estratificación de la mezcla a cargas altas también conlleva ciertos efectos adversos que limitan su aplicación, como es el incremento de las emisiones de óxidos de nitrógeno derivadas de la creación de zonas excesivamente ricas en combustible que a su vez generan zonas calientes durante el transcurso de la combustión [65]. A pesar de esto, se concluye que la estratificación de la mezcla resulta más atractiva que la generación de una mezcla altamente homogénea, contribuyendo positivamente al desarrollo de una combustión limpia y eficiente [66].

Para el caso concreto de los combustibles analizados en el presente trabajo, la anteriormente referida importancia de la preparación de la mezcla adopta un carácter crítico, ya que tanto el gasoil como el biodiésel presentan una baja volatilidad, una alta viscosidad y una alta tendencia a la auto-ignición, características todas que complican la consecución de una mezcla homogénea.

Sin embargo, antes de proceder a analizar las distintas alternativas propuestas en relación a los motores que operan en modo HCCI, conviene revisar algunos de los parámetros que inciden sobre el fenómeno de la formación de la mezcla. En primer lugar, cabe destacar que el uso de elevadas presiones de inyección favorece la atomización del combustible, lo que facilita la formación de una mezcla homogénea. La medida anterior es especialmente atractiva en combinación con el uso de inyectores con orificios de muy pequeño tamaño, ya que las altas velocidades inducidas al combustible, así como la elevada relación entre la superficie y el volumen derivada del menor tamaño medio de la gota, facilitan la evaporación de éste. Los efectos anteriormente referidos han sido estudiados por Dodge et al. [67] y por Wang et al. [68], quienes emplearon presiones de inyección de 300 MPa en combinación con orificios de inyección de 0,085 mm, poniendo de manifiesto una reducción de las

emisiones de partículas y la desaparición de la deposición de combustible en las paredes de la cámara de combustión. Asimismo, otra medida encaminada a potenciar la generación de mezclas homogéneas, especialmente en aquellas aplicaciones en las que la mezcla debe producirse de una forma rápida, consiste en potenciar el swirl en la cámara de combustión. Mediante la aplicación de técnicas de ampliación del movimiento de la masa fluida albergada en la cámara de combustión se pueden obtener reducciones de emisiones, especialmente de las consistentes en monóxido de carbono e hidrocarburos sin quemar procedentes de las zonas intersticiales [69]. Dado que el movimiento del gas en la cámara de combustión depende en gran manera de la forma de ésta, los pistones con geometrías en forma de cavidad son especialmente atractivos en relación a la potenciación del swirl [70]. Sin embargo, un swirl excesivo tampoco es deseable, ya que éste conlleva un aumento de las pérdidas de calor por convección, reduciendo la potencia generada [71]. De esta forma un elevado swirl conlleva menores temperaturas medias en la cámara de combustión, lo que se traduce en menores emisiones de óxidos de nitrógeno. Para concluir con los mecanismos disponibles para mejorar la mezcla entre el combustible y el aire cabe destacar la sobrealimentación [72], ya que ésta implica una mayor densidad del aire en la cámara de combustión, lo que limita la penetración del combustible inyectado. De esta forma, mediante el incremento de la presión durante la admisión se logra reducir el tiempo requerido para generar la mezcla. Asimismo, la sobrealimentación del motor posibilita la extensión del rango de operación a cargas altas, ya que la mayor dilución del combustible evita la aparición de ruidos y el “endurecimiento” de la combustión [73].

Previamente a la exposición de las tendencias actuales cabe destacar que la alimentación mediante inyección en la admisión, también denominada premezcla, es una técnica empleada tradicionalmente para lograr la homogeneidad de la mezcla, ya que el combustible dispone de tiempo suficiente para mezclarse con el aire antes del inicio de la combustión. Sin embargo, su aplicación en los motores con combustión en modo HCCI requiere la disminución de la relación de compresión para evitar la detonación, lo que redundaría negativamente en la eficiencia del motor. Asimismo, la inyección en la

admisión se adapta mejor a los combustibles con una alta volatilidad, como la gasolina, no siendo adecuada para los gasóleos ni otros combustibles similares. Este hecho es debido a las altas deposiciones de combustible que se producen sobre las paredes, siendo requerido el precalentamiento de la carga para minimizar este efecto, lo que penaliza el rendimiento volumétrico del motor. A pesar de esta no idoneidad, dado que se trata de uno de los combustibles empleados en el desarrollo del presente trabajo, se destaca el trabajo desarrollado por Singh et al. [74] quienes aplicaron la inyección en la admisión a un motor alimentado con biodiésel, para lo cual incorporaron un evaporador de combustible. Los autores emplearon la recirculación de los gases de escape como herramienta para el control del inicio de la combustión. Los resultados obtenidos ponen de manifiesto la mayor estabilidad de la combustión en comparación con el gasoil, dada la más suave liberación de calor asociada al biodiésel. A pesar de esto, los autores destacan un mayor consumo de combustible y unas mayores emisiones de monóxido de carbono y de hidrocarburos sin quemar, dada la mayor dificultad del biodiésel para la evaporación.

Debido a las limitaciones expuestas con anterioridad, distintos autores han propuesto una serie de técnicas alternativas de alimentación especialmente adaptadas a la combustión en modo HCCI, las cuales se resumen brevemente en los párrafos siguientes. Asimismo, podrá comprobarse que estas técnicas para la generación de una mezcla óptima para la combustión en modo HCCI están basadas en la aplicación práctica de los parámetros de control expuestos en el subapartado anterior.

2.5.1. Inyección temprana

La inyección directa de combustible con una significativa antelación respecto al PMS, denominada inyección temprana, ha sido el sistema más comúnmente empleado para lograr la combustión en modo HCCI [6]. De esta forma, las temperaturas alcanzadas durante la carrera de compresión, junto con el mayor tiempo disponible y, en ocasiones, el movimiento inducido al fluido en el interior

de la cámara, potencian la evaporación del combustible y la mezcla con el aire. Esto relaja los requerimientos relacionados con la temperatura de admisión, lo que reduce el riesgo de auto-ignición prematura. Asimismo, el sistema de inyección empleado es análogo al empleado en los MEC tradicionales, lo que reduce la complejidad del sistema. Sin embargo, la principal limitación de la inyección temprana reside en la alta probabilidad de que el combustible inyectado se deposite en las paredes de la cámara de combustión, derivando en unas altas emisiones de hidrocarburos sin quemar y daños mecánicos debido a la eliminación de la película de lubricante. Para superar esta dificultad se requiere un diseño específico del sistema de alimentación, el cual permita limitar la penetración del combustible en la cámara de combustión.

Dado que, a diferencia de lo que ocurre en los MEC convencionales, la inyección temprana no posibilita el control del inicio de la combustión, diversas alternativas han sido exploradas para mejorar el control del mismo.

PREDIC

El sistema PREDIC (Premixed Lean Diesel Combustion), desarrollado por el instituto New ACE de Japón, constituye una de las alternativas más destacables dentro de los sistemas de inyección temprana. El concepto propuesto consiste en la combinación de tres inyectores, uno central y dos a los lados de éste. La función de estos inyectores laterales consiste en evitar, en condiciones de baja temperatura, la penetración excesiva del combustible y su deposición en las paredes de la cámara de combustión. El mencionado efecto se consigue gracias a que los inyectores laterales están orientados de forma que los chorros inducidos colisionan en el centro de la cámara de combustión y no en las paredes de la misma. Los resultados reportados pusieron de manifiesto unas bajas emisiones tanto de óxidos de nitrógeno como de partículas [75]. Sin embargo, las emisiones de hidrocarburos y el consumo específico eran mayores que en el caso de un MEC convencional, debido al significativo adelanto experimentado en el inicio de la combustión a pesar de los distintos combustibles, temperaturas de admisión y relaciones de compresión ensayadas.

En un esfuerzo adicional para soslayar la pérdida de eficiencia anteriormente referida, Hashizume et al. [76] añadieron una inyección secundaria de combustible en las cercanías del PMS. De esta forma los inyectores laterales generaban una mezcla pobre mediante la inyección temprana, mientras que el inyector central era el responsable de la inyección secundaria. Aunque las emisiones de óxidos de nitrógeno experimentaron un aumento en comparación con la combustión en modo HCCI puro, éstas eran aún inferiores a las emisiones de un MEC convencional, sin penalizar el rendimiento. Sin embargo, las emisiones de hidrocarburos sin quemar presentaban valores elevados.

Para concluir cabe destacar que un concepto similar al PREDIC lo constituye la combustión PCI (Premixed Compression Ignited) desarrollada por la compañía Mitsubishi [77], el cual fue aplicado a un motor diésel de cuatro tiempos. De esta forma los autores desarrollaron un sistema de inyección, que mediante la colisión de los chorros generaba un spray con un elevado ángulo de dispersión, limitando la deposición de combustible en las paredes de la cámara de combustión debido a la reducción de la penetración del combustible en la misma. Sin embargo, la combustión PCI estaba limitada a cargas medias debido a las altas emisiones de hidrocarburos sin quemar.

MULDIC & HiMICS

Hashizume et al. [76] proponen el sistema MULDIC (Multiple Stage Diesel Combustion), el cual combina una inyección durante la carrera de compresión, la cual da lugar a una combustión de premezcla pobre, y una inyección antes del PMS, la cual genera una combustión difusiva bajo condiciones de bajo contenido en oxígeno.

Asimismo, Yokota et al. [78], de la compañía Hino Motors, proponen el sistema HiMICS (Homogeneous Charge Intelligent Multiple Injection Combustion System), muy similar al sistema MULDIC, salvo por la diferencia de que la inyección secundaria se sustituye por una inyección múltiple. Los autores otorgan a esta inyección múltiple el papel de maximizar la oxidación de las partículas generadas en la fase de premezcla.

UNIBUS

Otro ejemplo exitoso de la aplicación de la inyección temprana está constituido por el sistema UNIBUS (Uniform Bulky Combustion System) propuesto por la compañía Toyota [79]. Esta propuesta se basa en la combinación, para cargas bajas y medias, de una inyección temprana (50° APMS) con una inyección tardía (13° DPMS) (Figura 2. 3). Los resultados obtenidos ponen de manifiesto que la combustión derivada de la inyección secundaria actúa como potenciador de la liberación de calor asociada a la inyección temprana. De esta forma, al igual que ocurre con el sistema PREDIC, la inyección secundaria del sistema UNIBUS permite la mejora de la eficiencia del motor, así como la reducción de las emisiones de hidrocarburos sin quemar. Asimismo, los autores consiguieron mantener las emisiones de óxidos de nitrógeno por debajo de los niveles asociados a los MEC convencionales.

MULINBUMP

El sistema MULINBUMP, propuesto por Su et al. [81], se basa en un sistema de inyección temprana múltiple, lo que permite controlar la combustión en modo HCCI a bajas cargas, reduciendo notablemente las emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas. Sin embargo, a cargas medias y altas, el sistema multi-pulso anterior se combina con una inyección secundaria cerca del PMS (Figura 2. 4), dando lugar a una combustión difusiva. Esta combinación de inyecciones posibilita que la combustión sea limpia y eficiente en todo el rango de operación del motor, lo que requiere que la proporción de combustible inyectado de forma temprana sea mayor que la correspondiente a la inyección secundaria.

Para potenciar la mezcla entre el aire y el combustible procedente de la inyección secundaria se emplea un diseño especial del pistón denominado BUMP, el cual potencia el swirl, acompañado de una elevada presión de inyección. Asimismo cabe destacar que mediante el mencionado sistema de inyección multi-pulso se consigue controlar la penetración del chorro de combustible, evitando que éste se deposite en las paredes de la cámara de combustión.

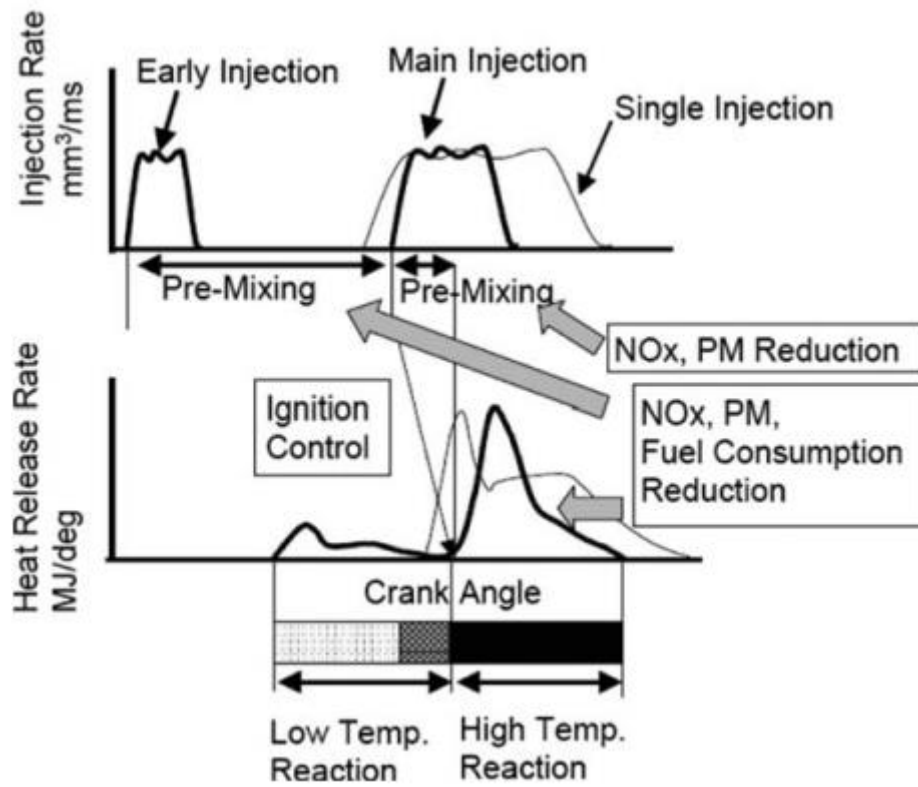


Figura 2. 3: Estrategia de combustión UNIBUS [80].

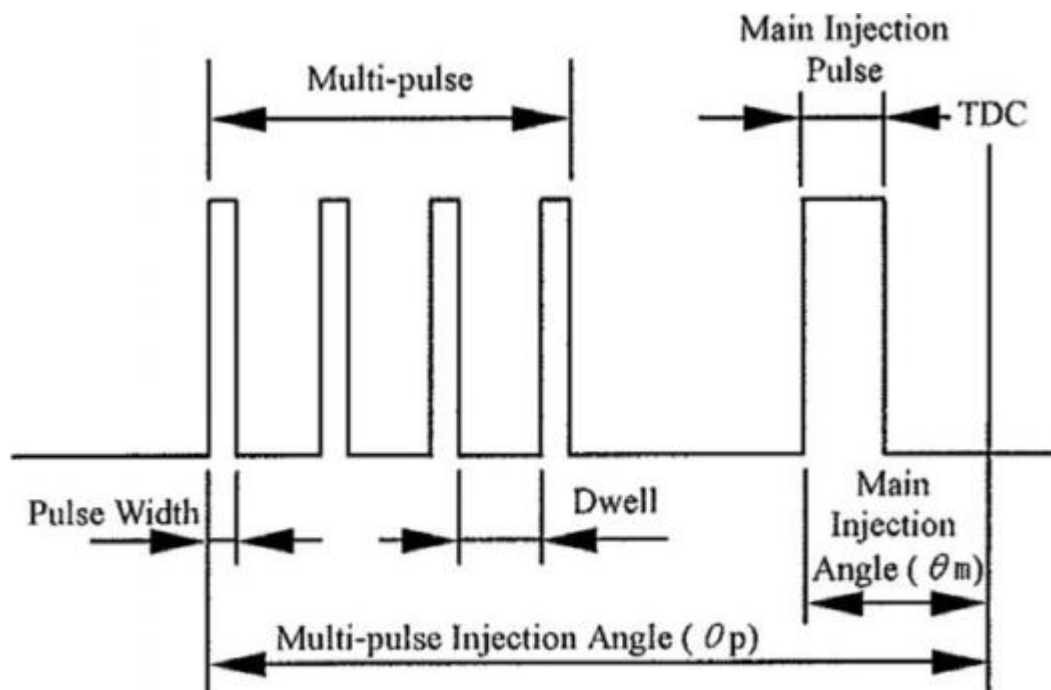


Figura 2. 4: Inyección multi-pulso del sistema MULINBUMP [80].

NADI

Una solución destinada a minimizar la deposición de combustible en las paredes de la cámara de combustión en los motores con inyección temprana consiste en el empleo de inyectores de bajo ángulo de chorro. En esta línea el Instituto Francés del Petróleo propuso el sistema NADI (Narrow Angle Direct Injection) [82] el cual opera en modo HCCI a carga parcial y en modo MEC a cargas altas. Los resultados obtenidos ponen de manifiesto una notable reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno y partículas a la vez que se mantiene el nivel de prestaciones de un motor MEC convencional.

2.5.2. Inyección tardía

El sistema MK (Modulated Kinetics), desarrollado por la compañía Nissan [83] representa un claro ejemplo de combustión en modo HCCI con inyección tardía. Este sistema se basa en lograr el retraso del inicio de la combustión inyectando el combustible en el rango comprendido entre 7° APMS y 3° DPMS y recirculando cantidades considerables de gases de escape que reducen la concentración de oxígeno notablemente. Para compensar el efecto de esta inyección tardía y potenciar la mezcla entre el combustible y el aire se combinan un pistón con cavidad toroidal y la inducción de un swirl elevado. Sin embargo, a pesar de las medidas adoptadas y de la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno, el rango de operación de los motores MK estaba acotado a cargas medias, lo que limitaba su implantación efectiva.

No obstante, la segunda generación de motores MK sí permitió extender el rango de operación a altas cargas [84]. Para ello fueron necesarias unas modificaciones respecto al diseño original, las cuales incluyen un sistema common-rail de inyección, la reducción de la relación de compresión y, finalmente, la refrigeración de los gases de escape recirculados.

Para concluir, cabe destacar que a diferencia de otras alternativas, el sistema MK permite el control efectivo del inicio de la combustión a través de la

modificación del punto de inyección, sin que para ello se requieran elementos distintos a los existentes en un MEC de inyección directa convencional.

2.5.3. Combinación de premezcla e inyección directa

La alimentación mediante premezcla convencional, la cual consiste en inyectar el combustible en una corriente de aire antes de que la mezcla pase por la válvula de admisión, ha sido combinada con una inyección directa secundaria en motores con combustión en modo HCCI obteniéndose resultados satisfactorios.

De esta forma, en el trabajo de Odaka et al. [85] la mayor parte del combustible se inyecta en la admisión, generando una mezcla homogénea, mientras que la fracción restante de combustible se inyecta directamente en la cámara de combustión con la finalidad de detonar el inicio de la combustión de la premezcla anterior. Los resultados obtenidos ponen de manifiesto una mejora de las emisiones de óxidos de nitrógeno y partículas respecto a un MEC convencional.

La propuesta de Midlam-Mohlet et al. [86] es similar a la anteriormente descrita, con la salvedad de que a altas cargas la cantidad de combustible asociado a la inyección secundaria aumenta notablemente.

En un intento de extender el rango de operación, Aroonsrisopon et al. [87] optaron por una estrategia basada en el control de la estratificación de la carga, la cual se logra modificando tanto la cantidad de combustible inyectado en la admisión como el inicio de la inyección directa. Los resultados derivados de este trabajo ponen de manifiesto que la combustión en modo HCCI gana estabilidad a medida que la estratificación de la carga aumenta.

El trabajo de Berntsson et al. [88] concluye que el incremento de la estratificación de la carga implica un adelanto del inicio de la combustión, así como una liberación de calor menos pronunciada. El efecto anteriormente referido permite extender el rango de operación del motor empleando la estratificación de la carga como herramienta de control.

Para concluir con los sistemas que combinan la inyección en la admisión con una inyección directa cabe destacar el desarrollo de Inagaki et al. [89], quienes proponen un motor sobrealimentado que emplea gasolina para la inyección en la admisión y gasoil para la inyección directa. Los autores mantienen que el inicio de la combustión puede ser controlado mediante la modificación de las fracciones de combustibles inyectados en cada fase.

2.6. Modelos aplicados al análisis de la combustión en modo HCCI

Dado que el objetivo del presente trabajo es el desarrollo de un modelo para la simulación de la combustión en modo HCCI, se considera oportuno proceder a resumir de forma breve los trabajos más relevantes en este campo, los cuales se pueden dividir en modelos de volumen cerrado y modelos cíclicos.

Aunque este trabajo se centra en la primera de las categorías mencionadas, es decir, en los modelos de volumen cerrado, en relación a los modelos cíclicos cabe mencionar que, en la mayoría de las ocasiones, esta tipología deriva del acoplamiento de modelos de volumen cerrado y una herramienta especialmente desarrollada para la consideración de los fenómenos asociados a la operación periódica del motor [90] [91] [92].

A diferencia de los modelos cíclicos, en los modelos de volumen cerrado, como el propuesto en este trabajo, no se consideran ni el proceso de renovación de la carga ni las modificaciones en la operación del motor debido al funcionamiento cíclico del mismo. Es decir, este tipo de modelos se aplica a la simulación de la operación del motor en modo HCCI durante las fases de compresión, combustión y expansión, sin considerar la operación durante el denominado lazo de bombeo ni realimentación alguna del modelo a partir de resultados obtenidos en el ciclo precedente.

Con respecto a los modelos de volumen cerrado es importante exponer que existen diversos enfoques posibles en función del planteamiento considerado

en su desarrollo (unizona, multizona, fluido-dinámicos y estadísticos), los cuales son expuestos someramente en los siguientes subapartados.

2.6.1. Modelos unizona

Los modelos unizona se basan en la ecuación del primer principio de la termodinámica para un volumen variable y cerrado (normalmente se desprecian las pérdidas de masa a través de los segmentos) con pérdidas de calor a través de las paredes de la cámara de combustión (Figura 2. 5). Dado que se considera un único volumen completamente homogéneo, tanto la temperatura como la concentración química de especies son uniformes. Este tipo de modelos son adecuados cuando el objetivo es minimizar el tiempo de computación, ya que constituyen la alternativa más sencilla.

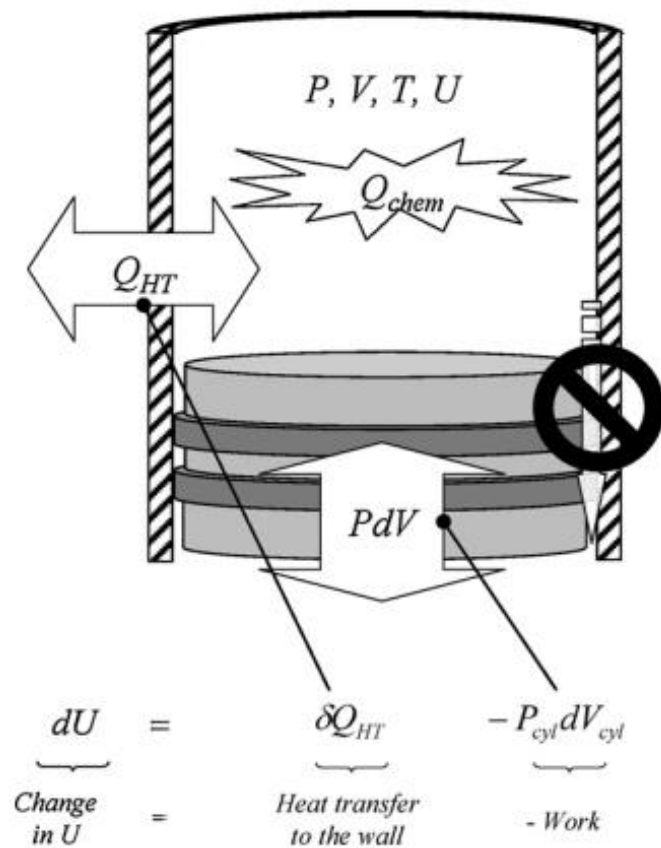


Figura 2. 5: Esquema de un modelo unizona, incluyendo el planteamiento del primer principio de la termodinámica [93].

Debido a las simplificaciones asociadas a los modelos unizona, éstos tienden a sobreestimar los resultados de la tasa de liberación de calor, lo que se traduce en valores ficticiamente altos para la tasa de variación de la presión y para la presión máxima. Además, los modelos unizona son incapaces de describir los procesos de formación de las emisiones de hidrocarburos y de monóxido de carbono, ya que la mezcla en la cámara de combustión se considera uniforme y sin heterogeneidades, lo que no permite caracterizar los procesos de formación de estas especies debido a su alta dependencia de la estratificación de la carga [94] [95].

A pesar de las limitaciones anteriormente mencionadas, los modelos unizona pueden ser empleados para estimar el punto de ignición y las emisiones de NO_x, debido a que ambos fenómenos están controlados principalmente por la temperatura de las zonas calientes de la cámara de combustión, la cual es muy similar a la temperatura media de la mezcla. Asimismo, los modelos unizona también pueden ser usados para valorar la importancia relativa de las distintas reacciones químicas y las especies dominantes en el mecanismo cinético-químico empleado. Es por este motivo que los modelos unizona han sido usados para el estudio de los resultados derivados de la mezcla de distintos biocombustibles o del efecto de la incorporación de determinados aditivos a un combustible concreto, así como el efecto de distintas configuraciones del motor.

2.6.2. Modelos multizona

Las previamente mencionadas limitaciones de los modelos unizona pueden ser superadas parcialmente mediante el uso de los llamados modelos multizona, los cuales surgen de un esfuerzo por describir los fenómenos que tienen lugar en el interior de la cámara de combustión de una forma más detallada que los modelos unizona previamente descritos.

A grandes rasgos, se puede establecer que mediante un modelo multizona se divide la cámara de combustión en distintas zonas, cada una de las cuales se caracteriza por poseer una temperatura y una composición uniformes, siendo la presión idéntica en todas las zonas consideradas (Figura 2. 6). Las distintas

zonas en las que se divide la cámara de combustión están ligadas por una serie de leyes físicas que condicionan la evolución temporal del estado termodinámico. Los distintos modelos multizona disponibles en la literatura se diferencian en el número de zonas en los que se divide la cámara de combustión, la distribución de estas zonas y, finalmente, las interacciones existentes entre ellas. De esta forma, el concepto en el que se basan los modelos multizona permite la consideración de gradientes tanto en el campo de temperaturas como en el de composición química en el interior de la cámara de combustión. Resulta intuitivo que este planteamiento es más semejante a la situación real que se produce en el interior de la cámara de un motor con combustión en modo HCCI, por lo que los resultados derivados de éstos presumiblemente tendrán un mayor grado de exactitud que los obtenidos mediante el modelado unizona.

Gracias a que los modelos multizona poseen la ventaja de permitir la caracterización de zonas no homogéneas en los campos de temperatura y de composición química en el interior de la cámara de combustión, el estudio de la evolución de la combustión en modo HCCI es factible, permitiendo una mejor estimación de la duración de la combustión, la tasa de variación de la presión, la presión máxima y de las emisiones resultantes. Sin embargo, es preciso destacar que los resultados obtenidos con los modelos multizona dependen fuertemente del grado de complejidad de los submodelos que los componen, destacando especialmente la posibilidad o no de transferencia de masa y/o calor entre zonas contiguas.

A pesar de las ventajas anteriormente referidas, los modelos multizona presentan el principal inconveniente de no permitir el estudio de los efectos de la turbulencia causada por el movimiento de la carga en el interior de la cámara de combustión, lo cual resta definición local a los resultados obtenidos. Esta limitación es significativa cuando se pretende simular condiciones en las que la formación de la mezcla se consigue mediante la inyección directa del combustible en la cámara de combustión. Asimismo, es necesario exponer que este tipo de modelos requiere un proceso de calibración y una cantidad de recursos mayor que la necesaria para las simulaciones unizona, lo que se traduce en unos tiempos de computación superiores.

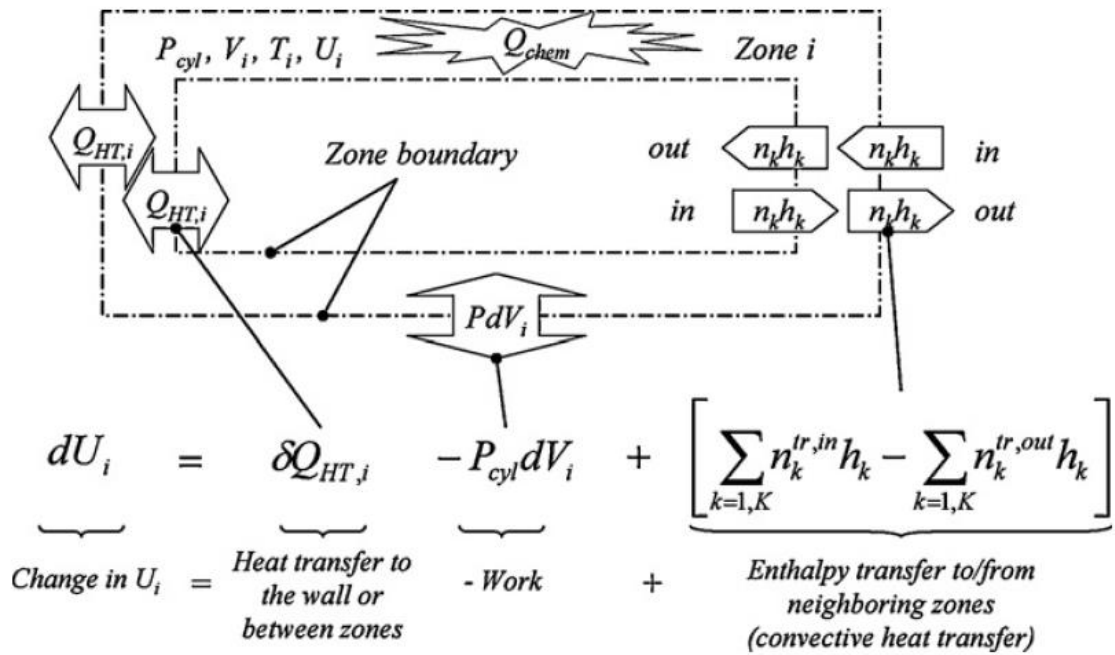


Figura 2. 6: Esquema de un modelo multizona, incluyendo el planteamiento del primer principio de la termodinámica [93].

En materia de modelado multizona cabe destacar los trabajos realizados por Fiveland et al. [96], orientados a la simulación del comportamiento de los motores con combustión en modo HCCI mediante la aplicación de un modelo de dos zonas. El citado trabajo se basa en la división de la cámara de combustión en núcleo adiabático y en una zona exterior asociada a la capa límite, entre las que el intercambio de masa estaba permitido (Figura 2. 7). El citado trabajo destaca también por la aplicación de un interesante modelo de transferencia de calor a través de la capa límite. Noda et al. [97] profundizaron en el campo de los modelos multizona mediante el estudio de las no homogeneidades presentes en la combustión en modo HCCI. El modelo desarrollado se caracteriza por no dotar a las zonas consideradas de una ubicación espacial y por no permitir las transferencias de masa y calor entre ellas. A pesar de estas limitaciones se analizaron satisfactoriamente las implicaciones sobre la combustión en modo HCCI de la existencia en el interior de la cámara de combustión de regiones con diferente composición química y temperatura. También es procedente destacar la aportación realizada por Amano et al. [98], donde se analiza de nuevo la influencia de las zonas no homogéneas de la cámara de combustión, pero dotando de ubicación física a

las distintas zonas y permitiendo la transferencia de calor entre ellas, aunque la transferencia de masa entre zonas no se considera. Otro modelo multizona digno de mención es el desarrollado por Easley et al. [99], en el que se contempla la existencia de un núcleo adiabático de masa constante, un núcleo exterior que puede intercambiar masa con una tercera zona denominada capa límite, cuyo espesor se considera constante. Para concluir con la revisión a los principales modelos multizona, cabe destacar la aportación de Komninos et al. [100], así como su influencia sobre el modelo objeto del presente trabajo, quienes desarrollaron un modelo fenomenológico orientado a la caracterización de los procesos físicos que acontecen en el interior de la cámara durante la combustión en modo HCCI. En relación a este trabajo cabe destacar el modelado de las regiones intersticiales formadas entre los segmentos, el pistón y el cilindro.

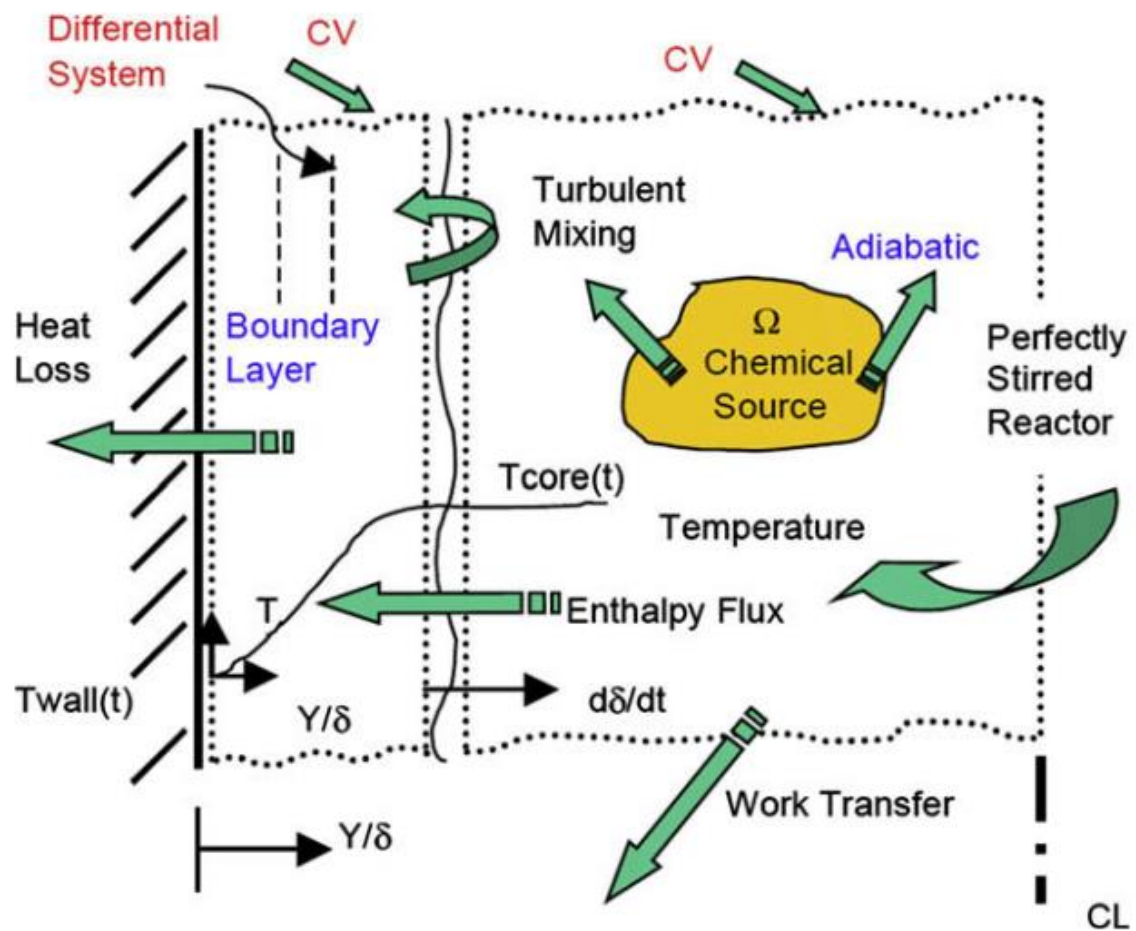


Figura 2. 7: Modelo multizona empleado por Fiveland et al. [96].

2.6.3. Modelos basados en códigos fluido-dinámicos

En comparación con los modelos multizona, los modelos CFD permiten describir en detalle el proceso de renovación de la carga y los efectos de la turbulencia, proporcionando una mayor resolución espacial de los campos de temperatura y composición química en la cámara de combustión. No obstante, los inconvenientes asociados a los modelos basados en CFD derivan del mayor tiempo computacional requerido para la resolución de las simulaciones.

Sin embargo, en un esfuerzo por equilibrar la ventaja asociada a la caracterización de la estratificación en la cámara de combustión frente al inconveniente derivado del incremento del tiempo de resolución, diversos autores han propuesto modelos en los que los CFD se usan hasta el inicio de la combustión, empleándose a partir de este instante modelos multizona para reproducir el desarrollo de la combustión. En este campo cabe destacar la significativa aportación de Aceves et al. [101], quienes desarrollaron un modelo basado en la combinación de un CFD (KIVA-3) y un código para la resolución de la cinética-química asociada al problema (HCT). Basándose en este modelo, los autores concluyeron que en la combustión en modo HCCI no hay propagación de un frente de llama y que los fenómenos de mezcla durante la combustión no afectan al proceso. A pesar de ello es preciso aclarar que los fenómenos de mezcla durante la carrera de compresión sí afectan a la ignición, ya que modifican el perfil de temperaturas existente en el interior de la cámara de combustión. Dado que el modelo anteriormente mencionado no cubre el proceso de renovación de la carga, posteriormente Babajimopoulos et al. [102] extendieron el modelo con la finalidad de analizar los procesos de admisión y escape, destacando el análisis realizado en relación al uso de la distribución variable como herramienta de control. Finalmente, Flowers et al. [103] propusieron otra modificación del modelo inicial de Aceves, centrándose en la influencia ejercida por el proceso de mezcla del combustible y las pérdidas de calor sobre las emisiones de monóxido de carbono y de hidrocarburos sin quemar.

Otra medida encaminada a soslayar el mencionado consumo de recursos asociado a la simulación mediante modelos basados en CFD consiste en el

empleo de mecanismos cinético-químicos reducidos, ya que la experiencia ha demostrado que no es necesario conocer la evolución de la totalidad de las especies químicas involucradas en la combustión. Por el contrario, conociendo el comportamiento de determinadas especies críticas se puede llegar a reproducir la combustión en modo HCCI mediante CFD con suficiente precisión [6]. Por este motivo diferentes autores se han centrado en el acoplamiento de un modelo CFD con mecanismos cinéticos reducidos. A este respecto cabe destacar los trabajos realizados por Kong et al. [104], Su et al. [105] para el n-heptano, Jia et al. [106] para el iso-octano y Ohashi et al. [107] para los combustibles primarios de referencia.

Como conclusión cabría destacar que los modelos CFD son los más sofisticados de que se dispone, proporcionando la descripción más detallada sobre los fenómenos de transporte y sobre el estado termodinámico de cada celda en la cámara de combustión. Sin embargo, el mencionado nivel de sofisticación no está compensado, en la mayoría de aplicaciones, por los recursos requeridos desde el punto de vista computacional.

2.6.4. Modelos de base estadística

Finalmente, con respecto a los modelos basados en funciones de densidad de probabilidad, también denominados modelos estocásticos, es necesario destacar el modelo elaborado por Kraft et al. [108], el cual permite la consideración de gradientes de diversa naturaleza, los cuales condicionan las interacciones existentes entre el núcleo de la cámara de combustión y la capa límite, a la vez que proporciona resultados precisos con un coste computacional razonable.

2.7. Control aplicado a la combustión en modo HCCI

Según se ha indicado en las secciones precedentes, el control de la combustión en modo HCCI se puede llevar a cabo mediante distintas estrategias, como por ejemplo la recirculación de gases de escape [109], la modificación de la temperatura de la carga [110], los sistemas de distribución variable [111] o los sistemas de alimentación de combustible [112]. Sin embargo, se requieren controladores adecuados para la gobernar la actuación automática de los sistemas anteriormente referidos.

2.7.1. Desarrollo de controladores

En relación a los controladores, cabe destacar que éstos se suelen clasificar en dos categorías. El primer grupo está constituido por los controladores empíricos, no basados en modelos, sino en resultados obtenidos experimentalmente y plasmados en mapas de operación estacionarios. Un ejemplo de este tipo de controladores ha sido desarrollado por Agrell et al. [113]. Por el contrario, el segundo grupo está constituido por aquellos controladores regidos por modelos basados en principios termodinámicos, análogos al modelo multizona objeto del presente trabajo. Es preciso resaltar que los controladores basados en modelos físicos son más polivalentes, ya que pueden ser aplicados a una determinada gama de motores mediante la modificación de los parámetros característicos oportunos [114].

Independientemente del grupo al que pertenezca un controlador, cabe destacar que, dado que la combustión en modo HCCI es significativamente sensible a parámetros tales como las condiciones de la carga fresca, las características del combustible o simplemente las fluctuaciones entre cilindros de un mismo motor, el control de la combustión en modo HCCI en condiciones distintas a las de laboratorio requiere la actuación sobre cada cilindro de forma independiente al resto, tanto a nivel de instrumentación, como de actuadores [115]. A este

respecto cabe destacar que las tecnologías de control aplicadas actualmente en la producción de los MCIAs no tienen esta capacidad [116], limitando la implantación del concepto de combustión en modo HCCI. Entre las limitaciones de los sistemas actuales de control en los MCIAs cabe destacar que éstos se basan en variables promediadas, medidas en los colectores de admisión y de escape, lo que imposibilita el control particularizado de los distintos cilindros. Como ejemplo de variable promediada cabe destacar el caudal de aire en los MEP, el cual no se mide de forma individualizada para cada cilindro. Asimismo, los controladores actuales, en el caso de poseer una configuración de lazo cerrado, aplican el resultado de las mediciones realizadas una vez que el ciclo que las genera ha terminado, por lo que, además del retraso intrínseco de los sistemas de medida y control, se debe tener en cuenta el retraso inducido por el propio proceso, el cual imposibilita el control del motor hasta que el ciclo ha terminado y se ha producido la carrera de escape. Como ejemplo de este retraso cabe citar la medida de oxígeno en los gases de escape, la cual se produce una vez el ciclo ha terminado, lo que impide que se pueda actuar sobre éste de manera anticipativa. De esta forma, la combinación de señales promediadas y retrasadas, aunque válidas para el control de los motores con combustiones convencionales, conlleva dificultades en relación al control de los motores con combustión en modo HCCI, especialmente cuando éstos operan en condiciones transitorias [116].

Tras la exposición realizada en el párrafo anterior, se concluye que los controladores aplicados a motores con combustión en modo HCCI deben estar orientados a la predicción de las condiciones de la carga de cada cilindro con antelación a que ésta se produzca. Este objetivo impone además que estos controladores en tiempo real sean rápidos, simples y estables ante perturbaciones.

Respecto a la comparativa entre los controladores basados en mapas de operación y los controladores basados en modelos termodinámicos, cabe destacar que distintas experiencias ponen de manifiesto que ambos son capaces de controlar la combustión en modo HCCI con un error prácticamente nulo en condiciones estacionarias, mientras que durante transitorios, si bien el tiempo de respuesta de ambas tipologías es del orden de cinco ciclos del motor,

los controladores basados en modelos presentan un mejor comportamiento [117].

En relación a la aplicación de controladores basados en modelos termodinámicos en motores con combustión en modo HCCI cabe destacar la aportación de Latí et al. [116], quienes demostraron experimentalmente la viabilidad de los modelos detallados en los controladores en tiempo real, logrando que la respuesta del controlador (Figura 2. 8), soportado por una placa dSPACE DS1005 y un ordenador a 480 MHz similar a los empleados en los MCIA de serie, fuera 2 veces más rápida que el proceso real. Asimismo, los mencionados autores ponen de manifiesto que, si bien la precisión del modelo es importante, ésta no tiene que ser excesiva, ya que existen otros factores limitantes como son los derivados de los actuadores o del propio diseño del motor. Para terminar, cabe destacar que en el trabajo referido los autores concluyen que, en el caso de la alimentación con gasolina, es más ventajoso controlar la cantidad de combustible a través de la inyección que el flujo de aire.

Análogamente a los autores anteriormente referidos, Bidarvatan et al. [114] también han propuesto controladores basados en modelos con tiempos de computación aplicables al control en tiempo real, concretamente de 1 ms con un procesador a 2,67 GHz, el cual es superior al estándar empleado actualmente en los MCIA. Otros autores [115] han empleado controladores similares a los anteriormente referidos, concluyendo que la actuación sobre la inyección de combustible genera un control más fino que la actuación sobre variables como por ejemplo el sistema de distribución.

A pesar de las experiencias anteriormente referidas, las cuales constituyen actualmente la punta de lanza en el campo de la investigación y el desarrollo de los motores con combustión en modo HCCI, la madurez de estos sistemas de control está aún lejos del estándar requerido para su aplicación extensiva en el sector de los MCIA, reduciéndose su aplicación al ámbito de la investigación.

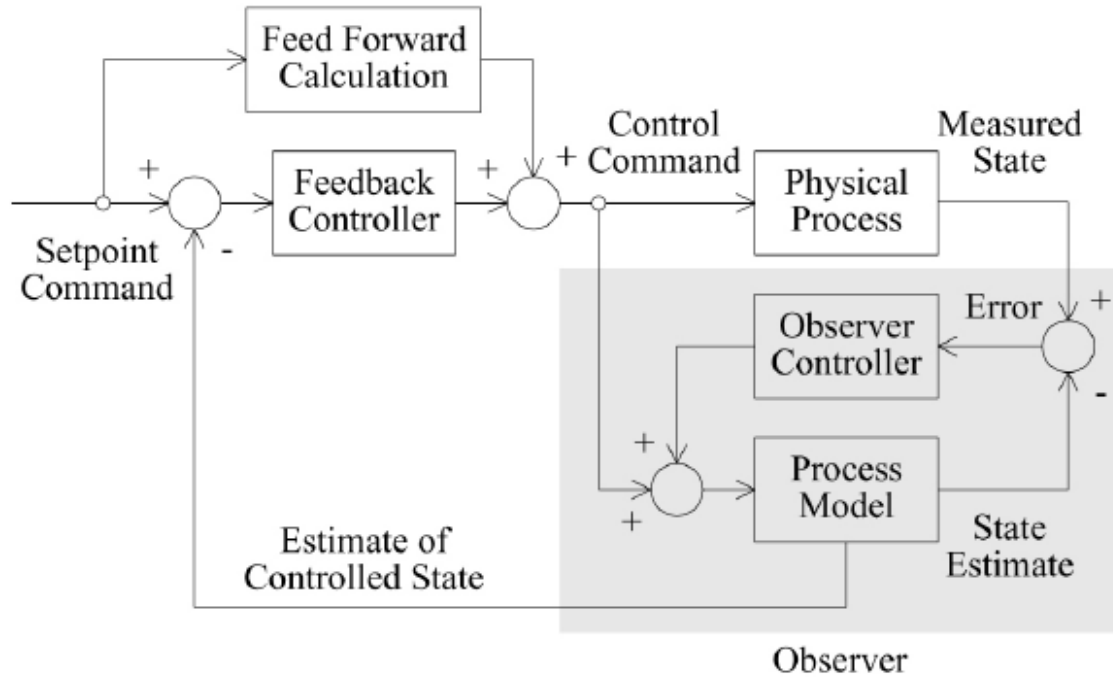


Figura 2. 8: Arquitectura típica de un controlador basado en un modelo termodinámico [116].

2.7.2. Transiciones entre modos de combustión

La previamente referida limitación del rango de operación de los motores con combustión en modo HCCI a cargas altas se hace más crítica dada la tendencia actual en el sector de los MCIAs, consistente por un lado en la reducción del tamaño mediante el uso de sobrealimentación y, por el otro, la hibridación con motores eléctricos, ya que ambas medidas reducen el funcionamiento del motor a bajas cargas. Una respuesta ante esta demanda consiste en motores capaces de combinar la operación con combustión en modo HCCI con los modos de combustión convencionales, a saber MEP y MEC. Por este motivo otro campo de investigación en relación al control de la combustión en modo HCCI consiste en el desarrollo de algoritmos que optimicen la transición entre modos de operación.

Es preciso destacar que los procesos de transición entre modos de operación conllevan, en ausencia de algoritmos adecuados, cambios drásticos en los niveles de emisiones, ruidos e, incluso, de la potencia generada [118].

Teniendo en cuenta esta situación, los algoritmos empleados para este propósito deben posibilitar una transición suave entre modos de combustión, sin discontinuidades y garantizando la estabilidad y eficiencia de ambos modos de combustión.

En relación a los algoritmos para la transición entre distintos modos de combustión cabe resaltar el trabajo desarrollado por Asad et al. [119] quienes aplicaron satisfactoriamente un algoritmo de transición entre la operación en modo encendido provocado y HCCI con inyección múltiple y concluyeron que los ordenadores empleados actualmente en los MCI poseen capacidad suficiente para la implementación de este tipo de algoritmos de transición en tiempo inferior al equivalente a diez ciclos. En la Figura 2. 9 se muestra el resultado correspondiente a una de las pruebas llevadas a cabo por los autores, en la que puede observarse el comportamiento de las curvas de presión ante un evento de transición entre modos de operación. De esta forma tras identificar la necesidad de proceder al cambio del modo de operación, se pasa de la operación en modo encendido provocado, marcado con "A", a un modo HCCI con inyección múltiple, marcado con "B". Respecto a la mencionada figura cabe destacar la estabilidad del algoritmo propuesto para el control de la transición, la cual se refleja en la ausencia de perturbaciones existentes en la zona denotada por "B".

Otra referencia destacable en este campo es la elaborada por Han et al. [118], quienes actuaron sobre la fracción de gases de escape recirculados, el punto de inyección, la duración de la inyección y el número de inyecciones para generar un algoritmo de transición entre el modo diésel y el modo HCCI.

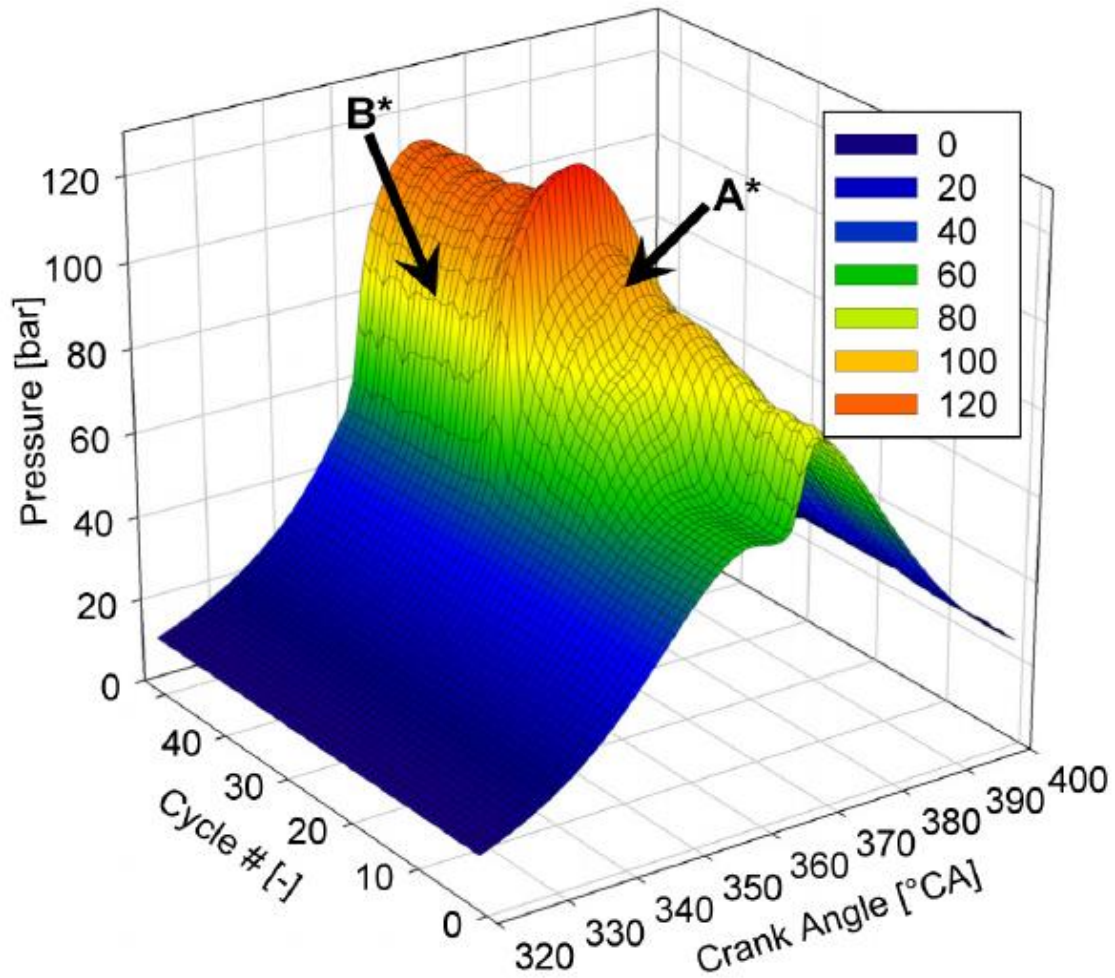


Figura 2. 9: Curvas de presión durante un ensayo de transición entre modos de operación [119].

2.8. Biocombustibles en la combustión en modo HCCI

El objeto de la siguiente sección es proporcionar una perspectiva básica sobre la investigación realizada en el campo de la combustión en modo HCCI con biocombustibles. Queda excluida del propósito de este apartado la realización de una revisión detallada de los fundamentos de los biocombustibles, de sus características ni de sus procesos de obtención.

2.8.1. Definiciones básicas

Antes de profundizar en detalles conviene aclarar que el término biocombustible se refiere a cualquier combustible, líquido o gaseoso, producido a partir de biomasa, tales como materiales lignocelulósicos, azúcares y grasa vegetal o animal.

Adicionalmente, dada su relevancia en el marco del presente trabajo, también es preciso definir en detalle el concepto de biodiésel, el cual corresponde a un biocombustible equivalente al gasoil, compuesto químicamente por ésteres monoalquílicos de ácidos grasos de cadena larga, con procedencia vegetal o animal. En la actualidad el biodiésel se produce principalmente a partir de aceite de soja, colza y palma, aunque también existen otras fuentes como el aceite de girasol, el sebo bovino u ovino e, incluso, el aceite doméstico reciclado. Las especificaciones técnicas que debe cumplir el biodiésel están reguladas por el estándar ASTM D 6751 en EEUU y por el estándar EN 14214 en Europa, el cual establece para el biodiésel un número de cetano mínimo de 51. Mediante el proceso de transesterificación se produce biodiésel y glicerina a partir de una grasa específica y metanol o etanol, si bien el primero es preferible dado su menor coste. Asimismo, la transesterificación requiere de la presencia de un catalizador, empleándose típicamente hidróxido de sodio o potasio. La transesterificación implica la disminución de la viscosidad del biodiésel respecto a la de los ácidos grasos iniciales, debido a la conversión de los compuestos de cadena larga y ramificada en moléculas de cadena más corta y simple [120].

2.8.2. Introducción a los biocombustibles

Existe un amplio consenso en atribuir a los combustibles de origen fósil dos desventajas significativas. La primera de ellas reside en su limitada disponibilidad, lo que conjugado con su naturaleza no renovable crea incertidumbres sobre la sostenibilidad del modelo adoptado en los sectores de la generación de potencia y el transporte. Este hecho deriva en la dependencia energética de multitud de países, con el riesgo estratégico que ello supone

desde el punto de vista de la estabilidad. La segunda desventaja radica en los negativos efectos para el medioambiente emanados de la combustión de los combustibles de origen fósil, principalmente debido al aumento de las emisiones netas de dióxido de carbono a la atmósfera. El mencionado aumento de las emisiones de dióxido de carbono se debe a que éstas no pueden ser revertidas a corto plazo por ningún mecanismo natural. Por este motivo, el uso de combustibles fósiles no puede ser considerado como neutro desde el punto de vista medioambiental. Frente a los mencionados efectos adversos de los combustibles de origen fósil, los biocombustibles se caracterizan por su naturaleza renovable y por la capacidad de reducir las emisiones netas de dióxido de carbono asociadas a la acción humana. Estas beneficiosas características de los biocombustibles derivan de su origen basado en la biomasa. Por un lado, la biomasa es un recurso totalmente renovable, lo que hace que la disponibilidad de los biocombustibles sea ilimitada. Respecto a los efectos medioambientales, el ciclo constituido por la biomasa y los biocombustibles se considera neutro desde el punto de vista de las emisiones de dióxido de carbono. En la Figura 2. 10 se muestra una comparativa entre los sistemas energéticos basados en combustibles de origen fósil y en biocombustibles, donde se pone de manifiesto la diferencia marcada por la capacidad de la biomasa de fijar emisiones de dióxido de carbono.

Los denominados biocombustibles de primera generación están basados en materias primas alimenticias. En el caso del biodiésel de primera generación las materias primas empleadas son plantas oleaginosas, como por ejemplo la colza, el ricino, la soja y la palma. Para la producción de bioetanol de primera generación se emplea la caña de azúcar, la remolacha, trigo, maíz y la cebada. El hecho de que los biocombustibles de primera generación se basen en materias primas alimenticias ha supuesto un significativo inconveniente debido a las interferencias causadas en los mercados alimenticios desde el punto de vista del precio y la disponibilidad de recursos. Este hecho resulta especialmente crítico en los países con menor renta disponible, donde la desnutrición representa un papel crítico.

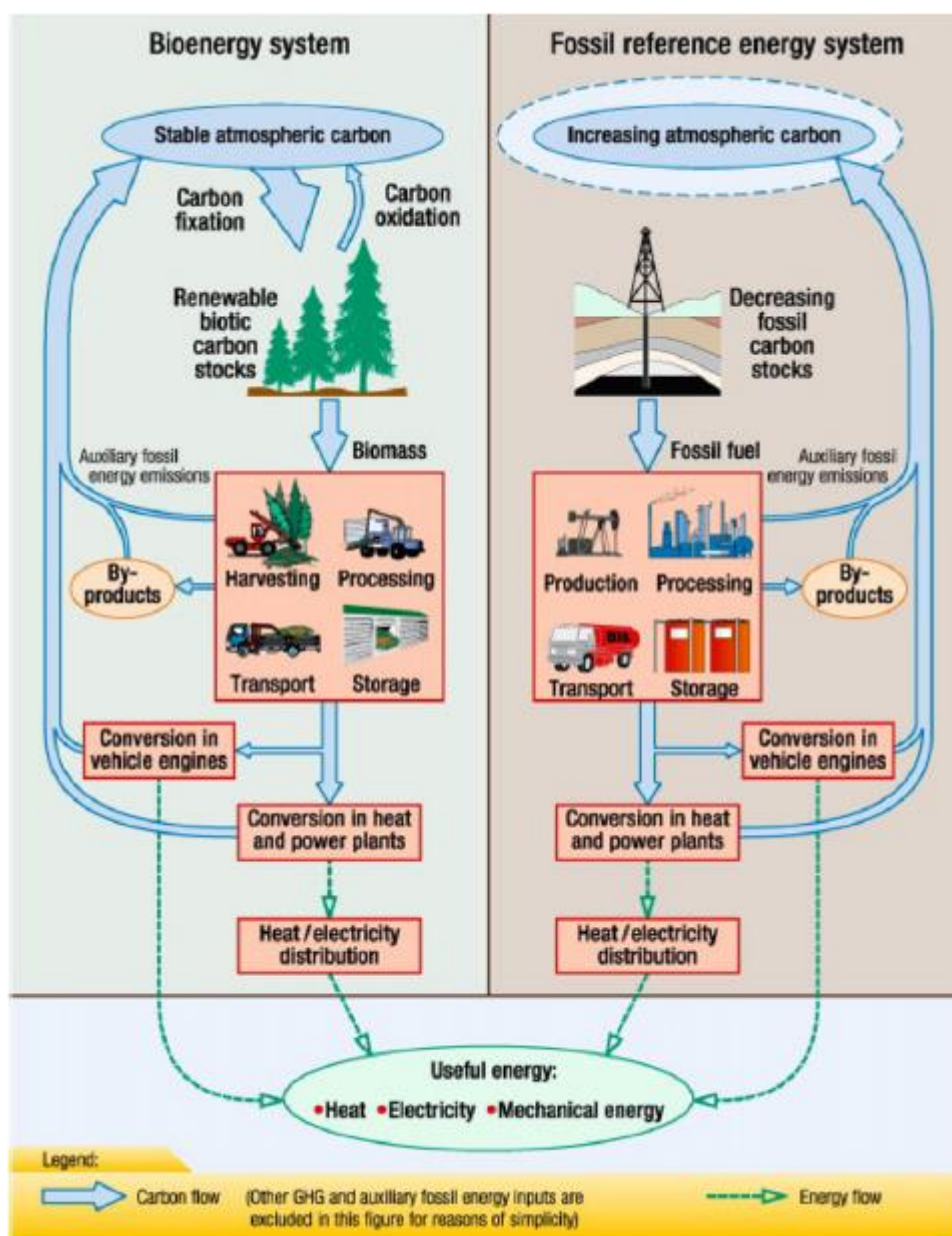


Figura 2. 10: Comparativa entre los sistemas energéticos basados en combustibles de origen fósil y en biocombustibles [121].

A diferencia de los biocombustibles de primera generación, la segunda generación está basada únicamente en materiales derivados de plantas lignocelulósicas, los cuales se componen principalmente de polisacáridos. Los materiales lignocelulósicos no constituyen materias primas alimenticias, por lo que no se produce la interacción de factores procedentes del sector energético en el mercado alimenticio. En el caso del biodiésel de segunda generación la producción se basa en la producción de hidrocarburos líquidos mediante

gasificación. La producción de bioetanol de segunda generación se basa en hidrólisis y fermentación.

En el marco de la Unión Europea, el consumo de biocombustibles se localiza de forma casi exclusiva en el sector del transporte rodado, cuyo consumo de biocombustibles ha aumentado relevantemente durante la última década, pasando del 0,5% en 2003 hasta el 4,6% en 2013 [122]. Esta tendencia al alza pone de manifiesto la importancia de los biocombustibles y justifica el esfuerzo investigador en relación a su uso en motores de combustión interna alternativos.

2.8.3. Análisis experimental de los biocombustibles en MCI

En el campo de los motores de combustión convencional destacan los trabajos realizados con biogás, bioDME y bioetanol en motores de encendido por chispa [123], [124] y con n-butanol, bioetanol, biodiésel y bioDME en motores de encendido por compresión [125], [126], [127], [128], [129], [130], [131], [132], [133].

Las distintas propiedades físico-químicas de los biocombustibles poseen un atractivo potencial para ser usados en los motores con combustión en modo HCCI, cuya combustión depende fuertemente de aspectos cinético-químicos y, por lo tanto, del biocombustible empleado. El mencionado atractivo reside en el uso de biocombustibles con distinto número de cetano, ya sea en su forma pura o incluso mediante mezclas, como mecanismo de control del punto de ignición a diferentes regímenes de operación, lo que constituye una de las principales demandas actuales de los motores con combustión en modo HCCI. De esta forma, los biocombustibles con un elevado número de cetano, como por ejemplo el DME, pueden ser usados como favorecedores de ignición, mientras que los biocombustibles con un elevado número de octano, por ejemplo el etanol y el metanol, pueden ser empleados como supresores de la ignición. Existen otras referencias destacables en relación al uso de biocombustibles en motores con combustión en modo HCCI, destacando el etanol [59], [134], [135], [136], [137], los éteres [138], [139], [140], [141], [142] y el biodiésel [22].

Es destacable que algunos de los biocombustibles mencionados con anterioridad, como por ejemplo el bioDME, son capaces de reducir la formación de partículas. Esta característica se debe a la estructura química de estos biocombustibles, ya que la formación de partículas se reduce con el contenido en oxígeno del biocombustible y aumenta con el número de enlaces carbono-carbono [143].

2.8.4. Análisis numérico de los biocombustibles en MCI

A diferencia de los estudios experimentales, los biocombustibles están siendo analizados desde el punto de vista numérico desde hace relativamente poco tiempo, existiendo un amplio campo de investigación pendiente en relación a la cinética de la combustión, a la formación de emisiones y a los fenómenos de transporte [93]. A pesar de la relativa escasez de datos, la información disponible actualmente en relación al uso de biocombustibles en motores con combustión en modo HCCI posee un alto valor, ya que sirven de referencia a éste y otros estudios futuros.

Una pieza fundamental del análisis numérico de los biocombustibles lo constituye el desarrollo de mecanismos cinéticos que permitan la simulación de la combustión en el interior del cilindro. A este respecto cabe destacar las carencias actuales en relación a la identificación de los mecanismos primarios y secundarios de reacción, así como a la reducción del número de ecuaciones involucradas en el modelo cinético resultante. El número de especies químicas y de reacciones englobadas en el mecanismo provoca que el tiempo computacional requerido aumente drásticamente, siendo especialmente significativo en el caso de los modelos CFD, que resultan penalizados con mayor intensidad que otros modelos como los multizona debido al incremento de la complejidad en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes del sistema. Kominos et al. realizaron un compendio de los diferentes mecanismos cinéticos disponibles para biocombustibles [93]. En resumen, el estudio de los mecanismos cinéticos de los biocombustibles se ve dificultado por la amplia variedad de sustancias englobadas, los cuales incluyen compuestos orgánicos

tales como alcoholes, éteres y ésteres. Esto supone que los mecanismos cinéticos resultantes para los biocombustibles presenten notables diferencias respecto a los modelos cinéticos de los combustibles primarios de referencia, los cuales son empleados como sustitutivos en las simulaciones de la combustión de la gasolina y el diésel y no contienen átomos de oxígeno en sus moléculas. Asimismo, cabe destacar que la experiencia demuestra que distintos modelos cinéticos no siempre generan los mismos resultados ante idénticas condiciones operativas, ni siquiera para combustibles ampliamente investigados [144]. Es por ello que la elección de un determinado mecanismo cinético debe llevarse a cabo con especial atención a las condiciones operativas en las que ha sido validado. En el caso concreto de la combustión HCCI con biodiésel son preferibles los modelos cinéticos validados con dosados relativamente bajos y altas presiones.

En relación a los modelos unizona de motores con combustión en modo HCCI cabe destacar los trabajos realizados con alcoholes por Ng y Thomson [145], Martínez-Frías et al. [146], Szybist [147] y Yang et al. [148]. Los éteres han sido simulados de forma relevante en motores con combustión en modo HCCI por Yao et al. [149], quienes establecieron la premisa ampliamente aceptada de que las emisiones de monóxido de carbono en los motores con combustión en modo HCCI se originan en regiones con temperaturas relativamente bajas o de mezcla pobre, como los intersticios entre el pistón y el cilindro o la capa límite en la pared de la cámara de combustión, regiones en las que la temperatura es suficientemente alta como para provocar la oxidación parcial del combustible, pero no tanto como para consumir el monóxido de carbono resultante. También destacan los trabajos con éteres desarrollados por Hofmann y Abraham [150], que emplearon un modelo cinético detallado desarrollado por Herbinet et al. [151] para el metil decanoato como sustitutivo del biodiésel. Asimismo, estos autores demostraron que el DME posee un menor retraso de la ignición que el metil decanoato y el n-heptano. Respecto a los modelos HCCI unizona alimentados con biodiésel cabe destacar la aportación de los ya mencionados Hofmann y Abraham y de Brakora y Reitz [152], quienes usaron una mezcla de n-heptano y metil butanoato para simular la combustión del biodiésel con el propósito de investigar la formación de NO_x, concluyendo que el inicio de la

combustión juega un papel crucial en las emisiones de NO_x resultantes. Además de los modelos HCCI unizona alimentados con biocombustibles puros cabe destacar la investigación orientada a los modelos HCCI unizona alimentados con mezclas de los compuestos anteriormente mencionados. Por ejemplo, Szybist et al. [22] emplearon un modelo alimentado con mezclas de n-heptano y metil butanoato como sustitutivos de mezclas diésel y biodiésel. Otros trabajos similares han sido desarrollados por Saisirirat et al. [153], Mack et al. [154], Yao et al. [155], Ogawa et al. [156] y Yamada et al. [157].

Dentro de los modelos HCCI multizona para biocombustibles se dispone de referencias tanto de modelos multizona estadísticos, en los que determinadas propiedades se definen mediante funciones de densidad de probabilidad [158]; como de modelos multizona fenomenológicos, que no contemplan estas funciones. El modelo objeto del presente trabajo pertenece a este último subgrupo. Entre los ejemplos de modelos HCCI multizona cabe destacar el trabajo de Komino et al. con el etanol [159], determinando que la temperatura inicial y la relación de compresión son los efectos dominantes sobre el inicio de la combustión y la tasa de variación de la presión, aunque la velocidad de giro del motor también afecta debido a la modificación del tiempo disponible para el desarrollo de las distintas reacciones químicas involucradas. Asimismo, también se identificó el aumento significativo de las emisiones de NO_x como consecuencia del aumento del dosado y se localizó la formación de monóxido de carbono en las zonas cercanas a las paredes de la cámara de combustión, lo que justifica la mayor resolución usada habitualmente en esas regiones de los modelos HCCI multizona. Finalmente, los autores consideraron que las emisiones de monóxido de carbono se predecían correctamente, mientras que las emisiones de hidrocarburos resultaban sobreestimadas. En el trabajo desarrollado por Sjoberg y Dec [160] se simuló la combustión en modo HCCI del etanol usando un modelo de 11 zonas adiabáticas con la finalidad de analizar el efecto del EGR. Aunque los efectos del EGR sobre combustibles como el isooctano son más pronunciados, el trabajo anteriormente referido concluyó en el escaso impacto del EGR sobre el inicio de la combustión en el caso del etanol. Para concluir con el repaso a los modelos multizona aplicados a experiencias con biocombustibles cabe destacar el trabajo de

Visakhamoorthy et al. [161], quienes simularon el comportamiento de un motor diésel convencional modificado para trabajar con biogás.

Los modelos CFD se suelen subdividir en modelos de inyección directa y en modelos de premezcla, exponiéndose en los párrafos siguientes referencias de ambas tipologías en relación a los biocombustibles.

Dentro de los modelos CFD de inyección directa con biocombustibles cabe destacar la aportación de Kim et al. [162], que estudiaron la influencia del sistema de inyección en la combustión en modo HCCI del DME. Entre las conclusiones obtenidas por los autores cabe destacar que, para inyecciones tempranas, la variación del ángulo de dispersión de la inyección tiene una fuerte incidencia sobre la presión máxima y la tasa de liberación de calor. Concretamente, para inyecciones con ángulos de dispersión amplios tanto la presión máxima como la tasa de liberación de calor disminuyen, dado que parte del combustible inyectado alcanza regiones relativamente frías cercanas a las paredes. Este efecto es menos pronunciado si la inyección se realiza más tarde, ya que la mayor parte del combustible permanece en la cavidad del pistón. Asimismo, cabe destacar que a medida que la inyección se acerca al PMS se produce la transición desde una combustión parcialmente homogénea hasta una combustión difusiva, aumentando las emisiones de NO_x debido al aumento de no homogeneidades. Por otro lado, en el trabajo desarrollado por Chen et al. [163] con este tipo de modelos se puso de manifiesto que el aumento de la presión de inyección supone una disminución de la duración de la combustión, a la vez que un aumento de parámetros tales como la eficiencia térmica, la temperatura máxima y la concentración de NO_x.

En relación a los modelos CFD de premezcla con biocombustibles se destaca el trabajo de Huang et al. [164] que, mediante el empleo de un mecanismo reducido para el DME, concluyen que la combustión no es homogénea en condiciones de inyección temprana, comenzando las reacciones de alta temperatura en el centro de la cámara de combustión y extendiéndose posteriormente al resto de la cámara. Otros trabajos destacables centrados en los modelos CFD de premezcla también han simulado la combustión en modo HCCI del DME, entre los que cabe destacar los desarrollados por Park [165] y

Kong [166]. Por otro lado, la combustión en modo HCCI del etanol ha sido analizada en modelos CFD de premezcla por autores como Yu et al. [167], Joelsson et al. [168] y Viggiano et al. [169]. Finalmente, existen referencias de modelos CFD de premezcla para otros biocombustibles como el biodiésel [170]. En este último trabajo se discute la no idoneidad del metil butanoato como sustitutivo en las simulaciones de la combustión del biodiésel debido al elevado contenido en oxígeno del primero. Asimismo se concluye que el incremento de la relación biodiésel/diésel para simulaciones con dosado estequiométrico supone el adelanto de la ignición y la disminución del calor total liberado, lo que reduce la temperatura media de la cámara de combustión y, por lo tanto, las emisiones de NO_x. Por el contrario, las emisiones de monóxido de carbono e hidrocarburos aumentan en estas condiciones.

Capítulo 3

Análisis experimental

3.1. Introducción al análisis experimental

Debido al amplio rango cubierto por las condiciones de operación en las que puede funcionar un MCIA, el paso previo al desarrollo de cualquier modelo consiste en caracterizar el comportamiento real del mencionado motor. Por este motivo el presente capítulo está destinado a la exposición de los resultados asociados a los ensayos experimentales realizados en un motor con funcionamiento en modo HCCI, con la finalidad de poner de manifiesto las principales tendencias que deben ser recogidas por el modelo desarrollado en el marco del presente trabajo.

El motor analizado experimentalmente corresponde a un modelo FL1 906 de Deutz-Díter, desarrollado por el GMTS y fabricado en Zafra (España), el cual ha sido sometido a una serie de modificaciones para hacerlo funcionar en modo HCCI. De una manera muy somera, se expone que se trata de un MEC monocilíndrico de cuatro tiempos e inyección directa, con refrigeración por aire y aspiración natural. Para obtener más información al respecto se remite al lector al Anexo A, en el que se exponen de forma detallada no sólo las características del motor empleado, sino también los detalles en relación a los distintos componentes de la instalación de prueba confeccionada para la realización del análisis experimental objeto del presente capítulo.

En las siguientes secciones se exponen los resultados experimentales obtenidos durante el análisis, aplicando una clasificación en dos grupos claramente diferenciados. La mencionada clasificación se basa en las dos configuraciones del motor empleadas para la realización de los ensayos, las

cuales se diferencian tanto en la relación de compresión como en el punto de inyección empleados. Aunque en los correspondientes apartados dedicados a cada configuración se aporta un mayor grado de detalle, a continuación se enuncian las principales características de las dos configuraciones del motor mencionadas con anterioridad:

- En primer lugar se analizará el comportamiento del motor con una configuración denominada “early HCCI”, consistente en una combustión en modo HCCI derivada de una inyección temprana (45° APMS). El mencionado punto de inyección empleado en estos ensayos se encuentra suficientemente adelantado como para garantizar las condiciones de homogeneidad de la mezcla requeridas para la operación en modo HCCI. Asimismo, como se justificará con posterioridad, la relación de compresión empleada en esta configuración es de 15:1, en lugar del valor nominal de 19:1.
- La segunda configuración ensayada también corresponde a una operación en modo HCCI, pero a diferencia de los ensayos early HCCI mencionados en el párrafo anterior, en este caso se realiza la inyección 10° APMS, motivo por el cual esta configuración se denominará en adelante “late HCCI”. Dado que en esta configuración el combustible es inyectado con un retraso mayor que el correspondiente a un MEC convencional, para lograr las condiciones de homogeneidad requeridas para la operación en modo HCCI se requiere tanto un alto grado de turbulencia (elevado swirl) como el empleo de la recirculación de una fracción de los gases de escape. De esta forma se potencian los fenómenos de mezcla de la carga y se retrasa el inicio de la combustión hasta instantes en los que la mezcla presenta un alto grado de homogeneidad. Al igual que para la configuración early HCCI, la relación de compresión empleada para la configuración late HCCI tampoco es la nominal, sino que se estableció un valor de 18,4:1 como se mostrará con posterioridad.

3.2. Análisis de la configuración early HCCI

3.2.1. Antecedentes a la configuración early HCCI

Aunque las características nominales del motor empleado para la realización del análisis experimental se recogen en el mencionado Anexo A, conviene destacar que, con carácter previo a la realización del presente trabajo, se realizaron una serie de modificaciones destinadas a la optimización de las prestaciones del motor en condiciones HCCI [61], las cuales se describen a continuación.

En primer lugar, para lograr las condiciones de homogeneidad requeridas para la combustión en modo HCCI se procedió a la modificación del sistema de inyección original, diseñado para una combustión diésel convencional, con un inicio de la inyección localizado 17° APMS. La alternativa consistente en la inyección del combustible en el colector de admisión no se consideró factible debido a las significativas deposiciones en las paredes que se producirían debido a la baja volatilidad de los combustibles empleados en los ensayos, a lo que habría que añadir los efectos adversos desde el punto de vista de las prestaciones derivados de la necesidad de precalentar el aire admitido en la cámara de combustión. Conviene reiterar que el calentamiento de la corriente de aire admitido en motores con combustión en modo HCCI se realiza habitualmente cuando el combustible presenta un elevado número de octano (por ejemplo: gasolina, metano, hidrógeno) o, incluso, para combustibles con un número de octano más reducido si la relación de compresión del motor no es suficientemente alta. No obstante, el mencionado aumento de la temperatura de admisión conlleva penalizaciones sobre el rendimiento volumétrico. Debido a las limitaciones anteriormente referidas se consideró que una solución factible para la consecución de unas condiciones homogéneas previas a la combustión consiste en el adelantamiento del punto de inyección. De este modo se llevó a cabo un proceso experimental de optimización del punto de inyección considerado, el cual concluyó en un valor final de 45° APMS [171].

Si bien la modificación del punto de inyección anteriormente referida permitía desarrollar una combustión en modo HCII, las prestaciones obtenidas se encontraban lejos de las potencialmente alcanzables para el motor analizado, destacando las penalizaciones ejercidas sobre el consumo específico y sobre el par máximo. Estas penalizaciones derivan del adelanto excesivo del inicio de la combustión, lo que se traduce en el aumento de la presión en cámara durante la carrera de compresión, que a su vez implica una significativa disminución del trabajo neto. Asimismo, también se evidenció un aumento de las emisiones de hidrocarburos, atribuidas fundamentalmente a la deposición de una fracción del combustible inyectado en las paredes de la cámara de combustión. La mencionada ineficacia de la inyección se debe en parte a la imposibilidad de modificar la conicidad de las toberas de inyección con la finalidad de evitar el impacto del combustible sobre las paredes, el cual está asociado al significativo adelanto del punto de inyección respecto a la configuración original del motor.

Como consecuencia de los inconvenientes mencionados en el párrafo anterior, se consideró imprescindible retrasar el inicio de la combustión. Como medida encaminada a este objetivo se dotó al motor de un sistema de recirculación de gases de escape refrigerados, lo cual propició el aumento del par generado dada una determinada cantidad de combustible inyectado. Esta mejora de las prestaciones del motor se debió al retraso del inicio de la combustión, lo que conllevó la reducción del trabajo absorbido durante la carrera de compresión. Los ensayos realizados pusieron de manifiesto la importancia de la recirculación de los gases de escape en relación al inicio de la combustión, así como el hecho de que se consiguen retrasos similares con menores cantidades de gases de escape recirculados a medida que la carga del motor aumenta. Sin embargo, el uso de la recirculación de gases de escape presenta un límite debido al déficit de oxígeno causado, lo que provoca un funcionamiento errático e inestable del motor. Aunque mediante el uso de la recirculación de gases de escape se consiguió una mejora de las prestaciones, éstas eran aún inferiores a las obtenidas en modo MEC convencional, por lo que seguía siendo necesaria la optimización del funcionamiento del motor en modo HCII,

concluyéndose que era necesario retrasar el inicio de la combustión sin causar un significativo déficit de oxígeno en la mezcla.

Para alcanzar el objetivo mencionado en el párrafo anterior se consideró la posibilidad de enfriar el flujo de admisión. Sin embargo, esta alternativa favorecería la deposición de combustible en las paredes de la cámara de combustión, lo que conllevaría una pérdida de eficiencia y un incremento de las emisiones de hidrocarburos, las cuales ya han sido referidas por su significativo valor como consecuencia del adelanto del punto de inyección. Por este motivo se optó finalmente por una reducción de la relación de compresión, medida que posee beneficios análogos a los derivados del enfriamiento de la mezcla. De esta forma, se procedió a reducir la relación de compresión nominal (19:1) hasta un valor de 15:1. Como consecuencia del retraso de la ignición causado por la disminución de la relación de compresión se obtiene un decremento de la cantidad de gases de escape recirculados requeridos para lograr un determinado retraso del inicio de la combustión, lo que minimiza el déficit de oxígeno en la mezcla asociado al efecto de dilución. Gracias a estas medidas se logró que las prestaciones del motor en modo HCCI fueran comparables a las obtenidas durante la operación en modo MEC convencional, con unas emisiones de óxidos de nitrógeno muy inferiores y en ausencia de humos.

3.2.2. Resultados asociados a la configuración early HCCI

Se muestran a continuación los resultados correspondientes a los ensayos realizados con el motor trabajando en condiciones HCCI con la configuración early HCCI (punto de inyección fijo a 45° APMS y relación de compresión de 15:1). La carga de los ensayos analizados varía desde 5 N·m hasta 20 N·m (con incrementos de 5 N·m), mientras que el régimen de giro está comprendido entre 1200 rpm y 2100 rpm (con incrementos de 300 rpm). Dado que los ensayos se llevaron a cabo en el interior de una celda de ensayo con fuerte renovación del aire y durante un periodo de tiempo relativamente corto, no se produjeron variaciones significativas en la temperatura ambiente. Las

condiciones de los ensayos con la configuración early HCCI se resumen en la Tabla 3. 1.

Antes de comenzar con el análisis detallado de las tendencias observadas en los distintos ensayos realizados, es conveniente verificar que los ensayos corresponden verdaderamente a una combustión en modo HCCI. Para ello, además de proceder a la verificación de la reducción de las emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas respecto a los niveles típicos de los MEC, se ha obtenido la tasa de liberación de calor (TLQ) derivada de la aplicación de un modelo unizona a la curva experimental de presión medida en la cámara de combustión. En la Figura 3. 1 puede observarse la evolución temporal de la TLQ correspondiente a un ensayo con configuración early HCCI, con una velocidad de 2100 rpm y un par de 20 N·m (sin recirculación de gases de escape). Se comprueba que la TLQ consta de un único máximo o modo, diferenciándose claramente de la curva obtenida en una combustión en modo MEC convencional, donde se apreciaría una combustión caracterizada por una fase de premezcla seguida de una fase de combustión difusiva (combustión con dos modos). Asimismo, se puede comprobar que la TLQ obtenida a partir de los ensayos experimentales casa perfectamente con la curva teórica esperada para una combustión en modo HCCI, caracterizándose por una rápida combustión de la mezcla homogénea de combustible y aire. Se concluye por tanto que las modificaciones efectuadas al motor con anterioridad han sido plenamente satisfactorias en la consecución de una combustión en modo HCCI. Conviene aclarar que las oscilaciones existentes en la curva de la TLQ se deben a ruido de alta frecuencia asociado a la medida de la presión en cámara y no al proceso de combustión.

Combustible	Velocidad	Carga	EGR
Gasoil (EN 590)	1200 rpm	5 N·m	Variable (mín: 0% máx: 75%)
	1500 rpm	10 N·m	
	1800 rpm	15 N·m	
	2100 rpm	20 N·m	

Tabla 3. 1: Condiciones de los ensayos realizados con la configuración early HCCI (inicio inyección 45° APMS; relación de compresión 15:1).

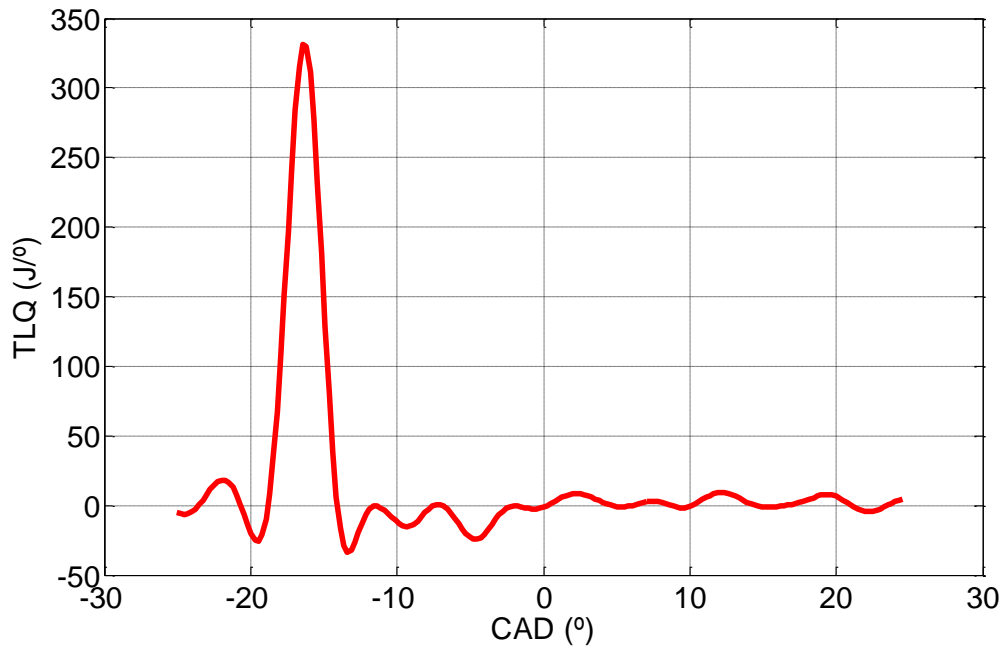


Figura 3. 1: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par de 20 N·m y 0% de EGR.

Tras proceder a la verificación de que los ensayos analizados se corresponden con una combustión en modo HCCI, a continuación se procede al análisis y discusión de las distintas tendencias identificadas en los diferentes ensayos experimentales efectuados.

En primer lugar, la Figura 3. 2 evidencia un retraso del inicio de la combustión a medida que el régimen de giro del motor aumenta, dado un par generado constante. La situación anteriormente referida supone una reducción del trabajo negativo y por lo tanto conlleva una mejoría del consumo específico de combustible. Sin embargo, conviene aclarar que, dadas unas condiciones de carga constantes, el instante de inicio de la combustión permanece prácticamente constante, aunque el ángulo de inicio de la combustión sí experimenta retraso debido a la fuerte dependencia de este parámetro respecto de la velocidad de giro ($\Delta\theta \propto RPM \cdot \Delta t$). En la mencionada Figura 3. 2 se representan las curvas de presión correspondientes a ensayos con un par de 20 N·m y un régimen de giro variable, poniéndose de manifiesto el comportamiento referido.

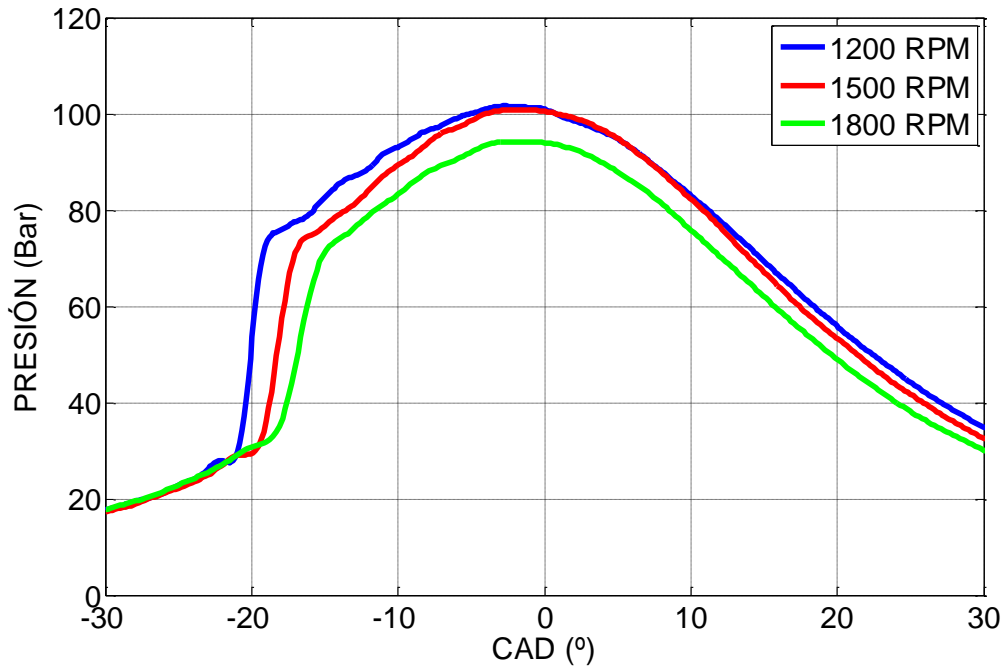


Figura 3. 2: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad variable, par de 20 N·m y 0% de EGR.

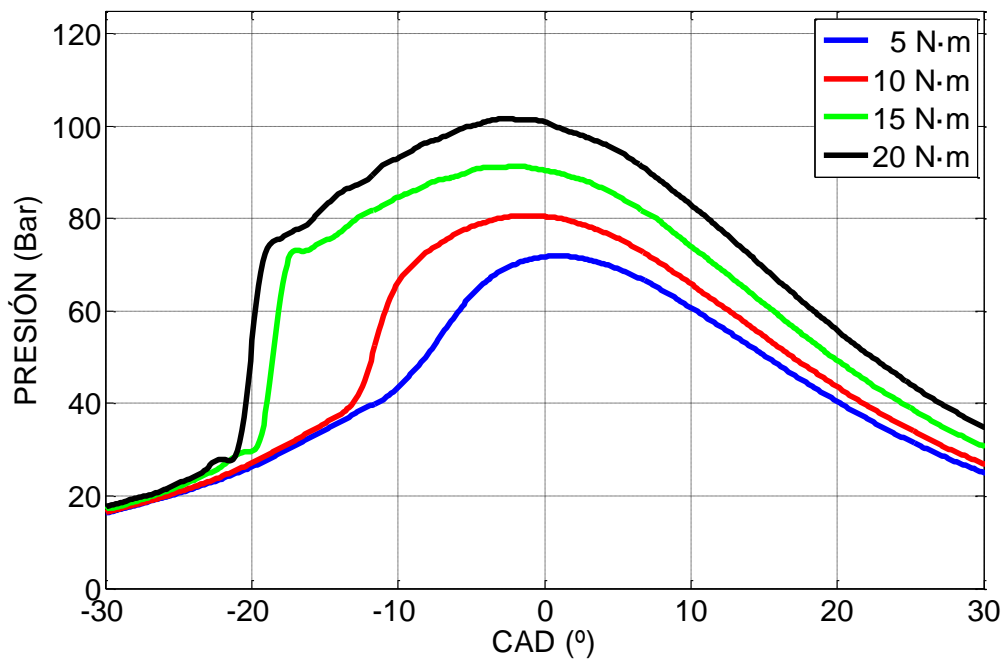


Figura 3. 3: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 1200 rpm, carga variable y 0% de EGR.

Al contrario de lo anteriormente referido en relación a un incremento del régimen de giro, se observa experimentalmente que un aumento de la carga provoca un adelanto del inicio de la combustión, debido principalmente al incremento de temperatura media de las paredes de la cámara de combustión, lo que provoca a su vez que la temperatura de la mezcla sea mayor y por lo tanto se alcancen antes las condiciones requeridas para la ignición de la mezcla. En la Figura 3. 3 se recoge la tendencia anteriormente descrita, donde se representan las curvas de presión correspondientes a ensayos con un régimen de 1200 rpm y una carga variable.

Respecto a los ensayos con recirculación de gases de escape, cabe destacar que la metodología empleada para su elaboración consiste en considerar las mismas condiciones que en los ensayos sin EGR (par entre 5 y 20 N·m y velocidad entre 1200 y 2100 rpm), incrementando progresivamente la cantidad de gases recirculados, manteniendo la velocidad y el combustible inyectado. La cantidad de gases de escape recirculados se incrementa hasta que se alcanza la fracción de gases de escape que, en vez de suponer un incremento del par generado, conlleva un descenso de éste respecto al ensayo inmediatamente anterior. Es preciso destacar que los gases de escape recirculados se encuentran a temperatura ambiente tras haber sido refrigerados. Al proceder de esta forma se pone de manifiesto el retraso de la combustión, lo que supone el incremento del par generado debido a la reducción del trabajo negativo. Asimismo se constata que la cantidad de gases recirculados requerida para producir un retraso equivalente depende de la carga, siendo mayor la cantidad de gases requerida cuanto menor es la carga. El fenómeno anterior se debe a que a bajas cargas la concentración de dióxido de carbono y de agua en los gases de escape es menor que a altas cargas, siendo estos dos componentes los que tienen una mayor influencia sobre el punto de inicio de la combustión debido a su alto efecto capacitivo (Capítulo 2). Asimismo, gracias a los resultados obtenidos también se puede comprobar que el incremento de la cantidad de EGR supone la reducción del gradiente de presión, lo cual está asociado al efecto de dilución asociado a los gases de escape recirculados. Las tendencias anteriormente referidas pueden comprobarse en la Figura 3. 4, en la que se recogen ensayos con una velocidad de 1800 rpm y un consumo

equivalente a un par de 10 N·m con EGR nulo. Analizando la TLQ mostrada en la Figura 3. 5, donde se reproducen las mismas condiciones que en la Figura 3. 4, se obtiene que el incremento de los gases de escape recirculados supone la disminución del máximo de la TLQ y el aumento de la duración de la combustión. Para concluir con el análisis de los efectos inducidos por la recirculación de gases de escape, en la Figura 3. 6, se muestra la fracción de gases de escape recirculados que causa una combustión inestable para distintos grado de carga, comprobándose como ésta disminuye cuanto mayor es la carga considerada en el ensayo, según se ha referido anteriormente.

Tras el estudio de los resultados relacionados con las curvas de presión y de tasa de liberación de calor, a continuación se procede a analizar los resultados obtenidos en relación a las emisiones para la configuración early HCCI. En las Figuras 3. 7 y 3. 8 se muestran las emisiones de óxidos de nitrógeno y de monóxido de carbono, respectivamente, en función de la proporción de gases de escape recirculados. Los datos mostrados corresponden a ensayos con un consumo equivalente a un par de 20 N·m con EGR nulo y velocidad variable. La tendencia de las emisiones de los óxidos de nitrógeno es inversamente proporcional al porcentaje de EGR considerado, debido a la disminución de la temperatura media en la cámara de combustión derivada del efecto capacitivo de los gases recirculados. Se pone de manifiesto que la recirculación de gases de escape representa una medida de enorme utilidad en la reducción de las emisiones de óxidos de nitrógeno, las cuales ya eran significativamente bajas como resultado de las características de la combustión en modo HCCI. Respecto a las emisiones de monóxido de carbono, el déficit de oxígeno derivado del incremento de los gases de escape recirculados condiciona la tendencia creciente con la proporción de gases de escape recirculados, ya que se dificulta la oxidación completa del monóxido de carbono a dióxido de carbono. Adicionalmente, este comportamiento también se debe a que la oxidación del monóxido es proporcional a la temperatura, por lo que ensayos con menor temperatura media de combustión, debido al aumento de los gases de escape, poseerán mayores proporciones de emisiones de monóxido de carbono.

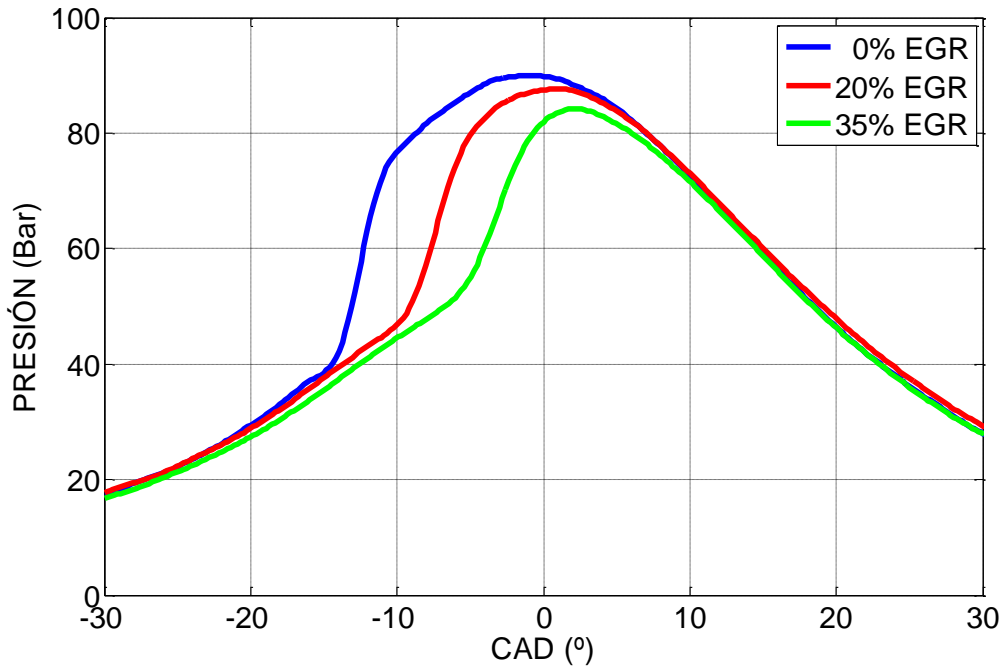


Figura 3. 4: Evolución de la presión para la configuración early HCCI con gasoil, 1800 rpm, combustible entregado constante (par inicial de 10 N·m) y EGR variable.

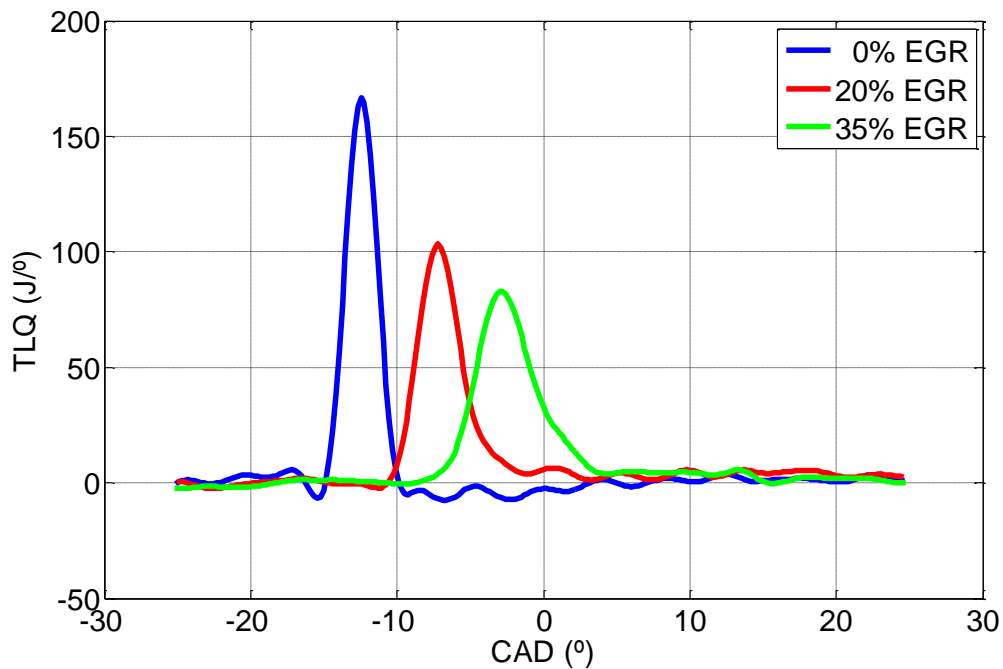


Figura 3. 5: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI con gasoil, 1800 rpm, combustible entregado constante (par inicial de 10 N·m) y EGR variable.

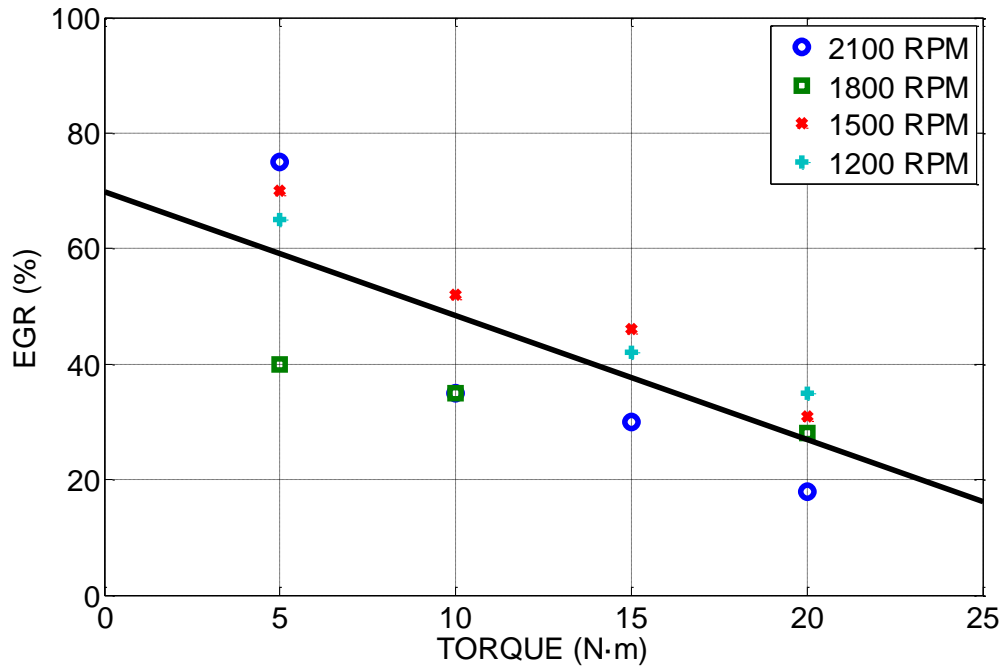


Figura 3. 6: EGR que causa inestabilidad para distintos grado de carga y velocidad, para la configuración early HCCI, con gasoil.

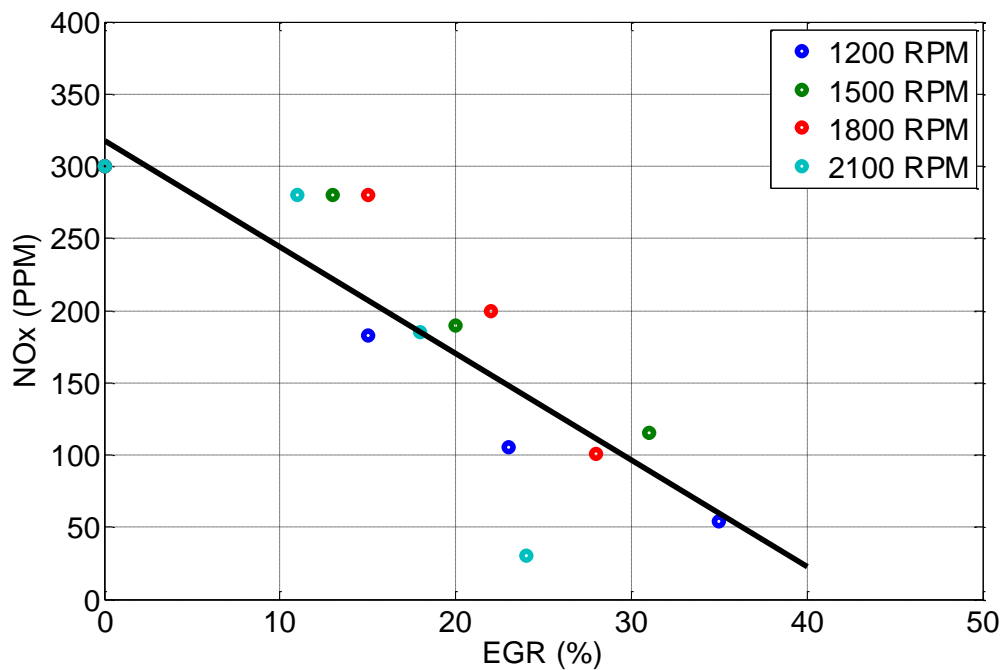


Figura 3. 7: Evolución de las emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad variable, par inicial de 20 N·m y EGR variable.

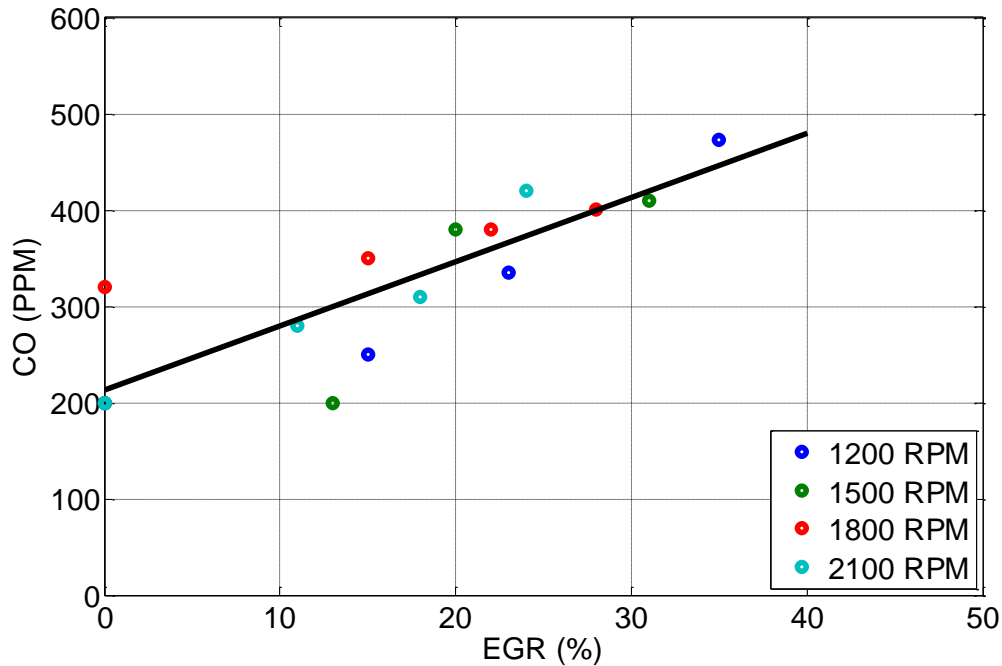


Figura 3. 8: Evolución de las emisiones de monóxidos de carbono para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad variable, par inicial de 20 N·m y EGR variable.

3.3. Análisis de la configuración late HCCI

3.2.1. Antecedentes a la configuración late HCCI

Como puede observarse en la primera columna de la Tabla 3. 3, a diferencia de los ensayos realizados con la configuración early HCCI, en la batería de ensayos asociados a la configuración late HCCI se han considerado diferentes proporciones de biodiésel de colza mezclado con gasoil convencional (EN 590), mostrándose en la Tabla 3. 2 las principales propiedades de ambos combustibles. Este hecho condiciona de una forma muy relevante la decisión sobre el punto de inyección empleado, ya que los ensayos con inyección temprana (45° APMS) de biodiésel pusieron de manifiesto, incluso para bajas proporciones de biodiésel, una significativa irregularidad en el comportamiento del motor, así como el incremento de las emisiones de monóxido de carbono y de hidrocarburos. A pesar de lo anteriormente referido, el condicionante que hace incompatible por completo el empleo del biodiésel en modo early HCCI en

el motor analizado consiste en los daños mecánicos producidos, incluso a las pocas horas de operación, como consecuencia del arrastre del aceite de lubricación en el cilindro por parte del combustible no evaporado. El fenómeno anteriormente referido puede explicarse atendiendo a las propiedades del biodiésel en comparación con el gasoil convencional. Dado que el biodiésel posee una curva de destilación muy concentrada en la banda de alta temperatura y mayor viscosidad, tensión superficial y densidad, el proceso de inyección se ve significativamente afectado, derivando en un mayor tamaño de gota y en una mayor penetración del chorro de combustible líquido inyectado. Las consecuencias anteriormente referidas implican la deposición de combustible en las paredes del cilindro y/o en el pistón, lo que diluye la película de aceite lubricante y puede derivar en la aparición de daños mecánicos, según pusieron de manifiesto Andrade et al. [172]. Asimismo, la no vaporización del combustible supone una disminución de la eficiencia del motor y un aumento en las emisiones de hidrocarburos. Por los motivos anteriormente referidos, para los ensayos que involucraban biodiésel se fijó el punto de inyección 10° APMS.

Además del cambio en el punto de inyección, para mejorar las condiciones en los ensayos con biodiésel se aumentó la presión de inyección máxima de los 450 bar originales hasta 650 bar. De esta forma se consiguió mejorar las condiciones de homogeneidad de la mezcla, disminuyendo el tiempo de inyección y aumentando la relación entre la superficie y el volumen de las gotas de combustible inyectadas, lo que favorece una evaporación del combustible más rápida.

Como medida adicional adoptada para favorecer tanto la evaporación del combustible como la homogeneidad de la mezcla cabe destacar la potenciación de la turbulencia en el interior de la cámara de combustión. A este respecto cabe destacar que la realización de un estudio basado en la simulación del flujo en el interior de la cámara de combustión [174] puso de manifiesto las siguientes conclusiones:

- Cuanto menor es el diámetro del bowl del pistón, mayor es el swirl máximo para cualquier velocidad de giro considerada.

- Se detecta que el máximo swirl se sitúa entre 10° y 20° APMS, con una amplificación del swirl hasta seis veces para pequeños ratios entre el diámetro del bowl y el diámetro del pistón.

Por este motivo se procedió a sustituir el pistón original, el cual estaba dotado de un bowl con un diámetro de 60 mm, por otro optimizado para las condiciones late HCCI con biodiésel, cuyo bowl tenía un diámetro de 35 mm. De esta forma se favorecieron las condiciones de turbulencia mediante el incremento del swirl, el cual se amplificó en un factor de 4 respecto al conseguido con el diseño original del pistón.

	B0 (gasoil EN590)	B30	B65	B100
Densidad a 15°C (kg/m ³)	832,0	858,8	865,5	883,4
Viscosidad a 40°C (cSt)	2,9	3,3	4,0	4,6
Poder calorífico inferior (MJ/kg)	43,1	42,2	41,2	40,2
Temperatura de destilación (al 95%)	175-350	200-390	207-405	320-415
Índice de cetano	47,0	47,6	52,2	52,2
Fórmula reducida	$CH_{1,9}$	-	-	$CH_{1,85}O_{0,11}$
A/F estequiométrico	14,7	-	-	13,0

Tabla 3. 2: Propiedades principales de los combustibles empleados en los ensayos con configuración late HCCI [173].

Combustible	Velocidad	Dosado relativo	EGR
Gasoil (0% bio.)	1800 rpm	0,20	Variable (mín: 0% máx: 54%)
30% bio.	2100 rpm	0,30	
65% bio.	2400 rpm	0,45	
100% bio.		0,60	

Tabla 3. 3: Condiciones de los ensayos realizados con la configuración late HCCI (inicio inyección 10° APMS; relación de compresión 18,4:1).

Como diferencia respecto de los ensayos early HCCI, conviene destacar que la relación de compresión empleada en los ensayos con configuración late HCCI es de 18,4:1, respecto a la relación de 15:1 empleada en la configuración early HCCI.

3.3.2. Resultados asociados a la configuración late HCCI

A continuación se realizará un análisis paralelo al realizado en el apartado anterior, analizando en esta ocasión los ensayos realizados con la previamente descrita configuración late HCCI. Como se ha indicado con anterioridad, para la realización de estos ensayos se ha procedido a fijar el punto de inyección 10° APMS, barriéndose las condiciones operativas recogidas en la Tabla 3. 3. Al igual que anteriormente, no se produjeron variaciones significativas en la temperatura de admisión, dado que los ensayos se llevaron a cabo en el interior de una celda de ensayo con fuerte renovación del aire y durante un periodo de tiempo relativamente corto.

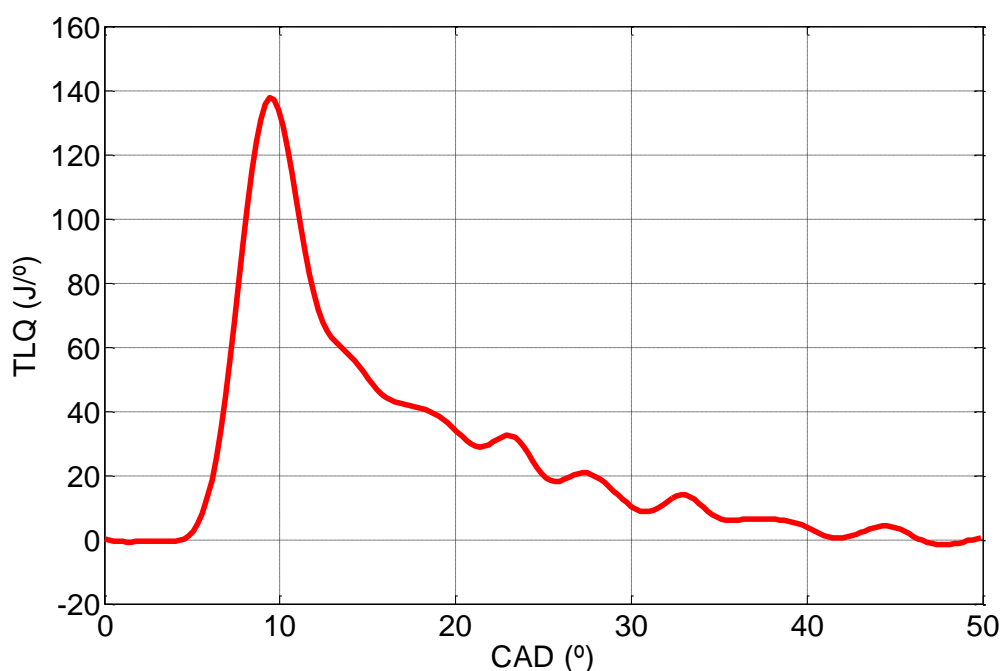


Figura 3. 9: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con gasoil, 2100 rpm, dosado relativo 0,6 y 0% de EGR.

Análogamente a la metodología aplicada en el apartado dedicado a la configuración early HCCI, en la Figura 3. 9 se muestra la TLQ obtenida mediante la aplicación de un modelo unizona a los datos de presión correspondientes a un ensayo con configuración late HCCI con gasoil a 2100 rpm y un dosado relativo de 0,6 (no se considera recirculación de gases de escape). Como puede comprobarse, se trata de una combustión que difiere ligeramente del patrón de TLQ en modo HCCI teórico, como el mostrado con anterioridad en la Figura 3. 1. En los instantes iniciales de la combustión se puede observar una rápida liberación de calor, con un único modo, lo que pone de manifiesto que la combustión en la configuración late HCCI sigue estando dominada por la fase de premezcla, aunque en etapas posteriores la velocidad de la combustión disminuye. En referencia a la mencionada reducción de la velocidad de combustión cabe destacar que, dado que la inyección ha finalizado completamente en esos instantes, no cabe la posibilidad de asociarlo a fenómenos difusivos. Es por estos motivos que este fenómeno se asocia a la baja temperatura en la cámara debido al avance de la carrera de expansión, lo que impide una combustión rápida e implica unas altas emisiones de monóxido de carbono y de hidrocarburos, lo que se traduce en un aumento del consumo específico de combustible.

Los ensayos efectuados con la configuración late HCCI ponen de manifiesto que el incremento de la fracción de biodiésel en el combustible empleado supone el adelanto del inicio de la combustión, debido al mayor número de cetano que posee el biodiésel en comparación con el gasoil. El mencionado adelanto de la combustión tiene lugar a pesar del ligeramente menor poder calorífico que posee el biodiésel en comparación con el gasoil. Asimismo, los datos experimentales derivados de los ensayos realizados demuestran que el máximo de la TLQ disminuye a medida que el porcentaje de biodiésel en el combustible aumenta, a pesar de que el mayor adelanto en el inicio de la combustión hace que ésta se inicie con una temperatura media mayor en la cámara de combustión. Este hecho sugiere que la cinética química de la combustión del gasoil es más rápida que el mecanismo correspondiente al biodiésel. En las Figuras 3. 10 y 3. 11 se muestran las curvas de presión y de TLQ, respectivamente, para ensayos a 2100 rpm con un dosado relativo de

0,45 y un porcentaje de biodiésel variable (no se considera recirculación de gases de escape). De forma análoga, las Figuras 3. 12 y 3. 13 representan los mismos parámetros para ensayos a 2400 rpm con un dosado de 0,45 (no se considera recirculación de gases de escape).

A partir de las curvas de la TLQ mostradas en las Figuras 3. 11 y 3. 13 puede comprobarse que el retraso medio medido desde el punto de inyección disminuye para los ensayos late HCCI (15° aprox.) en comparación con los ensayos early HCCI (30° aprox.). Este significativo adelanto del inicio de la combustión podría condicionar que la mezcla no fuese completamente homogénea si no fuera por el mayor nivel de turbulencia generado en las inmediaciones del PMS, lo que compensa la potencial falta de homogeneidad. Adicionalmente, esta potencial falta de homogeneidad podría ser minimizada mediante la adopción de medidas adicionales a las ya implementadas, encaminadas a potenciar en mayor medida la turbulencia en la cámara de combustión o a la modificación del punto de inyección.

El efecto del régimen de giro y de la carga en los ensayos efectuados con la configuración late HCCI es completamente análogo al anteriormente descrito para los ensayos con configuración early HCCI. De esta forma, un incremento de la velocidad de giro supone un aparente retraso del inicio de la combustión, aunque como se explicó anteriormente, este retraso sólo se produce en referencia al ángulo de giro, no respecto al tiempo transcurrido desde la inyección del combustible. La tendencia descrita puede ser comprobada en las Figuras 3. 14 y 3. 15, en las que se muestran datos de presión correspondientes a ensayos con gasoil (B0) y biodiésel 100% (B 100), respectivamente, con un dosado relativo de 0,60 y una velocidad variable. Al contrario que ocurre con el régimen de giro, se observa experimentalmente que un aumento de la carga provoca un adelanto del inicio de la combustión, debido a que las condiciones requeridas para la ignición se alcanzan antes gracias a la mayor temperatura media de las paredes de la cámara de combustión. En las Figuras 3. 16 y 3. 17 puede comprobarse la tendencia descrita, mostrándose datos de presión derivados de ensayos con gasoil (B0) y biodiésel 100% (B 100), respectivamente, con una velocidad de 2100 rpm y un dosado relativo variable.

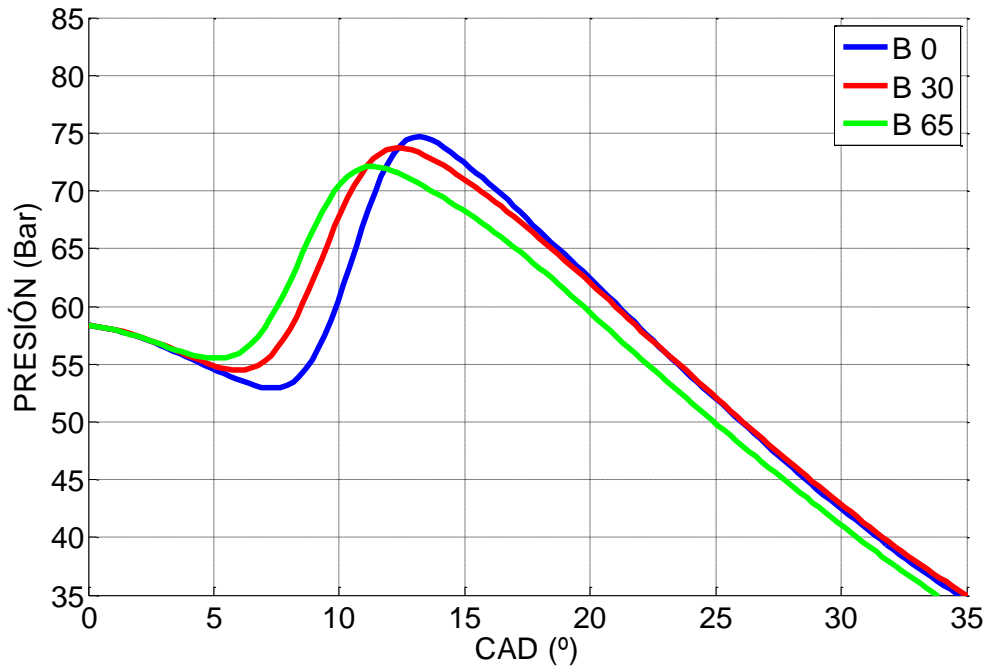


Figura 3. 10: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.

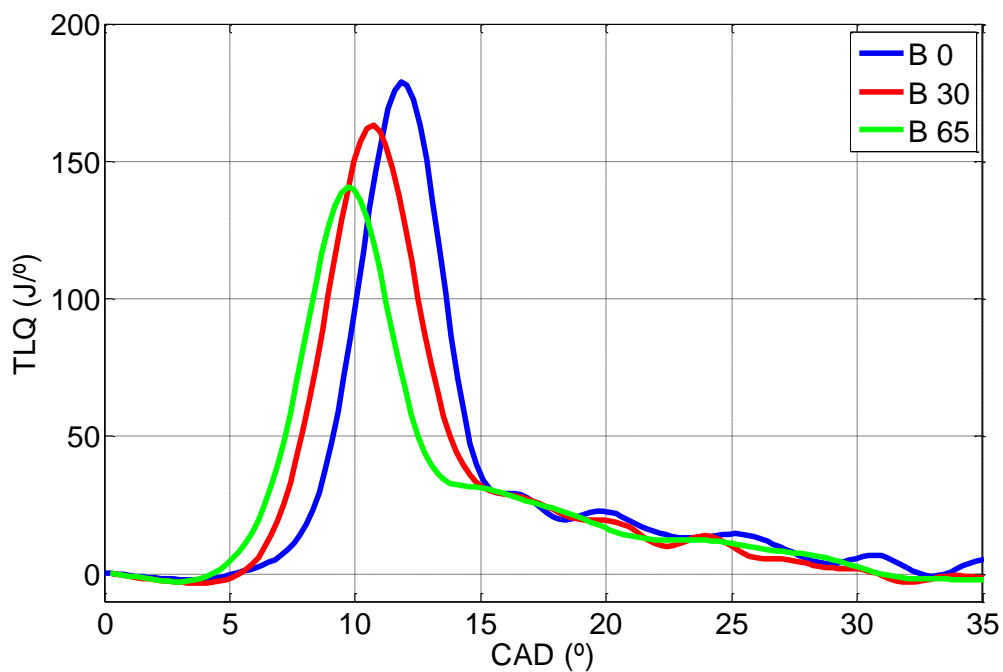


Figura 3. 11: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.

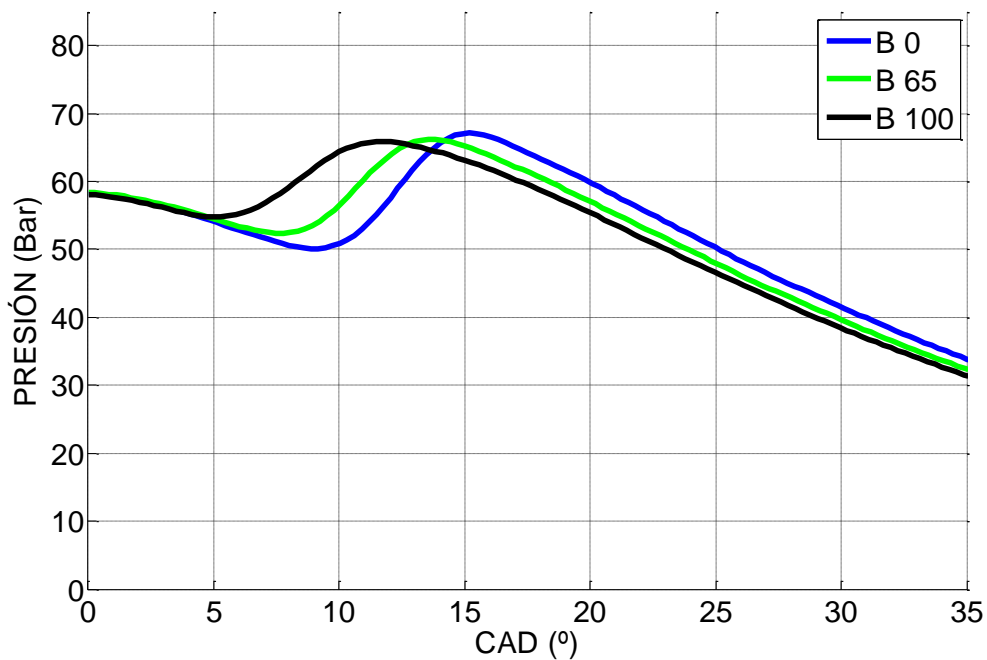


Figura 3. 12: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.

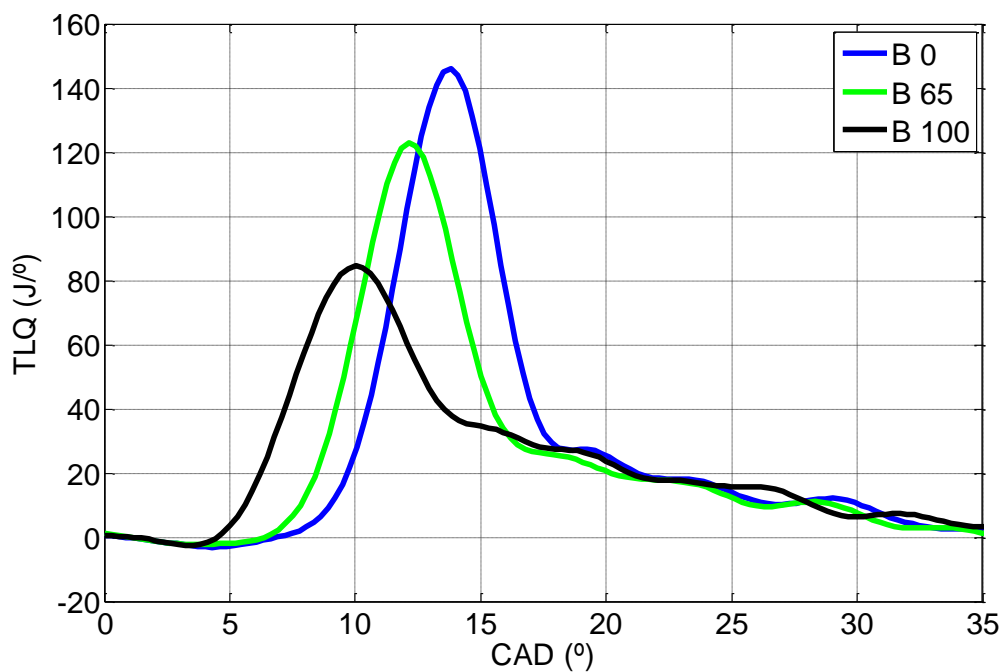


Figura 3. 13: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % de biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,45 y 0% de EGR.

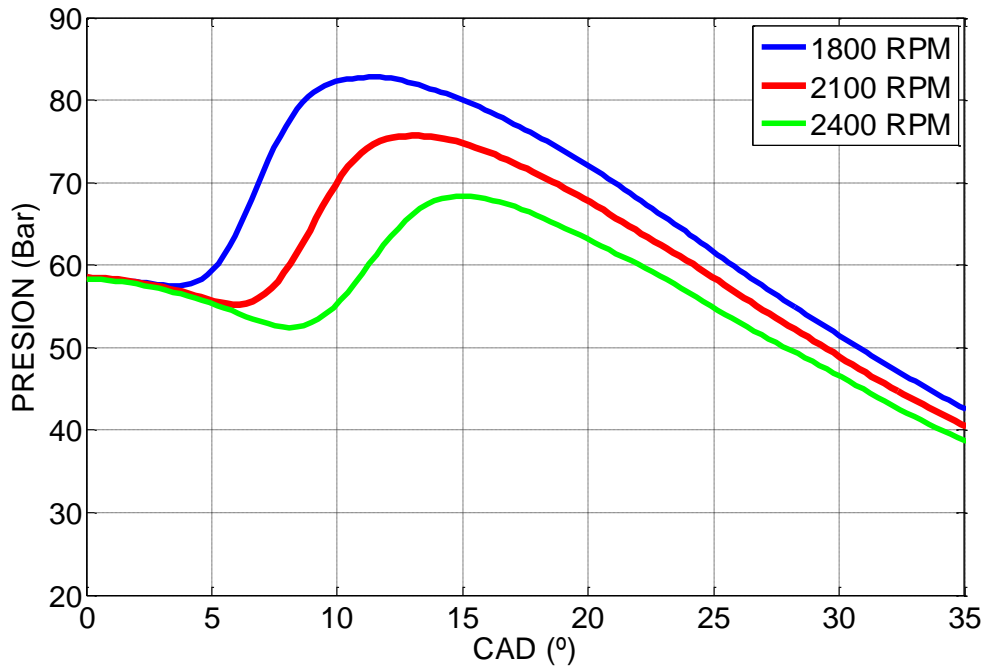


Figura 3. 14: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), velocidad variable, dosado relativo 0,6 y 0% de EGR.

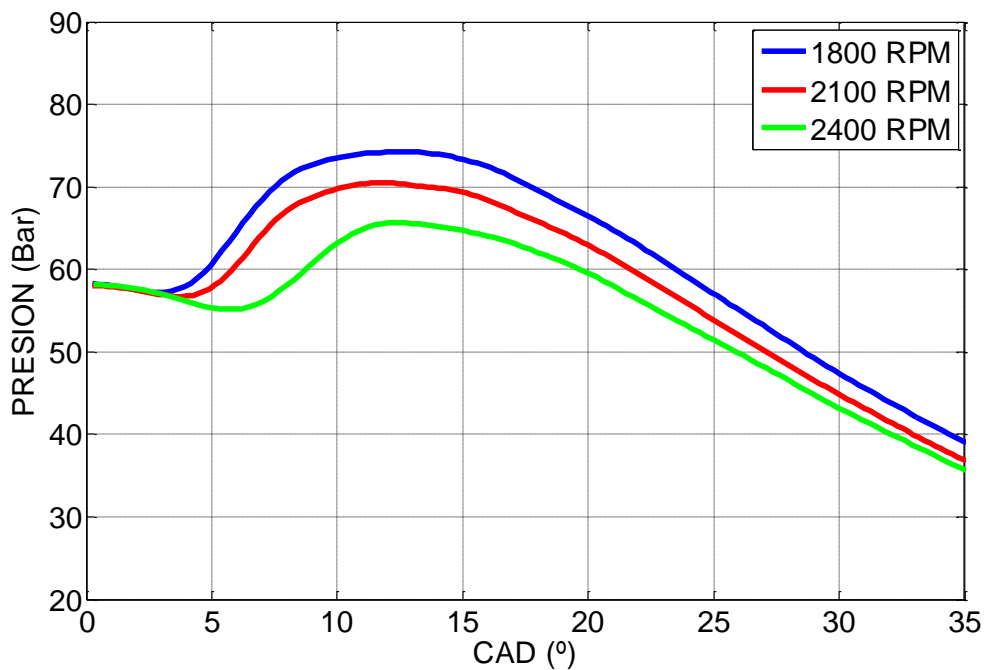


Figura 3. 15: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), velocidad variable, dosado relativo 0,6 y 0% de EGR.

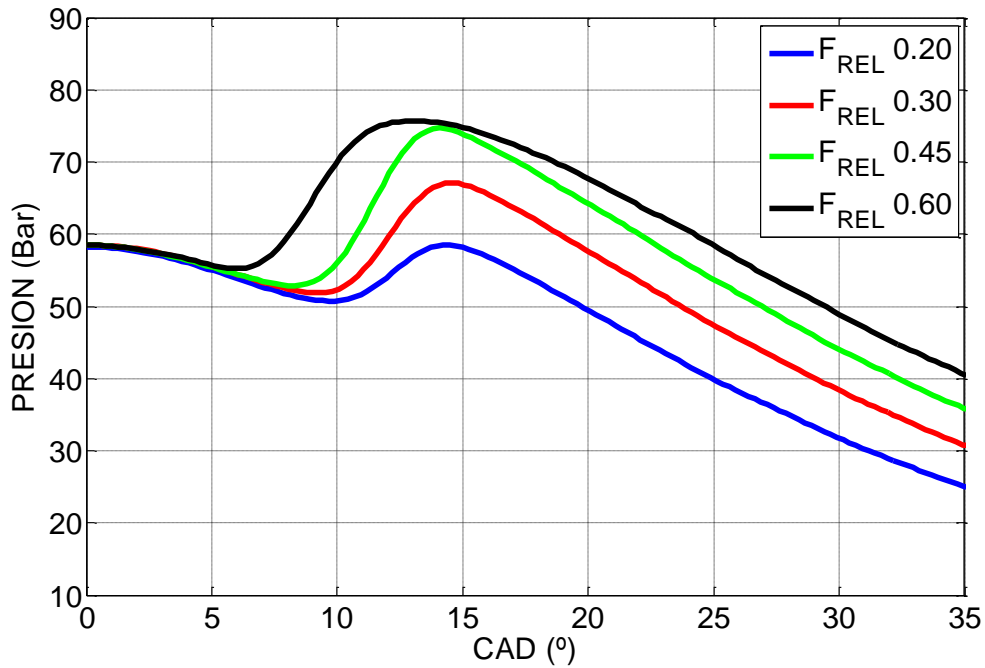


Figura 3. 16: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), 2100 rpm, dosado relativo variable y 0% de EGR.

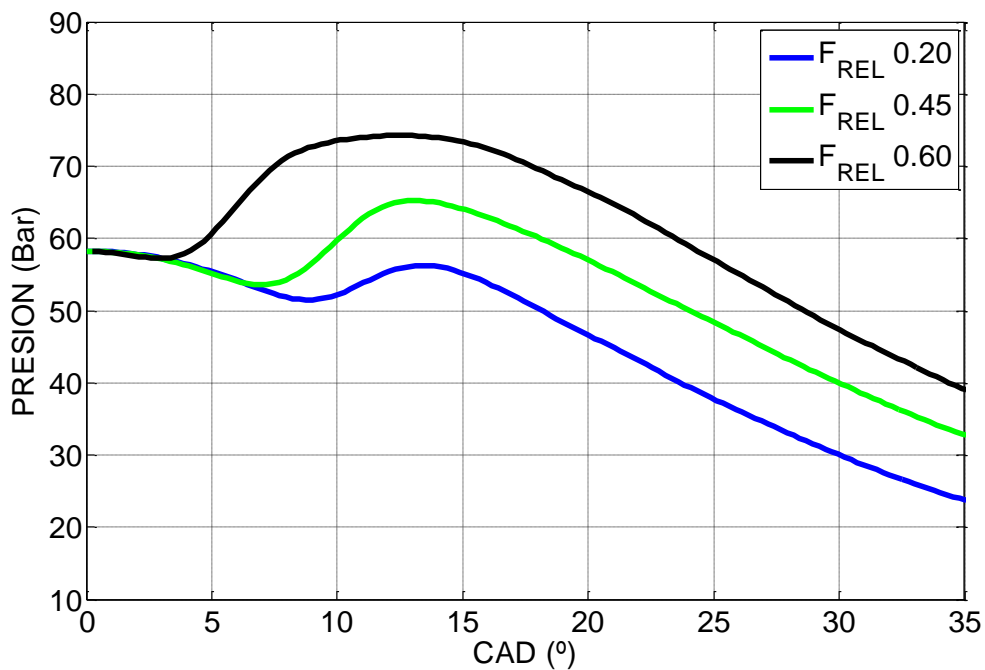


Figura 3. 17: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), 2100 rpm, dosado relativo variable y 0% de EGR.

Al igual que con los ensayos realizados con la configuración early HCCI, a continuación se muestra el efecto de la recirculación de los gases de escape sobre las curvas de presión y de TLQ en ensayos efectuados con la configuración late HCCI. Se puede comprobar que el incremento de la fracción de los gases de escape recirculados supone un mayor retraso del inicio de la combustión, aunque este retraso es menor cuanto mayor es el porcentaje de biodiésel en el combustible alimentado, siendo el biodiésel puro (B 100) prácticamente insensible a este fenómeno. El hecho anteriormente referido está asociado a que el inicio de la combustión del biodiésel está controlado por el mecanismo cinético químico, siendo menos sensible a la disminución de la temperatura media de la cámara de combustión causada por el efecto capacitivo de los gases de escape recirculados. Asimismo, se puede comprobar que el aumento de la fracción de gases de escape recirculados implica un aumento del máximo de la curva de TLQ y una disminución de la duración de la combustión, tendencias opuestas a las observadas con anterioridad en los ensayos realizados con la configuración early HCCI. Al igual que se mencionó anteriormente, estas tendencias son menos apreciables en el caso del biodiésel puro. Su et al. [175] atribuyen las tendencias referidas a una mayor homogeneidad de la mezcla, lograda gracias al incremento del retraso del inicio de la combustión. Las tendencias descritas en las líneas superiores pueden ser comprobadas en las Figuras 3. 18 y 3. 19 para ensayos con gasoil, en las Figuras 3. 20 y 3. 21 para ensayos con un 65% de biodiésel, en las Figuras 3. 22 y 3. 23 para ensayos con biodiésel puro; todas ellas con una velocidad de 2400 rpm y un dosado relativo de 0,60. Como un complemento a las figuras anteriores destinado a proporcionar un mayor detalle sobre las tendencias expuestas se han confeccionado las Figuras 3. 24, 3. 25 y 3. 26, donde se muestran, para las mismas condiciones operativas, el ángulo en el que se produce el valor máximo de la TLQ, el valor máximo de la TLQ y la duración estimada de la combustión, respectivamente.

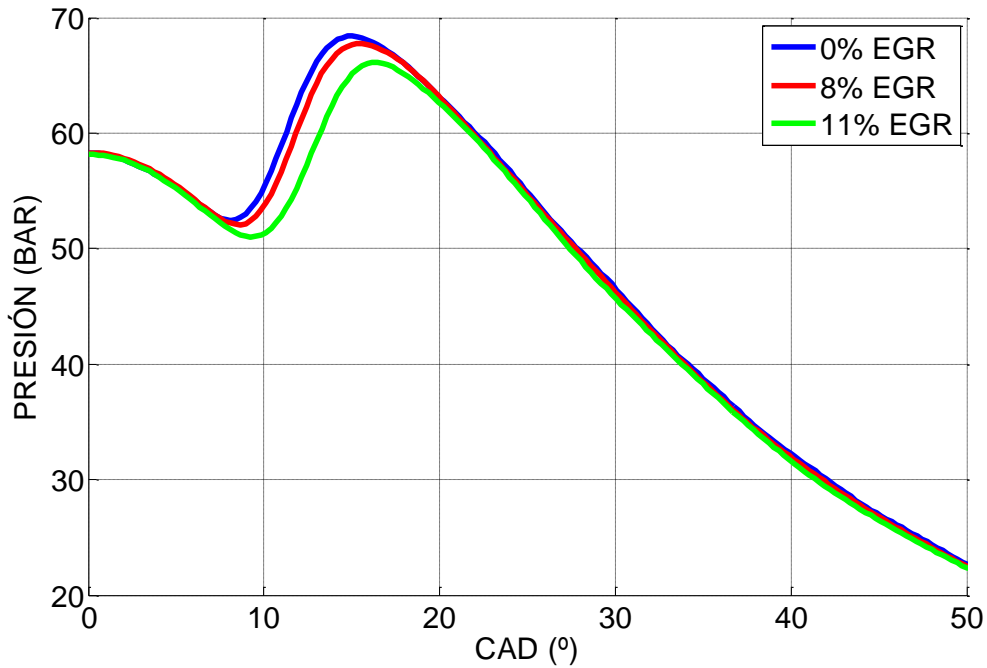


Figura 3. 18: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

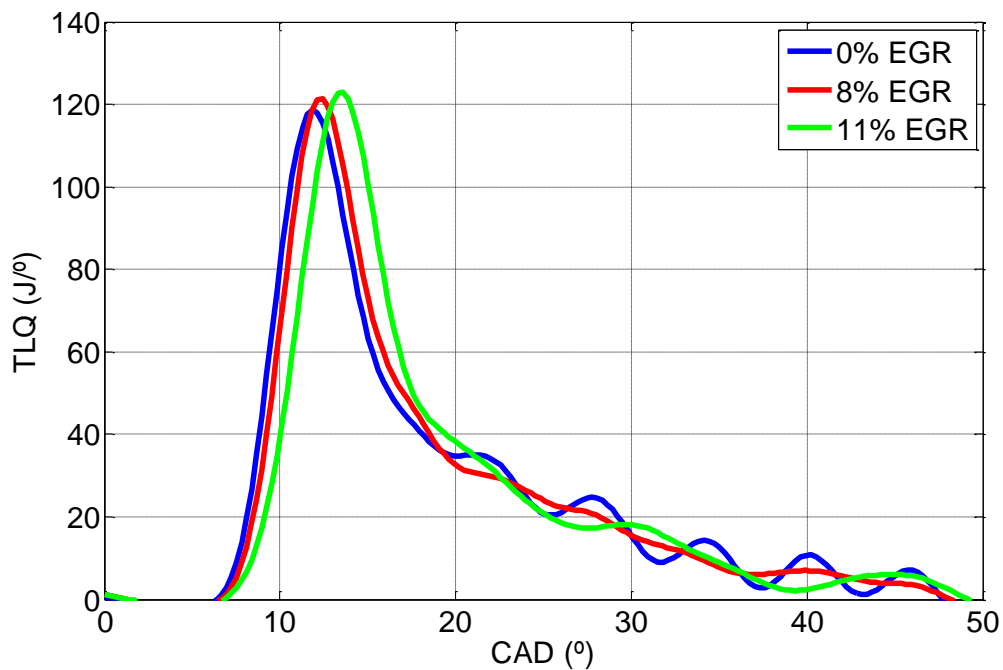


Figura 3. 19: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con gasoil (B0), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

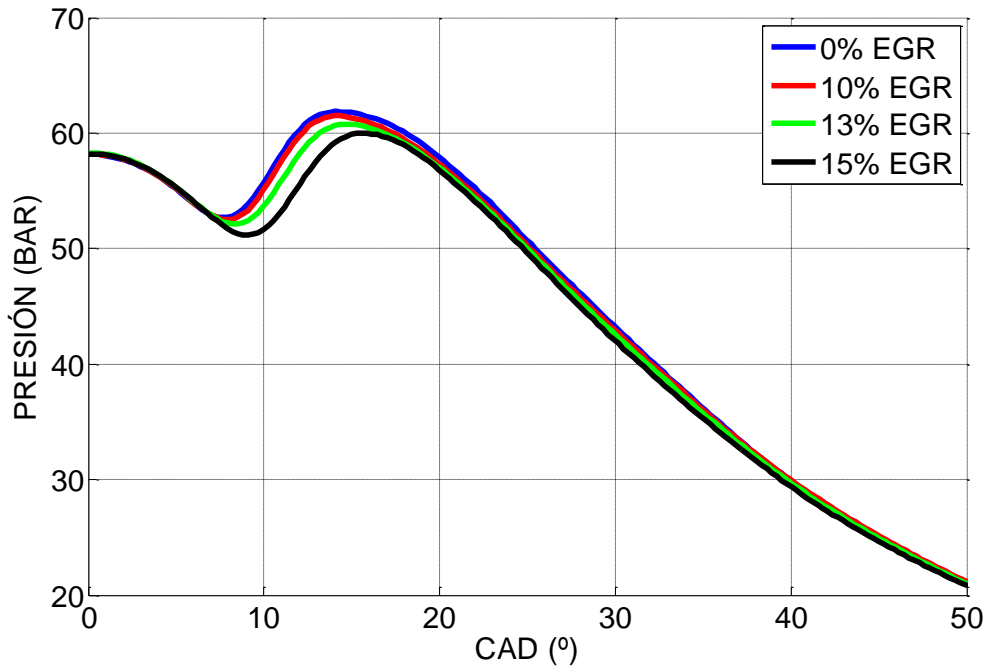


Figura 3. 20: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 65% biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

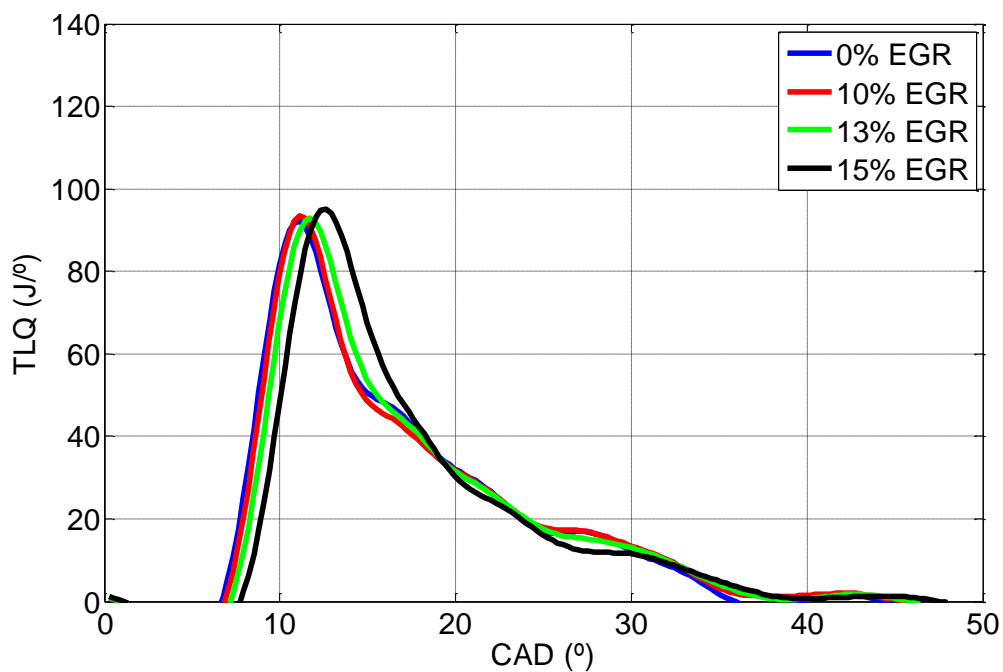


Figura 3. 21: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 65% biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

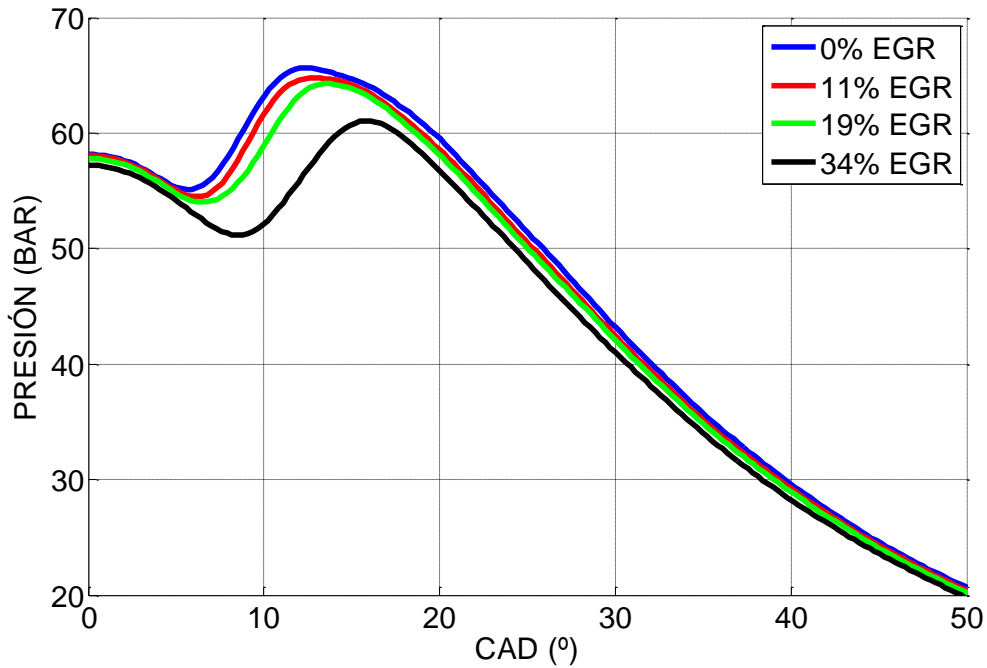


Figura 3. 22: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

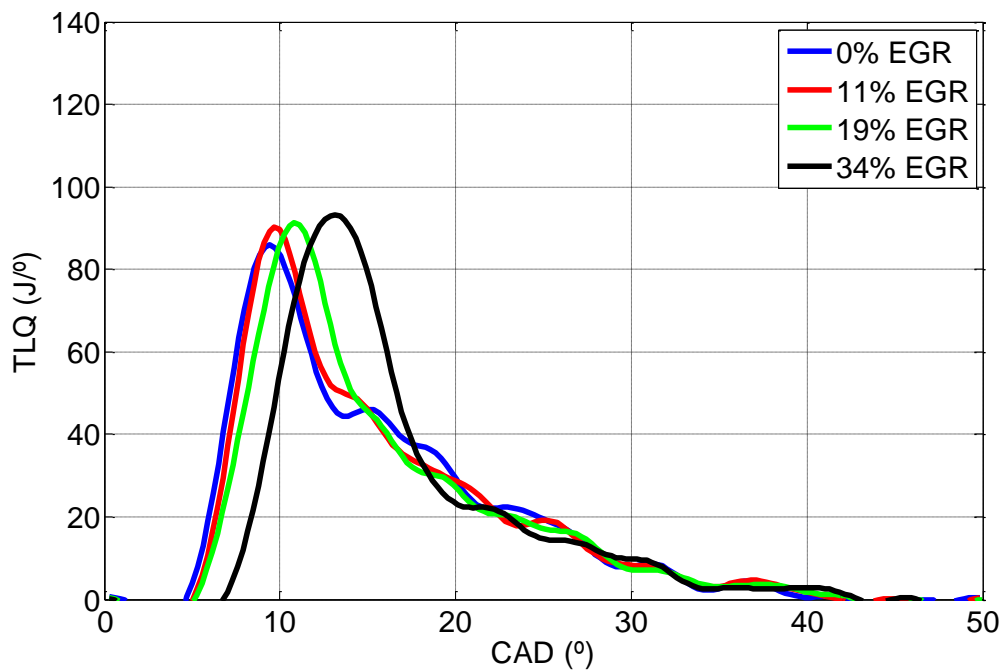


Figura 3. 23: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 100% biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

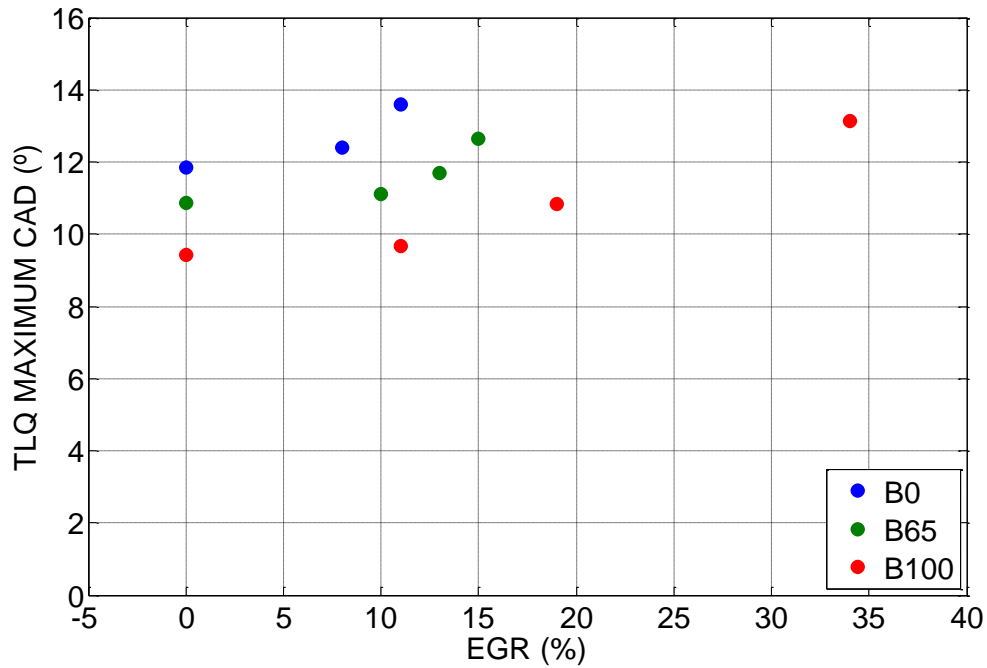


Figura 3. 24: Ángulo correspondiente al máximo de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

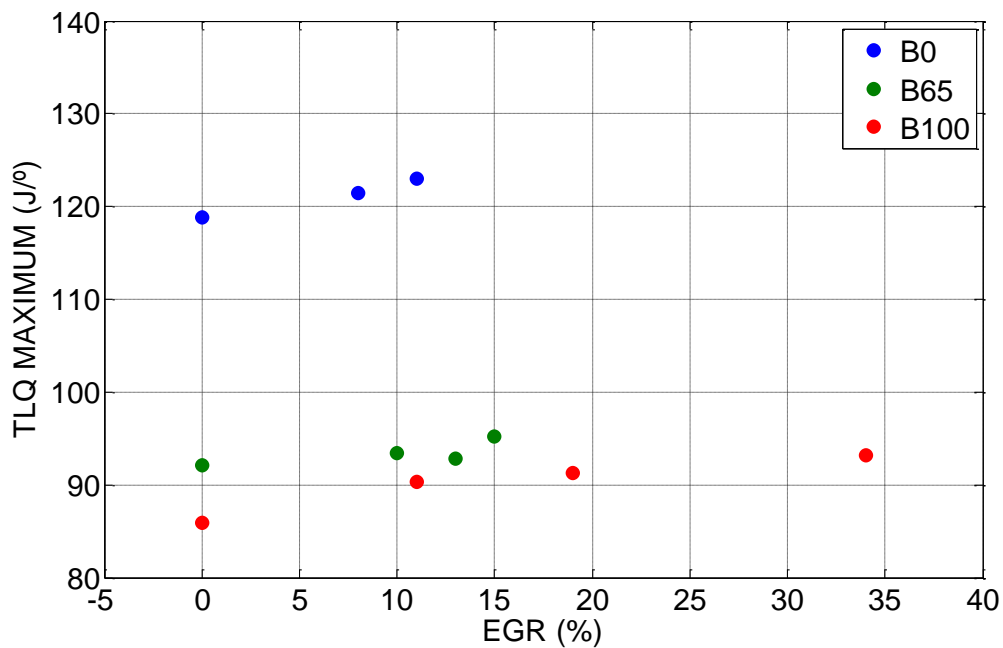


Figura 3. 25: Máximo de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

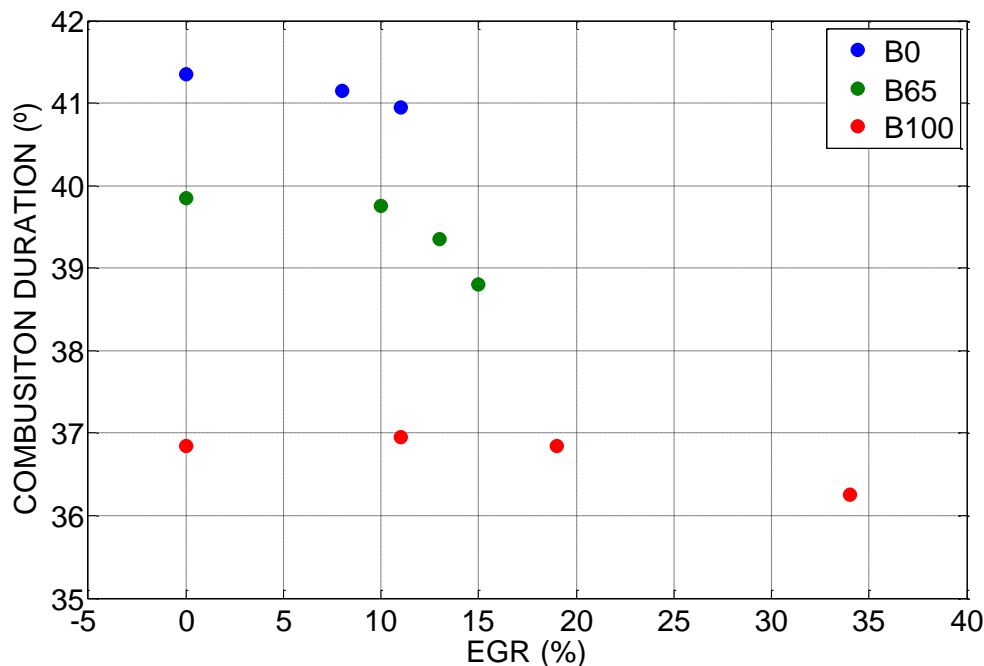


Figura 3. 26: Duración de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con % biodiésel variable, 2400 rpm, dosado relativo 0,6 y EGR variable.

Para concluir con el estudio de las tendencias observadas experimentalmente en los ensayos llevados a cabo con la configuración late HCCI, se analizará el comportamiento de las emisiones de óxidos de nitrógeno y de monóxido de carbono, análogamente al ejercicio llevado a cabo para las emisiones correspondientes a los ensayos realizados con la configuración early HCCI. En referencia a las emisiones de óxidos de nitrógeno cabe destacar un comportamiento análogo al referido en el caso de los ensayos early HCCI, ya que la tendencia de las emisiones de los óxidos de nitrógeno es, para cualquier mezcla de combustible considerada, inversamente proporcional al porcentaje de EGR considerado, debido a la menor temperatura máxima alcanzada en la cámara de combustión. Sin embargo, este comportamiento no se debe únicamente al efecto capacitivo de los gases de escape, como ocurría en los ensayos early HCCI, sino que en el caso de los ensayos late HCCI una mayor proporción de EGR se traduce en un mayor retraso, lo que contribuye también a disminuir la temperatura de la cámara de combustión debido al avance de la carrera de expansión. Al igual que en el caso de los ensayos realizados con la configuración early HCCI, se destaca que la recirculación de gases de escape

representa una medida de enorme utilidad en la reducción de las emisiones de óxidos de nitrógeno. Respecto a las emisiones de monóxido de carbono, para cualquier mezcla de combustible ensayada se comprueba una tendencia creciente con la proporción de gases de escape recirculados. Este comportamiento, además de estar asociado al mayor déficit de oxígeno derivado del incremento de los gases de escape recirculados, se debe a que la oxidación del monóxido es proporcional a la temperatura, por lo que ensayos con menor temperatura media de combustión debido al aumento de los gases de escape poseerán mayores proporciones de emisiones de monóxido de carbono. Las tendencias anteriormente mencionadas para las emisiones de óxidos de nitrógeno y de monóxido de carbono se muestran para todas las proporciones de biodiésel ensayadas en las Figuras 3. 27 y 3. 28, donde se recogen ensayos con una velocidad de 2100 rpm y un dosado relativo inicial de 0,45.

Asimismo, las figuras mencionadas en el párrafo anterior también permiten obtener conclusiones en relación a la influencia de la proporción de biodiésel en la mezcla sobre las emisiones analizadas. En el caso de las emisiones de óxidos de nitrógeno se puede comprobar que las emisiones aumentan con la fracción de biodiésel contenida en la mezcla. El primer hecho que justifica este comportamiento es el mayor contenido en oxígeno en el combustible a medida que aumenta la proporción de biodiésel [176], ya que la formación de óxidos de nitrógeno depende no sólo de la temperatura, sino también de la concentración de oxígeno, aunque en cualquier caso la carga presenta por sí misma un elevado exceso de aire. Además de la justificación anterior, cabe destacar que una mayor fracción de biodiésel implica un menor retraso del inicio de la combustión, lo que conlleva unas mayores temperaturas medias en la cámara durante el desarrollo de la combustión [177]. Según se ha mencionado en repetidas ocasiones, la formación de los óxidos de nitrógeno es muy sensible a la temperatura, estableciéndose una relación de proporcionalidad, lo que constituye otro factor que implica unas mayores emisiones de óxidos de nitrógeno para ensayos con mayores fracciones de biodiésel en la mezcla. Aunque las dos características anteriores deberían afectar positivamente a las emisiones de monóxido de carbono, los resultados experimentales obtenidos

ponen de manifiesto la tendencia opuesta: las emisiones del monóxido de carbono también aumentan con la proporción de biodiésel en el combustible. Este comportamiento se asocia al peor comportamiento del biodiésel en lo que se refiere a la formación de la mezcla, debido a su menor volatilidad y mayor viscosidad, tensión superficial y densidad. Dado que el combustible con altas fracciones de biodiésel no se evapora tan fácilmente, una parte de éste impregna las paredes, por lo que se produce una combustión incompleta y las emisiones de monóxido de carbono aumentan.

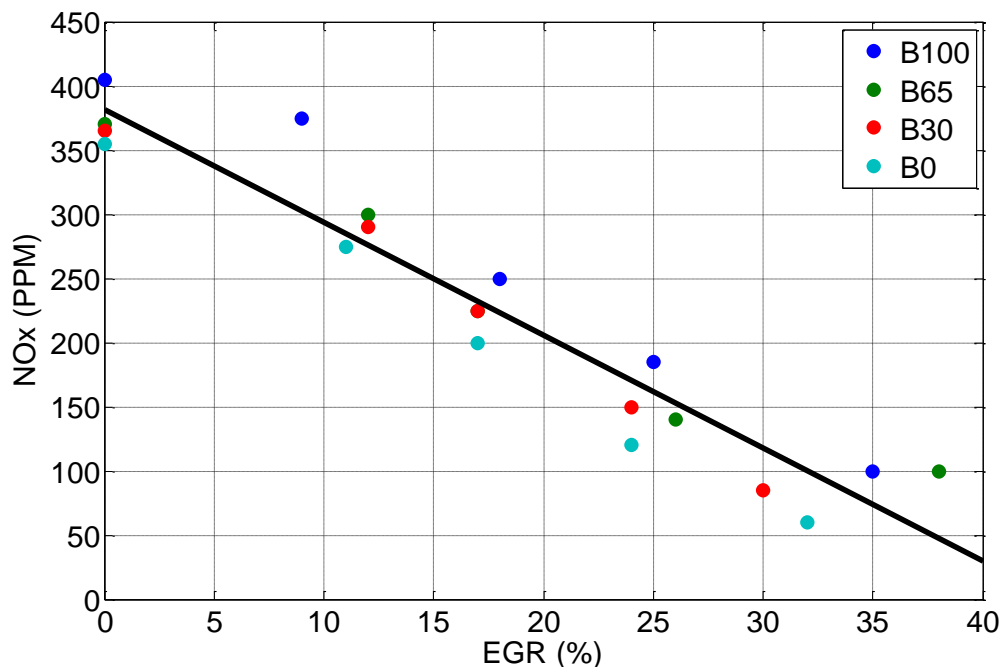


Figura 3. 27: Emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración late HCCI, con biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y EGR variable.

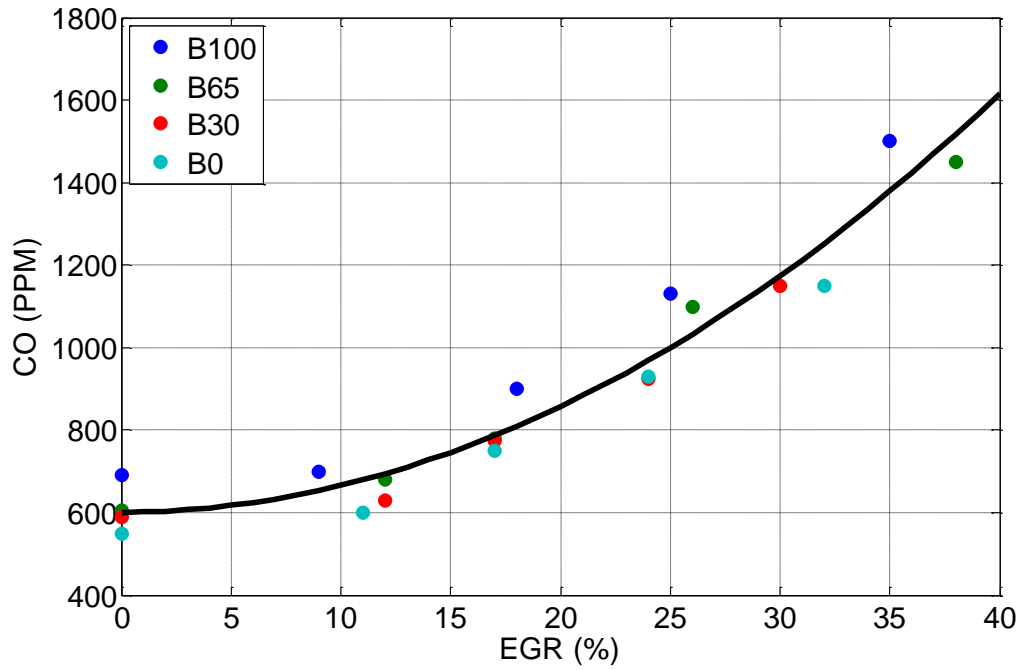


Figura 3. 28: Emisiones de monóxido de carbono para la configuración late HCCI, con biodiésel variable, 2100 rpm, dosado relativo 0,45 y EGR variable.

Capítulo 4

Descripción del modelo multizona

4.1. Necesidades asociadas al modelado

Como se ha mencionado en capítulos anteriores, los principales rasgos que caracterizan la combustión en modo HCCI son unas bajas emisiones de óxidos de nitrógeno y prácticamente ausencia de partículas, unas relativamente altas emisiones de hidrocarburos y de monóxido de carbono, las cuales pueden ser minimizadas mediante la aplicación de tratamientos catalíticos de oxidación, y, finalmente, una alta eficiencia térmica, comparable a la asociada a los MEC convencionales. Asimismo, cabe destacar que las características anteriormente mencionadas dependen de una forma muy directa de la estratificación de la mezcla, es decir, de las distribuciones espaciales de temperatura y de concentración química existentes en el interior de la cámara de combustión, las cuales condicionan no sólo el instante en el que se produce la autoignición de la mezcla, sino que también repercuten sobre la posterior evolución del proceso de combustión.

Antes de profundizar en las características del modelo multizona propuesto conviene recalcar algunos conceptos previamente mencionados en el Capítulo 2, según los cuales los modelos unizona se caracterizan por considerar la cámara de combustión como un reactor de mezcla perfecta. La característica mencionada posee unas importantes connotaciones, ya que de ella deriva la imposibilidad de los modelos unizona de contemplar regiones con mezcla no homogénea en el interior de la cámara de combustión, ya sea en lo referente a la composición química o a la temperatura. Como consecuencia de esta limitación en referencia a la incapacidad de considerar un determinado grado

de estratificación de la carga por parte de los modelos unizona se concluye que éstos no son adecuados para llevar a cabo estudios precisos orientados al análisis de variables derivadas del desarrollo de la combustión en modo HCCI, tales como la duración o la intensidad de ésta. En otras palabras, según se expuso con anterioridad, el empleo de modelos unizona para el estudio de motores con combustión en modo HCCI imposibilita la predicción con exactitud de la evolución real del proceso de liberación de energía asociado a la oxidación del combustible.

Por el contrario, el modelo multizona desarrollado en el presente trabajo surge de la necesidad de caracterizar los efectos ejercidos sobre el proceso de combustión en modo HCCI por parte de las no homogeneidades de distinta naturaleza presentes en la mezcla alojada en la cámara de combustión, las cuales no pueden ser contempladas por los modelos unizona. Una de las características del modelo multizona desarrollado en el marco del presente trabajo es permitir la caracterización con precisión de las prestaciones de un motor funcionando en modo HCCI, haciendo posible la elaboración de diversos estudios paramétricos destinados a determinar el efecto de múltiples variables características del motor sobre las prestaciones del mismo, lo que se traduce en una mejora del grado de entendimiento de los complejos procesos físico-químicos que tienen lugar en el interior de la cámara de combustión. Como se ha anticipado en repetidas ocasiones, el proceso de combustión en modo HCCI es muy dependiente de las distribuciones de temperatura y composición existentes en el interior de la cámara de combustión, motivo por el cual los fenómenos físicos que provocan estas distribuciones condicionan fuertemente tanto el instante en el que se produce la autoignición como el desarrollo del posterior proceso de liberación de calor. Teniendo en cuenta los argumentos anteriores parece lógico establecer que el éxito de los modelos asociados a los motores con combustión en modo HCCI está íntimamente ligado a la capacidad de aquéllos de reproducir verazmente los procesos físicos que tienen lugar en el interior de la cámara de combustión del motor, entre los que se encuentra la estratificación de la mezcla. En el presente trabajo se ha pretendido alcanzar estos objetivos mediante el desarrollo de un completo y versátil modelo multizona.

Como consecuencia de lo expuesto en el párrafo anterior, el principal requisito que debe satisfacer el modelo multizona propuesto consiste en la caracterización de campos variables con el ángulo de giro del cigüeñal para la temperatura y la composición química en el interior de la cámara de combustión, los cuales estarán condicionados por diferentes fenómenos físicos que se expondrán más adelante. Los citados campos de temperatura y composición constituyen unos de los principales requisitos para la obtención de resultados precisos mediante el uso de modelos multizona. En otras palabras, uno de los requisitos del modelo multizona desarrollado consiste en permitir la caracterización de la temperatura y la composición química de cada una de las zonas que componen la cámara de combustión durante las fases de compresión, combustión y expansión. De esta forma se dispondrá de las herramientas requeridas para determinar de forma precisa tanto el instante en el que se produce la autoignición de la mezcla como el proceso de liberación de calor asociado a la oxidación del combustible, lo que se traducirá finalmente en una estimación precisa de la presión existente en el interior de la cámara de combustión del motor analizado. La importancia de la obtención de la evolución de la presión en cámara radica en el hecho de que se trata de la magnitud física que más fácilmente puede obtenerse experimentalmente, posibilitando de esta forma la validación de los resultados obtenidos a partir del modelo mediante comparación con valores reales medidos en condiciones operativas análogas a las empleadas para la realización de las simulaciones, como se expondrá convenientemente en el Capítulo 5 del presente documento.

4.2. Fundamentos del modelo multizona propuesto

Para lograr los objetivos expuestos en el apartado anterior se ha desarrollado un modelo cuyo rasgo característico más importante consiste en la división de la cámara de combustión del motor en un determinado número de zonas. Cada una de estas zonas elementales en las que se divide la cámara de combustión posee a su vez la característica de ser homogénea tanto en temperatura como

en composición química. Es decir, mediante el modelo multizona propuesto se procede al análisis de los fenómenos que acontecen en la cámara de combustión del motor estudiado mediante la consideración de zonas homogéneas en composición química y temperatura que interaccionan con las zonas contiguas, las cuales presentan por lo general temperaturas y composiciones diferentes a aquélla. En otras palabras, la cámara de combustión en el modelo multizona propuesto se compone de una serie de subvolúmenes, cada uno de los cuales posee una temperatura y una composición asignada a la masa contenida en la citada zona durante cada instante, siendo ambas características variables con el ángulo de giro del cigüeñal. De esta forma se hace posible la consideración de no homogeneidades, aunque es importante destacar que todas las zonas se encuentran a la misma presión, coincidente con la existente en la cámara de combustión. Según el planteamiento anterior en la cámara de combustión analizada existirán diferentes zonas cada una de la cuales posee una temperatura y composición pero cuya presión es común a todos los subvolúmenes que componen la cámara.

Tras la descripción del sistema de zonas elementales que integran el modelo multizona propuesto, la caracterización de éste culmina con la imposición de una serie de leyes físicas que condicionan la evolución temporal de las propiedades de cada una de las zonas elementales. Estas leyes modelan tanto el comportamiento propio de cada zona elemental debido a las condiciones termodinámicas que tiene asociadas como las interacciones existentes entre zonas distintas o entre éstas y los contornos de la cámara de combustión.

Es importante recalcar que la filosofía general con la que se ha procedido a desarrollar el modelo multizona objeto del presente trabajo ha sido en todo momento la de potenciar la versatilidad del mismo. Es decir, la concepción del modelo multizona desarrollado se basa en la idea de establecer un algoritmo de resolución sólido que permita que el planteamiento del problema sea modificado parcialmente mediante la inclusión o modificación de los submodelos que caracterizan distintos fenómenos físicos asociados a este tipo de simuladores. Algunos ejemplos de submodelos que pueden estar sujetos a modificaciones en función tanto de la profundidad deseada durante el proceso

de modelado como del grado de precisión requerido para la obtención de determinados resultados, son los referentes a los mecanismos que controlan el inicio y el posterior desarrollo de la combustión, la transmisión de calor, la inyección de combustible o la determinación de los campos de temperatura y composición química considerados inicialmente. Debido a los argumentos anteriormente expuestos, el proceso de desarrollo del modelo multizona para motores con combustión en modo HCII objeto del presente trabajo está continuamente en revisión, ya que se pueden realizar modificaciones destinadas a mejorar la precisión de los resultados o la economía de los recursos consumidos en función de distintos criterios, como puede ser la disponibilidad de datos experimentales medidos en laboratorio o procedentes de simulaciones realizadas con otras plataformas como, por ejemplo, los códigos fluido-dinámicos.

A continuación se procederá a describir detalladamente el planteamiento establecido para el modelo multizona desarrollado. En primer lugar cabe resaltar que, como consecuencia del criterio de maximización de la versatilidad del modelo que deriva de la filosofía previamente mencionada, el número de zonas en las que se divide la cámara de combustión es un parámetro libre. Es decir, el modelo permite la resolución de simulaciones considerando cualquier número de subvolúmenes, siendo la única restricción la impuesta por el equipo informático donde se proceda a resolver las simulaciones, debido a la tendencia creciente del tiempo de computación a medida que el número de subvolúmenes considerados aumenta. Cuando se analicen los resultados derivados del modelo multizona se comprobará que esta característica dota al modelo de un alto valor añadido ya que de otra forma se impondrían limitaciones artificiales que pondrían en cuestión la exactitud de los resultados numéricos obtenidos.

En el modelo multizona desarrollado cada una de las zonas elementales en las que se divide la cámara de combustión posee una ubicación espacial determinada, la cual condicionará los fenómenos físicos que tendrán lugar en ella, como por ejemplo la transferencia de calor o de masa. La configuración y posición relativa de las zonas elementales son determinadas mediante consideraciones geométricas que pueden estar basadas en distintos criterios.

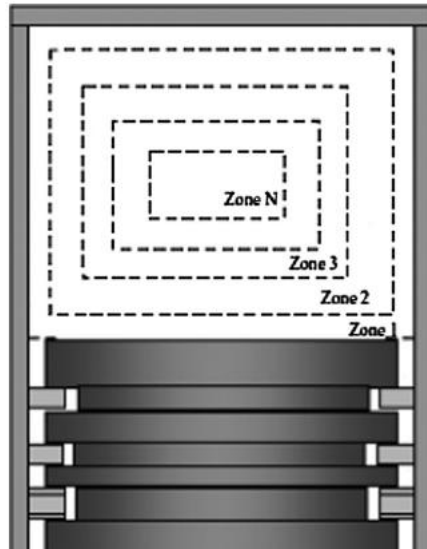


Figura 4. 1: Representación esquemática de la discretización de la cámara de combustión en el modelo multizona propuesto [182].

Aunque existen otros planteamientos válidos para realizar la discretización de la cámara de combustión, el criterio empleado en el modelo multizona desarrollado, el cual puede ser modificado a criterio del usuario, consiste en dividir la cámara de combustión en un número determinado de cilindros concéntricos, de forma que cada uno de ellos represente en todo instante un porcentaje fijo con respecto al volumen total de la cámara de combustión (Figura 4. 1).

Respecto al tamaño relativo de cada subvolumen, la solución implementada en el modelo objeto del presente trabajo dota de un mayor tamaño a los subvolúmenes alojados en el núcleo de la cámara, considerando por tanto que los situados en la periferia representan una menor fracción de volumen. Este criterio trata de reproducir las evidencias que demuestran que la zona central de la cámara de combustión, denominada bulbo, presenta un alto grado de homogeneidad, ubicándose las zonas no homogéneas en temperatura y composición en una reducida zona en contacto con las paredes de la cámara, la cual se denomina capa límite [184]. Procediendo de la forma expuesta se logra incidir en las zonas donde más detalle se requiere, lo que corresponde a la periferia de la cámara de combustión. El inconveniente asociado a este criterio radica en el hecho de que se requiere un amplio conocimiento de las dimensiones relativas del bulbo y la capa límite para proceder a una

discretización satisfactoria. El número de subvolúmenes y el tamaño relativo de cada uno de éstos se discutirá en el Capítulo 5 del presente documento.

Una característica destacable del modelo multizona propuesto en el presente trabajo consiste en la capacidad de las distintas zonas elementales consideradas de intercambiar masa y energía entre ellas según las leyes físicas que se expondrán en apartados posteriores. Este hecho posee una gran importancia, ya que, como se indicó en el Capítulo 2, no todos los modelos multizona disponibles en la bibliografía incorporan la posibilidad simultánea de que los subvolúmenes derivados de la discretización de la cámara de combustión puedan intercambiar masa y energía. Sin embargo, cabe destacar que existen algunos modelos que sí ofrecen esta posibilidad, ya sea durante la totalidad del periodo de simulación considerado o simplemente durante una fracción de éste. Mediante la posibilidad de contemplar intercambios de masa y energía para la totalidad de las zonas durante el periodo de simulación completo se consiguen las condiciones propicias para la obtención de distribuciones de temperatura y composición semejantes a las existentes realmente en el interior de la cámara de combustión.

Otra característica que conviene destacar en relación al modelo multizona desarrollado consiste en la posibilidad de admitir un planteamiento que contemplase la resolución de un mecanismo cinético-químico de cualquier tipo, aunque en primera instancia no se ha optado por esta solución debido a la contraprestación que entraña este tipo de enfoque. La posibilidad de emplear un mecanismo cinético-químico en cualquiera de sus variantes presenta únicamente el inconveniente del significativo aumento del tiempo de computación requerido para la resolución de las simulaciones, lo que implica una pérdida de atractivo desde el punto de vista de la obtención de resultados suficientemente precisos en un tiempo de computación breve. Este inconveniente resulta crítico en aplicaciones orientadas al desarrollo de controladores para la combustión en modo HCCI, donde se requiere la obtención de resultados en tiempo real, así como unos elevados requisitos de simplicidad en relación al modelo, derivando estos requisitos de las limitaciones del hardware empleado típicamente. El espectro de mecanismos cinéticos es muy variado, pero incluso los mecanismos más sencillos inducirían un grado de

complejidad tal que el consumo de recursos requeridos para simular el sistema serían excesivos para su aplicación en dispositivos de control de la combustión en modo HCCI.

Debido a la ausencia de mecanismos cinético-químicos en el actual planteamiento del modelo multizona, los cuales establezcan el instante en el que se produce la autoignición y gobiernen el posterior desarrollo de la combustión, se ha recurrido a modelar tanto el inicio de la combustión como la tasa de liberación de calor mediante leyes funcionales que serán expuestas posteriormente. Aunque a priori pueda parecer que el uso de leyes funcionales limita la bondad del modelo de una manera más restrictiva que el empleo de mecanismos cinético-químicos, la combinación del modelado multizona y el uso de leyes funcionales proporciona resultados óptimos a la vez que se reduce significativamente la complejidad del planteamiento realizado. Para que las leyes funcionales empleadas proporcionen resultados válidos en distintas condiciones operativas se ha procedido a la optimización de las mismas mediante la confrontación de los resultados obtenidos con datos procedentes de mediciones experimentales (Capítulo 5). Es decir, se ha procedido al desarrollo de un algoritmo cuya finalidad es la obtención de leyes funcionales que proporcionen el punto de ignición y la evolución de la tasa de liberación de calor asociada a la combustión en condiciones HCCI del motor analizado. Como se expondrá con posterioridad, el citado algoritmo de optimización se basa en la metodología de los mínimos cuadrados y su objetivo es la minimización del error existente entre la curva de presión en cámara medida experimentalmente y la evolución de la presión derivada de la simulación realizada mediante el modelo multizona en las mismas condiciones operativas. Cabe destacar que, debido a la fuerte no linealidad que presentan las funciones consideradas, el proceso de optimización ha resultado bastante complejo, ya que los resultados obtenidos no representaban siempre óptimos absolutos, sino locales.

Finalmente, antes de proceder al análisis de las variables y ecuaciones englobadas en el modelo multizona, conviene señalar que se ha adoptado el Sistema Internacional de Unidades para proceder al planteamiento de la totalidad del sistema requerido para el desarrollo del modelo multizona

destinado a la simulación del comportamiento de motores con combustión en modo HCCI propuesto en el presente trabajo.

4.3. Variables principales

En primer lugar es conveniente señalar que el número de variables que se requiere contemplar, es decir, el número de grados de libertad del sistema constituido por el modelo multizona, depende directamente del número de zonas en las que se discretice la cámara de combustión. Dado que, como se comentó con anterioridad, el modelo multizona objeto de este capítulo se ha desarrollado de forma que el número de subvolúmenes considerado durante las simulaciones sea un parámetro más, las variables asociadas al problema también dependerán del número de zonas contemplado en cada resolución del sistema. En otras palabras, el modelo multizona desarrollado tiene la capacidad de resolver el sistema asociado al comportamiento del motor con combustión en modo HCCI contemplando cualquier número de variables, las cuales serán únicamente dependientes del número de zonas en las que se divida la cámara de combustión. Cuanto mayor sea el número de subvolúmenes considerados, mayor será el número de grados de libertad del sistema, por lo que la resolución del mismo requerirá una mayor cantidad de recursos, lo que se traduce en un aumento del tiempo de computación requerido para la obtención de los resultados asociados a unas determinadas condiciones operativas.

A continuación se procederá a analizar la totalidad de las variables asociadas al sistema contemplado en el modelo multizona objeto del presente trabajo. Asimismo, se procederá a especificar las unidades correspondientes a cada una de las magnitudes físicas que se analizan en los párrafos siguientes.

4.3.1. Presión

Anteriormente ya se adelantó que, a pesar de que los modelos multizona posibilitan la existencia de gradientes espaciales de temperatura y composición

química en el interior de la cámara de combustión, la presión existente en la misma debe ser única. Es decir, todos los subvolúmenes contemplados se encontrarán a la misma presión, la cual será única para todos ellos e idéntica a la asociada a la totalidad de la cámara de combustión.

La presión se expresará en Pascales (Pa).

4.3.2. Temperatura

En base a las consideraciones anteriores se concluye que se considerará una variable asociada a la temperatura de cada zona en la que se divide la cámara de combustión del motor.

La unidad correspondiente a las distintas temperaturas contempladas será el grado Kelvin (K).

4.3.3. Masa

Con respecto a las variables asociadas a la magnitud “masa” caben dos posibilidades en referencia a las unidades empleadas: el kilogramo (kg) y el mol, las cuales se hallan vinculadas a través del peso molecular (kg/kmol) de cada sustancia química considerada.

La determinación del número de variables asociadas a la magnitud “masa” es la que presenta un mayor grado de complejidad, debido a la existencia de diferentes enfoques para proceder a su resolución. A continuación se analizará la opción adoptada para el planteamiento del modelo multizona desarrollado.

Masa alojada en una zona

Es lógico establecer que la totalidad de la masa alojada en la cámara de combustión no se distribuirá de forma homogénea en todos los subvolúmenes contemplados debido a la existencia de un campo de temperatura no homogéneo. La no homogeneidad en el campo de temperaturas, unido a la

existencia de una única presión para todas las zonas que componen la cámara de combustión, se traduce en la no homogeneidad de la densidad de las distintas zonas, por lo que la masa alojada en cada una de ellas será una variable independiente.

Es decir, se considerará una nueva variable independiente por cada volumen contemplado, la cual estará asociada a la masa total alojada en cada uno de ellos.

Masa intercambiada entre dos zonas contiguas

Dado que el modelo multizona desarrollado permite el intercambio de masa entre los distintos subvolúmenes que componen la cámara de combustión habrá que plantear la forma de contemplar estos intercambios en el sistema asociado al modelo del motor con combustión en modo HCCI.

Se ha definido una variable independiente asociada a la masa intercambiada a través de cada una de las fronteras existentes entre zonas contiguas. De esta forma en un modelo con N zonas se tendrán N-1 masas intercambiadas entre zonas contiguas.

Es importante destacar que esta variable no aporta interés en sí, sino que es su derivada con respecto al tiempo la que realmente aporta información desde el punto de vista del análisis de los procesos físicos que tienen lugar en el interior de la cámara de combustión del motor contemplado. La mencionada derivada representa el gasto de masa que fluye entre dos volúmenes contiguos en cada instante (kg/s).

Masa de una especie química alojada en una zona

Aunque previamente se ha contemplado una variable independiente asociada a la totalidad de la masa alojada en cada una de las zonas que componen la cámara de combustión, ciertos planteamientos requieren la inclusión de variables que representen la masa de una determinada especie química alojada en cada subvolumen concreto.

Para un modelo multizona que contemple la división de la cámara de combustión en N zonas y la existencia de S especies químicas distintas se deberán considerar $N \cdot S$ nuevas variables independientes.

Aunque no se trata de la única posibilidad, el planteamiento actual del modelo multizona desarrollado implica la inclusión de siete (7) especies químicas distintas:

- Combustible (a pesar de estar constituido por la mezcla de diversos compuestos, el combustible se modela como un gas ideal con propiedades variables con la temperatura [181] [183]).
- Oxígeno.
- Nitrógeno.
- Dióxido de carbono.
- Agua.
- Monóxido de carbono.
- Óxidos de nitrógeno (NO_x).

El hecho de incluir únicamente estas siete especies se debe a que se han considerado las cuatro especies involucradas en la oxidación completa de un hidrocarburo (combustible, oxígeno, dióxido de carbono y agua), el nitrógeno, y las emisiones cuyos comportamientos se pretenden analizar (monóxido de carbono y óxidos de nitrógeno).

En el caso de que se optase por la inclusión de un modelo cinético-químico, ya sea reducido o extendido, el modelo estaría perfectamente adecuado para ello, requiriéndose únicamente la ampliación del número de variables y por lo tanto de ecuaciones contempladas por el modelo multizona. Es necesario recalcar que ampliaciones de este tipo suponen un gran aumento del tiempo de computación requerido para la obtención de resultados, sin que ello suponga una sustancial mejora de los resultados obtenidos.

4.3.4. Inicio de la combustión

El planteamiento actual del modelo multizona se basa en leyes funcionales para determinar tanto el punto de ignición de la mezcla como la evolución de la tasa de liberación de calor, según se expuso con anterioridad. Con respecto a la citada ley funcional para la determinación del inicio de la combustión cabe destacar que se basa en una variable temporal cuya integración es requerida durante el periodo de simulación, por lo que debe ser contemplada como una variable independiente más del modelo.

De esta forma se tiene una variable independiente más por cada zona considerada, ya que la ignición de una zona se produce de forma independiente de las correspondientes al del resto de zonas en las que se discretiza la cámara de combustión del motor estudiado.

La unidad correspondiente al inicio de la combustión de cada zona será el segundo (s), por tratarse de una magnitud de tiempo.

4.3.5. Formulación del problema

A partir de la información expuesta en los párrafos anteriores se puede concluir que el planteamiento del modelo multizona desarrollado, en el que la cámara de combustión del motor analizado se divide en N subvolúmenes y se contemplan S especies químicas, tiene $(4+S) \cdot N$ grados de libertad. Es decir, la resolución del modelo multizona involucra a un total de $(4+S) \cdot N$ variables independientes.

Dado que actualmente se contemplan únicamente las siete especies químicas previamente mencionadas se concluye que la simulación mediante el modelo multizona propuesto requiere que se contemplen $11 \cdot N$ variables independientes.

Las variables consideradas actualmente en un modelo de N zonas independientes se resumen a continuación:

- 1 presión.
- N temperaturas.
- N masas alojadas en zonas.
- N-1 masas intercambiadas entre zonas contiguas.
- N masas de combustible.
- N masas de oxígeno.
- N masas de nitrógeno.
- N masas de dióxido de carbono.
- N masas de agua.
- N masas de monóxido de carbono.
- N masas de óxidos de nitrógeno.
- N inicios de la combustión.
- **11·N variables en total.**

4.4. Ecuaciones de gobierno

Tras el análisis llevado a cabo previamente en relación al número de variables principales involucradas en la resolución del sistema asociado al modelo multizona para motores con combustión en modo HCCI, a continuación se procederá a plantear el sistema de ecuaciones que gobierna la evolución temporal de las variables antes citadas.

Seguidamente se realizará la revisión de cada una de las ecuaciones principales que gobiernan el comportamiento de las variables involucradas en el modelo multizona desarrollado.

Dada la extensa nomenclatura empleada en las ecuaciones mostradas en los siguientes subapartados, al final del presente capítulo se ha procedido a recapitular la definición de todas las variables involucradas en las ecuaciones expuestas.

NOTA: Es preciso destacar que el planteamiento del sistema de ecuaciones diferenciales que conforma el modelo multizona se ha realizado en función del tiempo, estableciéndose la siguiente relación entre las variaciones angulares y las variaciones temporales:

$$\frac{dF(\theta)}{d\theta} = \frac{dF(t)}{dt} \cdot \frac{60}{rpm \cdot 2 \cdot \pi} \quad \text{Ecuación 4.1}$$

En relación a la expresión anterior cabe aclarar que se ha asumido una velocidad de giro constante, lo cual no es siempre cierto, especialmente en motores monocilíndricos como el ensayado en este trabajo. Asimismo, la expresión \dot{F} hace referencia a la derivada de la función $F(t)$ con respecto al tiempo, es decir:

$$\dot{F} = \frac{dF(t)}{dt} \quad \text{Ecuación 4.2}$$

4.4.1. Primer Principio de la Termodinámica

El modelo desarrollado estará sujeto a las restricciones impuestas por el Primer Principio de la Termodinámica. Esta restricción se traduce en la imposición de una ecuación a cada uno de los subvolúmenes en los que se divide la cámara de combustión.

De una forma bastante resumida, el Primer Principio de la Termodinámica expresa matemáticamente que la variación del contenido energético de un

volumen de control abierto se realiza en forma de trabajo, de calor y/o de intercambios de masa, y por tanto de energía, con el entorno que lo circunda.

La formulación del Primer Principio de la Termodinámica que se ha empleado se caracteriza por corresponder a un volumen de control abierto y por estar planteada en términos de potencia, si bien conviene destacar que se han despreciado los términos correspondientes a la energía cinética:

$$\dot{U}_i = \dot{W}_i + \dot{Q}_i + \dot{M}_i \cdot h_i \quad \text{Ecuación 4.3}$$

Donde U representa a la energía interna, W al trabajo, Q al calor, M a la masa, h a la entalpía por unidad de masa y el subíndice “i” indica que las variables anteriores están asociadas al subvolumen i-ésimo.

Respecto a la energía interna del subvolumen i, conviene iniciar exponiendo que ésta puede expresarse en función de la energía interna por unidad de masa del subvolumen i (u_i):

$$U_i = M_i \cdot u_i \quad \text{Ecuación 4.4}$$

$$\dot{U}_i = \dot{M}_i \cdot u_i + M_i \cdot \dot{u}_i = \dot{M}_i \cdot u_i + M_i \cdot \frac{\delta u_i}{\delta T} \cdot \dot{T}_i \quad \text{Ecuación 4.5}$$

Donde T_i corresponde a la temperatura de la zona i-ésima.

Por otro lado, la energía interna por unidad de masa del subvolumen i puede expresarse en función del calor específico a volumen constante del subvolumen i ($C_{v_i}(T_i)$):

$$\frac{\delta u_i}{\delta T} = C_{v_i}(T_i) \quad \text{Ecuación 4.6}$$

$$u_i = \int_{T_0}^T C_{v_i}(T_i) dT \quad \text{Ecuación 4.7}$$

Combinando las ecuaciones anteriormente expuestas se puede describir el primer miembro de la ecuación del Primer Principio de la Termodinámica:

$$\dot{U}_i = \dot{M}_i \cdot \int_{T_0}^T C_{v_i}(T_i) dT + M_i \cdot C_{v_i}(T_i) \dot{T}_i \quad \text{Ecuación 4.8}$$

Respecto a la derivada temporal del trabajo desarrollado en el subvolumen i , ésta puede ser expresada como se muestra a continuación:

$$\dot{W}_i = -P \cdot \dot{V}_i \quad \text{Ecuación 4.9}$$

Donde P corresponde a la presión en la cámara de combustión y V_i al volumen de la zona i -ésima.

En el planteamiento aplicado en el presente trabajo el calor intercambiado por cada subvolumen puede deberse a dos factores distintos. El primero de ellos es el calor liberado durante la combustión acontecida en cada subvolumen (TLQ_i), el cual siempre posee signo positivo. El segundo de los factores que pueden modificar el calor contenido en un determinado subvolumen es la transferencia de calor a través de los distintos volúmenes de control (H_{LOSSES}). Conviene aclarar que en el modelo objeto del presente trabajo únicamente se considera transferencia de calor a través de las paredes de la cámara de combustión, no considerándose transferencia de calor entre zonas contiguas. Como se verá posteriormente sí se considera transferencia de energía asociada a los distintos flujos de masa entre los subvolúmenes. El término correspondiente a la transferencia de calor tendrá signo positivo cuando se trate de pérdidas de energía, es decir cuando la transferencia se produzca desde los gases alojados en la cámara de combustión hacia las paredes de la misma. De esta forma, la variación de calor en un subvolumen i puede expresarse como se muestra a continuación:

$$\dot{Q}_i = TLQ_i - \dot{H}_{LOSSES} \quad \text{Ecuación 4.10}$$

Finalmente, el término correspondiente al intercambio de entalpía entre el subvolumen i y otros subvolúmenes contiguos puede expresarse como se muestra a continuación:

$$\dot{M}_i \cdot h_i = \dot{M}_i^{IN} \cdot h_y - \dot{M}_i^{OUT} \cdot h_i \quad \text{Ecuación 4.11}$$

Donde M_i^{IN} corresponde a la masa recibida en el subvolumen i-ésimo, M_i^{OUT} a la masa que abandona el subvolumen i-ésimo y el subíndice “y” se refiere al subvolumen y-ésimo, contiguo al subvolumen i-ésimo.

De forma análoga a la energía interna por unidad de masa, la entalpía por unidad de masa del subvolumen i puede expresarse en función del calor específico a presión constante del subvolumen i ($Cp_i(T_i)$):

$$h_i = \int_{T_0}^T Cp_i(T_i) dT \quad \text{Ecuación 4.12}$$

Combinando las ecuaciones anteriormente expuestas, la variación de entalpía en el subvolumen i puede expresarse como se muestra a continuación:

$$\dot{M}_i \cdot h_i = \dot{M}_i^{IN} \cdot \int_{T_0}^T Cp_y(T_y) dT - \dot{M}_i^{OUT} \cdot \int_{T_0}^T Cp_i(T_i) dT \quad \text{Ecuación 4.13}$$

Tras combinar las ecuaciones expuestas con anterioridad, el Primer Principio de la Termodinámica puede expresarse como de se muestra a continuación:

$$\dot{M}_i \cdot \int_{T_0}^T Cv_i(T_i) dT + M_i \cdot Cv_i(T_i) \dot{T}_i = -P \cdot \dot{V}_i + TLQ_i - \dot{H}_{LOSSES} + \dot{M}_i^{IN} \cdot \int_{T_0}^T Cp_y(T_y) dT - \dot{M}_i^{OUT} \cdot \int_{T_0}^T Cp_i(T_i) dT$$

Ecuación 4.14

En un sistema en el que la cámara de combustión se divide en N zonas, se dispondrá un total de N ecuaciones del Primer Principio de la Termodinámica, una para cada subvolumen considerado por el modelo multizona.

4.4.2. Ecuación de Estado

Para relacionar las magnitudes termodinámicas asociadas a un determinado volumen de control se empleará como Ecuación de Estado la Ley de los Gases Ideales. La validez de esta ley se sustenta en los valores de presión y temperatura que se manejan típicamente en los sistemas asociados a los motores de combustión interna alternativos [181].

Al igual que ocurre con la formulación del Primer Principio de la Termodinámica anteriormente expuesto, la Ley de los Gases Ideales considerada también se encontrará derivada con respecto al tiempo:

$$P \cdot V_i = n_i \cdot k \cdot T_i = \frac{M_i}{PM_i} \cdot k \cdot T_i = M_i \cdot R_i \cdot T_i \quad \text{Ecuación 4.15}$$

$$\dot{P} \cdot V_i + P \cdot \dot{V}_i = \dot{M}_i \cdot R_i \cdot T_i + M_i \cdot \dot{R}_i \cdot T_i + M_i \cdot R_i \cdot \dot{T}_i \quad \text{Ecuación 4.16}$$

Donde las únicas variables no mencionadas previamente son n , que representa al número de moles, y PM , asociada al peso molecular, ambas referidas, al igual que anteriormente, al subvolumen i -ésimo. Como se puede comprobar, R_i (J/(kg·K)) denota el cociente de la constante universal de los gases k (8.314 J/(mol·K)) y el peso molecular medio asociado a la mezcla alojada en la zona i -ésima. Es necesario hacer notar que, aunque la derivada de la constante universal de los gases k sería nula, la derivada de R_i puede ser distinta de cero, ya que posee dependencia con respecto al tiempo. Esta dependencia se produce a través de la variación del peso molecular medio de la mezcla alojada en un determinado subvolumen, el cual cambia durante las fases analizadas debido, entre otras razones, a la existencia de reacciones químicas asociadas a la oxidación del combustible.

Se tendrá una Ecuación de Estado para cada uno de los subvolúmenes considerados por el modelo multizona, lo que se traduce en un total de N ecuaciones aportadas al sistema global de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden.

4.4.3. Balances de masa total en cada zona

Dado que el planteamiento seleccionado para el desarrollo del modelo multizona objeto del presente capítulo permite la existencia de intercambios de masa entre subvolúmenes contiguos, es necesaria la introducción de restricciones que gobiernen los mencionados flujos de masa. Con esta finalidad

se considerará un balance de masa para cada una de las zonas que componen la cámara de combustión del motor.

Es preciso destacar que, a diferencia de lo que ocurre con el siguiente grupo de ecuaciones, los balances de masa aquí mencionados se refieren a la variación de la masa total alojada en un subvolumen, sin hacer referencia a las distintas especies químicas que la componen.

La formulación empleada se muestra a continuación, donde las variables involucradas han sido previamente definidas:

$$\dot{M}_i - \dot{M}_i^{IN} + \dot{M}_i^{OUT} = 0 \quad \text{Ecuación 4.17}$$

Considerando un modelo en el que la cámara de combustión del motor se divide en N zonas, será necesario plantear N ecuaciones de balance de masa como la mostrada previamente, una por cada subvolumen considerado.

4.4.4. Balances de especies en cada zona

Se considera un balance de masa para cada especie química alojada en un determinado subvolumen. A diferencia de lo que ocurre en los balances de masa asociados a la totalidad de la masa alojada en una determinada zona, la variación de la masa de una especie química no sólo se debe a los intercambios de masa entre zonas contiguas, sino que además se produce variación temporal debido a la presencia de reacciones químicas.

El planteamiento elegido es el siguiente:

$$\dot{M}_i^k - \dot{M}_i^{INk} + \dot{M}_i^{OUTk} = \dot{M}_i^{REAk} \quad \text{Ecuación 4.18}$$

Donde se ha introducido el término \dot{M}_i^{REAk} para representar la variación de la masa de la especie k-ésima en la zona i-ésima debido a las reacciones químicas.

En un modelo multizona en el que se consideren N subvolúmenes y S especies químicas se considerarán N·S ecuaciones de balances de especies químicas. Dado que el actual planteamiento del sistema contempla la existencia de siete especies químicas distintas, se considerarán un total de 7·N ecuaciones de este tipo.

4.4.5. Formulación del inicio de la combustión

Se ha adelantado en varias ocasiones que el planteamiento del modelo multizona desarrollado no contempla un mecanismo cinético-químico, razón por la cual se ha optado por modelar el inicio de la combustión mediante una ley funcional.

La ley funcional seleccionada se basa en la definición de un parámetro, designado τ , para la determinación del instante de tiempo t_{IG} en el que se produce la ignición de la mezcla contenida en la zona considerada. La determinación se lleva a cabo de la siguiente forma:

$$\int_0^{t_{IG}} \frac{1}{\tau} = 1 \quad \text{Ecuación 4.19}$$

La definición del parámetro τ para la zona i-ésima se muestra a continuación [100]:

$$\tau_i = A_D \cdot \rho_i^{B_D} \cdot [O_2]_i^{C_D} \cdot [Fuel]_i^{D_D} \cdot EXP\left(\frac{E_D}{R_i \cdot T_i}\right) \quad \text{Ecuación 4.20}$$

Donde A_D , B_D , C_D , D_D y E_D son constantes calibradas experimentalmente, según el procedimiento expuesto en el Capítulo 5 del presente documento. Asimismo, ρ denota la densidad y los corchetes se emplean para referirse a la concentración de una determinada especie química.

El procedimiento anteriormente expuesto requiere de la inclusión de una ecuación idéntica a la anterior para cada volumen considerado, por lo que para

el desarrollo de un modelo con N zonas se tendrán que añadir al sistema N nuevas ecuaciones diferenciales.

4.4.6. Problema formulado

Al igual que se hizo tras la exposición de las variables involucradas en el proceso de modelado, a continuación se procederá a realizar una recapitulación de las ecuaciones matemáticas expuestas con anterioridad, las cuales gobiernan los procesos físico-químicos que tienen lugar en la cámara de combustión de los motores cuando se procede a realizar un modelado multizona. Las ecuaciones empleadas para proceder al modelado de un motor donde se contemplan siete especies químicas y cuya cámara de combustión se divide en N zonas distintas son las siguientes:

- N ecuaciones correspondientes al Primer Principio de la Termodinámica.
- N ecuaciones de la Ley de los Gases Ideales derivada.
- N balances de masa total alojada en una zona
- N balances de combustible.
- N balances de oxígeno.
- N balances de nitrógeno.
- N balances de dióxido de carbono.
- N balances de agua.
- N balances de monóxido de carbono.
- N balances de óxidos de nitrógeno.
- N ecuaciones para el inicio de la combustión.
- **11·N ecuaciones en total.**

Dado que el número de ecuaciones planteadas, todas linealmente independientes, coincide con el de variables involucradas, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden, resoluble mediante el uso de herramientas informáticas apropiadas.

4.5. Ecuaciones auxiliares

En algunas de las ecuaciones diferenciales mostradas con anterioridad aparecen una serie de expresiones que involucran a derivadas con respecto al tiempo de funciones que no son inmediatamente deducibles. Por esta razón se expone a continuación una serie de expresiones auxiliares destinadas a proporcionar una mejor comprensión del planteamiento aplicado a la construcción del modelo multizona desarrollado.

4.5.1. Relaciones termodinámicas

Con respecto a la derivada con respecto al tiempo de la variable R_i cabe realizar las siguientes aclaraciones:

$$R_i = \frac{k}{PM_i} \quad \text{Ecuación 4.21}$$

$$\dot{R}_i = k \cdot (-1) \cdot PM_i^{-2} \cdot \dot{PM}_i \quad \text{Ecuación 4.22}$$

Por otro lado, la derivada con respecto al tiempo del peso molecular medio de la mezcla alojada en la zona i -ésima requiere las siguientes aclaraciones:

$$PM_i = \frac{M_i}{n_i} = \frac{M_i}{\sum_k \frac{M_i^k}{PM^k}} \quad \text{Ecuación 4.23}$$

$$\dot{PM}_i = \dot{M}_i \cdot \left(\sum_k \frac{M_i^k}{PM^k} \right)^{-1} - M_i \cdot \left(\sum_k \frac{M_i^k}{PM^k} \right)^{-2} \cdot \sum_k \frac{\dot{M}_i^k}{PM^k} \quad \text{Ecuación 4.24}$$

4.5.2. Tasa de liberación de calor

Se expone la ley funcional empleada para el modelado de la evolución temporal de la tasa de liberación de calor de cada uno de los subvolumenes que componen la cámara de combustión en el modelo multizona desarrollado [100]. Cabe destacar que la ley funcional usada en el modelo multizona no proporciona directamente el valor del calor liberado debido a la oxidación del combustible, sino que se trata de una expresión para la obtención de la tasa de desaparición del combustible:

$$\dot{M}_i^{REA} \Big|^{FUEL} = A_C \cdot \rho_i^{B_C} \cdot [O_2]_i^{C_C} \cdot [Fuel]_i^{D_C} \cdot EXP\left(\frac{E_C}{R_i \cdot T_i}\right) \quad \text{Ecuación 4.25}$$

Donde A_C , B_C , C_C , D_C y E_C son constantes calibradas experimentalmente, según el procedimiento expuesto en el Capítulo 5 del presente documento. Finalmente sólo cabe destacar que la evolución de la liberación de calor y la tasa de desaparición de combustible están ligadas a través del poder calorífico del combustible considerado:

$$TLQ_i = \dot{M}_i^{REA} \Big|^{FUEL} \cdot PCI^{FUEL} \quad \text{Ecuación 4.26}$$

Donde todas las variables han sido previamente definidas, salvo PCI^{FUEL} que denota el poder calorífico inferior del combustible empleado en las simulaciones.

4.5.3. Transferencia de calor

A lo largo de los años se han desarrollado distintas leyes funcionales para el cálculo del coeficiente instantáneo de transferencia de calor tanto en MEP como en MEC [185] [186] [187] [188] [189] [190] [191] [192] [193] [194]. Sin embargo, la ley funcional de Woschni, la más popular entre las anteriores, ha demostrado no ser totalmente adecuada para modelar las pérdidas de calor en

motores con combustión en modo HCCI debido al significativo cambio respecto de las condiciones consideradas originariamente en su desarrollo para MEC. A diferencia las leyes funcionales propuestas por otros autores, en la ley de Woschni se considera que la velocidad del gas en el interior de la cámara de combustión se compone de dos términos. El primero de estos términos de velocidad está asociado a la región sin quemar y es proporcional a la velocidad media del pistón, mientras que el segundo término corresponde a la velocidad impuesta por la combustión y se considera proporcional a la diferencia de presiones entre las condiciones de motor arrastrado y de combustión. Mediante este enfoque se aplica una velocidad constante durante la carrera de compresión, mientras que durante la combustión se introduce un aumento de la velocidad de los gases. A pesar de lo anteriormente referido, la ley funcional de Woschni no es adecuada para motores con combustión en modo HCCI, ya que infravalora el flujo de calor durante la etapa de compresión, mientras que lo sobrevalora durante la fase de combustión. Como es lógico la minoración de las pérdidas térmicas durante la fase de compresión hace que los distintos modelos de combustión en modo HCCI que aplican la ley funcional de Woschni tiendan a predecir adelantos de la ignición y curvas de presión erróneas.

Debido a los motivos anteriormente expuestos, el modelo de pérdidas térmicas empleado en el presente trabajo se basa en los desarrollos de Chang et al. [195], quienes caracterizaron experimentalmente el flujo de calor en diversos puntos de la cámara de combustión en modo HCCI, concluyendo que la variación espacial del flujo era mínima, al contrario que en los MEP donde se produce el avance de un frente de llama. Este hecho confirma la elevada uniformidad de las condiciones en el interior de la cámara de combustión de los motores con operación en modo HCCI, lo que permite realizar un tratamiento uniforme del flujo de calor en la totalidad de la cámara de combustión de los modelos. En comparación con los MEP, el flujo de calor máximo en motores con combustión en modo HCCI es menor. De acuerdo a la investigación de los autores previamente referenciados, el mecanismo dominante en la transferencia de calor en los motores con combustión en modo HCCI es la convección forzada entre los gases alojados en la cámara de combustión y las paredes de ésta, mientras que la radiación no representa un papel relevante

debido a la baja presencia de partículas y la relativamente baja temperatura máxima en la combustión en modo HCCI.

Como se ha referido con anterioridad, el modelo de pérdidas de calor empleado en el presente trabajo se sustenta en el trabajo de Chang et al., el cual se basa en el modelo propuesto por Woschni pero posee las siguientes características propias:

- La longitud característica considerada es el valor instantáneo de la altura de la cámara de combustión.
- El exponente de la temperatura se reduce del 0,8 propuesto inicialmente por Woschni a 0,73.
- Aunque inicialmente Chang et al. intentaron ajustar la ley de pérdidas de calor eliminando el término de velocidad del gas correspondiente a la combustión, posteriormente verificaron que para que la ley resultante fuera universal y permitiera reproducir el efecto del cambio de carga del motor, éste era necesario aunque con una relevancia menor de la inicialmente considerada por Woschni para las combustiones convencionales. De esta forma, la constante que aplica al término de velocidad derivado de la combustión se reduce en 1/6.

Por último, en las siguientes ecuaciones se muestra el modelo empleado para la reproducción de las pérdidas de calor en el modelo multizona propuesto para motores con combustión en modo HCCI:

$$h(t) = \alpha_{scaling} \cdot L(t)^{-0.2} \cdot P(t)^{0.8} \cdot T(t)^{-0.73} \cdot v(t)^{0.8} \quad \text{Ecuación 4.27}$$

Donde h es el coeficiente de transferencia, $\alpha_{scaling}$ un coeficiente de ajuste, L la longitud característica y $v(t)$ representa la velocidad media de los gases en la cámara de combustión, definiéndose como se indica a continuación:

$$v(t) = C_1 \cdot \bar{S}p + \frac{C_2}{6} \cdot \frac{Vd \cdot Tr}{Pr \cdot Vr} \cdot (P(t) - P_{mot}(t)) \quad \text{Ecuación 4.28}$$

Donde C_1 y C_2 son los dos coeficientes ajustables definidos en el modelo original de Woschni, \bar{S}_p es la velocidad lineal media del pistón, V_d es la cilindrada del motor, el subíndice “r” denota un ángulo de giro de referencia como por ejemplo el correspondiente al cierre de la válvula de admisión y $P_{mot}(t)$ es la presión en la cámara de combustión en condiciones de motor arrastrado.

4.5.4. Fugas de masa

Existen diversas referencias destacables en relación a las fugas de masa desde la cámara de combustión al cárter a través de los segmentos, fenómeno conocido como “blow-by” [196] [197] [198] [199]. En este trabajo el blow-by ha sido considerado mediante un modelo de flujo isentrópico a través de tobera [200], de forma que el flujo de masa instantáneo intercambiado entre la cámara de combustión y el cárter se define como:

$$\dot{M}_{blow-by} = Cd \cdot A_{ref} \cdot P \sqrt{\frac{\eta}{R \cdot T_i}} \quad \text{Ecuación 4.29}$$

Donde el término η se define a continuación:

$$\eta = \frac{2 \cdot \gamma}{(\gamma - 1)} \left[\left(\frac{P_{crk}}{P} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left(\frac{P_{crk}}{P} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right] \quad \text{Ecuación 4.30}$$

Además de la presión, la temperatura, en las ecuaciones anteriores intervienen el ratio entre los calores específicos a presión y volumen constantes γ , el coeficiente de descarga de la tobera Cd , que se ajusta experimentalmente y suele tener valores comprendidos entre 0,6 y 0,86; el área de referencia A_{ref} y la presión en el cárter P_{crk} . En este trabajo se ha considerado el área de referencia propuesto por Hohenberg [201]:

$$A_{ref} = 3.5 \cdot 10^{-6} \cdot D \quad \text{Ecuación 4.31}$$

La expresión anterior para el flujo de masa intercambiado entre la cámara de combustión y el cárter es válida para condiciones subsónicas, es decir:

$$\frac{P_{crk}}{P} < \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} = \frac{P_{crit}}{P} \quad \text{Ecuación 4.32}$$

De lo contrario, el flujo de masa a través de la tobera debe ser calculado considerando la presión crítica P_{crit} , ya que se estaría ante un caso de descarga en condiciones sónicas.

4.5.5. Inyección de combustible

El comportamiento del sistema de inyección se reproduce mediante el empleo del siguiente modelo para flujos incompresibles [181], el cual requiere que se disponga de medidas de presión en el propio sistema de inyección de combustible:

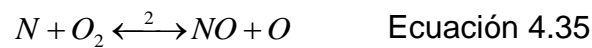
$$\dot{M}_{injection} = Cd \cdot A_{injection} \cdot \sqrt{2 \cdot \rho_{fuel} \cdot (P_{injection} - P)} \quad \text{Ecuación 4.33}$$

Donde:

- $\dot{M}_{injection}$ es el gasto de combustible inyectado en la cámara de combustión.
- Cd es el coeficiente de descarga característico de los orificios del inyector.
- $A_{injection}$ es el área de los orificios del inyector.
- ρ_{fuel} es la densidad del combustible.
- $P_{injection}$ es la presión del combustible aguas arriba del inyector.

4.5.6. Formación de óxidos de nitrógeno

Aunque el término NO_x engloba tanto a las emisiones de monóxido de nitrógeno (NO) como a las de dióxido de nitrógeno (NO₂), las emisiones de NO son predominantes frente a las de NO₂ en los MCIAs, pudiendo alcanzar estas últimas un valor de hasta el 15% respecto a las emisiones de NO en los MEC [181]. Por este motivo, en el presente trabajo las emisiones de NO_x se consideran a través de un modelo de emisiones de NO, el cual se genera principalmente a partir de la oxidación del nitrógeno molecular. Concretamente, se ha adoptado el mecanismo extendido de Zeldovich [202][203], el cual se muestra a continuación:



Las tasas de reacción k_i^+ y k_i^- correspondientes a cada una de las reacciones anteriores pueden ser consultadas en diversas fuentes, habiéndose usado en el presente trabajo los valores propuestos por Heywood [181], así como las siguientes hipótesis consideradas por el mismo autor:

- Dado que la concentración de nitrógeno monoatómico es muy inferior a la del resto de especies involucradas en el mecanismo, se considera que esta sustancia se encuentra en estado estacionario y su concentración no varía con el tiempo.
- Se asume que la formación de NO está desacoplada de la combustión y que las concentraciones de O, O₂, OH, H y N₂ se aproximan a sus correspondientes concentraciones de equilibrio, dado que la generación de NO posterior a la combustión predomina a la generación durante la propia combustión.

Tras la aplicación de las hipótesis anteriores, el mecanismo extendido de Zeldovich conduce a la siguiente tasa de variación de los moles de NO en cada subvolumen:

$$\frac{1}{V_i} \frac{dn_i^{NO}}{dt} = \frac{2 \cdot R_1 \left[1 - \left(\frac{[NO_i]}{[NO_i]_e} \right)^2 \right]}{1 + \left(\frac{[NO_i]}{[NO_i]_e} \right) \frac{R_1}{R_2 + R_3}} \quad \text{Ecuación 4.37}$$

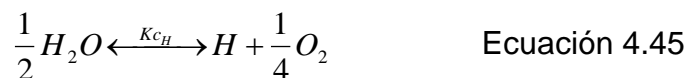
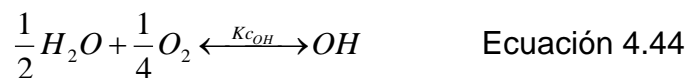
Donde:

$$R_1 = k_1^+ [O]_e [N_2]_e = k_1^- [NO]_e [N]_e \quad \text{Ecuación 4.38}$$

$$R_2 = k_2^+ [N]_e [O_2]_e = k_2^- [NO]_e [O]_e \quad \text{Ecuación 4.39}$$

$$R_3 = k_3^+ [N]_e [OH]_e = k_3^- [NO]_e [H]_e \quad \text{Ecuación 4.40}$$

Es decir, para calcular la tasa de variación de los moles de NO contenidos en cada subvolumen se requiere conocer las concentraciones de equilibrio de NO, N, O, OH y H, para lo cual se resuelve un sistema de ecuaciones no lineales derivadas de las diferentes constantes de equilibrio asociadas a cada una de las reacciones de disociación de cada una de las sustancias previamente mencionadas [204]:



De esta forma, para cada una de las reacciones anteriores se puede establecer una ecuación del tipo:

$$K_{C_i} = \frac{\prod_{Prod} [x_p]^\pi}{\prod_{Reac} [x_r]^\rho} \quad \text{Ecuación 4.46}$$

Las distintas constantes de equilibrio K_c se pueden calcular en función de las constantes de equilibrio expresadas en función de las presiones parciales K_p :

$$K_{C_i} = \frac{K_{p_i}}{(R \cdot T)^{\Delta n}} \quad \text{Ecuación 4.47}$$

Por último, las constantes de equilibrio expresadas en función de las presiones parciales se calculan en función de la energía libre de Gibbs ΔG :

$$K_{p_i} = EXP\left(-\frac{\Delta G}{R \cdot T}\right) \quad \text{Ecuación 4.48}$$

Donde, la energía libre de Gibbs se calcula como se muestra a continuación:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad \text{Ecuación 4.49}$$

Finalmente, las emisiones totales de NO se calculan como la suma del NO generado en cada una de las zonas en las que se ha discretizado la cámara de combustión:

$$n_{TOTAL}^{NO} = \sum_{i=1}^N n_i^{NO} \quad \text{Ecuación 4.50}$$

4.5.7. Formación de monóxido de carbono

El planteamiento adoptado para el modelado de las emisiones de monóxido de carbono es completamente análogo al anteriormente expuesto en relación a las emisiones de NO_x, siendo las reacciones involucradas en el mecanismo las mostradas a continuación:



Las tasas de reacción k_i^+ y k_i^- correspondientes a cada una de las reacciones anteriores han sido adoptadas del trabajo realizado por Arsie et al. [205].

Al igual que en el caso del NO, se considera aceptable la hipótesis de que OH, CO₂ y O₂ se encuentran en estado de equilibrio, por lo que la tasa de variación de los moles de CO en cada subvolumen quedaría como se muestra a continuación:

$$\frac{1}{V_i} \frac{dn_i^{CO}}{dt} = (R_1 + R_2) \left(1 - \frac{[CO]}{[CO]_e} \right) \quad \text{Ecuación 4.53}$$

Donde:

$$R_1 = k_1^+ [CO]_e [OH]_e = k_1^- [CO_2]_e [H]_e \quad \text{Ecuación 4.54}$$

$$R_2 = k_2^+ [CO_2]_e [O]_e = k_2^- [CO]_e [O_2]_e \quad \text{Ecuación 4.55}$$

Finalmente, las concentraciones de equilibrio de las especies involucradas se calculan empleando la misma metodología que en el caso de las emisiones de NO, concluyéndose:

$$n_{TOTAL}^{CO} = \sum_{i=1}^N n_i^{CO} \quad \text{Ecuación 4.56}$$

4.6. Algoritmo de resolución

En el presente apartado se expone el procedimiento utilizado para llevar a cabo la resolución del modelo multizona desarrollado para motores con combustión en modo HCCI, el cual, como se mencionó con anterioridad, está basado principalmente en la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden.

Previamente al comienzo del análisis del algoritmo empleado cabe resaltar que la plataforma en la que se ha programado el mismo consiste en el software MATLAB [179]. Se trata de un lenguaje de programación numérico orientado al tratamiento de matrices. Por esta razón, y con la finalidad de maximizar la eficiencia durante la resolución del problema, se ha optado por realizar un planteamiento basado en la manipulación de vectores. De esta forma se logra dotar al modelo de unas características apropiadas para potenciar la economía de recursos destinados a su resolución, teniendo especial importancia la reducción del tiempo de computación requerido.

En líneas generales las etapas requeridas para la obtención de los resultados mediante el modelo multizona son las que se expresan a continuación:

- 1) Definición de los datos iniciales. El modelo requiere que se le proporcionen cuatro conjuntos de datos iniciales distintos:
 - a. Datos asociados a la geometría del motor y a su régimen de funcionamiento.
 - b. Discretización de la cámara de combustión en subvolúmenes.
 - c. Campo de temperaturas inicial asociado a la división de la cámara de combustión previamente realizada.
 - d. Cantidad de masa introducida en la cámara de combustión por embolada y campo de composición química inicial asociado a la división de la cámara de combustión previamente realizada. La masa total introducida en la cámara se distribuirá en función del campo de temperaturas impuesto con anterioridad. Aunque el modelo multizona desarrollado permite la inclusión de no homogeneidades asociadas a la composición química de los distintos subvolúmenes, se ha optado por seleccionar un campo de composición química homogéneo. Es decir, se supone que todas las zonas poseen inicialmente la misma composición química. Posteriormente, cuando se desencadene paulatinamente la autoignición en las distintas zonas, la composición de cada

zona comenzará a diferenciarse de las del resto. En etapas posteriores del desarrollo se podría emplear un submodelo que permitiese el establecimiento de un campo de composición química realista de forma automática. Finalmente cabe destacar que el modelo multizona propuesto contempla la posibilidad de la introducción de gases de escape recirculados mediante la modificación de las concentraciones iniciales.

- 2) Determinación de la presión inicial en cámara. Dado que las variables impuestas al modelo se basan en la temperatura y la masa iniciales, se hace necesario determinar previamente a la resolución del problema el grado de libertad restante, es decir, la presión. Para ello se aplica la Ley de los Gases Ideales.
- 3) Establecimiento de las condiciones iniciales requeridas para la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales. Cada una de las variables involucradas en el proceso de resolución requiere la asignación de una condición inicial. La mayoría de ellas derivan del tratamiento de los datos obtenidos mediante la manipulación de los datos iniciales introducidos al modelo. Sin embargo, algunas de ellas, como por ejemplo las masas intercambiadas entre zonas contiguas o los distintos instantes de inicio de la combustión, poseen condiciones iniciales cuyo significado no es relevante para el modelo, ya que el objetivo del modelo es la determinación de sus derivadas temporales. A este tipo de variables se les asigna como condición inicial un valor nulo.
- 4) Resolución del sistema de ecuaciones diferenciales. Como se comentó con anterioridad, la resolución del modelo se ha planteado en la plataforma MATLAB, la cual dispone de diferentes alternativas para proceder a la resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales del tipo asociado al modelo de multizona desarrollado. Sin embargo, la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales asociado al modelo multizona no se reduce al empleo de una opción implementada en la mencionada plataforma de programación, sino que requiere el establecimiento de un algoritmo interno que se define a continuación:

- a. Suposición inicial del sentido de los intercambios de masa entre zonas contiguas. Debido a que el modelo multizona desarrollado permite la existencia de intercambios de masa entre zonas contiguas, existe una transferencia de energía asociada a dicho intercambio. La transferencia de energía citada aparece reflejada en la ecuación del Primer Principio de la Termodinámica, por lo que antes de definir el sistema es necesario establecer el sentido del mencionado intercambio con la finalidad de asignar a la corriente el valor apropiado de entalpía. Es decir, en función del sentido del flujo de masa, en la ecuación del Primer Principio de Termodinámica influirá la temperatura de la zona analizada o la de la zona contigua. A pesar de lo enrevesado de la situación y gracias a la poca dependencia que presenta globalmente el sistema de ecuaciones con respecto a las apreciaciones anteriores, se ha definido una sencilla forma de proceder, la cual se basa en el establecimiento de una hipótesis, procediéndose posteriormente a resolver el sistema y a comprobar la validez de la suposición realizada. Por todo ello, el primer paso durante la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales asociado al problema es la adopción de una determinada hipótesis asociada al sentido de los $N-1$ intercambios de masa que se producen en un modelo con N zonas distintas. La hipótesis que inicialmente se establece consiste en asignar sentido positivo a los intercambios de masa, es decir, se supone que éstos se realizan desde las zonas interiores a las exteriores.
- b. Definición del inicio de la combustión y, si procede, de la tasa de desaparición de combustible. En función de las condiciones existentes en cada instante del intervalo de integración se evalúa el valor del parámetro empleado para definir el inicio de la combustión, así como el valor de la tasa de consumo de combustible asociadas a los distintos subvolumenes que componen la cámara de combustión una vez que la combustión ha iniciado. Tanto el inicio de la combustión como la tasa de

desaparición de combustible están definidos por sendas leyes funcionales definidas con anterioridad. Si en algún momento se incorporase un mecanismo cinético-químico al modelo multizona, este paso no sería necesario, ya que serían las ecuaciones asociadas al mencionado mecanismo las que determinasen tanto el instante en el que se produce la autoignición de la mezcla como la evolución de la tasa de liberación de calor asociada a la oxidación del combustible en cada una de las zonas elementales consideradas.

- c. Definición del sistema de ecuaciones diferenciales. Una vez evaluados los parámetros anteriormente mencionados, se está en condiciones de establecer el sistema de ecuaciones diferenciales correspondiente al instante considerado. Debido a que las ecuaciones diferenciales se encuentran acopladas entre sí, es necesario recurrir a un planteamiento matricial para proceder a obtener el valor asociado a cada una de las incógnitas consideradas.
- d. Verificar las hipótesis realizadas sobre el sentido de los intercambios de masa entre zonas contiguas. Tras obtener el valor de las derivadas de las variables asociadas a la masa intercambiada entre zonas contiguas, es decir, al gasto de masa entre éstas, es posible comprobar la veracidad de las hipótesis realizadas previamente. En caso de que la suposición realizada sea incorrecta, se procede a cambiar el sentido supuesto y a repetir la evaluación del sistema de ecuaciones diferenciales. Procediendo de esta forma se ha demostrado que se logra obtener una solución coherente, siendo los resultados obtenidos totalmente congruentes con las condiciones existentes en el interior de la cámara de combustión del motor modelado.
- e. Asignación de los valores obtenidos a las derivadas de las variables contempladas. Cuando se ha logrado la convergencia de las suposiciones realizadas, se procede a dar por buenos los

resultados obtenidos para el resto de variables, los cuales son devueltos a la función de integración de sistemas de ecuaciones de MATLAB. Esta función se encarga de tratar los valores obtenidos para finalmente proporcionar los valores asignados a las funciones primitivas del sistema analizado, es decir, la evolución temporal de cada una de las variables contempladas por el modelo multizona.

- 5) Tratamiento final de los resultados. Tras concluir con la integración del sistema de ecuaciones diferenciales, el modelo multizona propuesto dispone de la evolución a lo largo del periodo de simulación de las variables manejadas. De esta forma se puede proceder a realizar una serie de cálculos secundarios para la obtención de ciertos valores derivados de las mismas. Dentro de este apartado también se engloba el tratamiento gráfico de los resultados obtenidos, cuya flexibilidad enriquece de un modo importante el modelo multizona desarrollado.

4.6 Glosario de términos empleados

Dada la gran cantidad de variables involucradas en las expresiones expuestas en el presente capítulo, a continuación se recopila la nomenclatura empleada.

Variables:

A	Área.
Cd	Coeficiente de descarga.
Cp	Calor específico a presión constante.
Cv	Calor específico a volumen constante.
D	Diámetro del pistón.
G	Energía libre de Gibbs.

h	Entalpía por unidad de masa. También empleado para el coeficiente de transferencia de calor.
H_{LOSSES}	Pérdidas de calor.
K	Constante de equilibrio.
k	Constante universal de los gases.
L	Longitud característica.
M	Masa.
n	Moles.
P	Presión.
PCI	Poder calorífico inferior.
PM	Peso molecular.
Q	Calor.
R	Cociente entre k y PM.
S	Entropía.
\bar{s}_p	Velocidad lineal media del pistón.
T	Temperatura.
t	Tiempo.
TLQ	Tasa de liberación de calor.
U	Energía interna.
u	Energía interna por unidad de masa.
V	Volumen.
Vd	Cilindrada.

W	Trabajo.
$\alpha_{SCALING}$	Factor de ajuste de la ley de pérdidas de calor.
γ	Cociente entre Cp y Cv.
ρ	Densidad.
τ	Parámetro empleado para la definición del inicio de la combustión.
θ	Ángulo de giro del cigüeñal.

Subíndices:

C	Relativo a la ley funcional de desarrollo de la combustión (A_C , B_C , C_C , D_C y E_C).
CRK	Relativo al cárter.
D	Relativo a la ley funcional de inicio de la combustión (A_D , B_D , C_D , D_D y E_D).
i	Relativo al subvolumen i-ésimo.
IG	Relativo a la autoignición de la mezcla.
MOT	Relativo al motor en condiciones de arrastre.
r	Referencia.
y	Relativo al subvolumen y-ésimo, contiguo al subvolumen i-ésimo.

Superíndices:

IN	Relativo a las entradas a un subvolumen.
----	--

k	Relativo a la especie química k-ésima.
OUT	Relativo a las salidas de un subvolumen.
REA	Relativo a reacciones químicas.

Capítulo 5

Validación del modelo multizona

5.1. Necesidades de calibración

Según se indicó en el Capítulo 4, el modelo multizona objeto del presente trabajo carece de un mecanismo cinético que reproduzca la combustión, motivo por el cual tanto el inicio de la combustión como su posterior desarrollo son modelados mediante sendas leyes funcionales, las cuales se exponen en las Ecuaciones 4.20 y 4.25. Como puede comprobarse, las dos leyes funcionales referidas se caracterizan mediante cinco coeficientes cada una de ellas: A_D , B_D , C_D , D_D y E_D para el inicio de la combustión y A_C , B_C , C_C , D_C y E_C para la ley que define la tasa de liberación de calor. Por consiguiente, para lograr que el modelo multizona propuesto permita reproducir de forma precisa una combustión en modo HCCI se requiere la calibración de los coeficientes característicos de estas leyes funcionales. Para ello se propone un proceso de optimización encaminado a minimizar el error existente entre las curvas de presión obtenidas experimentalmente y las curvas de presión resultantes del modelo multizona. De esta forma, en la Figura 5. 1 se muestra el proceso de calibración de coeficientes anteriormente referido, según el cual, partiendo de una condición inicial, se obtiene el valor de los coeficientes de las leyes funcionales que minimiza el error del modelo multizona. Según se expone en la referida figura, la comparación de la curva simulada y la curva real se realiza para distintos valores de los coeficientes, hasta identificar un conjunto óptimo, es decir, hasta hallar el valor de los coeficientes que resultan en una menor diferencia entre los valores experimentales de presión y la predicción derivada del modelo multizona:

$$MIN_{A_i} \left[\sum (P_{MODELO}(A_i, \theta) - P_{EXPERIMENTAL}(\theta))^2 \right] \quad \text{Ecuación 5.1}$$

Donde $P_{MODELO}(A_i, \theta)$ es el vector correspondiente a la presión predicha por el modelo multizona propuesto, $P_{EXPERIMENTAL}(\theta)$ es el vector asociado a la presión medida en el banco de ensayo y A_i son los distintos coeficientes que caracterizan las leyes funcionales de inicio de la combustión y la tasa de liberación de calor. Asimismo, para automatizar la búsqueda del conjunto óptimo de coeficientes referido en los párrafos anteriores se ha aplicado una metodología de ajuste por mínimos cuadrados no lineales. En este caso se recurrió a la orden “lsqnonlin” de MATLAB [179].

A_D	0,01
B_D	0,13
C_D	-0,53
D_D	-0,35
E_D	0,77E4

Tabla 5. 1: Valores iniciales para los coeficientes de la ley funcional de inicio de combustión.

A_C	0,60E9
B_C	0,00
C_C	1,50
D_C	1,30
E_C	0,70E4

Tabla 5. 2: Valores iniciales para los coeficientes de la ley funcional de tasa de liberación de calor.

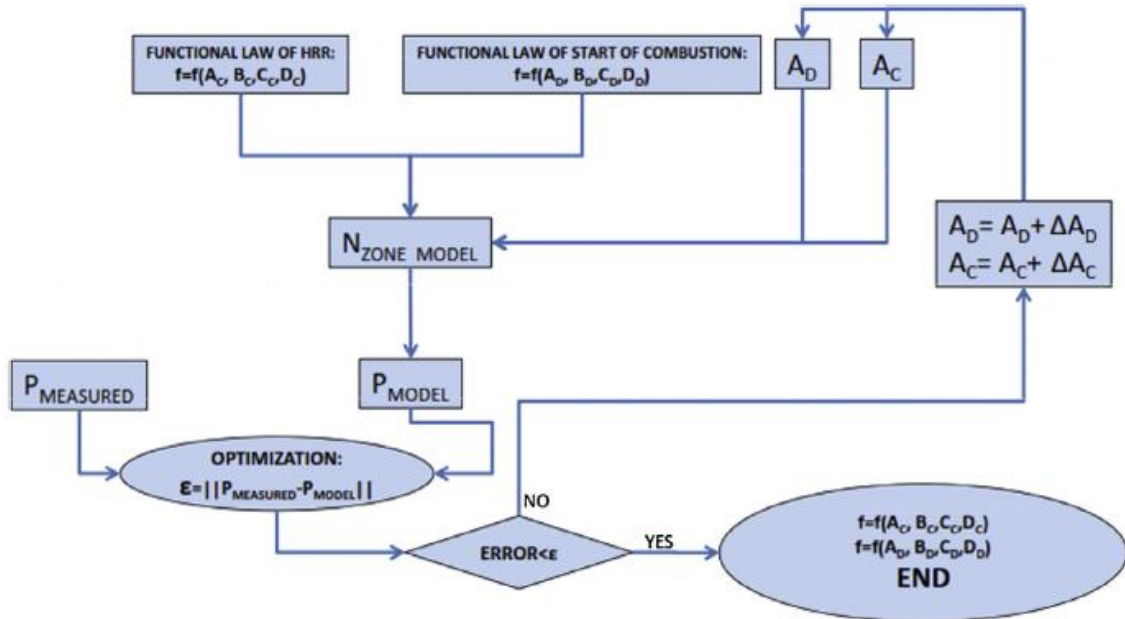


Figura 5. 1: Diagrama de flujo asociado al proceso de calibración de los coeficientes de las leyes funcionales de inicio de la combustión y de tasa de liberación de calor [182].

Para la obtención de la condición inicial empleada en el mencionado proceso de optimización se contactó personalmente con Komninos et al., quienes, a pesar de no incluirlos en sus publicaciones, facilitaron por comunicación privada los valores de los coeficientes empleados en sus trabajos [100]. De esta forma, partiendo de los valores iniciales recibidos, los cuales son mostrados en las Tablas 5. 1 y 5. 2, se han calibrado los coeficientes de las leyes funcionales de inicio de la combustión y de desarrollo de la tasa de liberación de calor.

A pesar de que las leyes funcionales empleadas para el modelado tanto del inicio de la combustión como de la tasa de liberación de calor están caracterizadas por cinco coeficientes cada una de ellas, se ha tomado la decisión de calibrar únicamente un coeficiente para cada ley funcional, optándose por las constantes de proporcionalidad A_D y A_C en ambos casos. Este enfoque es análogo al empleado por Chang et al. [195] para su modelo de pérdidas de calor, quienes emplean una constante de proporcionalidad como herramienta para adaptar una ley universal a cada motor analizado. La finalidad de esta decisión consiste en establecer un compromiso entre la robustez del modelo multizona resultante y su simplicidad, de forma que su uso en

aplicaciones distintas de la estudiada en el presente trabajo no requiera un complejo proceso previo dedicado a la calibración del modelo, de forma análoga a lo que ocurre con algunos modelos basados en plataformas CFD.

Mediante la aplicación de la filosofía expuesta en el párrafo anterior se pretenden evitar situaciones indeseables, como por ejemplo que las soluciones obtenidas mediante el proceso de optimización correspondan a mínimos locales, los cuales proporcionan valores de los coeficientes analizados que no minimizan realmente el error existente entre la curva de presión real y la curva simulada mediante el modelo multizona. La presencia de estos mínimos locales se ve amplificada por el significativo número de coeficientes considerados en el proceso de optimización, de forma que cuanto mayor sea el número de coeficientes analizados, mayor es la probabilidad de que la solución obtenida para el problema de mínimos cuadrados no lineales no represente el óptimo absoluto. Otro hecho por el que la calibración de los diez coeficientes de las leyes funcionales no es recomendable reside en la pérdida de tendencias lógicas en los resultados obtenidos. Esto se debe a que cuanto mayor es el número de coeficientes involucrados en el proceso de optimización, mayor es la probabilidad de que distintas combinaciones de éstos devuelvan mínimos análogos, de forma que las variaciones de unos coeficientes se vean balanceadas por las variaciones de otros. Como consecuencia derivada de este hecho pueden inducirse importantes fluctuaciones y dispersiones, aparentemente sin motivo, en los valores óptimos resultantes para los distintos coeficientes, lo que resta sentido físico al modelo e impide la obtención de un modelo predictivo como el mostrado en el Capítulo 6.

Antes de proceder a la calibración de los coeficientes de las leyes funcionales aplicando la metodología anteriormente descrita es importante destacar que dado que ambas leyes están destinadas al modelado de la combustión, se ha decidido considerar a efectos de cálculo del error correspondiente únicamente a la fracción de la curva de presión cercana al punto muerto superior. Con esta decisión se pretende que la desviación analizada durante el proceso de optimización el error resultante de la simulación de la combustión no se diluya en el resto de valores de presión correspondiente a las carreras de compresión y expansión.

Por último, es preciso comentar que, dada la alta no linealidad del problema de mínimos cuadrados formulado, una correcta elección de la condición inicial para los coeficientes resulta totalmente trascendental desde el punto de vista del éxito de la optimización, además de contribuir notablemente a reducir el tiempo de requerido para la identificación de las soluciones óptimas.

5.2. Caracterización de los subvolúmenes

Antes de exponer los resultados asociados a la calibración de las leyes funcionales correspondientes al inicio de la combustión y a la tasa de liberación de calor, conviene justificar la decisión adoptada en referencia al número de subvolúmenes empleado en el modelo multizona, aspecto que quedó pendiente de justificación en el Capítulo 4. Esta decisión deriva del análisis de los efectos contrapuestos que inciden, por un lado, en la precisión de los resultados y, por el otro, en el tiempo de computación requerido para la obtención de los resultados de la simulación. En primer lugar cabe destacar que la precisión de las predicciones obtenidas con el modelo es directamente proporcional al número de subvolúmenes considerados, ya que un mayor número de zonas permite una mejor caracterización de los procesos físicos que acontecen en la cámara de combustión. Sin embargo, como se indicó con anterioridad, el modelo propuesto implica un sistema de once ecuaciones y once incógnitas por cada subvolumen considerado, motivo por el cual el incremento del número de subvolúmenes considerados posee una fuerte incidencia en el tiempo de computación requerido, condicionando la potencial utilidad del modelo. Debido a los motivos anteriormente expuestos, se va a proceder a establecer el número de subvolúmenes considerados tratando de maximizar la bondad de los resultados, pero sin descuidar el tiempo de computación requerido para ello. Por este motivo se llevará a cabo un estudio paramétrico considerando 6, 8, 10, 12 y 14 subvolúmenes, es decir, se analizarán las configuraciones razonables desde el punto de vista del tiempo de computación requerido.

Además del número de subvolúmenes empleados, también es necesario definir la posición y tamaño relativo de estos subvolúmenes. En relación a la posición

relativa de las distintas zonas, aunque el modelo permite cualquier otro enfoque alternativo, se ha optado por la configuración consistente en una distribución de cilindros concéntricos [100], según se refirió en el capítulo anterior. Respecto al tamaño relativo de los distintos subvolúmenes, la distribución propuesta prima la necesidad de caracterizar el comportamiento de las zonas de baja temperatura, localizadas en la capa límite y los intersticios de la cámara de combustión. Por este motivo se ha adoptado la propuesta realizada por Aceves et al. [101], mediante la cual la mitad de los subvolúmenes considerados se destinan a reproducir el 5% del volumen de la cámara de combustión. Respecto a la otra mitad de los subvolúmenes, aunque los resultados obtenidos en la referencia anteriormente citada muestran una escasa dependencia respecto a sus tamaños relativos, se ha adoptado la misma distribución de tamaños, la cual se caracteriza por la evolución mostrada en la Figura 5. 2, en la que se han incluido las distintas distribuciones de volúmenes empleadas en el estudio paramétrico previamente mencionado.

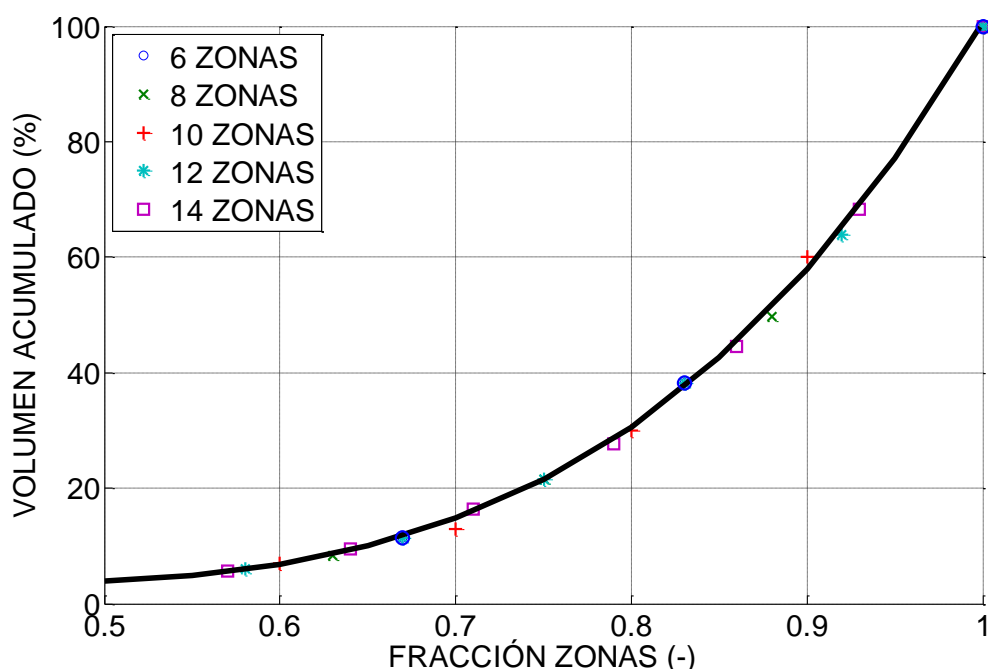


Figura 5. 2: Distribución de volumen acumulado en función del número de zonas consideradas en el modelo.

Como ejemplo entre los múltiples estudios paramétricos realizados con la finalidad de determinar el número óptimo de subvolumenes aplicados en el modelo multizona, en la Figura 5. 3 se muestran los resultados correspondientes a un ensayo con configuración early HCCI, alimentado con gasoil, 2100 rpm, 15 N·m y 36% EGR. Para ello se ha estudiado la evolución en función al número de zonas del tiempo de computación requerido, del error cuadrático medio (ECM) y del error máximo. Conviene destacar que los resultados mostrados a continuación están adimensionalizados mediante la división por el máximo valor obtenido para cada serie. Se observa que tanto el tiempo de computación como los dos tipos de errores analizados (error cuadrático medio y error máximo) son fuertemente dependientes del número de zonas considerado. Finalmente, los valores obtenidos permiten concluir que una distribución basada en diez zonas representa una solución de compromiso entre la precisión exigida al modelo y el consumo de recursos requeridos por el mismo. Asimismo, se destaca que este número de zonas es el mismo que se empleó en las dos referencias citadas en el presente apartado. Como resumen, se expone en la Tabla 5. 3 la distribución de volumen correspondiente a la configuración de 10 zonas.

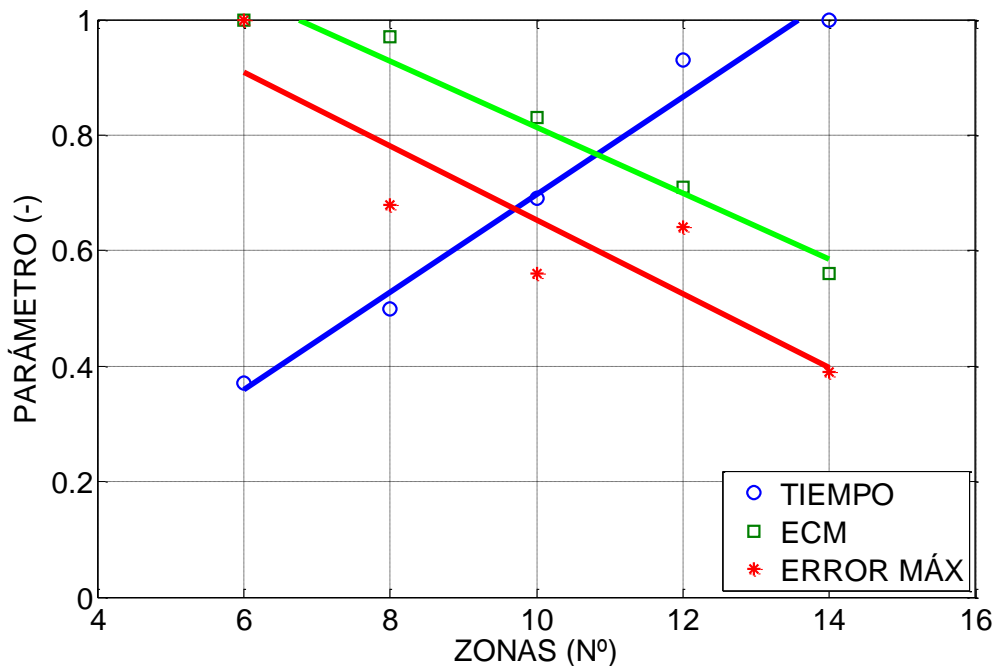


Figura 5. 3: Estudio paramétrico del número de subvolumenes para un ensayo con gasoil (early HCCI), 2100 rpm, 15 N·m, 36% EGR.

Zona (nº)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Volumen (%)	1	1	1	1	1	2	6	17	30	40

Tabla 5. 3: Distribución de volumen para una configuración de 10 zonas.

Para concluir con la justificación del número de subvolumenes considerados en la validación del modelo, es preciso destacar que los resultados obtenidos durante la realización del estudio paramétrico anteriormente expuesto ponen de manifiesto que los coeficientes de las leyes funcionales empleadas para definir el inicio de la combustión y la tasa de liberación de calor derivados del proceso de optimización, los cuales se exponen en futuros apartados, pueden ser empleados para un número de subvolumenes distinto del considerado en el mencionado proceso de optimización, manteniendo un bajo nivel de error. Como ejemplo en las Figuras 5. 4 y 5. 5 se exponen los resultados correspondientes a 6, 10 y 14 subvolumenes empleando los coeficientes obtenidos mediante la optimización para 10 subvolumenes. Como puede comprobarse, se mantiene la bondad de los resultados independientemente del número de subvolumenes empleados, si bien la mejor aproximación se produce para 10 zonas.

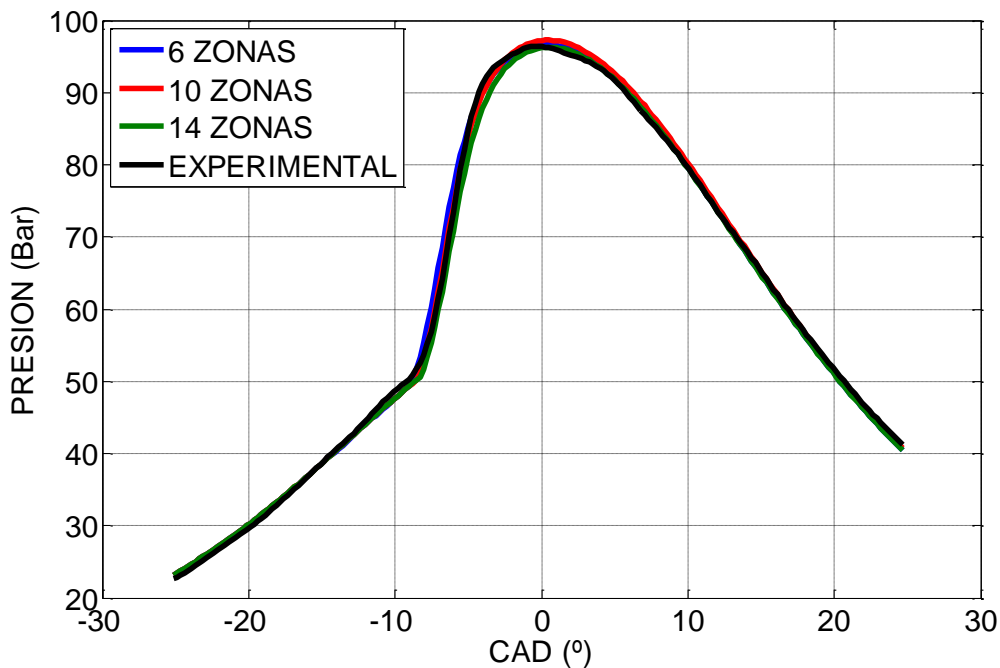


Figura 5. 4: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par de 15 N·m y 36% de EGR.

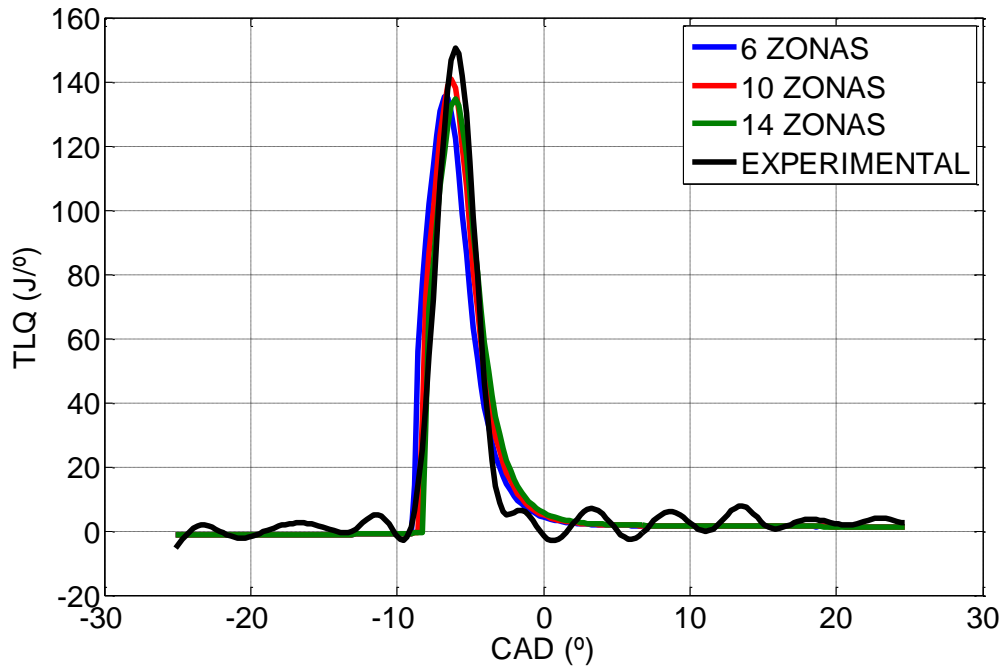


Figura 5. 5: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par de 15 N·m y 36% de EGR.

5.3. Resultados del modelo multizona optimizado

Combinando la metodología de calibración y la caracterización de los subvolúmenes expuestas en los apartados anteriores se obtienen los resultados que se mostrarán y discutirán a continuación, destacándose que la calidad de los resultados obtenidos permiten concluir que el enfoque basado en la adopción de sendas leyes funcionales para modelar el inicio de la combustión y la tasa de liberación de calor compensa satisfactoriamente la ausencia de un modelo cinético-químico.

Se expone en primer lugar que el resultado correspondiente a los valores óptimos de los coeficientes de ajuste A_D y A_C para cada uno de los ensayos realizados se muestra en el Anexo C.

Tras la mención a la recopilación de los valores óptimos asociados a los coeficientes de ajuste de las leyes funcionales de inicio de la combustión y de tasa de liberación de calor se expone una batería de resultados gráficos destinados a poner de manifiesto la previamente citada bondad de los resultados obtenidos mediante el modelo multizona optimizado, procediéndose a la representación de las curvas de presión en cámara y de tasa de liberación de calor correspondientes a diversos ensayos experimentales, incluyendo ensayos realizados tanto con la configuración early HCCI (inyección 45° APMS y relación de compresión 15:1) como con la configuración late HCCI (inyección 10° APMS y relación de compresión 18,4:1). Asimismo, conviene aclarar que las curvas de tasa de liberación de calor correspondientes a las curvas experimentales de presión han sido calculadas empleando un modelo unizona, por lo que no pueden considerarse como referencia para la evaluación del modelo multizona. Es decir, el único parámetro empleado para la calibración del modelo multizona lo constituye la curva de presión en cámara.

En las Figuras 5. 6 y 5. 8 se puede comprobar que para los ensayos asociados a la configuración early HCCI las curvas de presión experimental y la curva predicha por el modelo multizona objeto del presente trabajo son prácticamente idénticas, destacando la precisión de las predicciones respecto al ángulo de inicio de la combustión, el valor máximo de la presión en cámara y al gradiente de presión durante la combustión. Sin embargo, en las mencionadas figuras también se puede comprobar que el modelo tiende a subestimar ligeramente la presión durante la fase comprendida entre el máximo de la tasa de liberación de calor y el PMS cuando la combustión se produce con un adelanto significativo, es decir, para los ensayos sin recirculación de gases de escape. Aunque se discutirá en mayor profundidad en secciones posteriores, se destaca la capacidad del modelo multizona propuesto para capturar la tendencia de la combustión frente a un incremento de la cantidad de gases de escape recirculados, como queda evidenciado para los distintos ensayos mostrados en las Figuras 5. 6 y 5. 8. Respecto a la predicción de la tasa de liberación de calor en los ensayos con configuración early HCCI mostrada en las Figuras 5. 7 y 5. 9, en primer lugar cabe destacar la dificultad que entraña reproducir la curva derivada de los datos experimentales, al tratarse de una

variable proporcional a la derivada de la presión en cámara. A pesar de la dificultad mencionada, se puede observar en las mencionadas figuras que los resultados proporcionados por el modelo reproducen con bastante precisión la tasa de liberación de calor derivada de los resultados experimentales. No obstante, en las Figuras 5. 7 y 5. 9 se constata una tendencia a subestimar el valor máximo de la tasa de liberación de calor por parte del modelo multizona.

Respecto a los ensayos realizados con la configuración late HCCI se constata que el modelo multizona mantiene la precisión anteriormente referida para los ensayos con configuración early HCCI, destacando los resultados referidos al instante de inicio de la combustión y al gradiente de presión durante ésta, como puede comprobarse en las Figuras 5. 10, 5. 12, 5. 14 y 5. 16. Sin embargo, en esas mismas figuras se detecta una menor precisión en referencia a la predicción de la presión máxima en cámara, la cual resulta ligeramente sobrestimada en determinados casos (Figura 5. 14). No obstante, la mayor desviación en las predicciones de presión en cámara se identifica durante el inicio de la combustión, ya que los resultados experimentales presentan una evolución más suave que las predicciones obtenidas con el modelo multizona (Figura 5. 12). Respecto a las curvas correspondientes a la tasa de liberación de calor, mediante el análisis de las Figuras 5. 11, 5. 13, 5. 15 y 5. 17 se puede concluir que los resultados proporcionados por el modelo permiten obtener unas curvas de presión en cámara precisas, siendo por lo tanto aceptables en términos generales. A pesar de este hecho, es preciso destacar que la tasa derivada del modelo multizona presenta una forma con dientes de sierra en algunos casos (Figura 5. 13), debido a que la combustión de las distintas zonas consideradas se produce con un mayor decalaje temporal. Si bien este hecho no supone una limitación desde el punto de vista de los resultados de presión en cámara, podría limitarse o anularse mediante el incremento del número de subvolúmenes considerados, a costa de incrementar el tiempo de computación requerido. Este comportamiento no se produce en los ensayos con configuración early HCCI debido a que tanto la combustión de las zonas interiores como el avance del pistón proporcionan condiciones favorables para la combustión de las zonas exteriores, las cuales experimentan su respectivo

inicio de la combustión con una escasa diferencia de tiempo respecto a las zonas interiores, como se verá en el Capítulo 6.

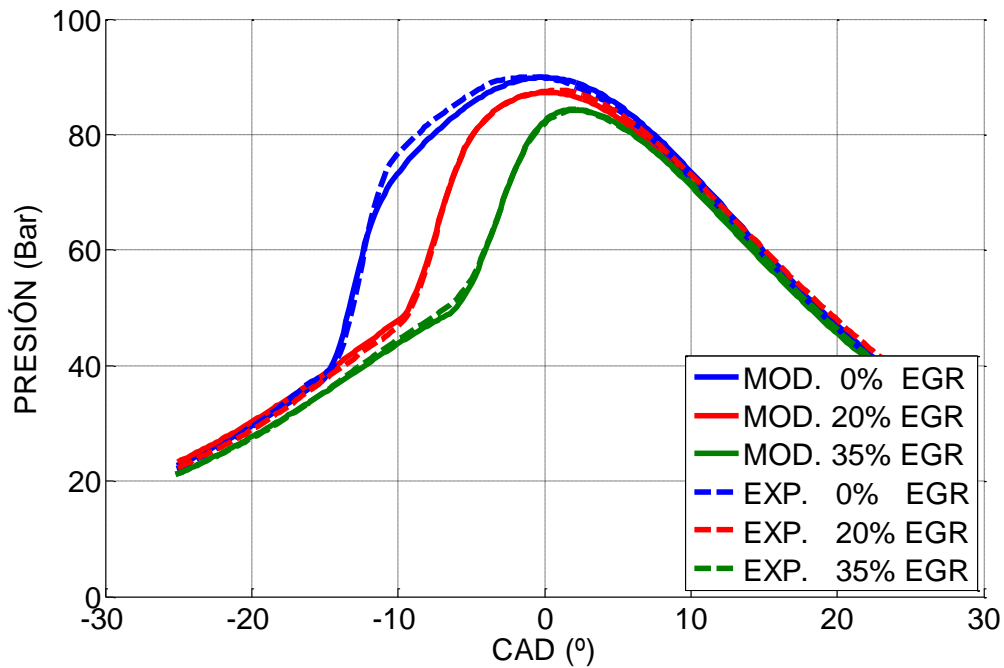


Figura 5. 6: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 1800 rpm, par inicial de 10 N·m y EGR variable.

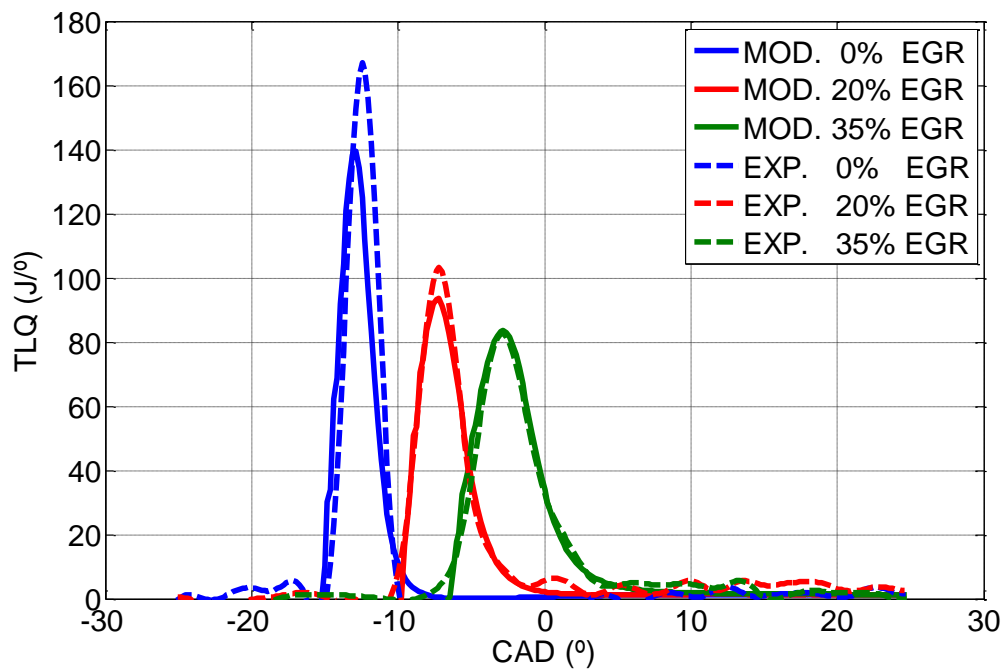


Figura 5. 7: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 1800 rpm, par inicial de 10 N·m y EGR variable.

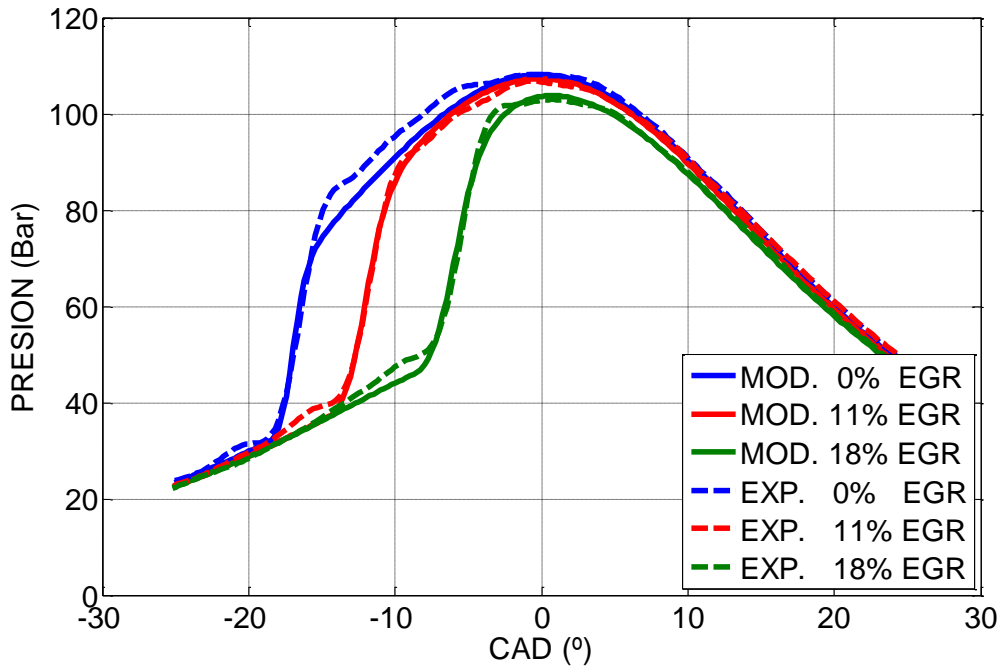


Figura 5. 8: Evolución de la presión para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par inicial de 20 N·m y EGR variable.

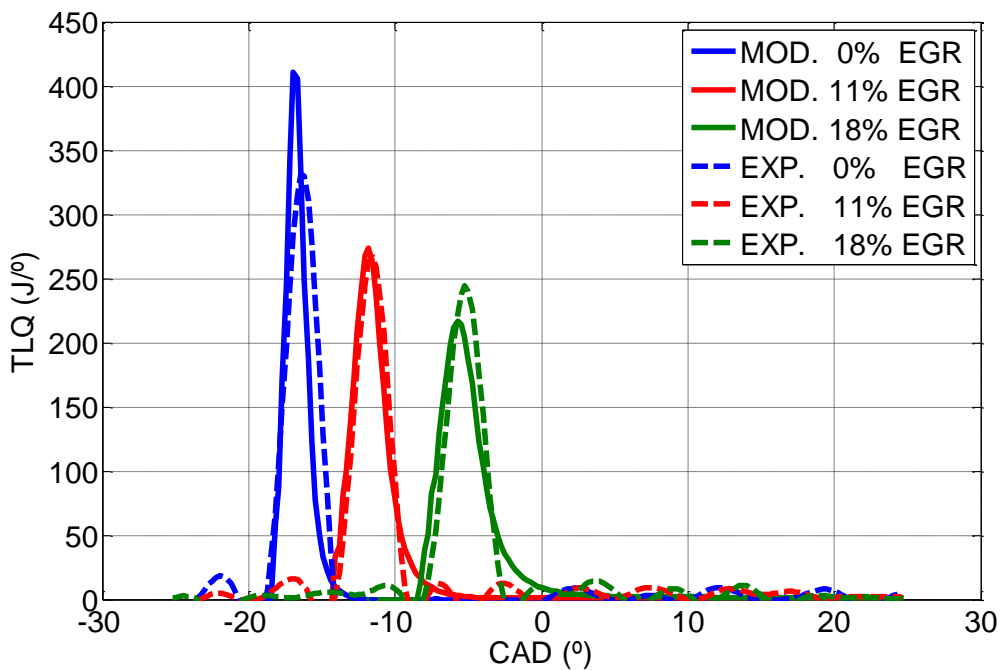


Figura 5. 9: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración early HCCI, con gasoil, 2100 rpm, par inicial de 20 N·m y EGR variable.

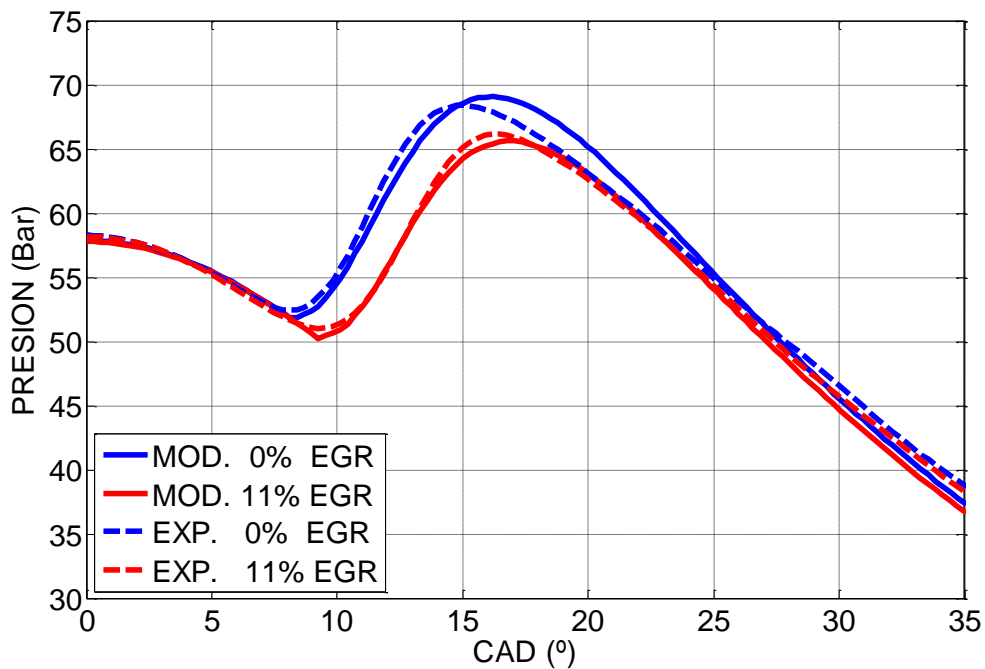


Figura 5. 10: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con gasoil, 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.

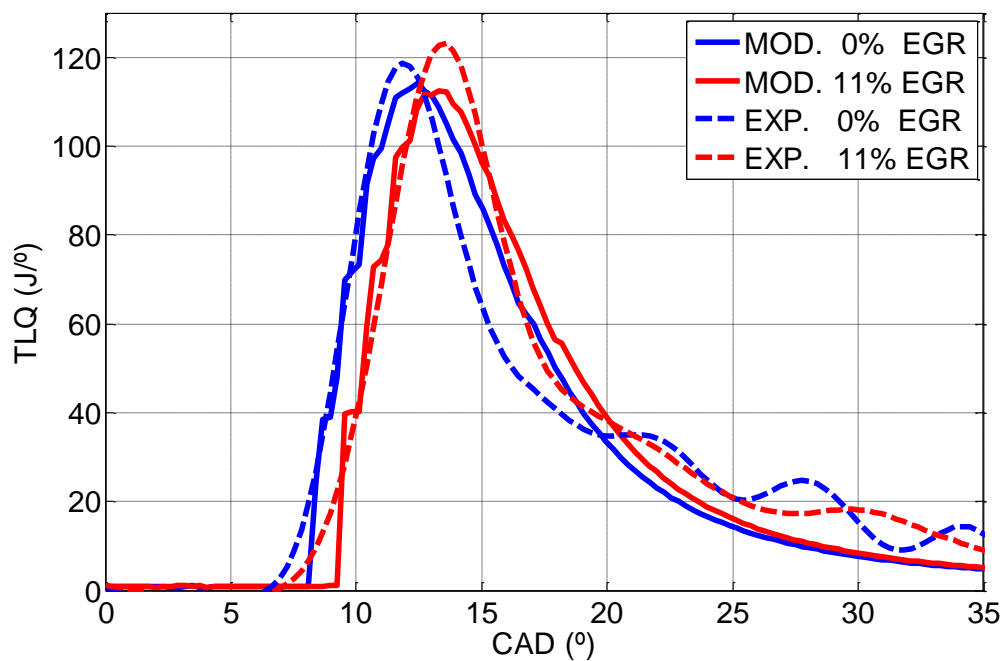


Figura 5. 11: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con gasoil, 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.

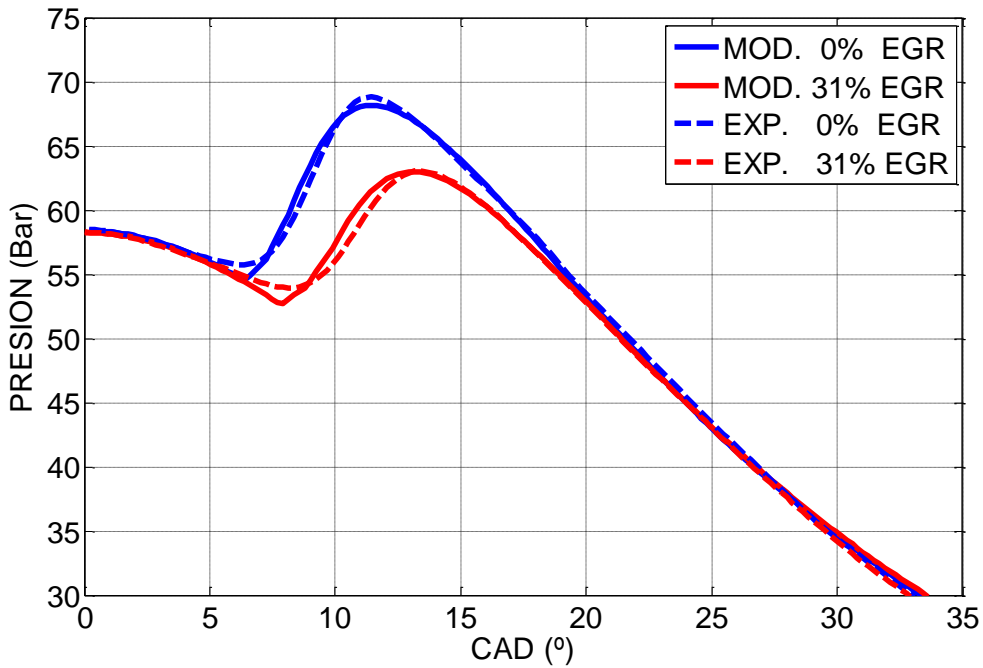


Figura 5. 12: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 30% de biodiésel (B30), 1800 rpm, dosado relativo de 0,20 y EGR variable.

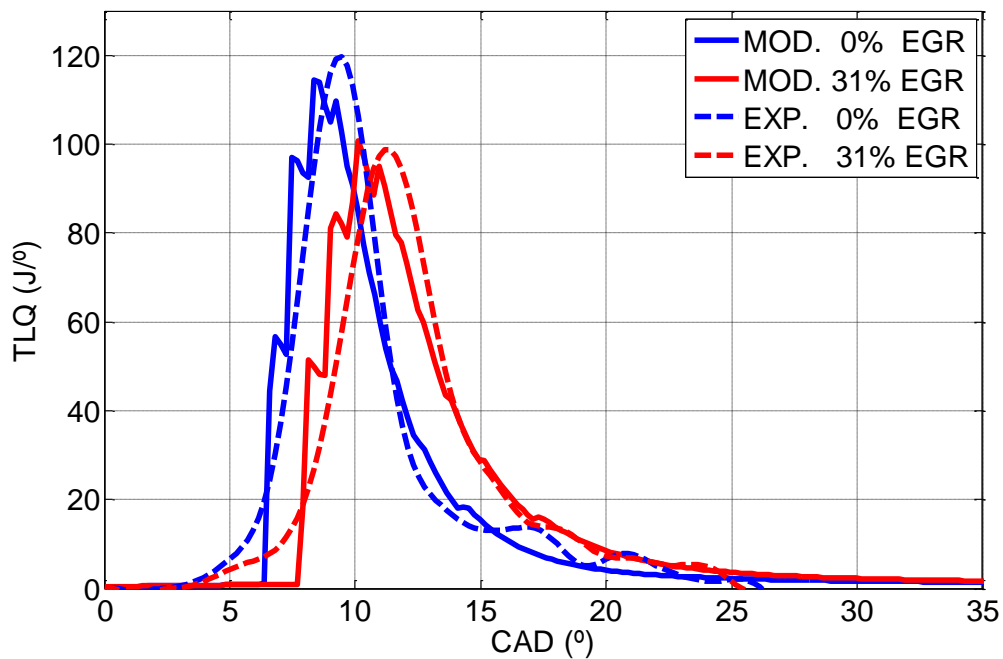


Figura 5. 13: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 30% de biodiésel (B30), 1800 rpm, dosado relativo de 0,20 y EGR variable.

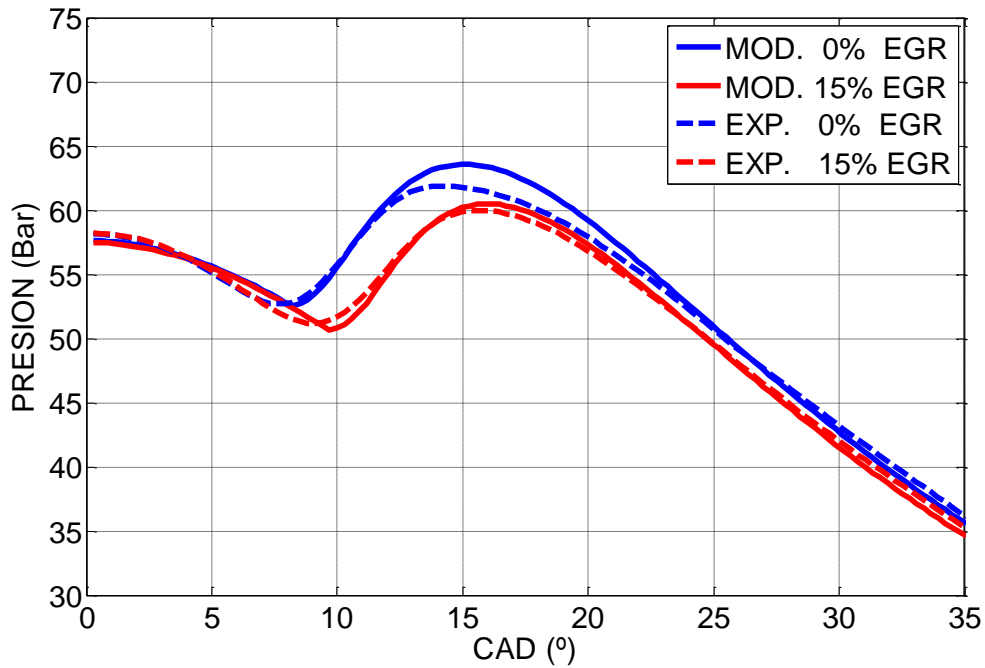


Figura 5. 14: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 65% de biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.

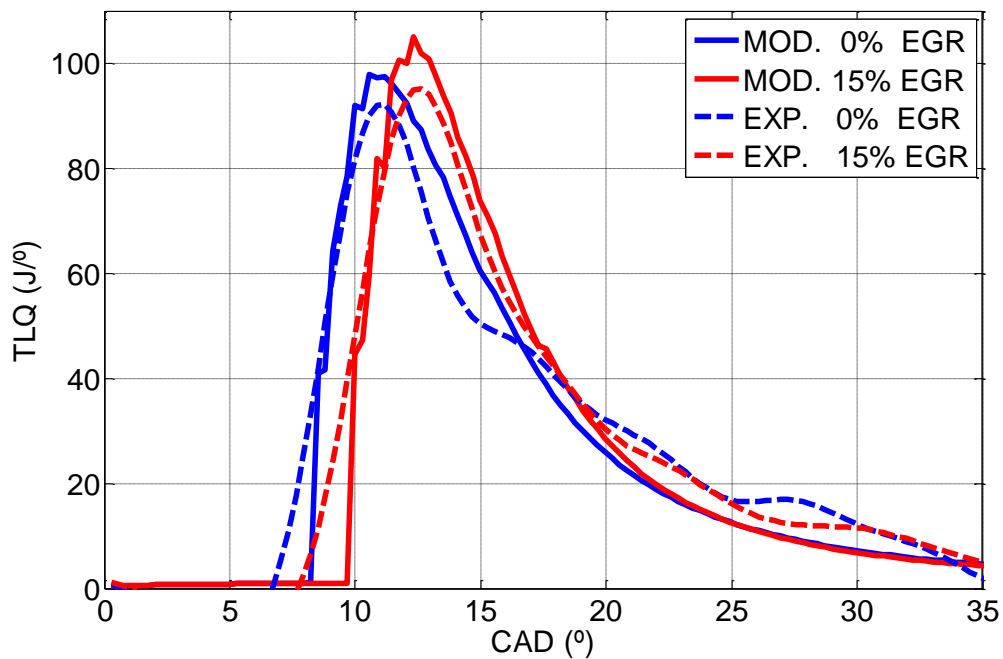


Figura 5. 15: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 65% de biodiésel (B65), 2400 rpm, dosado relativo de 0,60 y EGR variable.

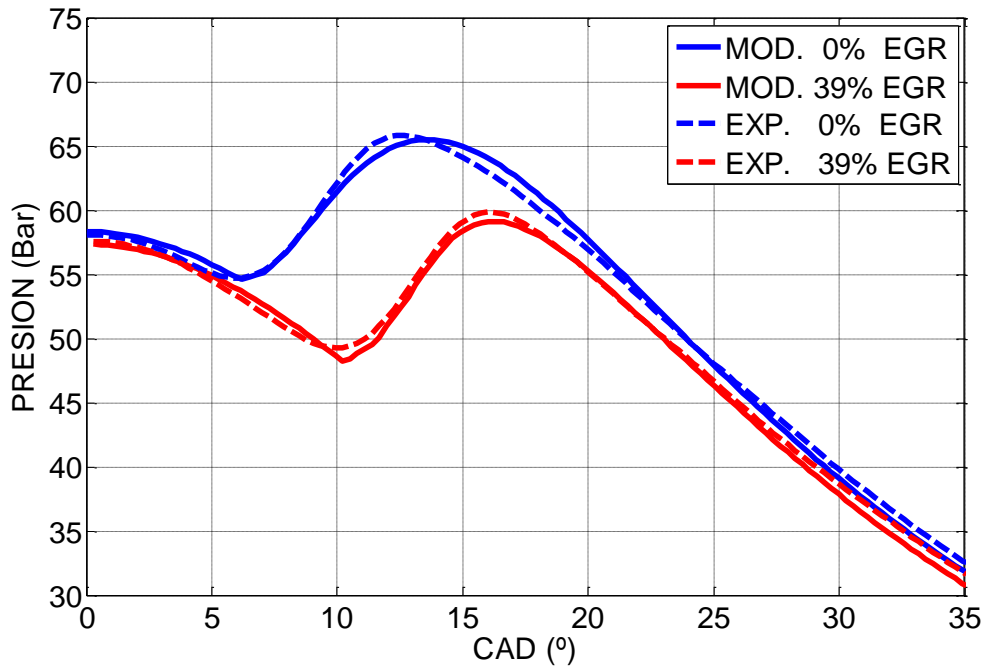


Figura 5. 16: Evolución de la presión para la configuración late HCCI, con 100% de biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.

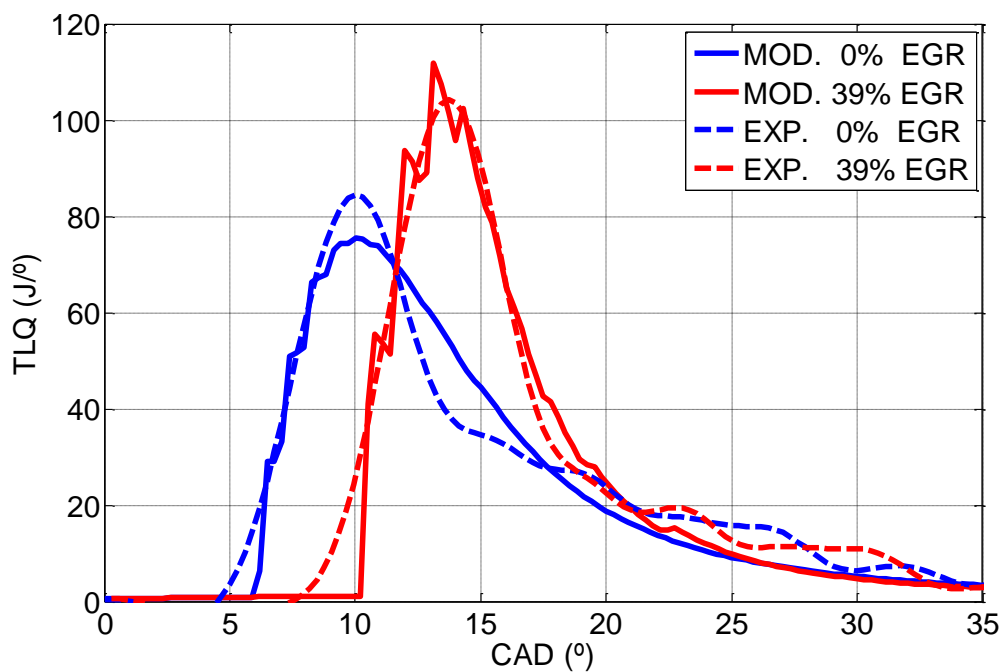


Figura 5. 17: Evolución de la tasa de liberación de calor para la configuración late HCCI, con 100% de biodiésel (B100), 2400 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.

Además de los ejemplos anteriores mostrados para ilustrar la bondad de las predicciones proporcionadas por el modelo multizona optimizado, a continuación se exponen resultados relacionados con los errores obtenidos en la predicción de la curva de presión para todos los ensayos empleados en la validación del modelo multizona. Se ha procedido al análisis tanto del error máximo cometido para cada ensayo (valor absoluto de la mayor diferencia entre la curva de presión experimental y la curva de presión simulada mediante el modelo optimizado, considerando el mismo ángulo del cigüeñal para ambas) como del error cometido en la estimación de la presión máxima en cámara (valor absoluto de la diferencia entre el máximo de la curva de presión experimental y el máximo de la curva de presión del modelo optimizado, sin necesidad de que se produzcan en el mismo ángulo del cigüeñal).

En la Tabla 5. 4 se exponen los valores promedio de los dos errores estudiados, clasificándolos en función de la configuración y del tipo de combustible empleados. Como puede comprobarse, los ensayos con configuración early HCCI poseen un error máximo más elevado que el obtenido para los ensayos con configuración late HCCI. Sin embargo, la tendencia es opuesta en relación al error cometido en la estimación de la presión máxima en cámara, ya que los ensayos con configuración early HCCI permiten obtener un error menor que el obtenido para los ensayos con configuración late HCCI. Asimismo se constata que no existe diferenciación entre los ensayos con configuración late HCCI en función del tipo de combustible empleado.

Ensayos	Error máximo promedio (Bar)	Error en presión máxima promedio (Bar)
Gasoil (early HCCI)	2,88	0,55
Gasoil (late HCCI)	1,70	0,81
B30 (late HCCI)	1,58	0,61
B65 (late HCCI)	1,79	0,85
B100 (late HCCI)	1,30	0,80

Tabla 5. 4: Errores promedio obtenidos tras el proceso de optimización del modelo multizona.

Para completar los resultados mostrados en la Tabla 5. 4, en las Figuras 5. 18, 5. 19, 5. 20, 5. 21 y 5. 22 se muestran el error máximo y el error en la presión máxima para la totalidad de los ensayos experimentales empleados en la validación del modelo multizona, así como los valores promedios previamente expuestos. Como se mencionó con anterioridad, las figuras referidas permiten comprobar que, aunque el error correspondiente a la estimación de la presión máxima es menor, el error máximo cometido en los ensayos con configuración early HCCI es mayor que el correspondiente a los ensayos con configuración late HCCI.

Como conclusión global, las desviaciones obtenidas permiten afirmar que el modelo multizona propuesto es válido, supliendo satisfactoriamente la ausencia de un modelo cinético-químico mediante las leyes funcionales adoptadas para el modelado tanto del inicio de la combustión como de la tasa de liberación de calor.

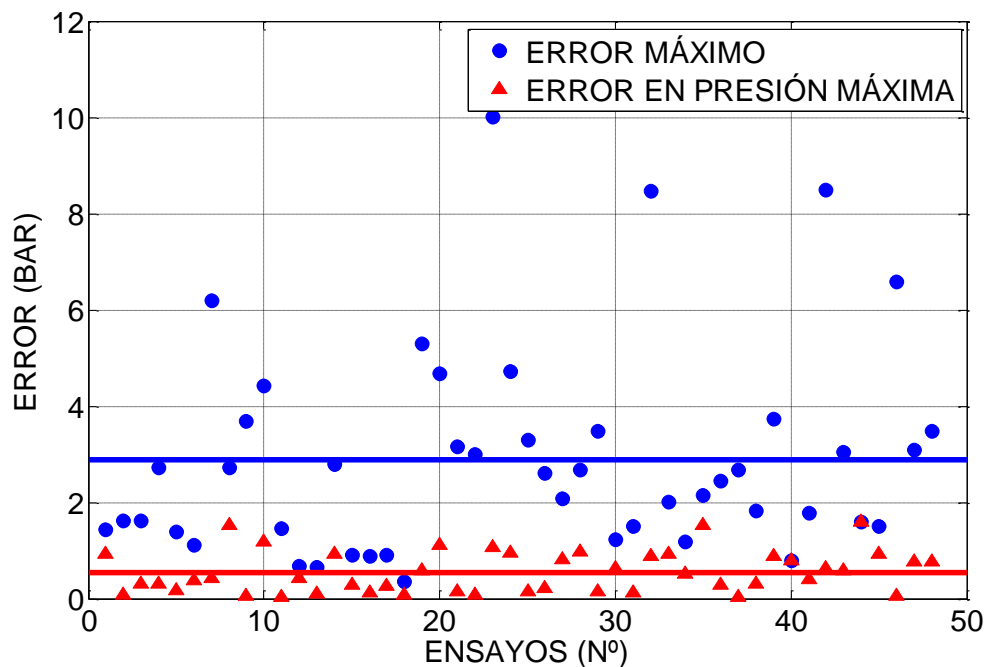


Figura 5. 18: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración early HCCI alimentados con gasoil.

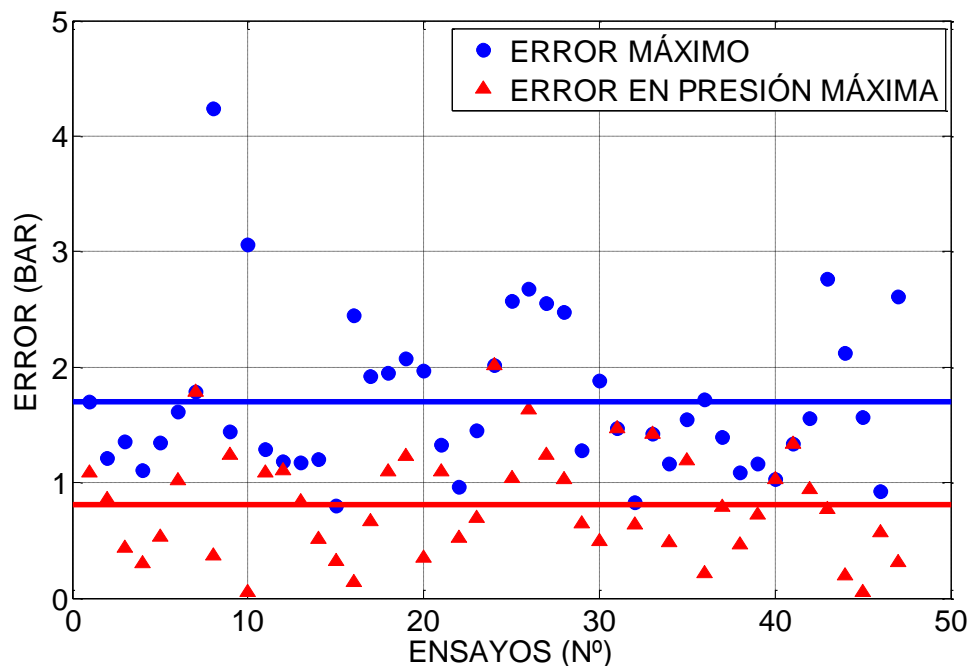


Figura 5. 19: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con gasoil.

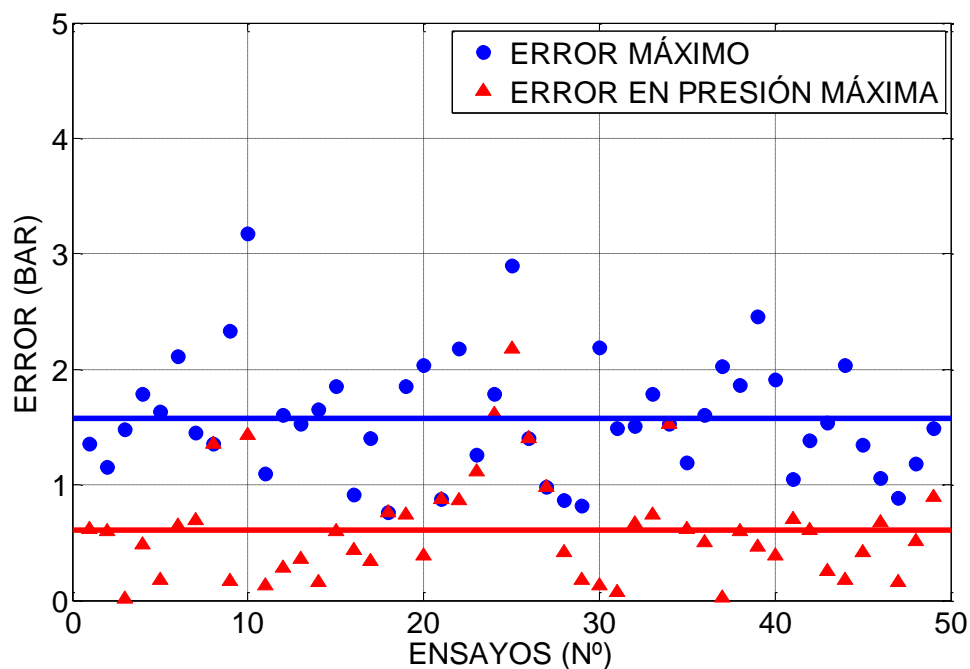


Figura 5. 20: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con biodiésel al 30% (B30).

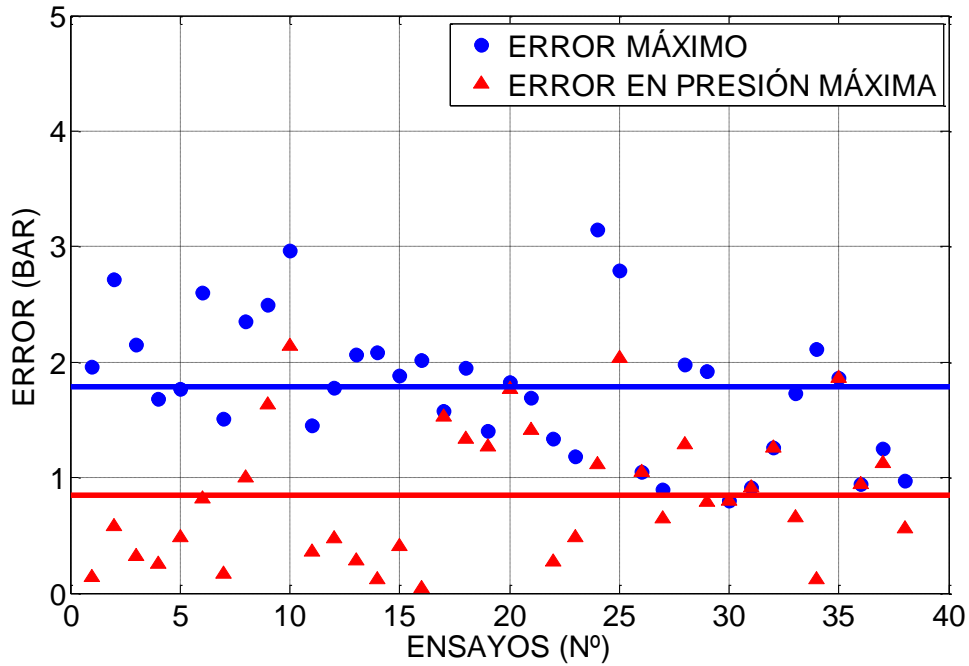


Figura 5. 21: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con biodiésel al 65% (B65).

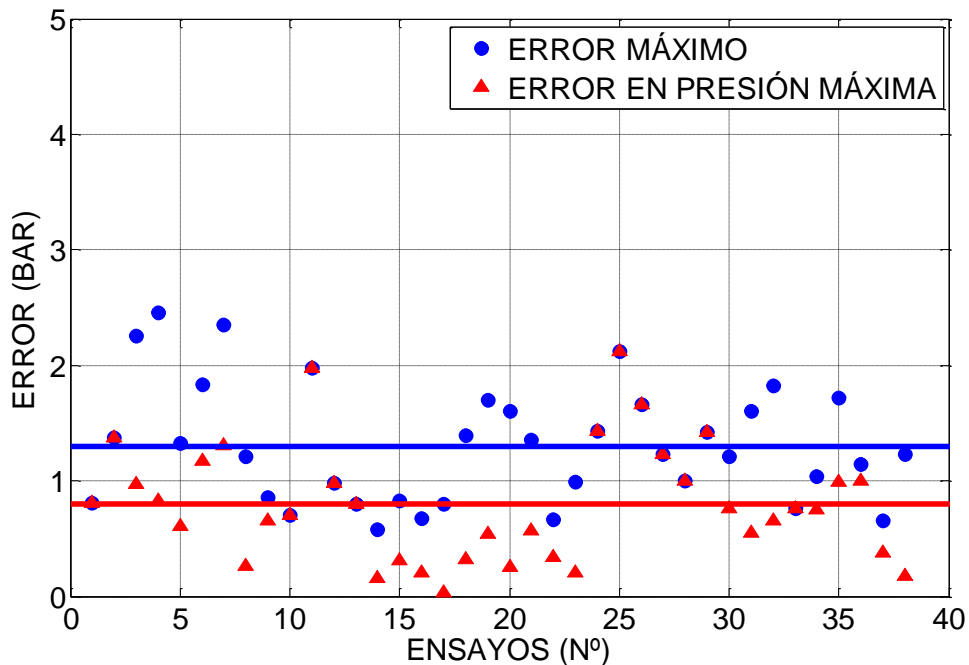


Figura 5. 22: Error asociado a la comparativa entre la curva de presión experimental y la curva obtenida con el modelo optimizado para ensayos con configuración late HCCI alimentados con biodiésel al 100% (B100).

Para concluir con la validación de las predicciones obtenidas a partir del modelo multizona optimizado, se ha procedido a analizar los resultados correspondientes a las emisiones de óxidos de nitrógeno. En la Figura 5. 23 se comparan los valores de emisiones medidos experimentalmente en el banco de ensayos con los valores predichos con el modelo multizona optimizado para los ensayos con configuración early HCCI. Respecto a los ensayos con configuración late HCCI, en la Figura 5. 24 se comparan los valores medidos con los resultados predichos por el modelo optimizado para ensayos con distinta fracción de biodiésel con una velocidad 2100 rpm y un dosado relativo de 0,45. Como puede observarse en las mencionadas figuras, el modelo propuesto es capaz de proporcionar valores razonables para las emisiones de óxidos de nitrógeno, lo que se debe a que éstas dependen en gran manera de la temperatura media o de bulbo de los gases alojados en la cámara de combustión. Finalmente, como se observa en las Figuras 5. 25 y 5. 26, cabe destacar que el modelo propuesto es capaz de capturar la tendencia creciente de las emisiones de óxidos de nitrógeno en función de la carga y decreciente con la fracción de gases de escape recirculados, respectivamente. Para más información sobre las tendencias de los valores de las emisiones de óxidos de nitrógeno se remite al lector al Capítulo 3, donde se analizan en detalle las justificaciones a los distintos comportamientos mencionados.

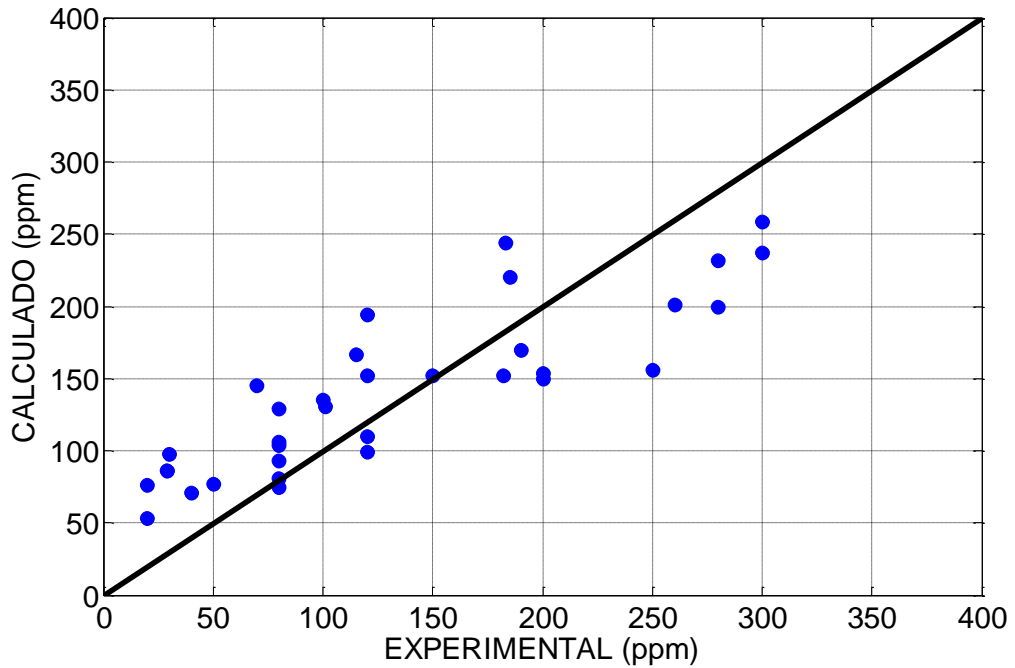


Figura 5. 23: Comparativa de las emisiones de óxidos de nitrógeno experimentales y las derivadas del modelo optimizado para la configuración early HCCI, con gasoil, velocidad de 1200 a 2100 rpm, par inicial de 5 a 20 N·m y EGR variable.

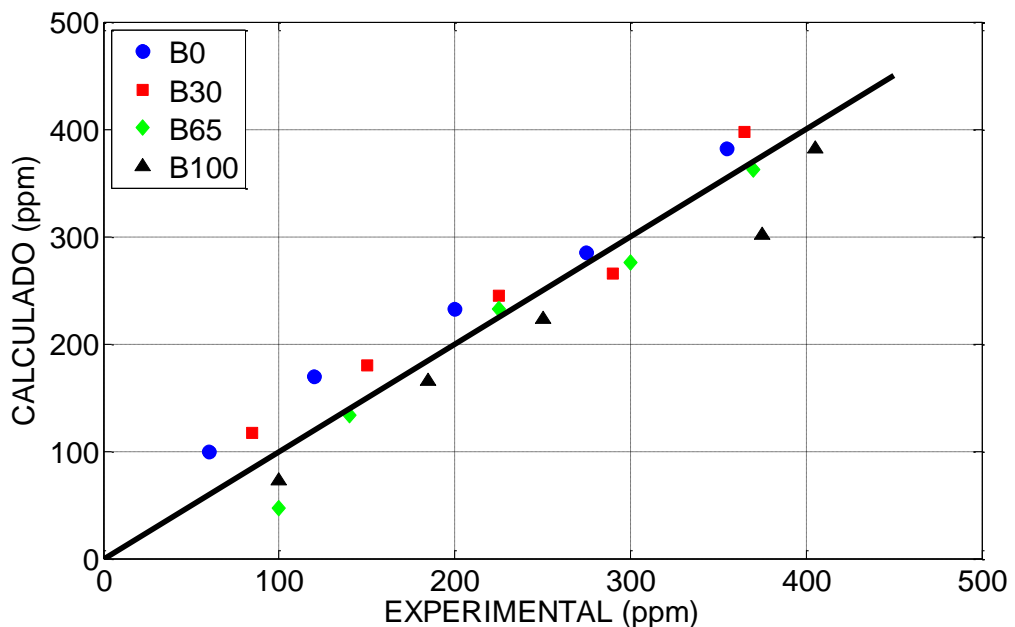


Figura 5. 24: Comparativa de las emisiones de óxidos de nitrógeno experimentales y las derivadas del modelo optimizado para la configuración late HCCI, con combustible variable, 2100 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.

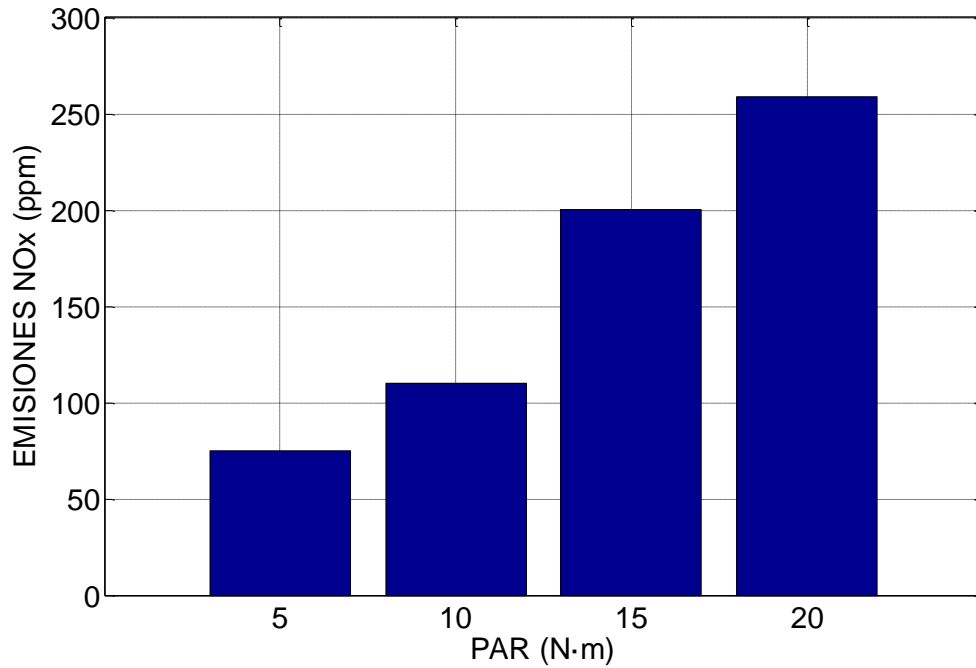


Figura 5. 25: Emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración early HCCI, con gasoil, 1200 rpm, par variable y EGR nulo.

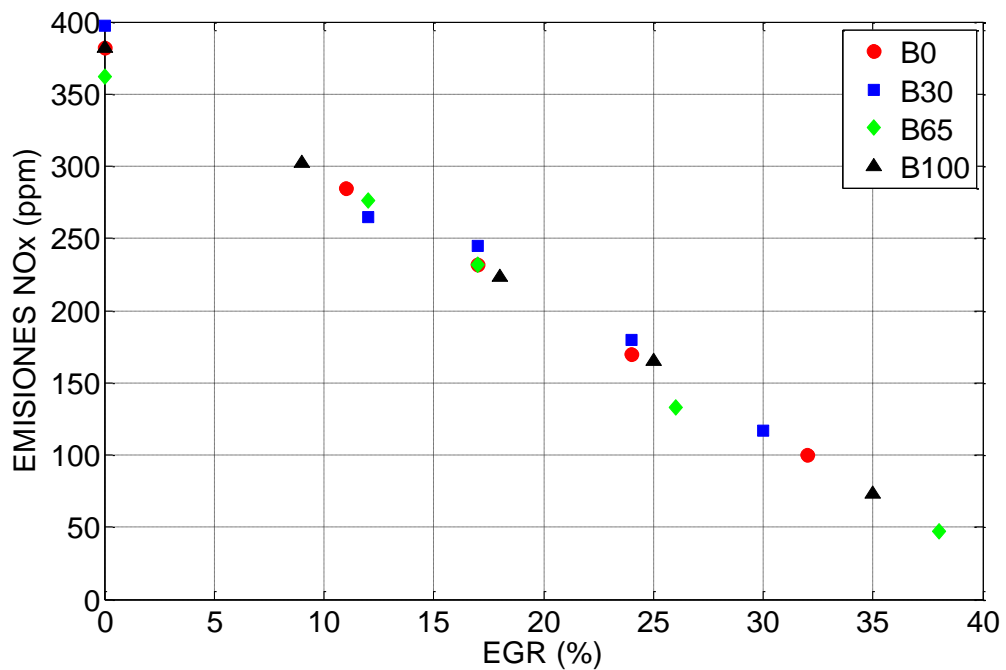


Figura 5. 26: Emisiones de óxidos de nitrógeno para la configuración late HCCI, con combustible variable, 2100 rpm, dosado relativo de 0,45 y EGR variable.

Capítulo 6

Modelo predictivo

6.1. Objetivo del modelo predictivo

Como se indicó en capítulos anteriores, uno de los principales objetivos del presente trabajo consiste en dotar de una estructura analítica al modelo multizona propuesto. Es decir, uno de los pilares fundamentales del trabajo desarrollado por el autor está constituido por la elaboración de un modelo capaz de predecir el comportamiento en modo HCCI del motor empleado en el análisis experimental (FL1 906 de Deutz-Díter). De esta forma se pueden obtener, sin necesidad de experimentación en laboratorio, parámetros representativos de las prestaciones del motor, como por ejemplo la presión media efectiva, el consumo específico de combustible, la presión máxima en cámara o las emisiones de óxidos de nitrógeno, todo ello a partir de una serie de variables características del punto de funcionamiento que se pretenda analizar.

Conviene destacar a modo de recordatorio que en capítulos anteriores se expuso que el modelo multizona desarrollado se basa en sendas leyes funcionales para reproducir el inicio de la combustión y la tasa de liberación de calor en modo HCCI. Asimismo, estas leyes funcionales han sido calibradas a través de uno de sus coeficientes, empleado como factor de escala, para cada uno de los ensayos experimentales disponibles (Capítulo 5). De esta forma, para poder generar un modelo predictivo se debe disponer de un mecanismo que proporcione, para cualquier condición operativa perteneciente al rango analizado experimentalmente, el valor de cada coeficiente derivado del hiperplano constituido en el proceso de calibración anteriormente referido. Para

solventar esta situación se ha optado por generar una ley funcional adicional para cada uno de los parámetros requeridos (A_D para el inicio de la combustión y A_C para la tasa de liberación de calor) en función de un conjunto de variables convenientemente seleccionadas para caracterizar las condiciones operativas que se pretenden analizar.

A continuación se expone con detalle el proceso aplicado para la obtención de las leyes funcionales que permitirán confeccionar el mencionado modelo predictivo, para lo cual se parte de los resultados obtenidos en el proceso de calibración de coeficientes descrito en el capítulo anterior.

6.2. Desarrollo del modelo predictivo

Según se expuso en el capítulo anterior, la calibración del modelo multizona consistió en la obtención de los valores de los coeficientes de escala de las leyes funcionales que modelan el inicio de la combustión y la tasa de liberación de calor, A_D y A_C respectivamente, que minimizan el error del modelo para cada uno de los ensayos experimentales disponibles. Dado que los resultados numéricos correspondientes a la calibración de los coeficientes A_D y A_C se exponen convenientemente en el Anexo C, a continuación se procede directamente con la aplicación de la metodología correspondiente a la obtención de sus leyes funcionales.

Dada la significativa cantidad de variables involucradas en los resultados mostrados en la tabla referida en el párrafo anterior, conlleva cierta complejidad la generación de un modelo multizona predictivo, lo cual implica proponer unas expresiones analíticas que permitan obtener los valores derivados de los hiperplanos generados en el proceso de calibración de los coeficientes de escalado de las leyes empleadas para el modelado del inicio de la combustión y de la tasa de liberación de calor. Por este motivo se ha recurrido a la aplicación de una metodología de superficies de respuesta multidimensional, por medio de la cual pueden obtenerse leyes funcionales en forma de

polinomios de regresión múltiple con coeficientes calculados aplicando el método de mínimos cuadrados.

Sin embargo, previamente a la obtención de las leyes funcionales mencionadas en el párrafo anterior es preciso identificar el conjunto de variables regresoras. En primer lugar se descartan las siguientes variables por los motivos expuestos a continuación:

- Turbulencia, ya que no juega un papel relevante en el modo de combustión HCCI según pusieron de manifiesto Aceves et al. [178]. Los autores mencionados procedieron al estudio de los efectos derivados de la turbulencia mediante un modelo multizona, analizando dos geometrías de cámara de combustión totalmente distintas desde el punto de vista de la turbulencia generada. Mientras que la primera de ellas consistía en un pistón plano y por lo tanto no generaba una turbulencia significativa, la segunda geometría consistía en un pistón con cavidad, diseñado con la finalidad de inducir un alto grado de turbulencia. La conclusión del estudio realizado pone de manifiesto que, aunque existe una relación, el papel desempeñado por la turbulencia en la combustión en modo HCCI es menor.
- Relación de compresión, ya que los valores adoptados para la configuración tanto early HCCI como late HCCI, son representativos del rango de relaciones de compresión empleados típicamente en motores off-road de pequeña cilindrada similares al empleado en el presente trabajo. Como ejemplos que ilustran el mencionado rango se mencionan el modelo 1D90 de Kohler (10 kW) con una relación de compresión de 20:1 y, por otro lado, el modelo HA294 de Kirloskar (14kW) con una relación de compresión de 17:1. Asimismo cabe destacar que los valores de relación de compresión empleados en las configuraciones early HCCI y late HCCI derivan de un proceso de mejora de las prestaciones del motor FL1 906 de Deutz-Díter descrito en el Capítulo 3, no habiendo sido modificados en el posterior transcurso del presente trabajo.

- Punto de inyección y características del sistema de inyección, ya que, al igual que ocurre con la relación de compresión, se han empleado valores tanto para los ensayos early HCCI como para late HCCI derivados del previamente referido proceso de optimización de las prestaciones del motor FL1 906 de Deutz-Díter (Capítulo 3). Por este motivo los parámetros del sistema de inyección han sido los mismos para todos los ensayos realizados para cada configuración del motor.
- Temperatura de admisión, ya que únicamente se esperan ligeras modificaciones de la misma para los distintos ensayos por haberse realizado estos en la misma celda de ensayo bajo condiciones ambientales similares.

Teniendo en cuenta estas apreciaciones y el resto de parámetros involucrados en los ensayos realizados, las magnitudes que constituyen las variables regresoras del modelo predictivo propuesto son el dosado relativo, la velocidad de giro y la fracción de gases de escape recirculados. Adicionalmente, para el modelo predictivo correspondiente a ensayos late HCCI se considerará la fracción de biodiésel empleada, ya que, además de las variables antes mencionadas, estos ensayos se realizaron para distintas mezclas de combustible. Esta variable no se considera en las predicciones correspondientes a ensayos con configuración early HCCI ya que estos sólo se realizaron con gasoil puro.

Antes de proseguir con la exposición de la metodología aplicada conviene destacar que se ha decidido no generar leyes funcionales que engloben tanto a los ensayos early HCCI como a los ensayos late HCCI debido a que, en referencia al sistema de inyección, sólo se dispone de resultados en dos puntos de operación (45° APMS para los ensayos early HCCI y 10° APMS para los ensayos late HCCI), lo cual no permite obtener resultados con un error aceptable. De esta forma, se generarán dos leyes funcionales para cada coeficiente: uno para los ensayos early HCCI, basado en la velocidad de giro, el dosado relativo y la fracción de gases de escape recirculados; y otro para los ensayos late HCCI, basado en las tres variables anteriormente mencionadas más la fracción de biodiésel presente en la mezcla de combustible ensayada.

Para la obtención de los polinomios de regresión múltiple que constituyen las leyes funcionales anteriormente mencionadas se ha empleado la función RSTOOL de MATLAB [179], la cual proporciona una interfaz gráfica para el ajuste y visualización de las superficies de respuesta derivadas los polinomios de regresión múltiple. La mencionada función permite al usuario generar un polinomio de ajuste del tipo cuadrático con interacciones, cuya expresión matemática particularizada para cuatro variables regresoras se expone en la Ecuación 6.1.

$$y = k_0 + k_1 \cdot x_1 + k_2 \cdot x_2 + k_3 \cdot x_3 + k_4 \cdot x_4 + k_5 \cdot x_1 \cdot x_2 + k_6 \cdot x_1 \cdot x_3 + k_7 \cdot x_1 \cdot x_4 + k_8 \cdot x_2 \cdot x_3 + k_9 \cdot x_2 \cdot x_4 + k_{10} \cdot x_3 \cdot x_4 + k_{11} \cdot x_1^2 + k_{12} \cdot x_2^2 + k_{13} \cdot x_3^2 + k_{14} \cdot x_4^2 \quad \text{Ecuación 6.1}$$

Donde “y” representa la variable que se pretende predecir (en este caso A_C y A_D), “ x_i ” representa al conjunto de variables regresoras (velocidad de giro, dosado relativo, fracción de gases de escape recirculados y, en el caso de los ensayos late HCCI, la fracción de biodiésel mezclada con el gasoil) y “ k_i ” es el conjunto de coeficientes de regresión múltiple obtenidos por mínimos cuadrados. En el caso de tres variables regresoras, es decir, para los ensayos early HCCI habría que sustraer de la Ecuación 6.1 los términos que involucren a la variable x_4 . Como puede comprobarse las interacciones entre variables se introducen a través de los productos cruzados de dos variables regresoras. Analizando la Ecuación 6.1 se concluye que los polinomios de regresión que constituyen las leyes funcionales asociadas a los coeficientes A_D y A_C se caracterizarán por 10 coeficientes en el caso de los ensayos early HCCI y por 15 coeficientes para los ensayos late HCCI. En relación a la morfología elegida para la expresión matemática de las dos leyes funcionales elaboradas cabe destacar que, aunque las alternativas son múltiples, la precisión asociada a la expresión polinomial elegida ha resultado suficiente para el objetivo perseguido en esta aplicación, generando un error aceptable como quedará demostrado más adelante. Asimismo, conviene destacar que los resultados obtenidos mediante el procedimiento descrito con anterioridad tienen asociados por defecto unos polinomios de regresión múltiple con unos intervalos de confianza del 95% para cada una de las variables regresoras consideradas.

	Early HCCI		Late HCCI	
	A_C	A_D	A_C	A_D
k0	-7,94E+3	1,24E-2	1,91E+2	-6,06E-2
k1	5,65E+0	-1,66E-5	1,48E+1	1,67E-1
k2	1,57E+4	2,51E-2	-1,91E-1	1,30E-4
k3	8,01E+2	-2,20E-2	3,19E+2	-9,48E-2
k4	-6,28E+0	-7,30E-6	-7,32E+2	-1,81E-1
k5	-8,65E-1	8,49E-6	2,24E-2	-1,31E-4
k6	-2,28E+3	1,23E-2	-8,38E+1	1,90E-1
k7	-7,01E-4	5,56E-9	-1,57E+2	-6,67E-2
k8	-5,76E+3	-1,60E-2	-4,67E-1	7,32E-5
k9	1,41E+3	2,68E-2	3,05E-1	9,06E-5
k10	-	-	-2,32E+2	-5,63E-2
k11	-	-	-2,59E+1	7,56E-2
k12	-	-	9,33E-5	-3,79E-8
k13	-	-	6,43E+2	-7,94E-2
k14	-	-	9,88E+2	7,05E-2

Tabla 6. 1: Resultados de la regresión múltiple para los coeficientes correspondientes a las leyes funcionales de A_C y A_D .

Finalmente, tras haber expuesto la metodología, se muestran los resultados correspondientes a los coeficientes de regresión, los cuales se recogen en la Tabla 6. 1.

Para concluir con la descripción de la regresión múltiple realizada, en las Figuras 6. 1, 6. 2, 6. 3 y 6. 4 se muestran los hiperplanos de respuesta asociados a los modelos de regresión resultantes para los coeficientes de escalado de las leyes funcionales empleadas para el modelado del inicio de la combustión (A_D) y de la tasa de liberación de calor (A_C). Los resultados mostrados en las mencionadas figuras refuerzan la previamente mencionada decisión de realizar regresiones independientes para los ensayos early HCCI y late HCCI. La afirmación anterior se basa en el hecho de que la tendencia de los coeficientes A_C y A_D ante una misma variable regresora llega a ser distinta

para los ensayos early HCCI y late HCCI. Esto implica que, de haber procedido unificando los ensayos early HCCI y late HCCI y haber obtenido una única ley funcional para A_C y A_D , el error resultante en las predicciones habría sido significativamente mayor. Concretamente, en el caso del parámetro A_C la variable regresora con mayor impacto es la fracción de gases de escape recirculados, tanto para los ensayos early HCCI como para los ensayos late HCCI. Sin embargo, el comportamiento es opuesto para cada grupo de ensayos, ya que la tendencia es decreciente para los ensayos early HCCI pero creciente en el caso late HCCI, como puede comprobarse en las Figuras 6. 1 y 6. 3. Por el contrario, variables regresoras como la velocidad de giro y el dosado relativo poseen una influencia más limitada sobre el valor de A_C , tanto para ensayos early HCCI como para ensayos late HCCI. Cabe destacar que, en el caso de los ensayos late HCCI, la influencia de la fracción de biodiésel en la mezcla es muy reducida (ver Figura 6. 3). Como se observa en las Figuras 6. 2 y 6. 4, la variable regresora con mayor influencia sobre el parámetro A_D para los ensayos early HCCI es la fracción de gases de escape recirculados, mientras que ésta es muy limitada en el caso de los ensayos late HCCI, donde la variable con mayor impacto es la fracción de biodiésel presente en la mezcla de combustible. Al igual que en el caso del coeficiente A_C , la velocidad de giro y el dosado relativo poseen una influencia poco significativa sobre A_D , tanto para ensayos early HCCI como para ensayos late HCCI.

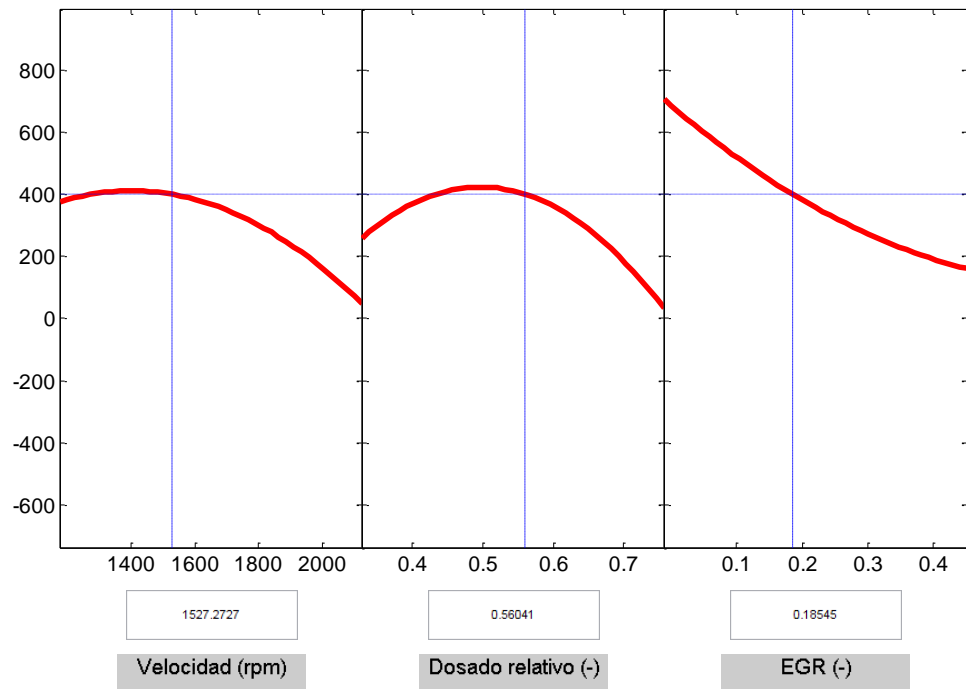


Figura 6. 1: Superficie de respuesta del coeficiente A_C para los ensayos early HCCI.

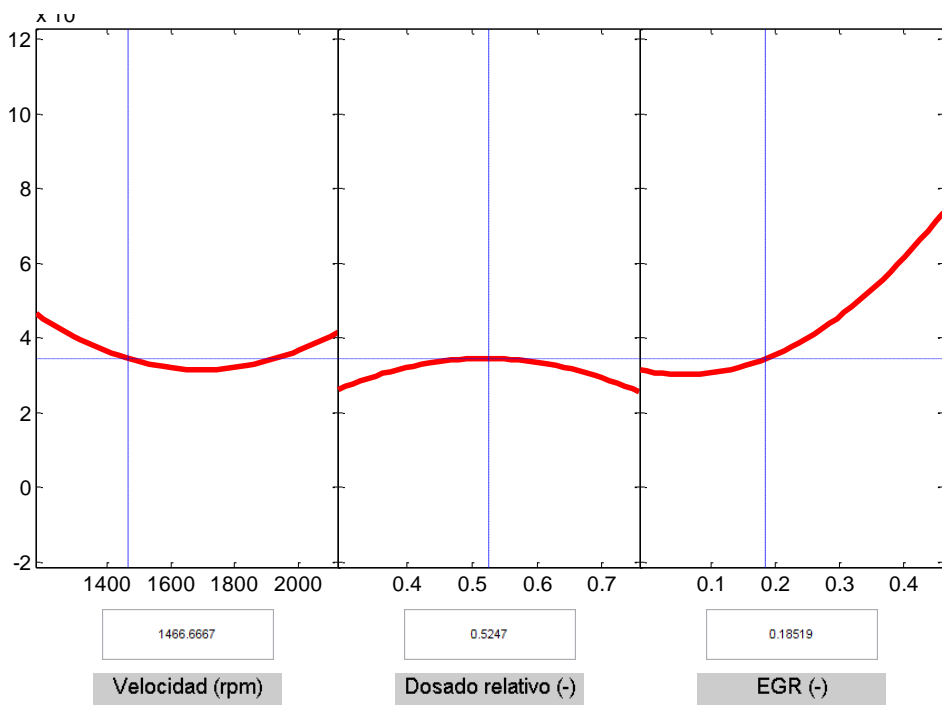


Figura 6. 2: Superficie de respuesta del coeficiente A_D para los ensayos early HCCI.

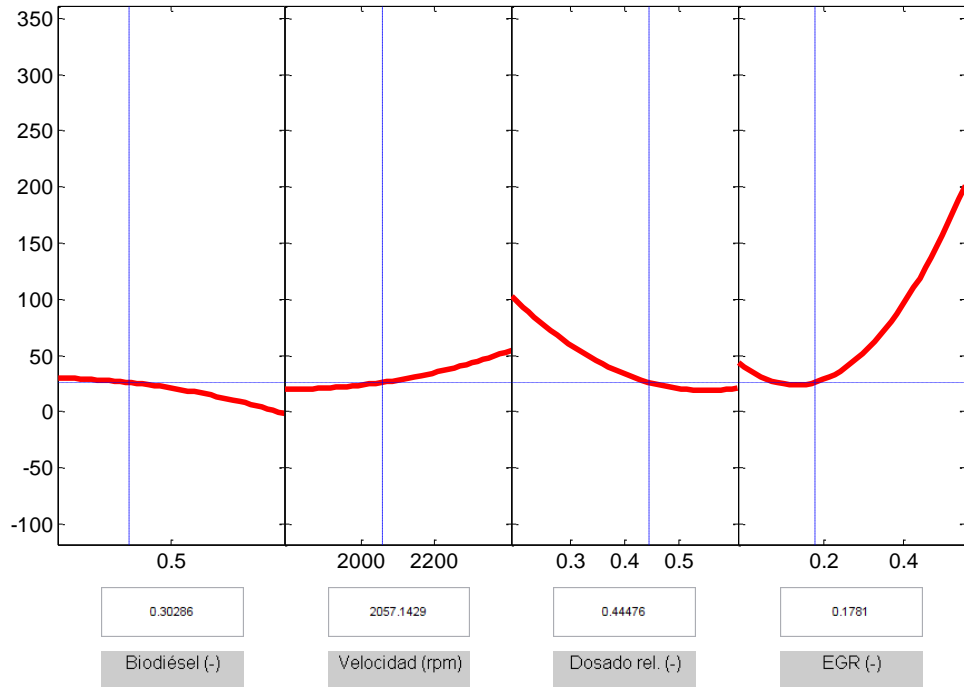


Figura 6. 3: Superficie de respuesta del coeficiente A_c para los ensayos late HCCI.

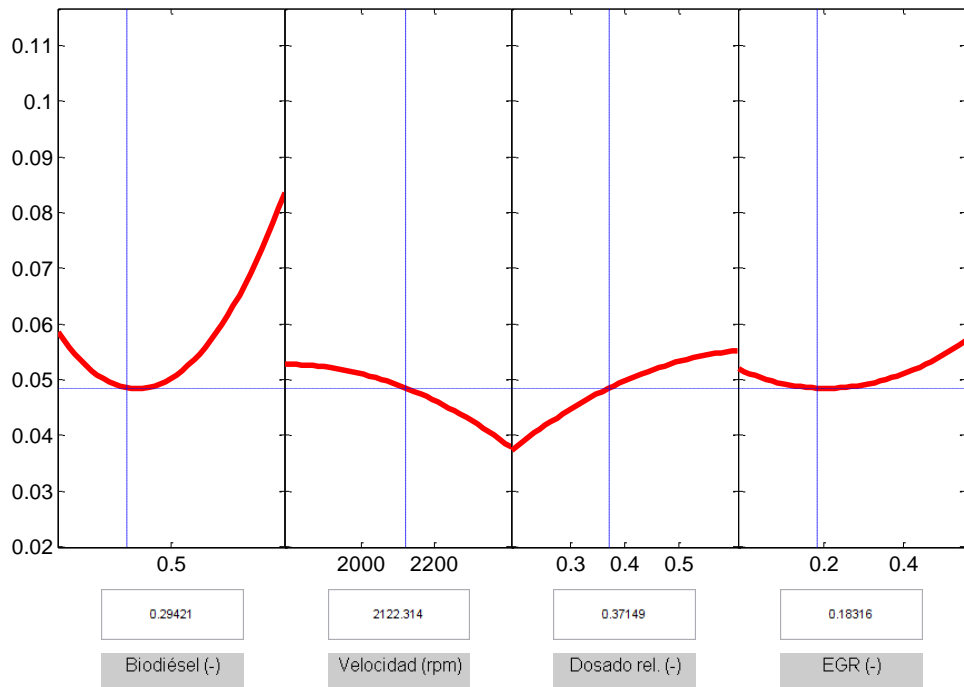


Figura 6. 4: Superficie de respuesta del coeficiente A_D para los ensayos late HCCI.

6.3. Validación del modelo multizona predictivo

A continuación se procederá a validar los resultados del modelo predictivo construido mediante la aplicación de las leyes funcionales descritas en el apartado anterior, las cuales permiten la caracterización de los coeficientes A_c y A_d en función de las condiciones de operación del motor. La metodología aplicada para llevar a cabo la mencionada validación consiste en la comparación de las curvas de presión en cámara obtenidas mediante el modelo predictivo frente a las curvas de presión derivadas del modelo optimizado expuesto en el Capítulo 5. Dado que este último fue a su vez validado frente a datos obtenidos experimentalmente, según lo expuesto en el capítulo anterior, se considera que el modelo multizona optimizado constituye una herramienta plenamente apta para llevar a cabo la validación del modelo predictivo.

Al igual que en el capítulo anterior, en primer lugar se expone una batería de resultados gráficos, los cuales incluyen ensayos tanto early HCCI (inyección 45° APMS) como late HCCI (inyección 10° APMS). Según se ha indicado con anterioridad en estas figuras se representan las curvas de presión obtenidas tanto por el modelo predictivo como por el modelo optimizado, de forma que resulte posible la comparativa entre los mismos.

En relación a los ensayos early HCCI cabe destacar que el análisis de las Figuras 6. 5 y 6. 6 pone de manifiesto una cierta tendencia a adelantar el inicio de la combustión por parte del modelo predictivo. Es decir, los valores de A_d empleados en el modelo predictivo son ligeramente mayores que los valores óptimos derivados del proceso de calibración frente a los ensayos experimentales. No obstante, a pesar de la mencionada tendencia a adelantar el inicio de la combustión, la predicción realizada respecto del instante de ignición de la mezcla puede considerarse como válida. Por el contrario, la observación de los gradientes de presión durante la combustión mostrados en las Figuras 6. 5 y 6. 6 denota que los resultados del modelo predictivo son

complemente análogos a los resultados obtenidos con el modelo optimizado. Asimismo, en relación a los resultados mostrados en las Figuras 6. 5 y 6. 6 para los ensayos early HCCI cabe destacar la bondad del modelo predictivo en relación a la presión máxima en cámara. Este hecho posee una gran importancia, ya que la presión máxima condiciona en gran medida el valor de la temperatura máxima en el interior de la cámara de combustión, lo que a su vez condiciona las emisiones de óxidos de nitrógeno. Por lo tanto, en base a la similitud entre las curvas de presión mostradas en las figuras referidas cabe concluir que las emisiones obtenidas a través del modelo predictivo gozarán de la misma bondad que las derivadas del modelo optimizado. Asimismo conviene destacar que la capacidad del modelo predictivo de estimar adecuadamente la presión máxima en la cámara de combustión dota de un valor añadido al trabajo realizado, ya que el modelo propuesto puede ser aplicado en el estudio de la presión máxima en MEC para aplicaciones severas (Heavy Duty Diesel, HDD). En los motores HDD existe actualmente la demanda de mejoras en relación a la potencia específica de los mismos, lo cual requiere el aumento de la presión máxima en la cámara de combustión, estimándose valores futuros de 250 bar [180]. El mencionado aumento en la presión máxima requiere que durante la fase de diseño de los motores HDD se lleven a cabo estudios estructurales detallados, los cuales requieren la correcta caracterización de la presión máxima en diferentes condiciones de operación. Por otro lado, como no podía ser de otra forma, el modelo multizona predictivo tiene la capacidad de capturar la tendencia del inicio de la combustión frente a un incremento de la cantidad de gases de escape recirculados, reflejando un retraso en el inicio de la combustión (Figuras 6. 5 y 6. 6).

Los resultados asociados a los ensayos late HCCI mejoran a los anteriormente referidos para los ensayos early HCCI. De esta forma el ángulo de inicio de la combustión es predicho con mayor precisión que en el caso de los ensayos early HCCI. Sin embargo, es preciso reseñar que la previamente mencionada tendencia al adelanto de la combustión persiste, aunque en mucha menor medida. De hecho, para ensayos con biodiésel puro la tendencia es opuesta, el modelo predictivo se retrasa respecto del modelo optimizado (Figura 6. 10). En relación a los gradientes de presión durante la combustión no cabe destacar

nada nuevo respecto a lo indicado para los ensayos early HCCI, ya que los resultados obtenidos mediante el modelo predictivo son análogos a los derivados del modelo optimizado. Sin embargo, la principal desviación del modelo predictivo detectada en relación a los ensayos late HCCI está asociada al error cometido en la predicción del valor de la presión máxima en cámara, la cual resulta sobre-estimada por parte del modelo predictivo. Como se expondrá con posterioridad (Tabla 6. 2), el error cometido en los ensayos late HCCI respecto a la presión máxima, aunque superior al detectado en los ensayos early HCCI, posee un valor del orden de los 2 bar, lo que no resta validez al modelo propuesto ni al resto de parámetros obtenidos a partir del modelo predictivo. Para concluir cabe destacar que a pesar de la desviación referida en relación a la presión máxima en la cámara de combustión, la aplicación del modelo propuesto al diseño mecánico de motores no queda comprometida, ya que la predicción obtenida está sobrevalorada respecto a la magnitud real, por lo que el modelo proporciona datos del lado de la seguridad, dotados de un leve margen de seguridad.

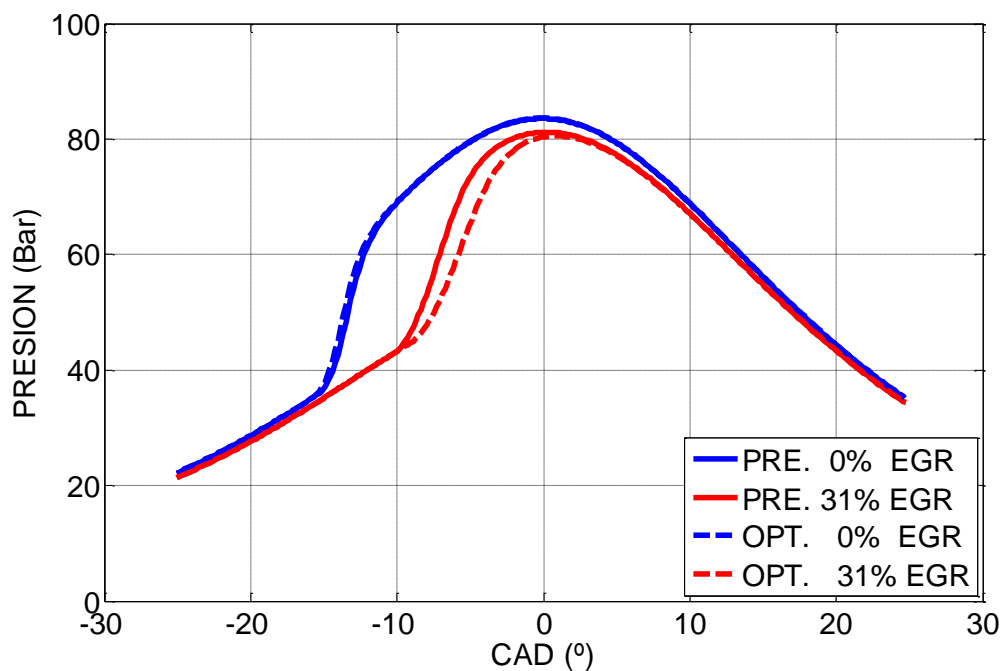


Figura 6. 5: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para gasoil (early HCCI), 1500 rpm y dosado relativo 0,34.

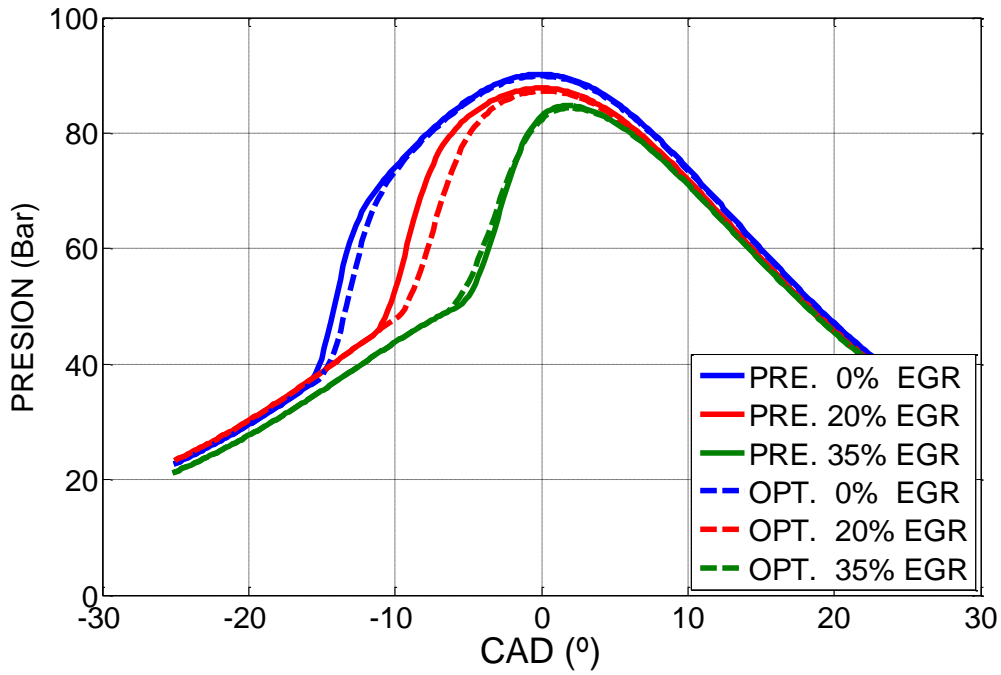


Figura 6. 6: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para gasoil (early HCCI), 1800 rpm y dosado relativo 0,34.

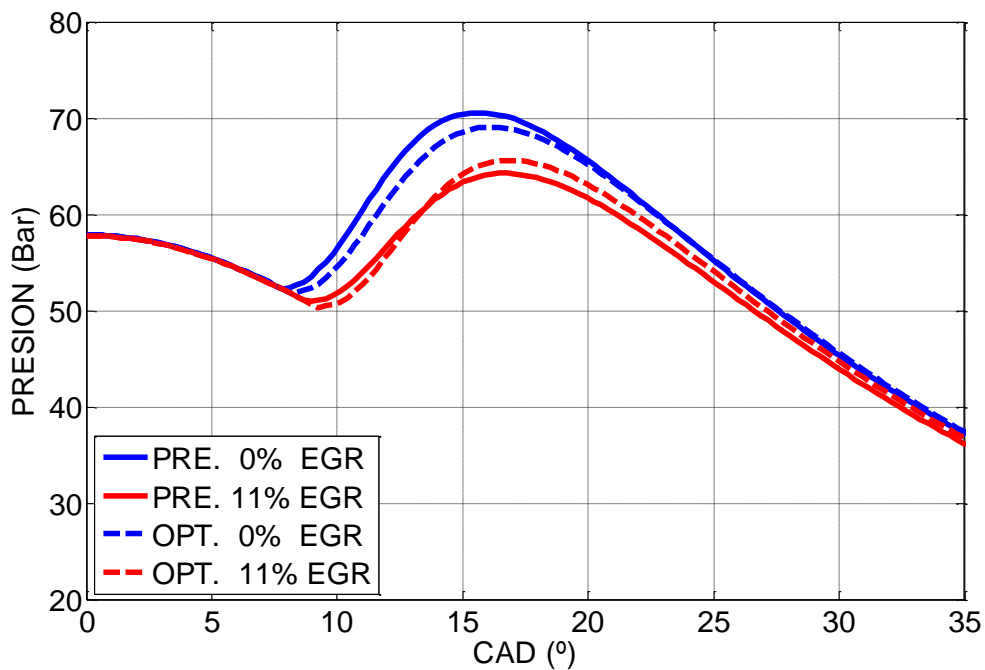


Figura 6. 7: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para gasoil (late HCCI), 2400 rpm y dosado relativo 0,60.

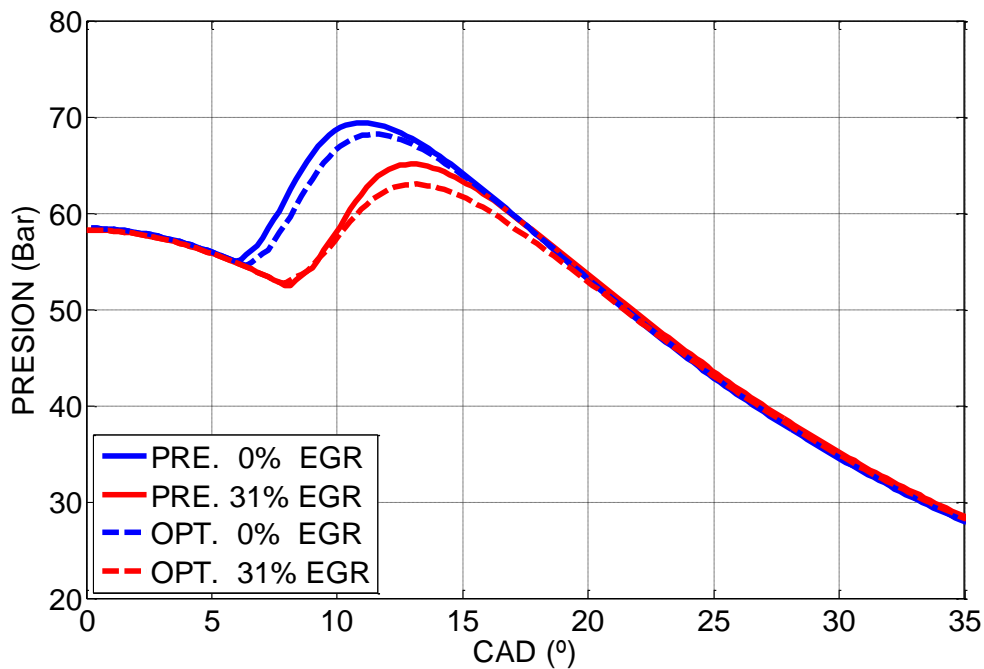


Figura 6. 8: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para biodiésel 30% (late HCCI), 1800 rpm y dosado relativo 0,20.

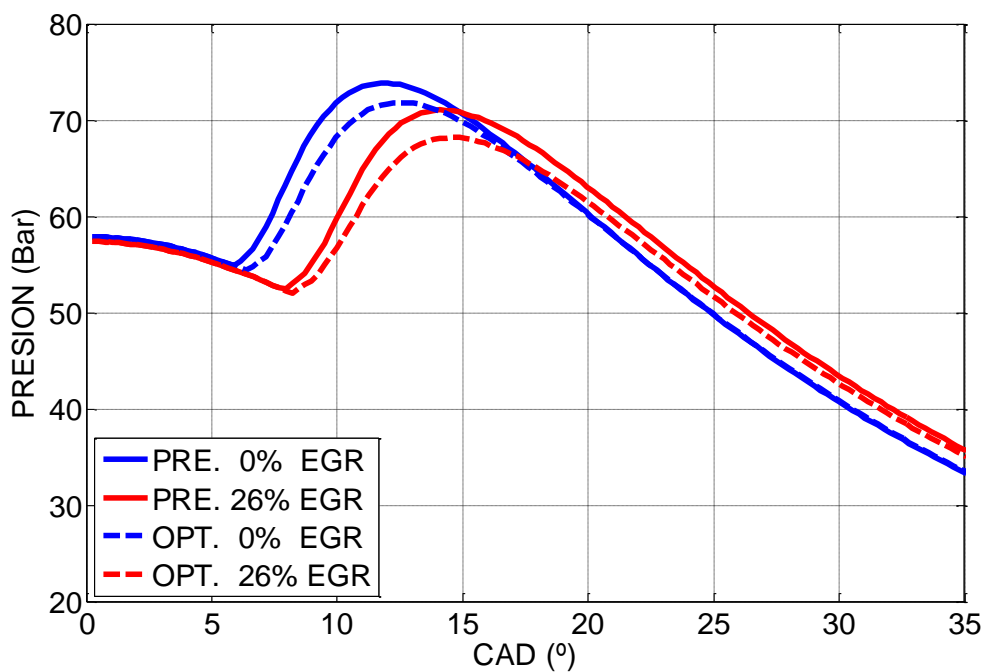


Figura 6. 9: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para biodiésel 65% (late HCCI), 2100 rpm y dosado relativo 0,45.

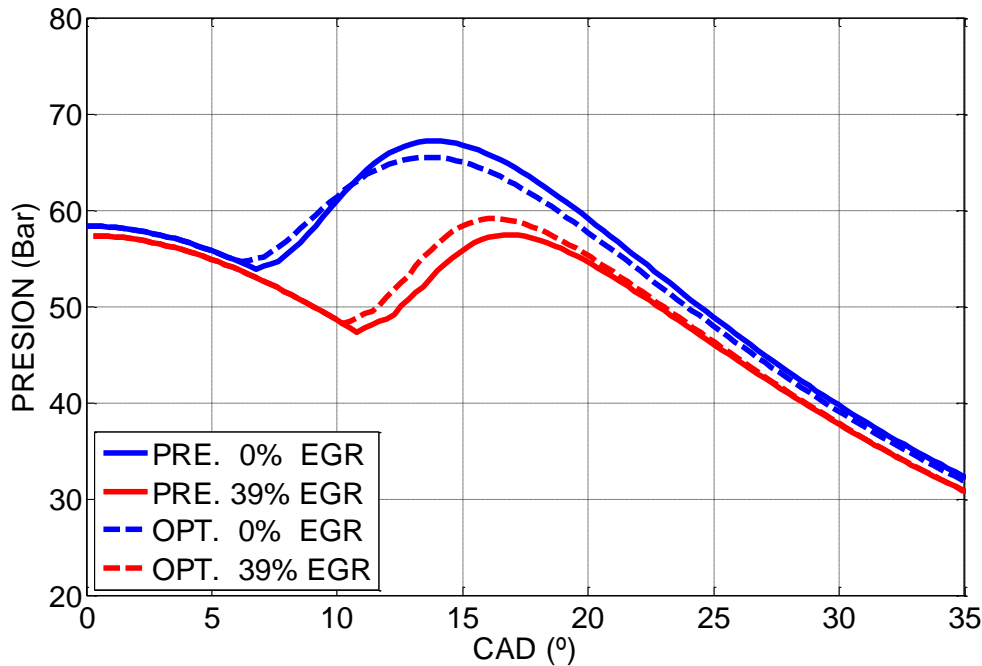


Figura 6. 10: Comparativa entre los modelos optimizado y predictivo. Evolución de la presión para biodiésel 100% (late HCCI), 2400 rpm y dosado relativo 0,45.

Para concluir con la validación del modelo predictivo derivado de las leyes funcionales propuestas en el presente capítulo, a continuación se exponen resultados relacionados con los errores obtenidos en la predicción de la curva de presión. Se ha procedido al análisis tanto del error máximo cometido para cada ensayo (valor absoluto de la mayor diferencia entre la curva de presión derivada del modelo optimizado y la curva de presión simulada mediante el modelo predictivo, considerando el mismo ángulo del cigüeñal para ambas) como del error cometido en la estimación de la presión máxima en cámara (valor absoluto de la diferencia entre el máximo de la curva de presión derivada del modelo optimizado y el máximo de la curva de presión del modelo predictivo, sin necesidad de que se produzcan en el mismo ángulo del cigüeñal). En la Tabla 6. 2 se exponen los valores promedio de los dos errores estudiados, clasificándolos en función de la configuración empleada. Al igual que ocurría al comparar el modelo optimizado con las curvas experimentales, los ensayos early HCCI poseen un error máximo más elevado que el obtenido para los ensayos late HCCI. En relación al error máximo derivado del modelo predictivo para los ensayos early HCCI cabe destacar que, a pesar de su aparentemente elevado valor, éste no posee un impacto severo en los

resultados, ya que esta diferencia entre las curvas de presión comparadas se concentra en la zona de inicio de la combustión, donde, debido al ligero desfase entre el modelo optimizado y el modelo predictivo, se acumula el error máximo referido. Sin embargo este error es corregido inmediatamente a medida que la combustión inicia en el modelo optimizado. Es decir, el error máximo derivado del modelo predictivo para los ensayos early HCCI se debe a la previamente mencionada tendencia a adelantar el inicio de la combustión respecto al modelo optimizado. Sin embargo, la tendencia es opuesta en relación al error cometido en la estimación de la presión máxima en cámara, ya que los ensayos early HCCI permiten obtener un error menor que el obtenido para los ensayos late HCCI, al igual que ocurría al comparar el modelo optimizado y los valores experimentales. No obstante, es preciso señalar que los errores asociados al modelo predictivo doblan a los cuantificados para el modelo optimizado (Tabla 5. 4). Este hecho resulta asumible gracias al potencial proporcionado por el modelo predictivo, el cual permite llevar a cabo estimaciones de diferentes variables indicadas sin necesidad de realizar experimentación en el banco de ensayos, limitando de esta forma el consumo de recursos tanto temporales como económicos. En base a lo anteriormente expuesto cabe destacar que las desviaciones obtenidas permiten establecer la validez del modelo predictivo derivado de las leyes funcionales descritas en este capítulo, supliendo satisfactoriamente la ausencia de un modelo cinético-químico mediante las leyes funcionales adoptadas para el modelado tanto del inicio de la combustión como de la tasa de liberación de calor. De esta forma, se da por satisfactorio el modelo predictivo desarrollado, siendo los resultados proporcionados por el mismo válidos para llevar a cabo estudios relacionados con los fenómenos físicos que tienen lugar en el interior de la cámara de combustión de un motor que opere con combustión en modo HCCI.

Ensayos	Error máximo promedio (Bar)	Error en presión máxima promedio (Bar)
Early HCCI	7,58	1,23
Late HCCI	3,70	1,98

Tabla 6. 2: Errores promedio asociados a la validación del modelo predictivo.

El modelo predictivo logrado a través de las leyes funcionales descritas en este capítulo posee una gran utilidad a la hora de llevar a cabo el prediseño mecánico de motores off-road de cilindrada similar a la empleada en el presente trabajo, ya que la obtención de las estimaciones en relación a los niveles de emisiones, presión máxima, gradiente de presión, temperatura en cámara, inicio de la combustión, pérdidas de calor, etc... posibilitan dimensionar elementos tales como el pistón, el cigüeñal, el sistema de lubricación, sistema de refrigeración, etc...y de esta forma obtener una estimación preliminar del coste del mismo. Para concluir cabe mencionar que el diseño de motores con combustión en modo HCCI queda contextualizado en los Capítulos 1 y 2 del presente trabajo, donde se expone la tendencia de las normativas actuales a restringir el nivel de emisiones en los MCI, lo que dota a los motores con combustión en modo HCCI de un atractivo añadido frente a los MEC convencionales, considerando las menores emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas de los primeros.

6.4. Aplicación del modelo predictivo

Según se ha mencionado en la sección anterior, la principal aplicación del modelo multizona predictivo propuesto en el presente trabajo la constituye el prediseño mecánico de motores off-road de características similares al empleado en la sección experimental de este documento (Capítulo 3). Por este motivo, tras llevar a cabo la validación del modelo predictivo derivado de las leyes funcionales expuestas en la sección anterior, a continuación se ilustran distintos ejemplos de los potenciales usos del modelo predictivo propuesto. La finalidad de estos ejemplos es proporcionar una prueba del potencial del modelo multizona desarrollado como herramienta predictiva aplicada al análisis de motores off-road en condiciones HCCI.

En primer lugar se procederá a caracterizar el mapa de operación del motor analizado en el presente trabajo, empleando para ello diferentes parámetros característicos. A continuación se procederá a la optimización de la operación

mediante la obtención de la fracción de gases de escape recirculados que maximiza el par generado.

Tras la caracterización y optimización del mapa de operación referidas en el párrafo anterior, se analizará una serie de consideraciones generales asociadas a la evolución temporal de parámetros tales como la temperatura en el interior de la cámara de combustión, las pérdidas de calor a través de las paredes, los flujos de masa en el interior de la cámara y las fugas de masa hacia el cárter, incluyendo la realización de diferentes estudios de sensibilidad en relación a diversos parámetros operativos.

Antes de proceder a la exposición de las distintas aplicaciones del modelo predictivo es preciso recalcar que, según se justificó en el Capítulo 5, todas las simulaciones expuestas a continuación han sido realizadas considerando que la cámara de combustión se compone por diez subvolúmenes. Para más información sobre el tamaño relativo de estos subvolúmenes y su configuración se remite al lector a la Sección 5.2.

6.4.1. Obtención de mapas de operación en modo HCCI

Como ejemplo adicional de la previamente mencionada aplicación de este modelo predictivo al prediseño mecánico de motores off-road de características similares al empelado en el capítulo experimental de este documento, a continuación se ilustra el proceso de obtención de mapas de operación para distintas variables características del comportamiento del motor. Estos mapas de operación consistirán en representaciones gráficas del valor de diferentes parámetros empleados típicamente para la evaluación de las prestaciones del motor, frente a parámetros tales como la velocidad de giro y la presión media efectiva neta (Brake Mean Effective Pressure, BMEP [bar]). Los parámetros característicos analizados consistirán en el consumo específico neto de combustible (Brake Specific Fuel Consumption, BSFC [g/kWh]), la presión máxima en la cámara de combustión y las emisiones de óxidos de nitrógeno.

Asimismo, tras analizar convenientemente el comportamiento de los distintos parámetros característicos, se procederá a optimizar el comportamiento del motor mediante la identificación de la fracción de gases de escape recirculados que maximiza el par generado para un consumo de combustible y una velocidad de giro dadas. Es decir, se empleará el modelo multizona con la finalidad de predecir el par generado en condiciones óptimas de recirculación de gases de escape, así como para generar los mapas de operación de los parámetros característicos previamente mencionados en las condiciones optimizadas. De esta forma se hace patente el potencial del modelo multizona desarrollado como herramienta predictiva aplicada al análisis de motores off-road en condiciones HCCI.

Antes de proceder al análisis de los resultados obtenidos mediante la aplicación del modelo multizona predictivo conviene aclarar la metodología de cálculo empleada para obtención de los parámetros característicos previamente mencionados. En primer lugar es preciso realizar la diferenciación entre variables indicadas y netas, correspondiendo las primeras al proceso de intercambio de energía entre los gases y el pistón, mientras que las segundas están asociadas al trabajo medido en el eje del motor. Tras la aclaración previa, la BMEP se define como el cociente entre el trabajo neto generado por el motor y su correspondiente cilindrada, si bien en la práctica la BMEP se suele expresar en función de la potencia o el par netos (Ecuación 6.2). En relación a la BMEP cabe destacar que, a diferencia del par, se trata de un parámetro normalizado por la cilindrada y la velocidad de giro del motor, constituyendo una herramienta muy útil para evaluar las prestaciones relativas de un determinado motor.

$$BMEP = \frac{W_B}{V_D} = \frac{P_B \cdot n_R}{V_D \cdot N} = \frac{T_B \cdot 2 \cdot \pi \cdot n_R}{V_D} \quad \text{Ecuación 6.2}$$

Donde:

- W_B es el trabajo neto generado.
- V_D es la cilindrada del motor.

- P_B es la potencia neta.
- n_R es el número de revoluciones englobadas en un ciclo, 2 para motores de 4 tiempos.
- N es la velocidad de giro del motor.
- T_B es el par neto.

Sin embargo, dado que a partir de la curva de presión en cámara sólo se puede obtener el trabajo indicado (Ecuación 6.3) y no el trabajo neto, es preciso definir un modelo de pérdidas mecánicas para calcular la BMEP a través de la presión media efectiva indicada (Indicated Mean Effective Pressure, IMEP [bar]) (Ecuación 6.4). Para ello se ha implementado un modelo universal de pérdidas mecánicas para MEC, el cual se muestra en la Ecuación 6.5 [181]. De esta forma, las pérdidas mecánicas obtenidas serán sustraídas a la IMEP para calcular la BMEP (Ecuación 6.6).

$$W_I = \oint p \cdot dV \quad \text{Ecuación 6.3}$$

$$IMEP = \frac{W_I}{V_D} \quad \text{Ecuación 6.4}$$

$$P_{Loss}^{Mech} = C_1 + 48 \cdot \left(\frac{N}{1000} \right) + 0,4 \cdot \bar{S}_P^2 \quad \text{Ecuación 6.5}$$

$$BMEP = IMEP - P_{Loss}^{Mech} \quad \text{Ecuación 6.6}$$

Donde:

- W_I es el trabajo indicado.
- p es la presión en la cámara de combustión.
- V es el volumen de la cámara de combustión.
- P_{Loss}^{Mech} es la presión equivalente a las pérdidas mecánicas.

- C_1 es 0,75 bar para motores de inyección directa.
- \bar{S}_p es la velocidad media del pistón.

De esta forma, una vez obtenida la BMEP, a través del trabajo neto (Ecuación 6.2), es posible proceder al cálculo de la potencia neta (Ecuación 6.7) y, finalmente, del consumo específico neto de combustible (Ecuación 6.8), el cual se define como el cociente entre el consumo horario de combustible y la potencia neta generada.

$$P_B = \frac{W_B \cdot N}{n_R} \quad \text{Ecuación 6.7}$$

$$BSFC = \frac{\dot{m}_f}{P_B} \quad \text{Ecuación 6.8}$$

Donde:

- \dot{m}_f es el consumo horario de combustible.

Siguiendo la metodología descrita en los párrafos anteriores se generan los resultados mostrados en las Figuras 6. 11, 6. 12 y 6. 13, los cuales permiten obtener valiosas conclusiones. En primer lugar, cabe destacar que el funcionamiento en modo early HCCI, restringe el rango de operación a carga alta, pudiendo operar con BMEP máximas de 3 bar aproximadamente, como puede observarse en las tres figuras antes mencionadas. La penalización en la BMEP se debe a que el incremento de la carga se traduce en el adelanto del inicio de la combustión, debido al calentamiento de la cámara de combustión. A su vez el mencionado adelanto del inicio de la combustión supone un incremento del trabajo negativo (trabajo durante la carrera de compresión). Es decir, la combustión se produce con excesiva antelación respecto al PMS, lo que penaliza el trabajo generado. A pesar de los bajos valores obtenidos en relación a la BMEP, con posterioridad se analizará cómo incrementarlos, lo cual requerirá retrasar el inicio de la combustión mediante el uso de la recirculación de gases de escape.

En la Figura 6. 11 se muestran los resultados correspondientes al BSFC, el cual, al igual que la BMEP, posee unos valores muy lejanos a los correspondientes a un motor con una operación optimizada. Según se ha comentado con anterioridad en relación a la BMEP, el excesivo adelanto del inicio de la combustión experimentado a altas cargas implica una reducción de la potencia generada debido al trabajo negativo. La disminución de la potencia generada a altas cargas conlleva el significativo aumento del BSFC observado en la Figura 6. 11. Sin embargo, a pesar de los negativos resultados obtenidos, el comportamiento cualitativo del BSFC es el esperado, consistente en la existencia de una zona de BSFC óptimo, rodeada de curvas de nivel anulares concéntricas con BSFC creciente. En el caso de la Figura 6. 11 cabe destacar el significativo aumento del BSFC experimentado en el límite superior de las cargas simuladas.

El parámetro analizado en la Figura 6. 12 es la presión máxima en cámara, la cual presenta una tendencia creciente tanto para la carga como para la velocidad de giro, si bien el aumento frente a la velocidad de giro es mucho menos acusado que frente a la BMEP. En relación a la variación de la presión máxima respecto a la BMEP, dada una velocidad de giro constante, el aumento referido previamente se debe a la mayor cantidad de combustible inyectado en el motor, lo cual genera mayores dosados que se traducen en un aumento del calor liberado en la cámara de combustión. Todo ello conlleva que los máximos de la curva de presión en cámara crezcan con la BMEP.

Finalmente, en la Figura 6. 13 se recoge el mapa de operación correspondiente a las emisiones de óxidos de nitrógeno. En la referida figura se puede comprobar que las emisiones de óxidos de nitrógeno presentan una evolución similar a la descrita en relación a la presión máxima. Nuevamente se puede constatar que el aumento de las emisiones de óxidos de nitrógeno frente a la velocidad de giro es mucho menos acusado que frente a la BMEP. Llegados a este punto cabe recordar que, como se ha referido con anterioridad, las emisiones de óxidos de nitrógeno están fuertemente vinculadas a la temperatura media de los gases alojados en la cámara de combustión, existiendo una relación de proporcionalidad directa. De esta forma, en la Figura 6. 13 se puede constatar que las emisiones de óxidos de nitrógeno aumentan

con la BMEP. Este comportamiento se debe al aumento de la temperatura media en la cámara de combustión debido a la mayor liberación de calor asociada a la mayor cantidad de combustible aportado a cargas más altas. Respecto al aumento de las emisiones de óxidos de nitrógeno con la velocidad de giro del motor, considerando una BMEP constante, la menor energía correspondiente a las pérdidas de calor implica mayores temperaturas, lo que se traduce en emisiones de óxidos de nitrógeno ligeramente mayores.

Tras constar los pobres resultados obtenidos en relación al BSFC del motor empleado en la fase experimental del presente trabajo en condiciones early HCCI, se constata la necesidad de optimizar la operación del mismo. Para ello se requiere minimizar el significativo trabajo negativo asociado al excesivo adelanto del inicio de la combustión en condiciones early HCCI, especialmente a cargas altas. Como se ha mencionado con anterioridad, una estrategia muy útil a este respecto consiste en la recirculación de gases de escape refrigerados, lo que permite retrasar el inicio de la combustión. Esta tarea permite ilustrar de una manera muy notable la utilidad del modelo predictivo propuesto en el presente trabajo, ya que en vez de proceder a una optimización de tipo experimental, se llevará a cabo un proceso numérico basado en el modelo multizona descrito como herramienta predictiva del comportamiento del motor con combustión en modo HCCI.

De esta forma, se ha generado una batería de simulaciones en las que, dadas unas condiciones de velocidad de giro y de combustible alimentado, se ha procedido a identificar la fracción de gases de escape recirculados que permite maximizar el par generado. Es decir, se ha simulado el uso de la recirculación de gases de escape refrigerados con el objeto de retrasar el inicio de la combustión. De esta forma se ha generado el mapa de operación correspondiente a la cantidad de gases de escape recirculados que optimiza el par de forma numérica, sin necesidad de recurrir a la experimentación en banco de ensayos, lo que conllevaría un mayor consumo de recursos tanto económicos como de tiempo.

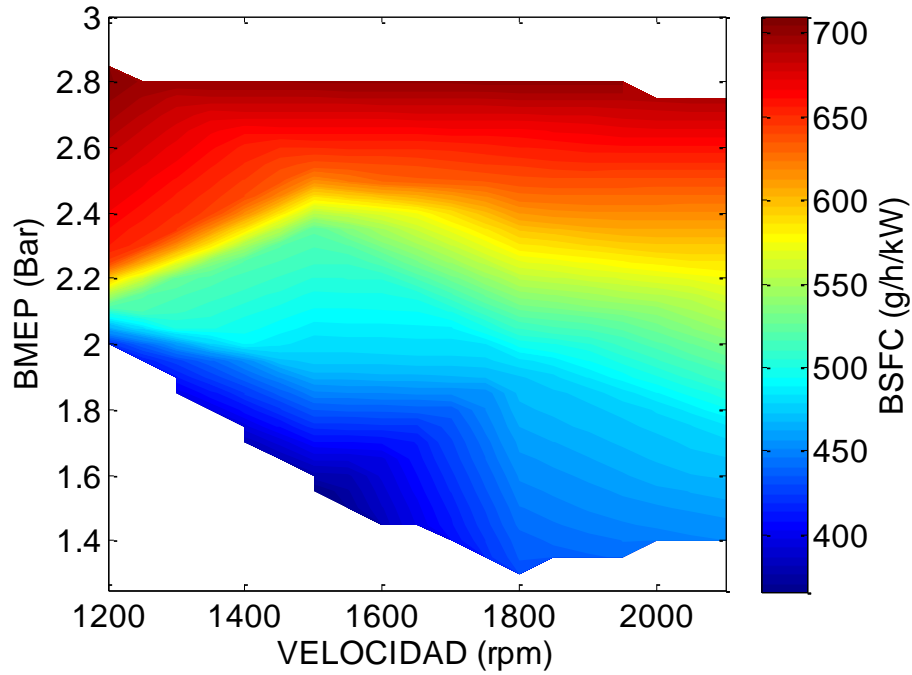


Figura 6. 11: BSFC simulado para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

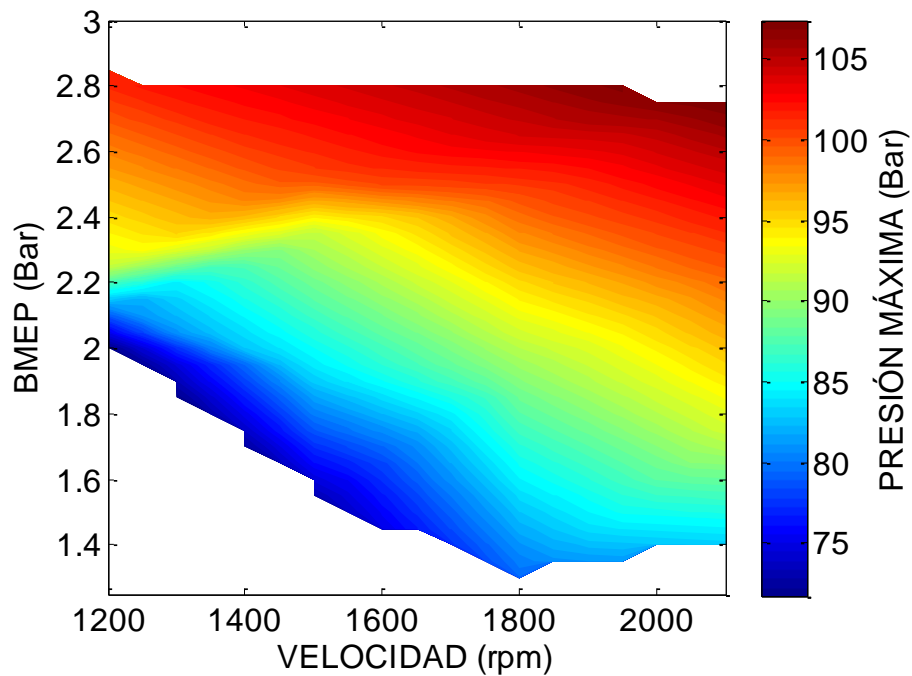


Figura 6. 12: Presión máxima simulada para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

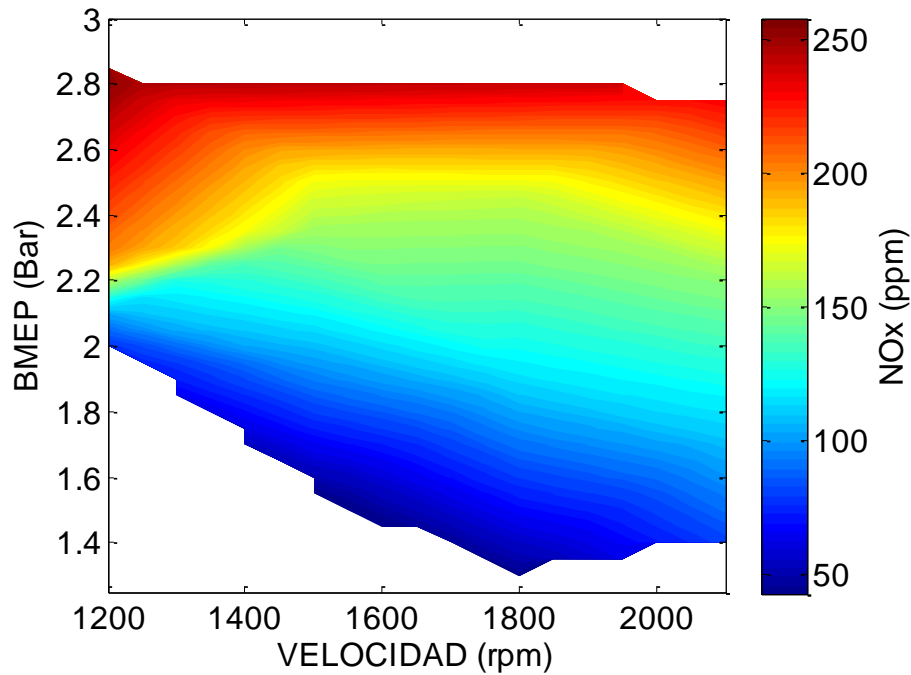


Figura 6. 13: Emisiones de óxidos de nitrógeno simuladas para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

Antes de proceder al análisis de los resultados obtenidos mediante el proceso numérico de optimización es conveniente destacar que la existencia de un valor óptimo para la fracción de gases de escape recirculados en modo HCCI se debe a que inicialmente el retraso del inicio de la combustión se traduce en la reducción del trabajo negativo, aunque a partir de un determinado valor, el inicio de la combustión se produce con excesivo retraso, minimizando el trabajo generado durante la carrera de expansión. De esta forma, en la Figura 6. 14 se muestran los resultados correspondientes a la fracción de gases de escape que maximiza el par generado para una cantidad de combustible y una velocidad dadas. El análisis de estos resultados pone de manifiesto claramente como a medida que la carga aumenta la cantidad requerida de gases recirculados es menor, aunque el retraso requerido sea mayor debido al excesivo adelanto del inicio de la combustión. Este comportamiento se debe a la mayor proporción de productos de la combustión contenido en los gases recirculados a carga alta, debido al mayor dosado asociado a ésta, poseyendo estos gases recirculados una capacidad térmica más elevada que la correspondiente al aire.

Tras identificar la fracción de gases de escape recirculados requerida para maximizar el par generado, dados un consumo de combustible y una velocidad de giro, se procede a analizar los resultados asociados al resto de parámetros analizados (Figuras 6. 15, 6. 16 y 6. 17). En primer lugar cabe destacar que la reducción del trabajo absorbido durante la carrera de compresión debido al retraso del inicio de la combustión, implica un significativo aumento de la BMEP, el cual alcanza aproximadamente el 50% a cargas altas en comparación con el mapa de operación sin recirculación de gases de escape. Este hecho pone de manifiesto que la recirculación de gases de escape constituye una estrategia muy útil a la hora de optimizar el funcionamiento del motor en condiciones early HCCI.

En la Figura 6. 15 se constata una significativa disminución del BSFC en las condiciones óptimas de recirculación de gases de escape. Esta reducción del BSFC está asociada a la mayor potencia generada como consecuencia del retraso del inicio de la combustión hasta el ángulo de giro óptimo, dadas unas determinadas cantidad de combustible alimentado al motor y velocidad de giro. El BSFC tras el proceso de optimización disminuye muy notablemente, alcanzando valores más razonables, si bien el BSFC óptimo continúa siendo superior al declarado en motores comerciales convencionales. Respecto a la tendencia identificada en relación al comportamiento del BSFC frente a la BMEP y a la velocidad de giro cabe destacar que el óptimo se sitúa en velocidades cercanas a las 1800 rpm.

Finalmente, en las Figuras 6. 16 y 6. 17 se recogen los resultados correspondientes a la presión máxima en la cámara de combustión y a las emisiones de óxidos de nitrógeno para la operación en condiciones early HCCI con la fracción de gases de escape óptima para la maximización del par generado. En ambas figuras se puede comprobar que las tendencias son las mismas que las mostradas en las Figuras 6. 12 y 6. 13 para la operación sin recirculación de gases de escape. Sin embargo, se hace patente una ligera reducción tanto de la presión máxima como de las emisiones de óxidos de nitrógeno, la cual se atribuye a los efectos capacitivo y de dilución atribuidos a los gases de escape recirculados, lo que implica un descenso de la

temperatura media en la cámara de combustión que justifica el descenso tanto de la presión máxima como de las emisiones de óxidos de nitrógeno.

Como conclusión asociada a los resultados puestos de manifiesto a lo largo de la presente sección, cabe destacar que, gracias a su capacidad predictiva del comportamiento del motor con combustión en modo HCCI, el modelo multizona propuesto resulta de gran utilidad en aplicaciones donde se requiere la obtención intensiva de datos relacionados con la operación del motor, frente a procesos de índole experimental. De esta forma, se puede proceder a la caracterización del motor tanto en fase de prediseño como en fases posteriores, con la finalidad de reducir los costes asociados a la experimentación en banco de ensayos.

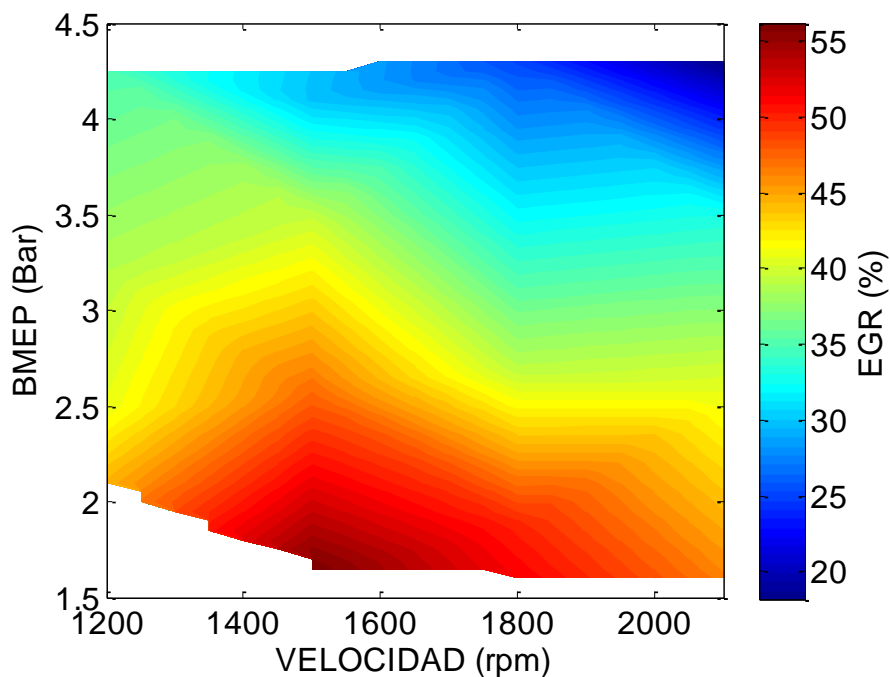


Figura 6. 14: EGR que optimiza el par generado para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

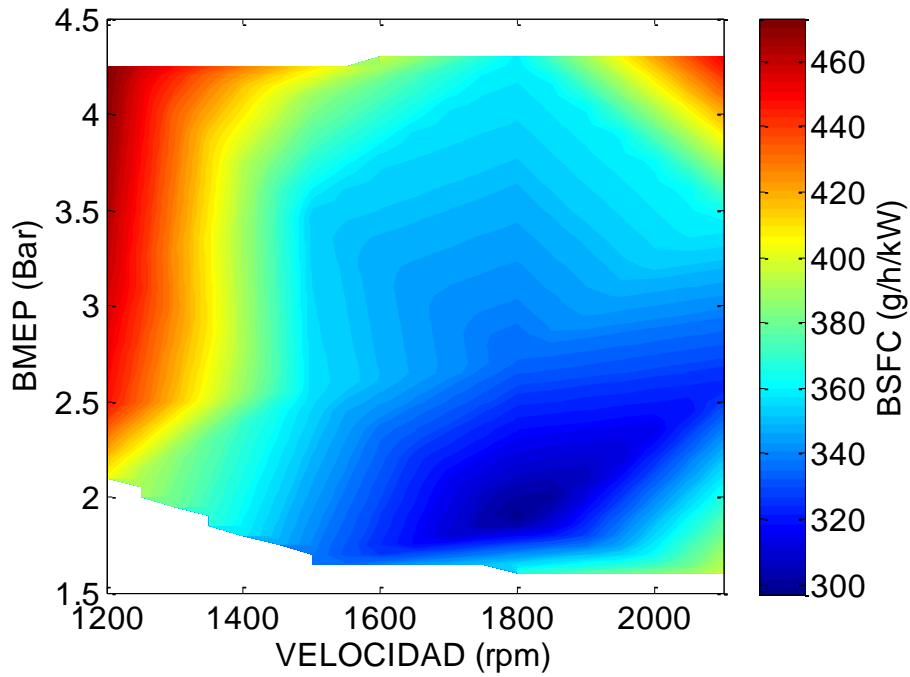


Figura 6. 15: BSFC optimizado para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

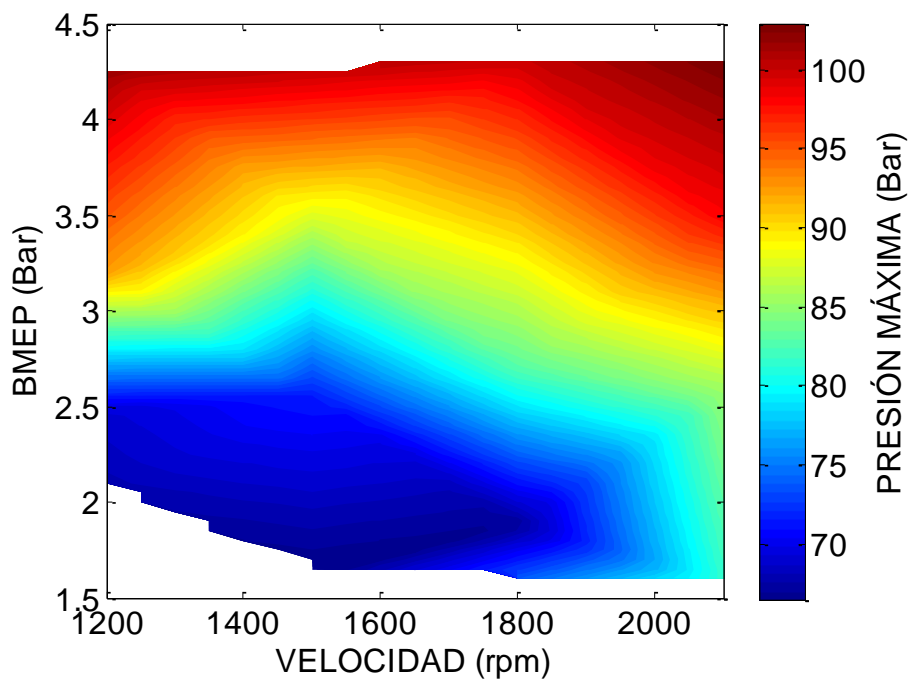


Figura 6. 16: Presión máxima con EGR óptimo para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

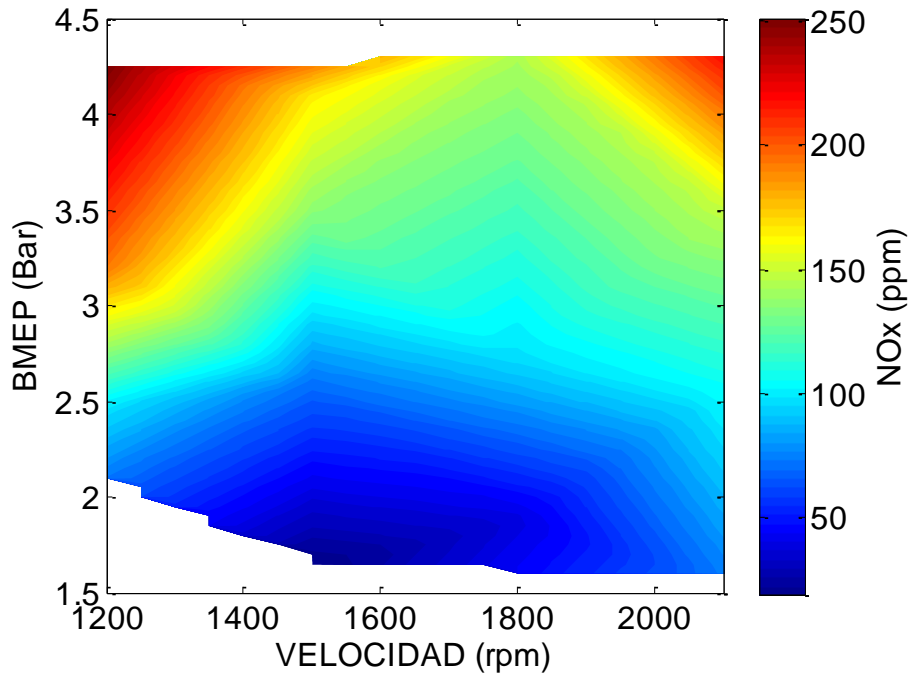


Figura 6. 17: Emisiones de óxidos de nitrógeno con EGR óptimo para el motor Deutz-Díter FL1 906 operando en modo early HCCI (RC 15:1, inyección 45° APMS).

6.4.2. Evolución de la temperatura y las pérdidas de calor

A continuación se analizará la evolución en el tiempo de la temperatura en el interior de la cámara de combustión para unas determinadas condiciones operativas, así como la correspondiente pérdida de calor a través de las paredes. Concretamente se monitorizarán las temperaturas en cada uno de los subvolúmenes en los que se ha dividido la cámara de combustión. Para realizar este análisis se ha optado por la configuración early HCCI, la cual se caracteriza por una relación de compresión de 15:1 y un punto de inyección localizado 45° APMS. No obstante las conclusiones obtenidas son directamente aplicables a la configuración late HCCI (relación de compresión 18,4:1 e inyección 10° APMS).

Las condiciones operativas bajo las cuales se ha llevado a cabo la simulación mostrada en la Figura 6. 18 corresponden a una velocidad de giro de 1200 rpm y un dosado relativo de 0,41. Para la realización de esta simulación no se ha

tenido en cuenta la recirculación de gases de escape. Respecto a la nomenclatura empleada en la mencionada figura cabe destacar que, según se expuso en el Capítulo 5, la cámara de combustión se ha dividido en cilindros concéntricos, de forma que el subvolumen 1 correspondería al cilindro exterior y el subvolumen 10 al cilindro interior. Asimismo, es preciso aclarar que la curva correspondiente al subvolumen 1 (cilindro exterior) no aparece reflejada en la Figura 6. 18 debido a que, al tratarse del subvolumen que está en contacto con las paredes de la cámara de combustión, su temperatura es mucho menor que la del resto de subvolúmenes, siendo similar a la temperatura de pared considerada. Este hecho no deriva de una condición impuesta al modelo, como hacen otros autores, sino que se trata de un resultado directo del modelo de pérdidas de calor considerado. Para más información a este respecto se remite al lector al Capítulo 4.

Volviendo a la Figura 6. 18, se puede observar que dado cualquier instante de tiempo, la curva que posee una mayor temperatura corresponde siempre a la zona interior de la cámara de combustión, mientras que las correspondientes al menor nivel térmico están asociadas a los subvolúmenes exteriores. También puede comprobarse que la combustión inicia antes en los subvolúmenes con una mayor temperatura, si bien no existe un retraso significativo entre las distintas zonas consideradas. Además se puede comprobar que el inicio de la combustión no se produce a la misma temperatura en todas las zonas consideradas, ya que la ley funcional adoptada para modelar este parámetro tiene en cuenta otras variables además de la temperatura de cada zona. Resulta igualmente instructivo analizar cómo repercute el inicio de la combustión de una zona en el calentamiento no sólo de esa zona, sino del resto de subvolúmenes. Este fenómeno se debe a los intercambios de masa asociados a los cambios en las condiciones termodinámicas provocados por la liberación de calor de la combustión, no siendo considerados en los modelos multizona propuestos por otros autores.

En la Figura 6. 19 se muestra la evolución temporal de la temperatura de cada subvolumen para una simulación en las mismas condiciones operativas que en la simulación anterior (1200 rpm y dosado relativo 0,41), con la salvedad de que se ha considerado un 30% de recirculación de gases de escape.

Comparando las Figuras 6. 18 y 6. 19 se puede observar el efecto de la recirculación de gases de escape sobre la evolución de la temperatura media. De esta forma se observa como la temperatura durante la fase de compresión es menor en los ensayos con recirculación de gases de escape, debido al efecto capacitivo de los gases de escape refrigerados. Este descenso de la temperatura durante la fase de compresión implica el retraso del inicio de la combustión, el cual se produce alrededor de 5° más tarde en el caso del ensayo con recirculación de gases de escape. Asimismo, se puede observar que la temperatura máxima alcanzada también decrece en la simulación con una mayor fracción de gases de escape recirculados. Esto se atribuye, además del previamente mencionado efecto capacitivo, al efecto de dilución provocado por los gases de escape, lo cual supone una reducción del oxígeno disponible en la cámara de combustión, el cual resulta sustituido por productos de la combustión recirculados.

Para poder analizar el efecto del dosado sobre el campo de temperaturas en el interior de la cámara de combustión se ha confeccionado la Figura 6. 20, donde se muestra la evolución de temperaturas para una velocidad de giro de 1200 rpm y un dosado relativo de 0,54. Al igual que en la Figura 6. 18, para la realización de esta simulación no se ha tenido en cuenta la recirculación de gases de escape. Comparando las Figuras 6. 18 y 6. 20 puede verificarse como un aumento de la carga conlleva un aumento del nivel de temperaturas en la cámara de combustión, lo que provoca el adelanto del inicio de la combustión, comportamiento expuesto en secciones anteriores. La satisfactoria reproducción de este efecto por parte del modelo propuesto presenta una ventaja añadida sobre otros modelos basados puramente en premisas cinético-químicas, ya que estos adolecen de la capacidad de capturar esta tendencia. Asimismo, un análisis detallado de las gráficas anteriores pone de manifiesto que en las simulaciones con mayores dosados relativos la combustión de las zonas externas se produce antes que en las simulaciones asociadas a menores dosados. La razón que justifica esta tendencia es el calentamiento que se induce sobre las zonas externas mediante las corrientes de masa procedentes de las internas, cuyos flujos se encuentran a mayor temperatura en los casos con dosados mayores.

En la Figura 6. 21 se muestra una de las principales capacidades proporcionadas por el modelo multizona predictivo propuesto, la cual consiste en la posibilidad de estimar distribuciones espaciales de temperatura. Es decir, el modelo multizona permite obtener valores de temperatura aproximados para distintas localizaciones de la cámara de combustión. Las condiciones operativas de la simulación recogida en la Figura 6. 21 corresponden a una configuración early HCCI (relación de compresión 15:1 e inyección 45° APMS) alimentada con gasoil, una velocidad de 1200 rpm y un dosado relativo de 0,41. Analizando la Figura 6. 21 puede comprobarse como la combustión se desencadena en el núcleo central de la cámara de combustión, extendiéndose posteriormente a las zonas exteriores en cuestión de apenas un par de grados de giro del cigüeñal. La mencionada cuasi-simultaneidad en relación al inicio de la combustión representa una característica típica de la combustión en modo HCCI.

Para concluir con el análisis del comportamiento térmico del modelo se muestra una serie de resultados relacionados con el modelo de pérdidas térmicas adoptado. En la Figura 6. 22 se muestra el flujo de calor instantáneo a través de las paredes para distintos grados de carga. Todas las simulaciones han sido realizadas con la configuración early HCCI (relación de compresión 15:1 e inyección 45° APMS), considerando gasoil puro, una velocidad de 1200 rpm y 0% de recirculación de gases de escape. En la mencionada figura se puede observar el incremento de las pérdidas instantáneas de calor asociado al incremento de la carga. Este hecho deriva de la mayor diferencia de temperatura entre los gases alojados en la cámara de combustión y las paredes de la misma.

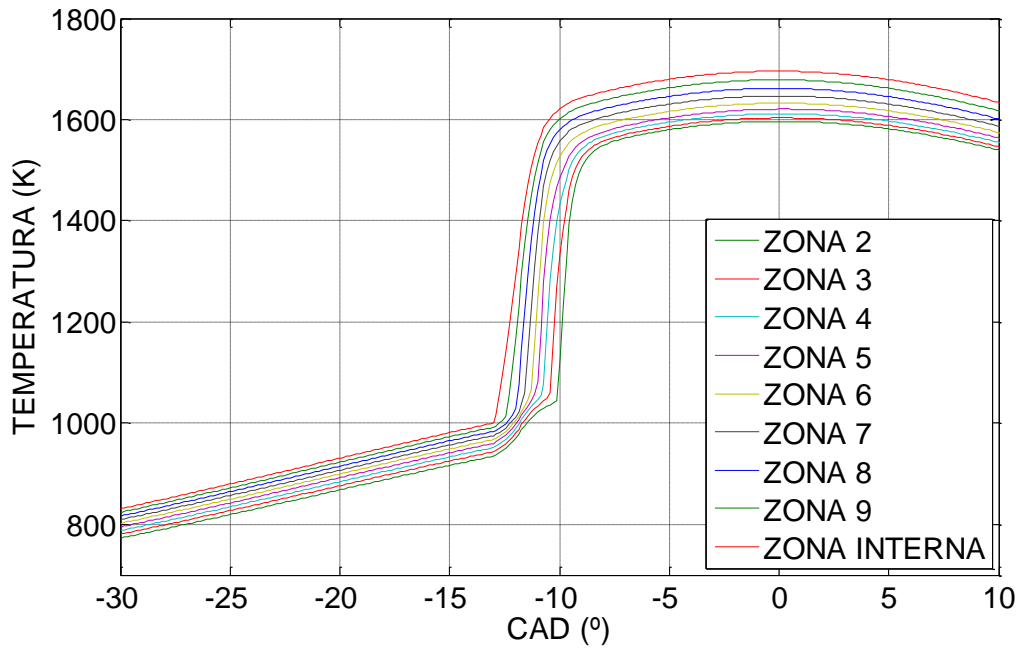


Figura 6. 18: Evolución de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,41 y 0% EGR.

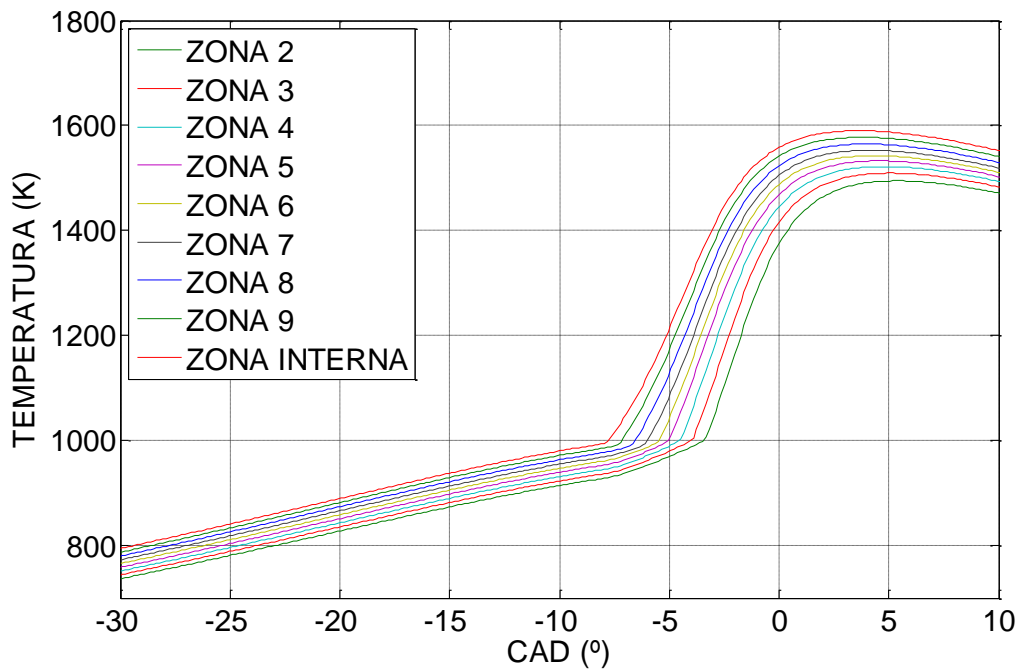


Figura 6. 19: Evolución de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,41 y 30% EGR.

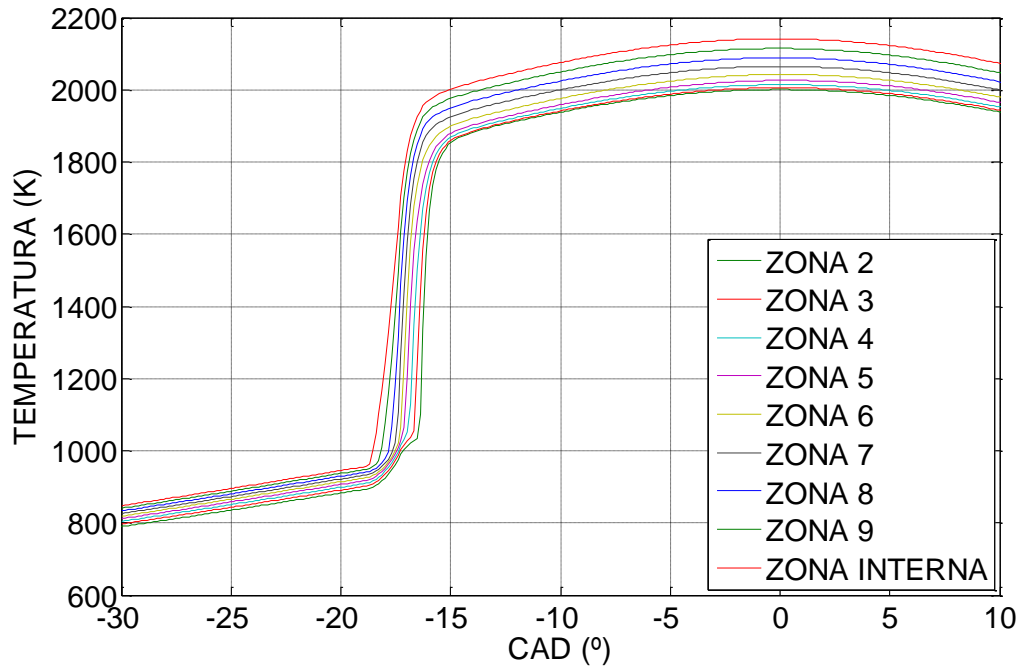


Figura 6. 20: Evolución de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,54 y 0% EGR.

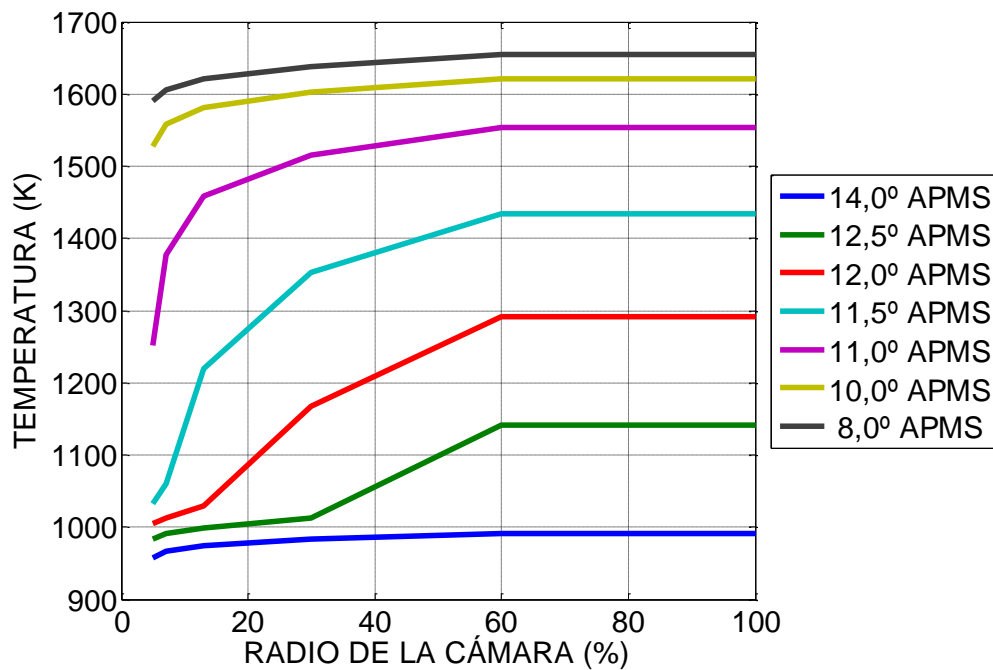


Figura 6. 21: Evolución espacial de la temperatura para gasoil (early HCCI), 1200 rpm, dosado relativo 0,41 y 0% EGR (en relación al radio de la cámara, 0% representa la pared de la cámara y 100% el centro de la misma).

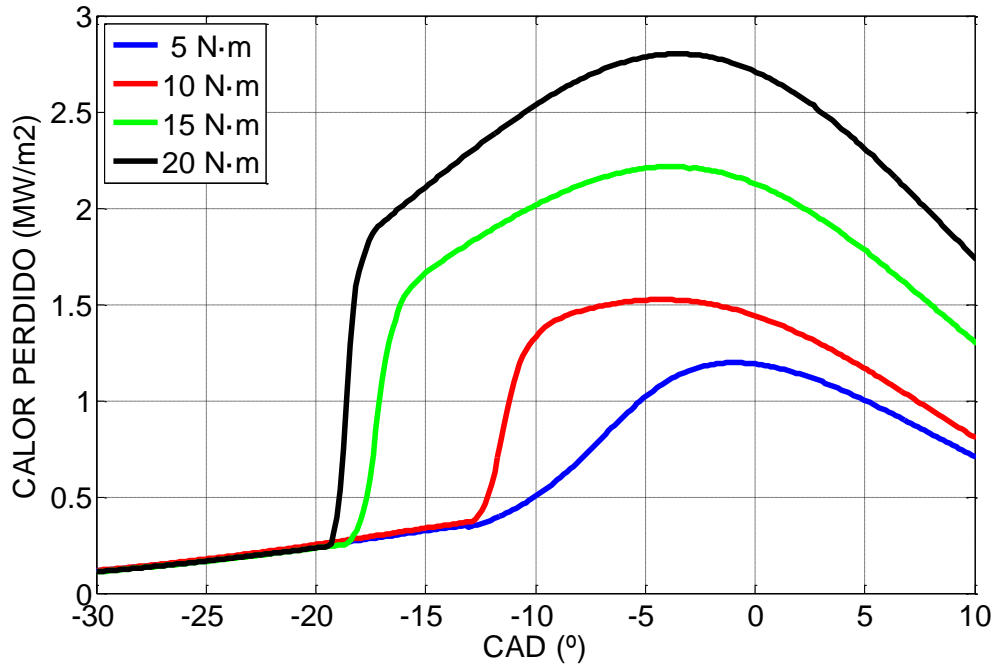


Figura 6. 22: Evolución del flujo de calor a través de las paredes para gasoil (early HCCI), 1200 rpm y 0% EGR.

6.4.3. Evolución de la masa alojada en la cámara de combustión

A continuación se analizará la evolución temporal de la masa alojada en el interior de la cámara de combustión. Asimismo se expondrán resultados derivados del modelo adoptado para reproducir las fugas de masa hacia el cárter del motor (blow-by).

En la Figura 6. 23 se muestran los flujos de masa entre subvolúmenes contiguos para una simulación en la que se ha considerado la configuración early HCCI (relación de compresión 15:1 e inyección 45° APMS) alimentada con gasoil, una velocidad de 2100 rpm y un dosado relativo de 0,76. De esta forma se dispone de un flujo de masa por cada entrefase considerada. Dado que el modelo se ha particularizado para 10 zonas, se dispone de un total de 9 flujos de masa entre subvolúmenes. Adicionalmente conviene aclarar que el signo de las variables representadas es positivo cuando el flujo de masa se produce del subvolumen interior hacia el subvolumen exterior. Por el contrario, los flujos de masa representados en la Figura 6. 23 son negativos cuando el

flujo de masa resultante de la simulación se produce del subvolumen exterior hacia el subvolumen interior. Por ejemplo, cuando la curva correspondiente al “Flujo 9-10” es positiva indica que el flujo de masa se produce del subvolumen 10 hacia el subvolumen 9, es decir, desde el interior hacia el exterior.

De esta forma, la Figura 6. 23 pone de manifiesto que tras el inicio de la combustión se produce una fuerte migración de masa desde la zona central de la cámara de combustión hacia la periferia de la misma. Dado que la masa migrada se encuentra a mayor temperatura que la masa alojada en las zonas receptoras, el flujo de masa contribuye al desencadenamiento de la combustión en las zonas exteriores. A medida que la combustión se va extendiendo a la periferia de la cámara de combustión, los flujos de masa tienden a invertirse, produciéndose un flujo neto desde las zonas periféricas hacia la zona central de la cámara de combustión.

Cabe destacar que el flujo de masa entre el subvolumen exterior y el subvolumen contiguo siempre tiene sentido positivo, es decir, siempre tiene lugar desde el interior hacia el exterior. Este hecho se debe a dos motivos: en primer lugar, la existencia de fugas de masa hacia el cárter son compensadas con masa procedente de las zonas contiguas y, en segundo lugar, las pérdidas de calor por las paredes de la cámara implican que la densidad de la zona exterior tenga una tendencia creciente, lo que resulta nuevamente compensado con flujos de masa del interior de la cámara de combustión.

Con la finalidad de analizar el efecto de la carga sobre los flujos de masa en el interior de la cámara de combustión se ha confeccionado la Figura 6. 24, donde se muestran los flujos de masa entre zonas contiguas para una simulación análoga a la expuesta en la Figura 6. 23, pero con un dosado inferior. Concretamente se ha considerado un dosado de 0,32. Comparando las Figuras 6. 23 y 6. 24 se concluye que los flujos de masa son mayores cuanto mayor sea la carga bajo la que opera el motor.

Para concluir con la exposición de los resultados asociados a los flujos de masa en el interior de la cámara de combustión, en las Figuras 6. 25 y 6. 26 se exponen, respectivamente, la evolución temporal del flujo másico fugado desde

la cámara de combustión hacia el cárter y la masa total fugada. Esta última se ha expresado en términos porcentuales referidos a la masa total alojada en la cámara de combustión. Ambas figuras muestran simulaciones en las que se ha considerado la configuración early HCCI (relación de compresión 15:1 e inyección 45° APMS) alimentada con gasoil, una velocidad de 1800 rpm, con dosados relativos de 0,21 y de 0,34. El análisis de la Figura 6. 25 pone de manifiesto la capacidad del modelo de capturar el incremento de las pérdidas de masa ante un incremento de la carga, debido a la mayor deferencia de presión entre el interior de la cámara de combustión y el cárter. Finalmente, cabe destacar que los resultados mostrados en la Figura 6. 26 se traducen en unas pérdidas de masa de aproximadamente el 2% durante la duración de la combustión, lo que está dentro del rango esperado.

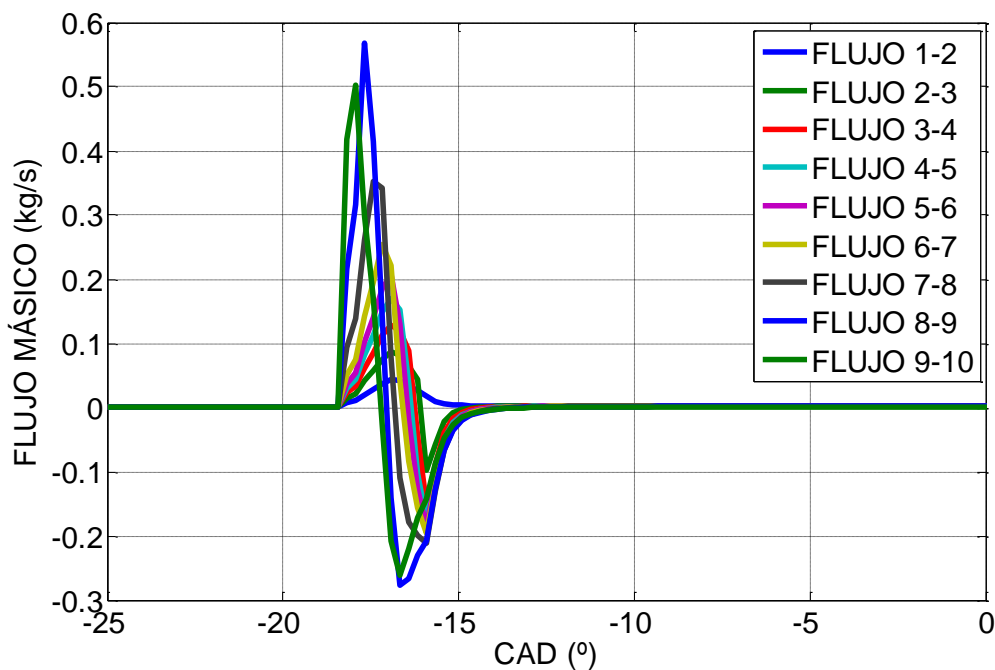


Figura 6. 23: Evolución del flujo de masas entre subvolúmenes para gasoil (early HCCI), 2100 rpm, dosado relativo 0,76 y 0% EGR.

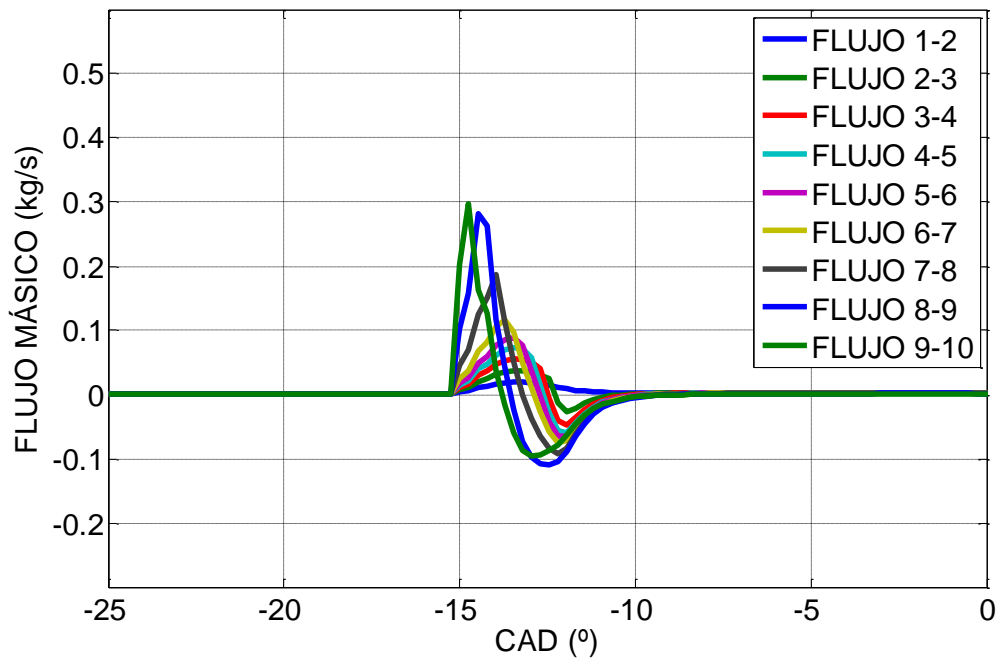


Figura 6. 24: Evolución del flujo de masas entre subvolúmenes para gasoil (early HCCI), 2100 rpm, dosado relativo 0,32 y 0% EGR.

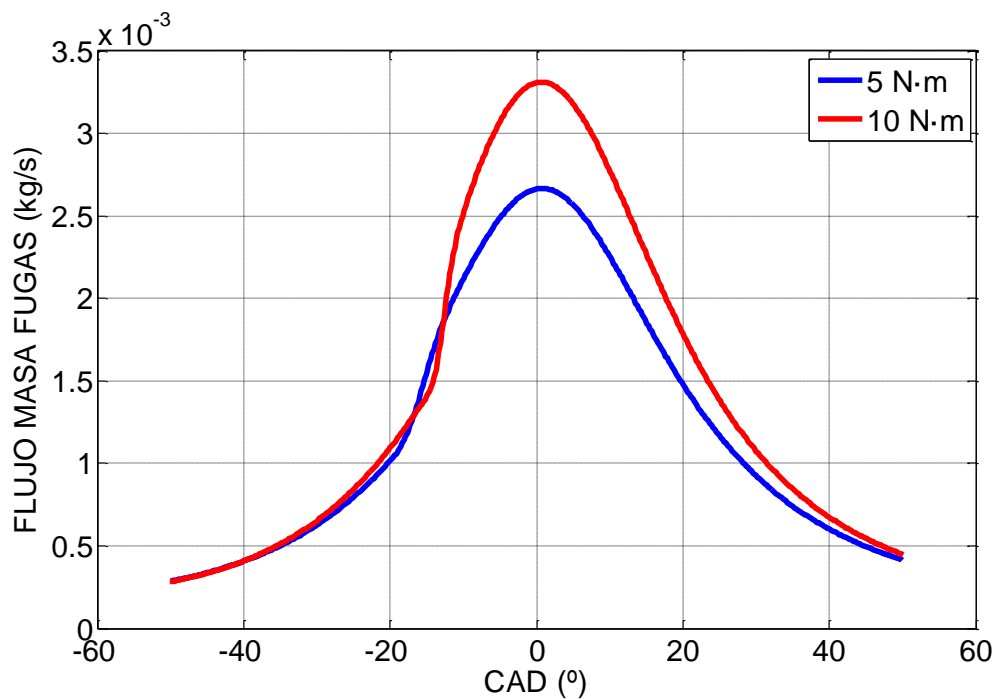


Figura 6. 25: Evolución de las pérdidas de masa de la cámara de combustión (blow-by) para gasoil (early HCCI), 1800 rpm y 0% EGR.

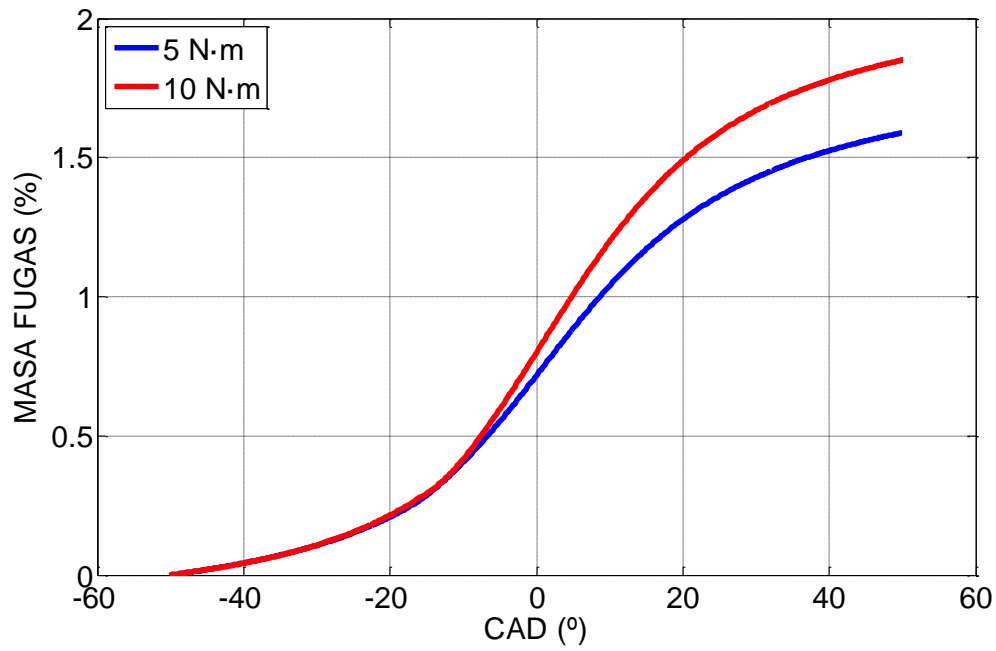


Figura 6. 26: Evolución de las pérdidas de masa acumuladas referidas a la masa total alojada en la cámara de combustión para gasoil (early HCCI), 1800 rpm y 0% EGR.

Capítulo 7

Conclusiones y desarrollos futuros

Antes de proceder con la exposición tanto de las principales conclusiones del presente trabajo como de los desarrollos futuros propuestos, conviene recapitular las principales características de la combustión en modo HCCI. La mencionada combustión se caracteriza por producirse a partir de una mezcla entre el aire y el combustible generada previamente al inicio de la combustión, una ignición derivada de la compresión de esta mezcla y, finalmente, un desarrollo controlado por la cinética química. Otra característica reseñable de la combustión en modo HCCI radica en las relativamente bajas temperaturas máximas alcanzadas en la cámara de combustión, las cuales derivan del bajo dosado empleado y del alto grado de homogeneidad de la mezcla entre el aire y el combustible. A pesar de las ventajas asociadas al aumento del rendimiento del motor y del descenso en las emisiones de óxidos de nitrógeno, la combustión en modo HCCI se enfrenta a dificultades correspondientes al control de la auto-ignición, a unas emisiones altas de monóxido de carbono y de hidrocarburos sin quemar, si bien éstas pueden ser procesadas mediante la aplicación de tratamientos catalíticos de oxidación, y, finalmente, a un rango de operación más restringido que los MEP y MEC convencionales, debido a una combustión irregular a cargas bajas y a una relevante tendencia a la detonación a cargas altas.

7.1. Conclusiones

En este apartado se exponen las principales conclusiones alcanzadas tras la ejecución de las tareas descritas en el presente documento, cuyo objetivo, alcance y metodología se encuentran convenientemente definidos en el Capítulo 1. Asimismo, las conclusiones expuestas a continuación pretenden recopilar las principales aportaciones realizadas a través del presente trabajo al conocimiento y desarrollo de la combustión en modo HCCI en los MCIA, así como las limitaciones más destacables que se han afrontado durante la elaboración del mismo.

Primero:

En primer lugar cabe destacar que el análisis experimental realizado en el marco del presente trabajo pone de manifiesto la capacidad de reproducir la combustión en modo HCCI aplicando distintas estrategias de preparación de la mezcla, habiéndose empleado satisfactoriamente alternativas basadas tanto en la inyección temprana de combustible (early HCCI) como en la inyección tardía de éste (late HCCI). De esta forma se ha constatado que el proceso de formación de la mezcla entre el aire y el combustible incide de una forma muy significativa sobre el inicio y posterior desarrollo de la combustión en modo HCCI, siendo posible actuar sobre la misma de diferentes formas. En el presente trabajo se han aplicado tanto técnicas asociadas a la mejora de la mezcla (potenciación de la turbulencia en la cámara de combustión), como técnicas encaminadas al retraso de la autoignición de la mezcla. En relación a las últimas, la experimentación realizada confirma que la recirculación externa de gases de escape refrigerados constituye una herramienta válida para el control tanto del inicio de la combustión como de su posterior desarrollo.

Por último, si bien la combustión en modo HCCI puede ser aplicada a múltiples combustibles, las experiencias llevadas a cabo en el marco de este trabajo con gasoil, biodiésel y mezclas de éstos en distintas proporciones ponen de manifiesto que las características específicas de cada combustible determinan

el inicio y desarrollo de la combustión en modo HCCI. Esta afirmación implica la necesidad de ajustar el funcionamiento del motor con combustión en modo HCCI a las características concretas del combustible empleado, para lo cual se requiere tanto la adaptación del diseño como la aplicación de técnicas de control similares a la mencionada en el párrafo anterior. Asimismo, la experimentación mencionada aporta un valor añadido al presente trabajo, ya que resultan especialmente escasos los trabajos en los que se emplea el biodiésel en la combustión en modo HCCI.

Segundo:

Se ha demostrado mediante el presente trabajo que los resultados obtenidos mediante el modelo multizona propuesto gozan de bondad suficiente para reproducir el comportamiento real del motor simulado en referencia a la curva de presión en cámara. La afirmación anterior se justifica mediante la tarea de validación realizada, a partir de la cual se puede constatar que los comportamientos y tendencias observados son los esperados a priori, gozando en todo momento de la coherencia exigida a un modelo de esta naturaleza. Asimismo, el modelo propuesto proporciona los estándares de precisión anteriormente referidos sin que ello requiera unos recursos computacionales desorbitados (típicamente menos de 30 segundos empleando un ordenador personal con un procesador de 2.09 GHz), lo cual aporta valor al presente trabajo.

En base a los resultados obtenidos, el modelo multizona propuesto constituye una herramienta altamente útil en la elaboración de investigaciones de distinta naturaleza en el campo de los motores con combustión en modo HCCI. Debido principalmente a la velocidad de computación lograda y a la versatilidad empleada en su planteamiento, uno de los potenciales usos del modelo multizona desarrollado consiste en las aplicaciones relacionadas con el estudio de distintas estrategias de control. En relación a este aspecto es preciso resaltar que el desarrollo práctico de sistemas de control aplicados a los motores con combustión en modo HCCI con la finalidad de soslayar las

limitaciones de éstos representa actualmente la principal corriente innovadora en materia de combustión en modo HCCL. En relación a lo anteriormente referido, es preciso resaltar que las simulaciones mediante herramientas numéricas poseen una elevada flexibilidad así como un menor coste que la experimentación en banco de ensayos.

Tercero:

Dentro de los modelos orientados a la obtención de simulaciones con un bajo tiempo de computación, el modelo propuesto destaca por la bondad de los resultados en relación a la reproducción del desarrollo de la combustión. Esto se debe a la combinación, por una lado, de la ley funcional adoptada para el modelado de la tasa de liberación de calor y, por el otro, a las características propias de los modelos multizona, las cuales permiten la consideración de la estratificación de los gases alojados en la cámara de combustión desde el punto de vista térmico y de composición química.

El resultado anteriormente referido presenta una sustancial ventaja frente a otros modelos comparables, como son los modelos unizona basados en mecanismo cinético-químicos, ya que como se mostró en la Figura 1. 2, aunque son capaces de caracterizar adecuadamente el inicio de la combustión, no son herramientas válidas para la caracterización del posterior desarrollo de la combustión. Asimismo, el tiempo de computación asociado a los modelos dotados de mecanismos cinético-químicos es del orden de horas incluso para mecanismo reducidos, siendo muy superior al tiempo de respuesta del modelo propuesto

Cuarto:

Al igual que se ha hecho en relación a los resultados correspondientes a la curva de presión en cámara y a la tasa de liberación de calor, es preciso destacar la bondad de los resultados proporcionados por el modelo multizona propuesto en relación a las emisiones de óxidos de nitrógeno.

Este hecho dota de un atractivo añadido al modelo multizona propuesto, ya que las legislaciones vigentes en la mayoría de los países industrializados en relación a los límites de estas emisiones presentan de forma sistemática una tendencia cada vez más restrictiva. Por este motivo el desarrollo de motores con combustión en modo HCCI posee un interés creciente en el sector de los MCIAs, constituyendo el modelo multizona propuesto una herramienta válida para el prediseño de los mismos.

Asimismo, la bondad de los resultados correspondientes a las emisiones de óxidos de nitrógeno constituye una validación indirecta del campo de temperaturas de la mezcla considerado a través del modelo multizona, el cual se asume semejante al existente en la realidad. Nuevamente, se destaca este hecho como ventaja frente a los modelos unizona, ya que éstos carecen de la posibilidad de caracterizar la estratificación térmica de la carga.

7.2. Desarrollos futuros

Para concluir con el desarrollo del trabajo objeto del presente documento se procede a enunciar una serie de recomendaciones en relación a futuros desarrollos de las tareas presentadas en este documento, las cuales emanan directamente de las conclusiones expuestas en la sección anterior:

- Se considera oportuno comparar los resultados referidos en el presente trabajo con aquéllos obtenidos mediante la aplicación de otras metodologías de optimización de las leyes funcionales empleadas. Se destaca expresamente la posibilidad de emplear algoritmos genéticos para superar las dificultades referidas en el Capítulo 5 en relación a la existencia de mínimos locales. Sin embargo, cabe destacar que el empleo de estas técnicas supondrán presumiblemente un notable incremento de los recursos computacionales consumidos, lo que conllevará la necesidad de equipos informáticos más potentes para la ejecución de la optimización.

- Se propone la tarea consistente en la aplicación del modelo multizona propuesto a la simulación del funcionamiento del motor analizado (Deutz-Díter FL1 906) con otros modos de combustión, entre los que se destaca la combustión en modo PCCI. La ejecución de esta tarea requeriría el uso de prácticamente los mismos elementos que se han descrito en el presente trabajo para el estudio de la combustión en modo HCCI, lo que limitaría la complejidad de la misma desde el punto de vista del montaje experimental.
- Se recomienda investigar distintas distribuciones de subvolúmenes para la discretización de la cámara de combustión, modificando si es preciso tanto la geometría de las zonas como el número de éstas (Figura 7. 1). De este modo se pretende incidir sobre el modelado de la estratificación de la mezcla en las regiones intersticiales, permitiendo potenciar los resultados asociados a las emisiones de monóxido de carbono obtenidos mediante el modelo multizona, sin padecer los inconvenientes asociados a los modelos CFD (Capítulo 2).
- Gracias al continuo desarrollo de las herramientas informáticas, evaluar la posibilidad de combinar el actual modelo multizona con herramientas demandantes de mayores recursos computacionales, como son los códigos fluido-dinámicos, los cuales se utilizarían únicamente para definir patrones correspondientes a la condición inicial de simulación en relación a la estratificación térmica y a la composición química.

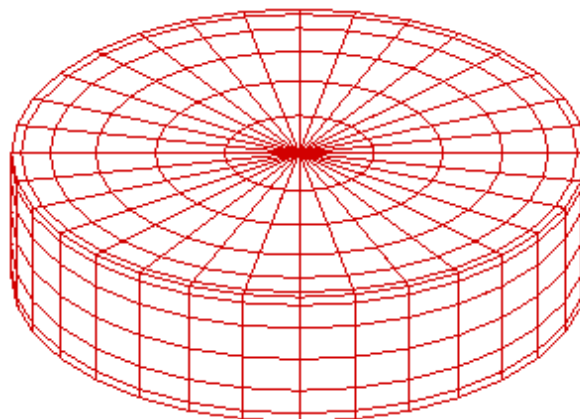


Figura 7. 1: Posible distribución de subvolúmenes para la discretización de la cámara de combustión [206].

- Uso del modelo multizona para motores con combustión en modo HCCI propuesto en aplicaciones consistentes en plantas de potencia, con la finalidad de evaluar el potencial de diferentes estrategias de reducción de emisiones. Estas plantas se caracterizan por emplear motores con velocidad reducida y constante, con lentas variaciones de la carga, por lo que el control de la combustión no es tan relevante como en el campo de la automoción. Entre las distintas estrategias orientadas a la reducción de emisiones podría evaluarse la inyección de agua, dados sus positivos efectos sobre las emisiones de óxidos de nitrógeno y de partículas. En fases posteriores, si los resultados obtenidos mediante las simulaciones numéricas son satisfactorios, podría plantearse la aplicación práctica de éstos a una empresa del sector de la generación de energía eléctrica.
- Aplicación del modelo multizona propuesto a un sistema de control en tiempo real de la combustión en modo HCCI. De esta forma se pretende proceder a la toma de decisiones por parte de un sistema de control en base a los resultados obtenidos a partir del modelo multizona, lo cual requeriría la medición de distintos parámetros característicos del funcionamiento del motor. Asimismo, dado el elevado coste de los sistemas dedicados a la medida de la presión en cámara, se propone la medida del par instantáneo, el cual puede ser empleado para inferir la presión en cámara.

Anexo A

Características del montaje experimental

A.1 Introducción

Dado que el núcleo del presente trabajo consiste en la definición de un modelo multizona para motores alternativos con combustión en modo HCCL, resulta imprescindible disponer de un banco de pruebas experimental que permita validar los resultados obtenidos mediante el mencionado modelo, así como cuantificar la bondad de las predicciones efectuadas. A lo largo de esta sección se describen tanto el banco de ensayos configurado con la finalidad de llevar a cabo los distintos ensayos como el motor empleado para la obtención de los datos experimentales empleados como referencia.

Es importante destacar que el parámetro crítico a la hora de llevar a cabo la validación del modelo multizona creado es la presión existente en el interior de la cámara de combustión, motivo por el cual resulta fundamental emplear un sistema de adquisición de datos que permita obtener la evolución temporal de la mencionada variable. Además de los datos referentes a la presión existente en el interior de la cámara de combustión, el sistema de adquisición de datos permite proceder a la medición de múltiples variables involucradas en la operación del motor, como por ejemplo la temperatura y presión en diferentes puntos de la instalación, la composición de los gases de escape, la cantidad de aire admitido o la de gases de escape recirculados. Gracias a los resultados experimentales obtenidos mediante este sistema se puede caracterizar el

proceso de combustión que tiene lugar en el interior de la cámara de combustión del motor estudiado.

A.2 Banco de ensayos

Para la realización de los ensayos experimentales empleados en el presente desarrollo se ha empleado una de las celdas de prueba del laboratorio del Grupo de Máquinas y Motores Térmicos (GMTS) de la Universidad de Sevilla, la cual se muestra en la Figura A. 1.

El banco de ensayos empleado para la validación del modelo multizona propuesto está constituido por el propio motor y por el resto de elementos auxiliares que hacen posible la realización de los diferentes ensayos. En la Figura A. 2 se muestra una representación esquemática de los elementos que constituyen el sistema empleado para realizar los ensayos.



Figura A. 1: Celda de prueba del laboratorio del GMTS de la Universidad de Sevilla.

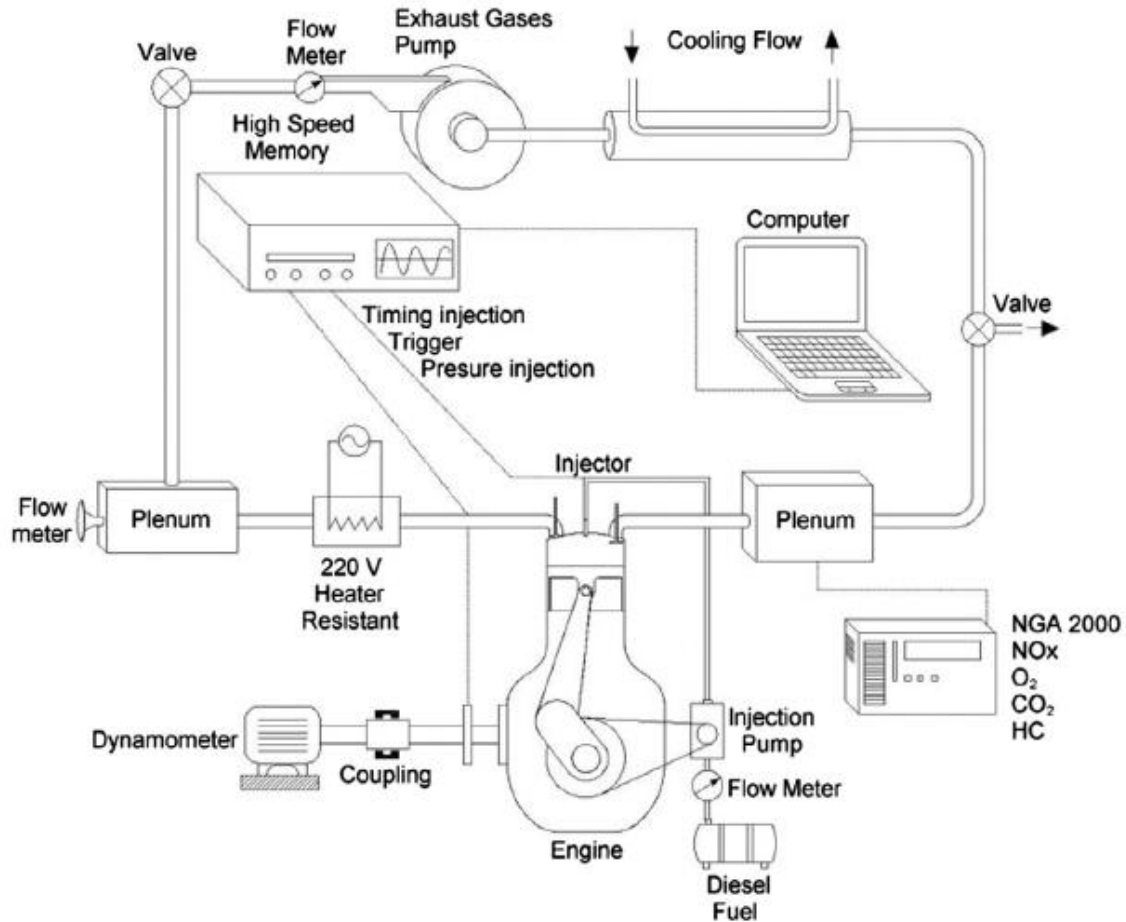


Figura A. 2: Representación esquemática del banco de ensayos [182].

A continuación se exponen las características principales de los elementos que componen el banco de ensayos anteriormente referido:

- Motor, dotado de controlador del punto de inicio de la inyección. Asimismo se dispone de una batería de pistones que permiten modificar la relación de compresión. Se remite a la sección A.3 para la obtención de más detalles en relación a las características del motor analizado experimentalmente.
- Freno dinamoétrico eléctrico con variador de frecuencia. El empleo del freno eléctrico se debe a la necesidad de control de la velocidad de arrastre, siendo el elemento que se encarga de simular la carga a la que es sometido el motor cuando trabaja en las diferentes condiciones operativas a las que se realizan los ensayos. Además, este dispositivo opera como un motor eléctrico que permite arrastrar el motor,

estableciendo el régimen de giro deseado, facilitando el arranque del motor y asegurando la continuidad del funcionamiento a un régimen constante de revoluciones. La unión del freno con el motor analizado se realiza a través de un acoplamiento flexible que absorbe parte de las oscilaciones angulares provocadas por el par irregular.

- Depósito de expansión en el escape, con la finalidad de uniformizar la presión de descarga del motor.
- Depósito de mezcla en la admisión, consistiendo su función en mezclar los gases recirculados con la corriente de aire fresco.
- Sistema de calentamiento de la admisión mediante cuatro resistencias eléctricas de 300 W cada una. La importancia de este dispositivo deriva de la necesidad de controlar las necesidades específicas de los distintos ensayos realizados. De esta forma se puede calentar la carga durante la realización de aquellos ensayos que lo requieran debido a una temperatura de la carga admitida excesivamente baja. Este sistema es capaz de aumentar la temperatura del flujo de admisión hasta los 120°C, permitiendo controlar el ángulo de inicio de combustión a través del calentamiento. De este modo se declinó la posibilidad de haber calentado el flujo de admisión con la recirculación de gases de escape.
- Sistema de refrigeración de los gases de escape recirculados, mediante un intercambiador de calor tipo carcasa y tubo, en el cual los gases circulan por los tubos y el agua de refrigeración por la carcasa (siete pasos).
- Sistema de recirculación de gases de escape, con soplante dotada de variador de frecuencia y válvula de control.
- Sistema de calentamiento del combustible, con la finalidad de reducir la deposición de éste en las paredes del cilindro y evitar las emisiones de hidrocarburos. Conviene destacar, que si bien este sistema estaba previsto para la operación con biodiesel, se mostró insuficiente para

evitar la problemática indicada, por lo que finalmente no ha sido utilizado en los ensayos experimentales analizados en el presente documento.

- Instrumentación, incluyendo:
 - Sistema de medición del caudal de gases de escape recirculados mediante una tobera calibrada.
 - Sistema de medición del consumo instantáneo de combustible de alta precisión mediante células ópticas. Mediante este dispositivo se caracteriza el tiempo que tarda en consumirse un volumen determinado de combustible, de forma que se obtiene una relación de consumo de combustible por unidad de tiempo con una gran precisión. Asimismo, es importante destacar que el rango de variación del consumo de combustible en esta aplicación está fuera del rango de medida de los dispositivos existentes en el mercado debido a su bajo valor (entre 5 mL/min y 50 mL/min). Por este motivo se decidió optar por un dispositivo expresamente diseñado por el GMTS. Además, una gran ventaja que presenta este medidor con respecto al resto de los medidores comerciales de su categoría es que la presión de suministro es constante en todo momento, lo que no ocurre en la mayoría de los medidores de combustible volumétricos.
 - Sistema de medición del flujo de aire admitido mediante una tobera abierta, serie TG-25 fabricada por Tecner Ingeniería.
 - Sensores de presión de inyección en línea y de levantamiento de aguja.
 - Medición del par mediante célula de carga.
 - Captador magnético de disparo de adquisición (trigger) y decodificador de posición angular para medición de la velocidad instantánea, fundamental al tratarse de ensayos sobre motores monocilíndricos con gran irregularidad en su velocidad instantánea.

- Dos captadores de presión para determinar la presión absoluta en el interior del cilindro, siendo uno de ellos para medir la presión absoluta (presión de baja) y otro para la presión relativa (presión de alta). Los dispositivos usados son del tipo piezoresistivos, fabricados por Kistler (modelos 6041 y 4073A).
- Termopares tipo PT-100 localizados en la admisión y el escape del motor, en el sistema de inyección de combustible y en la entrada y salida de los gases en el intercambiador de carcasa y tubo.
- Termopar de contacto para la temperatura de la culata, empleado como medida de seguridad para evitar aumentos extremos de temperatura que pudieran provocar daños materiales.
- Analizador de la composición de los gases de escape (Fisher-Rosemount, modelo NGA 2000), mostrado en la Figura A. 3. El rango y la precisión asociada a la medida de las distintas especies se muestran en la Tabla A. 1.

	Rango de medida	Precisión
Oxígeno	0 ÷ 5 %vol	± 0,04 %vol
	0 ÷ 100 %vol	± 0,8 %vol
Mónóxido de carbono	0 ÷ 5000 ppm	± 5,0 ppm
	0 ÷ 100000 ppm	± 5000 ppm
Dióxido de carbono	0 ÷ 20 %vol	± 1 %vol
Monóxido de nitrógeno	0 ÷ 250 ppm	± 12,5 ppm
	0 ÷ 1000 ppm	± 50 ppm
	0 ÷ 2500	± 125 ppm
	0 ÷ 10000	± 1000 ppm
Hidrocarburos	0 ÷ 1000 ppm	± 50 ppm
	0 ÷ 20000 ppm	± 1000 ppm

Tabla A. 1: Rango de medida y la precisión del analizador Fisher-Rosemount modelo NGA 2000.



Figura A. 3: Analizador Fisher-Rosemount modelo NGA 2000.

- Equipo de adquisición de datos de alta frecuencia de muestreo con seis canales independientes, mostrado en la Figura A. 4.
- Estación meteorológica con medición de temperatura, presión y humedad en el interior de la celda de ensayo.

Antes de proseguir con la descripción del motor empleado para la realización de los ensayos experimentales, es importante recalcar que, como se ha comentado con anterioridad, el banco de ensayos está constituido de forma que el EGR introducido en la cámara de combustión se encuentra a la misma temperatura que la corriente de aire. Es decir, el EGR es refrigerado previamente a su entrada en la cámara de combustión, lo que permite eliminar el potencial efecto de calentamiento inducido por el EGR (Capítulo 2).



Figura A. 4: Equipo de control de freno y adquisición de datos.

A.3 Motor experimental

Para llevar a cabo las mediciones experimentales anteriormente mencionadas se ha empleado un motor Deutz-Díter FL1 906, desarrollado por el GMTS y fabricado en Zafra (España). El mencionado motor ha sido sometido a una serie de modificaciones para hacerlo funcionar en modo HCCI. Se trata de un motor Diésel monocilíndrico de cuatro tiempos e inyección directa. La refrigeración se produce mediante aire y la aspiración es natural. Las características nominales del mismo se exponen en la Tabla A. 2, mientras que en la Figura A. 5 se muestra una fotografía del motor descrito en este apartado tomada en el interior de la celda de ensayos en la se realizaron los distintos experimentos. No obstante, cabe destacar que diversos parámetros indicados en la previamente mencionada tabla han sido modificados durante la realización de los ensayos (Capítulo 3), destacándose que los valores mostrados a continuación son los originales, es decir, los parámetros nominales.

Tipo	Monocilíndrico 4 tiempos con inyección directa
Cilindrada	708 cm ³
Diámetro	95 mm
Carrera	100 mm
Relación de compresión	19:1
Potencia máxima	11 kW @ 3000 rpm
Par máximo	45 N·m @ 2100 rpm
Combustible	Gasoil
Inyector	5 orificios de 0,26mm
Presión inicio inyección	240 bar
Presión máxima inyección	450 bar
Ángulo cono inyección	120°
Bomba lubricación	Accionamiento mecánico
Bomba de inyección	Accionamiento mecánico
Refrigeración	Aire mediante ventilador en volante de inercia
Apertura válvula de admisión	1° APMS
Cierre válvula de admisión	36° DPMI
Diámetro válvula de admisión	44,08 mm
Apertura válvula de escape	36° APMI
Cierre válvula de escape	1° DPMS
Diámetro válvula de escape	38,02 mm
Desplazamiento válvulas	12 mm

Tabla A. 2: Parámetros nominales del motor Deutz-Díter FL1 906.



Figura A. 5: Motor Deutz-Díter FL1 906.

Anexo B

Propiedades de los fluidos de trabajo

Debido a los elevados requerimientos del modelo multizona desarrollado en materia de precisión y número de operaciones matemáticas efectuadas, se ha optado por el uso de expresiones polinómicas para definir las propiedades termodinámicas en función de la temperatura asociadas a los distintos fluidos de trabajo involucrados en las simulaciones. Concretamente se ha adoptado el enfoque de las tablas JANAF de datos termodinámicos propuestas por la NASA [183]. A continuación se muestran las expresiones empleadas para el modelado del calor específico a presión constante, la entalpía y la entropía, donde la temperatura, denotada por T, se expresa en grados Kelvin (K):

$$C_p(T)/R = a_1 \cdot T^{-2} + a_2 \cdot T^{-1} + a_3 + a_4 \cdot T + a_5 \cdot T^2 + a_6 \cdot T^3 + a_7 \cdot T^4 \quad \text{Ecuación B.1}$$

$$h(T)/(R \cdot T) = -a_1 \cdot T^{-2} + a_2 \cdot \frac{\ln(T)}{T} + a_3 + a_4 \cdot \frac{T}{2} + a_5 \cdot \frac{T^2}{3} + a_6 \cdot \frac{T^3}{4} + a_7 \cdot \frac{T^4}{5} + b_1 \cdot T^{-1}$$

Ecuación B.2

$$s(T)/R = -a_1 \cdot \frac{T^{-2}}{2} - a_2 \cdot T^{-1} + a_3 \cdot \ln(T) + a_4 \cdot T + a_5 \cdot \frac{T^2}{2} + a_6 \cdot \frac{T^3}{3} + a_7 \cdot \frac{T^4}{4} + b_2$$

Ecuación B.3

En relación a las ecuaciones anteriormente mostradas cabe destacar que, debido a la adimensionalización de las mismas, las unidades resultantes para el calor específico a presión constante, la entalpía y la entropía dependerán de las unidades de R, habiéndose empleado J/(kg•K) en el presente trabajo.

Anexo B. Propiedades de los fluidos de trabajo

	O2	N2	CO2	H2O	CO	NO
a_1	-3,43e4	2,21e4	4,94e4	-3,95e4	1,49e4	-1,14e4
a_2	4,85e2	-3,82e2	-6,26e2	5,76e2	-2,92e2	1,54e2
a_3	1,12e0	6,08e0	5,30e0	9,32e-1	5,72e0	3,43e0
a_4	4,29e-3	-8,53e-3	2,50e-3	7,22e-3	-8,18e-3	-2,67e-3
a_5	-6,84e-7	1,38e-5	-2,13e-7	-7,34e-6	1,46e-5	8,48e-6
a_6	-2,02e-9	-9,63e-9	-7,69e-10	4,96e-9	-1,09e-8	-7,69e-9
a_7	1,04e-12	2,52e-12	2,85e-13	-1,34e-12	3,03e-12	2,39e-12
b_1	-3,39e3	7,11e2	-4,53e4	-3,30e4	-1,30e4	9,10e3
b_2	1,85e1	-1,08e1	-7,05e0	1,72e1	-7,86e0	6,73e0

Tabla B. 1: Coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas de los fluidos de trabajo en función de la temperatura, para el rango de 200K a 1000K.

	O2	N2	CO2	H2O	CO	NO
a_1	-1,04e6	5,88e5	1,18e5	1,03e6	4,62e5	2,24e5
a_2	2,34e3	-2,24e3	-1,79e3	-2,41e3	-1,94e3	-1,29e3
a_3	1,82e0	6,07e0	8,29e0	4,65e0	5,92e0	5,43e0
a_4	1,27e-3	-6,14e-4	-9,22e-5	2,29e-3	-5,66e-4	-3,66e-4
a_5	-2,19e-7	1,49e-7	4,86e-9	-6,84e-7	1,40e-7	9,88e-8
a_6	2,05e-11	-1,92e-11	-1,89e-12	9,43e-11	-1,79e-11	-1,42e-11
a_7	-8,19e-19	1,06e-15	6,33e-16	-4,82e-15	9,62e-16	9,38e-16
b_1	-1,69e4	1,28e4	,3,91e4	-1,38e4	-2,47e3	1,75e4
b_2	1,74e1	-1,59e1	-2,65e1	-7,98e0	-1,39e1	-8,50e0

Tabla B. 2: Coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas de los fluidos de trabajo en función de la temperatura, para el rango de 1000K a 6000K.

Como complemento a las expresiones anteriores, en las Tablas B. 1 y B. 2 se recoge el valor de los coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas de los fluidos de trabajo en función de la temperatura.

Asimismo, conviene destacar que las propiedades del combustible diésel en estado gaseoso se han obtenido a partir de las siguientes leyes recogidas por Heywood [181], en las que el parámetro denotado por “t” representa a la temperatura en grados Kelvin dividida por 1000:

$$Cp(t) \left[\frac{cal}{mol \cdot K} \right] = a_1 + a_2 \cdot t + a_3 \cdot t^2 + a_4 \cdot t^3 + a_5 \cdot t^{-2} \quad \text{Ecuación B.4}$$

$$h(t) \left[\frac{kcal}{mol} \right] = a_1 \cdot t + a_2 \cdot \frac{t^2}{2} + a_3 \cdot \frac{t^3}{3} + a_4 \cdot \frac{t^4}{4} - a_5 \cdot t^{-1} + a_6 + a_8 \quad \text{Ecuación B.5}$$

Análogamente, en la Tabla B. 3 se recoge el valor de los coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas del gasoil en función de la temperatura. Respecto al biodiésel, es preciso aclarar que, debido a la dispersión existente en los valores de las propiedades termodinámicas en estado gaseoso en función del origen del mismo, se han adoptado los mismos valores que en el caso del gasoil.

	Gasoil
a_1	-9,11e0
a_2	2,47e2
a_3	-1,44e2
a_4	3,23e1
a_5	5,18e-2
a_6	-5,01e1
a_8	2,35e1

Tabla B. 3: Coeficientes de los polinomios empleados para la caracterización de las propiedades termodinámicas del gasoil en función de la temperatura.

Dada su relevancia en relación al planteamiento expuesto en el Capítulo 4, conviene destacar la relación existente entre el calor específico a volumen constante y el calor específico a presión constante, así como la existente entre la energía interna específica y el calor específico a volumen constante:

$$Cv_i(T_i) = Cp_i(T_i) - R_i \quad \text{Ecuación B.6}$$

$$u_i = \int_{T_0}^T Cv_i(T_i) dT \quad \text{Ecuación B.7}$$

Donde R_i (J/(kg·K)) denota el cociente de la constante universal de los gases (8.314 J/(mol·K)) y el peso molecular medio del subvolumen i -ésimo.

De esta forma, aplicando las definiciones anteriormente expuestas puede caracterizarse desde el punto de vista termodinámico la mezcla de sustancias alojadas en cada uno de los subvolúmenes en los que se divide la cámara de combustión.

En la Figura B. 1 se recoge el valor del calor específico a presión constante en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo, con la finalidad de analizar la influencia de cada una de éstas. No se ha representado la evolución correspondiente al gasoil debido a que posee un orden de magnitud superior al resto. Como puede comprobarse, además del previamente mencionado gasoil, las especies con un mayor efecto capacitivo son el dióxido de carbono y el agua, el cual se acentúa cuanto mayor es la temperatura considerada, lo que pone de manifiesto la relevancia de la recirculación de los gases de escape en la evolución de la combustión en modo HCCI. Para concluir, en las Figuras B. 2 y B. 3 se ilustran los resultados correspondientes a la entalpía específica y a la energía interna específica, respectivamente.

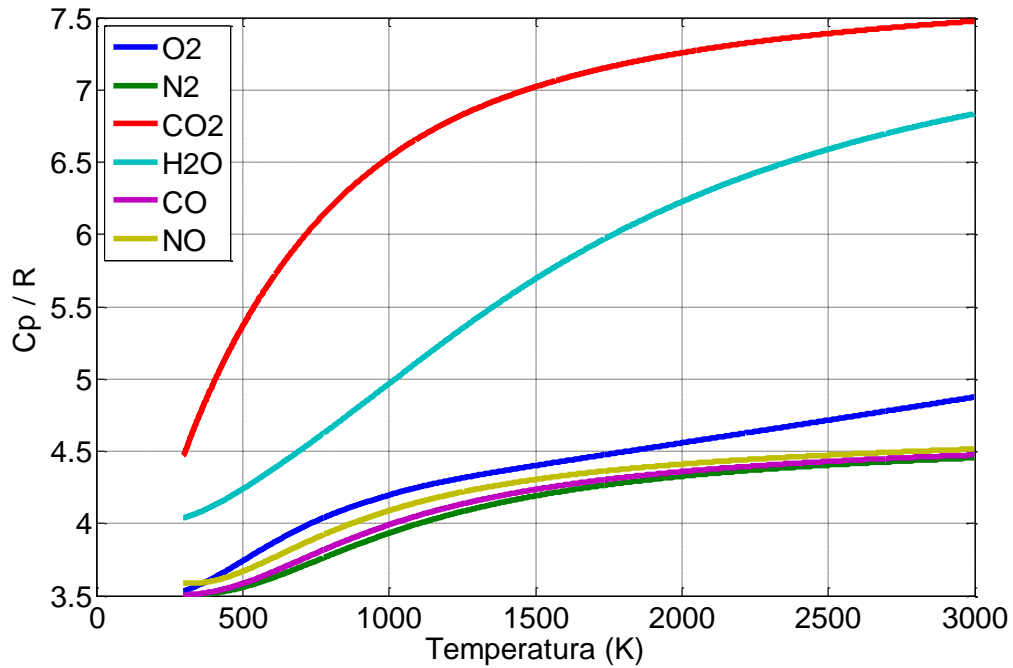


Figura B. 1: Calor específico a presión constante, normalizado por R, en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo.

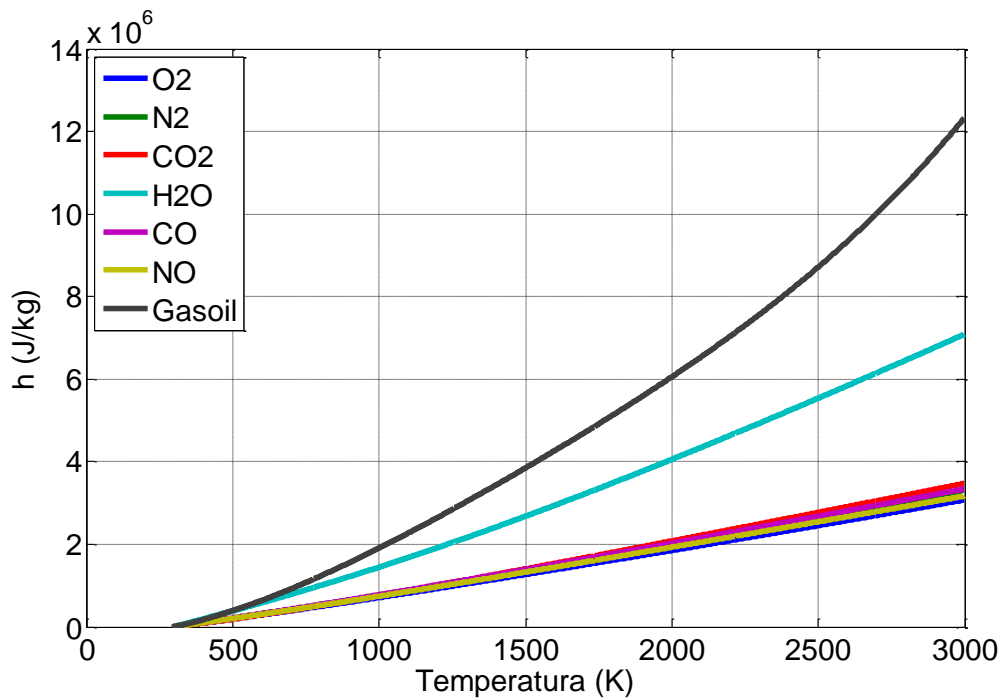


Figura B. 2: Entalpía específica en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo ($T_{REF} = 273,15$ K).

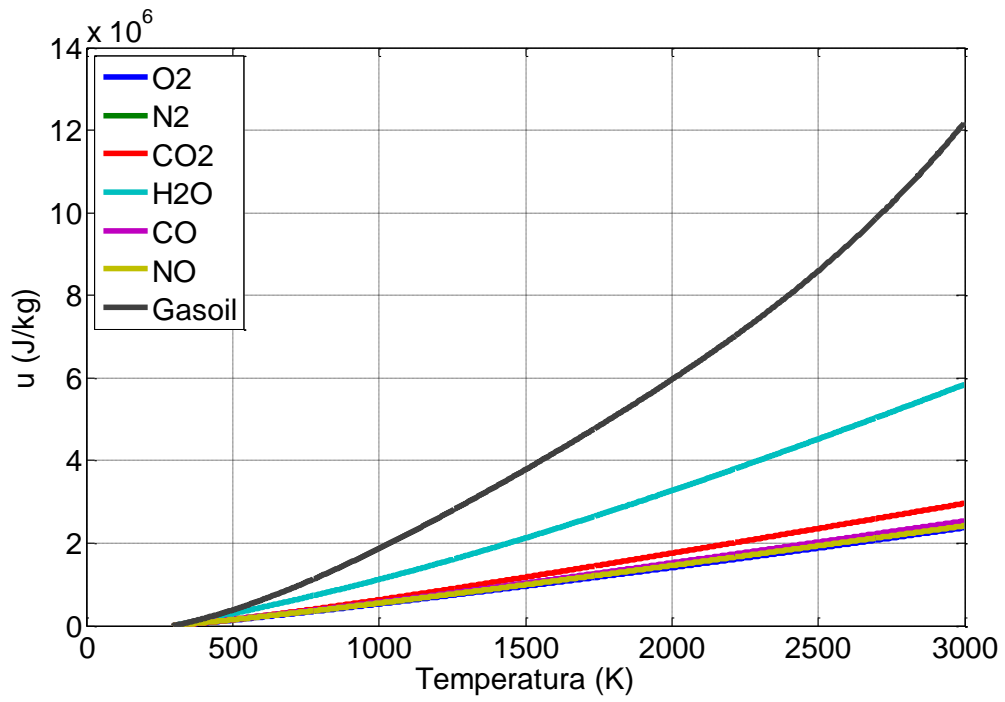


Figura B. 3: Energía interna específica en función de la temperatura para las distintas especies consideradas en el modelo ($T_{REF} = 273,15 \text{ K}$).

Anexo C

Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Se exponen a continuación los resultados correspondientes a los valores óptimos de los coeficientes de ajuste A_D y A_C para cada uno de los ensayos realizados (Capítulo 5).

Ensayos con configuración early HCCI

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Par (N·m)	EGR (%)	A_C	A_D
Early	B0	1200	5	0,00	71	0,004
Early	B0	1200	7	45,00	72	0,004
Early	B0	1200	3	65,00	59	0,005
Early	B0	1200	10	0,00	447	0,005
Early	B0	1200	12	17,00	168	0,005
Early	B0	1200	15	30,00	88	0,005
Early	B0	1200	15	0,00	477	0,003
Early	B0	1200	16	16,00	405	0,004
Early	B0	1200	18	27,00	304	0,005
Early	B0	1200	20	42,00	282	0,009
Early	B0	1200	20	0,00	864	0,005
Early	B0	1200	23	15,00	359	0,004
Early	B0	1200	25	23,00	365	0,004
Early	B0	1200	30	35,00	235	0,006

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Par (N·m)	EGR (%)	A_c	A_D
Early	B0	1500	5	0,00	178	0,002
Early	B0	1500	6	48,00	192	0,003
Early	B0	1500	7	70,00	99	0,003
Early	B0	1500	10	0,00	459	0,003
Early	B0	1500	12	21,00	272	0,003
Early	B0	1500	16	31,00	126	0,004
Early	B0	1500	18	44,00	71	0,006
Early	B0	1500	15	52,00	69	0,006
Early	B0	1500	15	0,00	591	0,002
Early	B0	1500	17	16,00	488	0,003
Early	B0	1500	21	28,00	253	0,004
Early	B0	1500	24	40,00	133	0,005
Early	B0	1500	23	46,00	70	0,006
Early	B0	1500	20	0,00	701	0,002
Early	B0	1500	22	13,00	445	0,003
Early	B0	1500	24	20,00	337	0,003
Early	B0	1500	26	31,00	258	0,003
Early	B0	1800	5	0,00	256	0,002
Early	B0	1800	9	40,00	115	0,001
Early	B0	1800	10	0,00	311	0,003
Early	B0	1800	13	20,00	143	0,007
Early	B0	1800	17	35,00	118	0,005
Early	B0	1800	20	0,00	582	0,002
Early	B0	1800	25	15,00	343	0,003
Early	B0	1800	28	22,00	226	0,003
Early	B0	1800	32	28,00	47	0,007
Early	B0	2100	5	0,00	263	0,002
Early	B0	2100	7	42,00	208	0,002
Early	B0	2100	6	75,00	352	0,002
Early	B0	2100	10	0,00	294	0,005
Early	B0	2100	13	25,00	120	0,008

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Par (N·m)	EGR (%)	A_c	A_D
Early	B0	2100	16	35,00	100	0,009
Early	B0	2100	15	0,00	650	0,003
Early	B0	2100	18	20,00	356	0,004
Early	B0	2100	22	30,00	169	0,005
Early	B0	2100	24	36,00	130	0,006
Early	B0	2100	20	0,00	340	0,005
Early	B0	2100	24	11,00	141	0,006
Early	B0	2100	28	18,00	86	0,010
Early	B0	2100	34	24,00	80	0,011
Early	B0	2100	26	34,00	84	0,018

Ensayos con configuración late HCCI

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_c	A_D
Late	B0	1800	0,20	0,00	63	0,041
Late	B0	1800	0,20	13,52	106	0,040
Late	B0	1800	0,20	19,62	101	0,046
Late	B0	1800	0,20	27,22	123	0,049
Late	B0	1800	0,20	35,50	106	0,045
Late	B0	1800	0,30	0,00	43	0,050
Late	B0	1800	0,30	13,79	42	0,050
Late	B0	1800	0,30	19,67	47	0,055
Late	B0	1800	0,30	29,52	67	0,039
Late	B0	1800	0,30	39,10	94	0,055
Late	B0	1800	0,45	0,00	15	0,051
Late	B0	1800	0,45	13,95	26	0,054
Late	B0	1800	0,45	23,25	40	0,050
Late	B0	1800	0,45	29,96	47	0,044

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_C	A_D
Late	B0	1800	0,45	39,68	105	0,049
Late	B0	1800	0,60	0,00	9	0,047
Late	B0	1800	0,60	18,72	11	0,036
Late	B0	1800	0,60	25,92	19	0,036
Late	B0	1800	0,60	30,49	35	0,051
Late	B0	1800	0,60	38,36	175	0,052
Late	B0	2100	0,20	0,00	190	0,052
Late	B0	2100	0,20	11,73	212	0,047
Late	B0	2100	0,20	20,94	175	0,048
Late	B0	2100	0,20	30,45	131	0,063
Late	B0	2100	0,20	40,67	121	0,057
Late	B0	2100	0,30	0,00	116	0,060
Late	B0	2100	0,30	12,05	88	0,052
Late	B0	2100	0,30	24,88	88	0,061
Late	B0	2100	0,30	32,82	123	0,067
Late	B0	2100	0,30	35,48	123	0,072
Late	B0	2100	0,45	0,00	41	0,056
Late	B0	2100	0,45	11,48	57	0,050
Late	B0	2100	0,45	16,62	49	0,048
Late	B0	2100	0,45	24,33	53	0,066
Late	B0	2100	0,45	31,89	101	0,065
Late	B0	2100	0,60	0,00	14	0,060
Late	B0	2100	0,60	11,59	18	0,041
Late	B0	2100	0,60	16,33	21	0,038
Late	B0	2100	0,60	20,71	24	0,054
Late	B0	2100	0,60	24,05	32	0,048
Late	B0	2400	0,20	0,00	208	0,052
Late	B0	2400	0,20	7,52	210	0,048
Late	B0	2400	0,20	15,75	94	0,058
Late	B0	2400	0,30	0,00	87	0,052
Late	B0	2400	0,30	10,98	88	0,062

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_C	A_D
Late	B0	2400	0,30	18,97	89	0,064
Late	B0	2400	0,30	24,00	123	0,056
Late	B0	2400	0,30	26,91	100	0,063
Late	B0	2400	0,45	0,00	47	0,056
Late	B0	2400	0,45	10,41	46	0,048
Late	B0	2400	0,45	15,16	44	0,058
Late	B0	2400	0,45	24,09	52	0,064
Late	B0	2400	0,45	32,15	140	0,064
Late	B0	2400	0,60	0,00	17	0,060
Late	B0	2400	0,60	7,52	20	0,048
Late	B0	2400	0,60	10,94	21	0,056
Late	B0	2400	0,60	13,50	22	0,060
Late	B30	1800	0,20	0,00	57	0,046
Late	B30	1800	0,20	13,03	77	0,039
Late	B30	1800	0,20	16,18	105	0,042
Late	B30	1800	0,20	20,41	71	0,065
Late	B30	1800	0,20	31,19	61	0,052
Late	B30	1800	0,30	0,00	32	0,051
Late	B30	1800	0,30	13,99	38	0,053
Late	B30	1800	0,30	20,18	35	0,054
Late	B30	1800	0,30	39,80	70	0,048
Late	B30	1800	0,30	54,02	175	0,034
Late	B30	1800	0,45	0,00	13	0,071
Late	B30	1800	0,45	14,07	19	0,051
Late	B30	1800	0,45	19,87	20	0,048
Late	B30	1800	0,45	30,70	26	0,041
Late	B30	1800	0,45	40,70	105	0,040
Late	B30	1800	0,60	0,00	35	0,070
Late	B30	1800	0,60	9,72	41	0,050
Late	B30	1800	0,60	18,95	9	0,036
Late	B30	1800	0,60	26,12	15	0,031

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_C	A_D
Late	B30	1800	0,60	29,92	22	0,039
Late	B30	2100	0,20	0,00	114	0,041
Late	B30	2100	0,20	11,85	145	0,038
Late	B30	2100	0,20	20,34	157	0,039
Late	B30	2100	0,20	26,96	161	0,041
Late	B30	2100	0,20	38,45	203	0,046
Late	B30	2100	0,30	0,00	63	0,055
Late	B30	2100	0,30	8,50	67	0,041
Late	B30	2100	0,30	17,30	64	0,043
Late	B30	2100	0,30	24,83	70	0,049
Late	B30	2100	0,30	37,07	140	0,048
Late	B30	2100	0,45	0,00	24	0,119
Late	B30	2100	0,45	11,59	33	0,092
Late	B30	2100	0,45	16,93	32	0,108
Late	B30	2100	0,45	24,21	32	0,099
Late	B30	2100	0,45	30,26	33	0,104
Late	B30	2100	0,60	0,00	10	0,200
Late	B30	2100	0,60	11,87	10	0,154
Late	B30	2100	0,60	17,03	9	0,210
Late	B30	2100	0,60	19,15	9	0,243
Late	B30	2100	0,60	21,65	13	0,279
Late	B30	2400	0,20	0,00	162	0,026
Late	B30	2400	0,20	10,41	164	0,023
Late	B30	2400	0,20	14,98	177	0,026
Late	B30	2400	0,20	23,10	159	0,022
Late	B30	2400	0,30	0,00	72	0,027
Late	B30	2400	0,30	11,12	94	0,031
Late	B30	2400	0,30	24,45	149	0,028
Late	B30	2400	0,30	29,14	149	0,030
Late	B30	2400	0,30	31,83	191	0,033
Late	B30	2400	0,45	0,00	53	0,029

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_C	A_D
Late	B30	2400	0,45	10,76	53	0,025
Late	B30	2400	0,45	15,52	88	0,028
Late	B30	2400	0,45	24,77	88	0,030
Late	B30	2400	0,45	31,42	130	0,029
Late	B30	2400	0,60	0,00	14	0,168
Late	B30	2400	0,60	7,42	15	0,151
Late	B30	2400	0,60	10,83	14	0,167
Late	B30	2400	0,60	15,48	15	0,166
Late	B30	2400	0,60	21,72	20	0,153
Late	B65	1800	0,20	0,00	84	0,076
Late	B65	1800	0,20	12,84	87	0,048
Late	B65	1800	0,20	19,02	103	0,059
Late	B65	1800	0,20	23,64	87	0,066
Late	B65	1800	0,20	33,57	86	0,062
Late	B65	1800	0,45	0,00	18	0,238
Late	B65	1800	0,45	13,30	15	0,176
Late	B65	1800	0,45	18,85	15	0,169
Late	B65	1800	0,45	23,76	18	0,182
Late	B65	1800	0,45	36,07	38	0,180
Late	B65	1800	0,60	0,00	9	0,240
Late	B65	1800	0,60	13,07	11	0,173
Late	B65	1800	0,60	22,05	12	0,147
Late	B65	1800	0,60	28,34	12	0,127
Late	B65	2100	0,20	0,00	134	0,023
Late	B65	2100	0,20	11,70	123	0,020
Late	B65	2100	0,20	16,33	175	0,020
Late	B65	2100	0,20	26,50	175	0,023
Late	B65	2100	0,20	35,90	157	0,022
Late	B65	2100	0,45	0,00	26	0,087
Late	B65	2100	0,45	11,66	23	0,075
Late	B65	2100	0,45	16,84	28	0,079

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_C	A_D
Late	B65	2100	0,45	26,07	38	0,075
Late	B65	2100	0,45	38,40	52	0,084
Late	B65	2100	0,60	0,00	10	0,171
Late	B65	2100	0,60	11,97	9	0,154
Late	B65	2100	0,60	16,93	13	0,153
Late	B65	2100	0,60	20,85	18	0,156
Late	B65	2100	0,60	25,12	19	0,179
Late	B65	2400	0,20	0,00	178	0,019
Late	B65	2400	0,20	10,17	189	0,017
Late	B65	2400	0,20	17,81	350	0,020
Late	B65	2400	0,20	23,69	350	0,022
Late	B65	2400	0,45	0,00	36	0,062
Late	B65	2400	0,45	14,51	52	0,057
Late	B65	2400	0,45	21,48	54	0,064
Late	B65	2400	0,45	31,70	84	0,060
Late	B65	2400	0,45	39,60	85	0,059
Late	B65	2400	0,60	0,00	14	0,136
Late	B65	2400	0,60	10,46	15	0,116
Late	B65	2400	0,60	12,92	22	0,120
Late	B65	2400	0,60	15,14	23	0,123
Late	B100	1800	0,20	0,00	87	0,022
Late	B100	1800	0,20	9,15	84	0,014
Late	B100	1800	0,20	13,34	139	0,017
Late	B100	1800	0,20	18,92	157	0,018
Late	B100	1800	0,20	26,71	227	0,016
Late	B100	1800	0,45	0,00	25	0,101
Late	B100	1800	0,45	13,05	28	0,062
Late	B100	1800	0,45	18,90	20	0,069
Late	B100	1800	0,45	24,11	25	0,087
Late	B100	1800	0,45	33,94	38	0,083
Late	B100	1800	0,60	0,00	35	0,220

Anexo C. Valores óptimos de los coeficientes de ajuste

Configuración	Combustible	Velocidad (rpm)	Dosado relativo	EGR (%)	A_C	A_D
Late	B100	1800	0,60	13,84	11	0,154
Late	B100	1800	0,60	19,38	12	0,157
Late	B100	1800	0,60	24,06	11	0,149
Late	B100	1800	0,60	28,22	14	0,164
Late	B100	2100	0,20	0,00	138	0,023
Late	B100	2100	0,20	8,31	206	0,021
Late	B100	2100	0,20	12,26	209	0,025
Late	B100	2100	0,20	22,04	211	0,032
Late	B100	2100	0,20	28,63	199	0,032
Late	B100	2100	0,45	0,00	33	0,100
Late	B100	2100	0,45	8,53	30	0,085
Late	B100	2100	0,45	17,77	35	0,109
Late	B100	2100	0,45	24,88	26	0,105
Late	B100	2100	0,45	35,00	32	0,122
Late	B100	2100	0,60	0,00	6	0,145
Late	B100	2100	0,60	12,12	6	0,125
Late	B100	2100	0,60	15,11	6	0,143
Late	B100	2100	0,60	22,11	9	0,189
Late	B100	2400	0,45	0,00	17	0,052
Late	B100	2400	0,45	11,21	31	0,050
Late	B100	2400	0,45	19,43	34	0,050
Late	B100	2400	0,45	32,08	49	0,052
Late	B100	2400	0,45	39,09	92	0,046
Late	B100	2400	0,60	0,00	11	0,096
Late	B100	2400	0,60	11,28	14	0,101
Late	B100	2400	0,60	19,48	14	0,091
Late	B100	2400	0,60	33,98	31	0,079

Anexo D

Publicaciones

Biodiesel effects on homogeneous charge compression ignition combustion mode using retarded injection strategies and high EGR rate

Jiménez-Espadafor Aguilar FJ, Torres García M, Vélez Godiño JA, Becerra Villanueva JA, Carvajal Trujillo E. SPEIC10: Towards Sustainable Combustion. Tenerife (Spain). 16-18 June 2010.

Experimental analysis of low temperature combustion mode with diesel and biodiesel fuels: a method for reducing NO_x and soot emissions

Jiménez-Espadafor Aguilar FJ, Torres García M, Becerra Villanueva JA, Carvajal Trujillo E, Vélez Godiño JA. Fuel Processing Technology. 2012. Vol. 103: 57-63.

Numerical study of HCCI combustion fueled with diesel oil using a multizone model approach

Vélez Godiño JA, Torres García M, Jiménez-Espadafor Aguilar FJ, Carvajal Trujillo E. Energy Convers Manag. 2015. Vol. 89: 885–895.

SPEIC10: Towards Sustainable Combustion – Tenerife (Spain) 16-18 June 2010

BIODIESEL EFFECTS ON HOMOGENEOUS CHARGE COMPRESSION IGNITION COMBUSTION MODE USING RETARDED INJECTION STRATEGIES AND HIGH EGR RATE

Francisco J. Jiménez-Espadafor, Miguel Torres Garcia, José A. Velez Godiño, José A. Becerra Villanueva, Elisa Carvajal Trujillo*

Escuela Superior de Ingenieros de Sevilla, Avda. Camino de los Descubrimientos, s/n. 41092 Sevilla, Spain

Address correspondence to fcojjea@esi.us.es

Phone: 0034954487245 Fax: 0034954487243

*Corresponding author

Abstract

1 Introduction

HCCI is being considered as an alternative combustion process in the internal combustion engine. As a state of the art internal combustion system, HCCI has the potential for nearly zero NO_x and soot emissions, with diesel like engine efficiency. The main reason HCCI systems are being developed is because of their potentially ultra-low emissions capability, at least for NO_x and soot, that will be needed to meet future worldwide emissions regulations and the possible avoidance of costly after treatment systems.

HCCI combustion process can accept a variety of fuel types, since ignition occurs by auto-ignition of the fuel/air mixture. Therefore the choice of fuel can have a significant impact on both engine design and control strategies. Fuel volatility is important in order to easily form a homogeneous charge and auto-ignition characteristics [1]. Fuels with single-stage ignition are less sensitive to changes in load and speed, which can ease the requirements on an HCCI control system over a wide range of engine operating conditions. Test results [2] show that almost any liquid fuel can be used in an HCCI engine using a variable compression ratio.

Fatty-acid methyl ester, commonly known as biodiesel, is the generic term used to describe vegetable or animal oils and greases which have been transesterified with methanol or ethanol [3]. Biodiesel can be presented in pure form (B 100 means 100% biodiesel), or it is mixed with diesel fuel to different proportions. The demands placed to biodiesel of any proportion are regulated in Europe by EN 14214 and by ASTM D 6751-07b in USA. These standards ensure aging stability and the elimination of the contamination produced by the transesterification process. Biodiesel have been thoroughly studied in diesel engines and they have shown to be highly compatible [4].

The advantages of biodiesel fuel are based on its renewability, extremely low sulphur and aromatic content [32], high cetane number –usually higher to mineral diesel fuel–, higher biodegradability [5] and the presence of oxygen in its molecules, making it a clearer-burning fuel [6].

Some drawbacks of biodiesel are high viscosity, low energy content, high cloud and pour points and an increment of NO_x emissions, as it is compared with mineral diesel fuel [7]. Oxygen in biodiesel contributes to the observed increase of NO_x emissions when burning biodiesel in diesel engines; up to 15% has been reported [8]. According to the Zeldovich mechanism, formation of NO_x is prominent at high temperature, but also depends on oxygen content. Although the huge experience and relative introduction of biodiesel, chemical kinetics modeling of biodiesel combustion is in development. This paper studies the effect of biodiesel content on homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine performance experimentally and by simulation. Combustion experiments were performed in a single cylinder HCCI engine using blends of

mineral diesel oil compatible with EN 590 and colza biodiesel compatible with EN 14214. Fuel injection was fixed 10° before TDC, following the system known as modulated kinetics (MK) which combines high swirl level and EGR rates [9].

2 EXPERIMENTAL STUDY

The experimental part of this work is based on the test system designed to run the naturally-aspirated, four stroke, single cylinder DI diesel engine DEUTZ FL1 906, transformed to operate in HCCI combustion mode. In DI combustion mode, the original engine fueled with diesel fuel had rated power of 11 kW at 3000 rpm and maximum torque of 45 Nm at 2100 rpm. The original engine configuration was modified with the following subsystems/adjustments: independent control of cooled EGR, intake air pre-heating (not used in these test), compression ratio of 18.5:1, start of injection 10° before TDC, high swirl bowl in piston combustion chamber and increase of the maximum injection pressure up to ≈ 650 bar. This change in the injection pressure improves mixture homogeneity: surface volume ratio of fuel drops increases promoting faster fuel evaporation and also a reduction of the injection period was achieved.

3 FUEL CHARACTERISTICS

In this epigraph main properties of the four tested fuels are compared. Fuels are formed from different percentages of diesel fuel, compatible with EN590, and rapeseed biodiesel, compatible with EN 14214. The fuels have been named B0, B30, B50, B100, being the number the mass percentage of biodiesel in the mixture. Main fuel properties are tabulated in table I, where cetane index has been evaluated with the expression

$$I_{\text{cetano}} = 454,74 - 1641,416 \cdot \rho_{15} + 774,74 \cdot \rho_{15}^2 - 0,554 \cdot T_{50\%} + 97,803 \cdot (\log[T_{50\%}])^2$$

Biodiesel has higher density than diesel fuel, which could cause longer liquid penetration. In addition biodiesel present lower volatility, having a narrow boiling range. Higher boiling temperatures may lead to longer penetration but also increase wall impingement risk. This can increase un-burnt hydrocarbon and CO emissions, reduce engine efficiency and also can contribute to solve lubricating oil and damage piston and liner. Higher viscosity may influence spray development and droplet atomization, as well as injector dynamics. Other relevant property is cetane index, which greatly affects autoignition characteristics. The higher cetane index of the biodiesel blends suggest a higher cetane number and therefore may cause the start of ignition angle to advance when is compared to diesel fuel.

4 COMBUSTION MODEL

A thermodynamic zero-dimensional model has been used to carry out the analysis and evaluation of HRR. The combustion chamber is considered as a perfect mixture reactor with variable volume, even pressure distribution, temperature and concentration of chemical species with heat losses. Equations and simplifications that govern the mathematical model are needed due to complex interaction between physics and chemical phenomenon during combustion and are described in the following equations:

- Thermal state equation
- Combustion chamber volume
- First Principle of Thermodynamics
- Heat losses
- Blow by has not been considered.

The heat loss model is expressed as:

$$\frac{dQ_w}{d\theta} = A_c h_c (T_g - T_w) \frac{1}{\omega}$$

The heat transfer coefficient h_c ($W/m^2 K$) is based on the correlation formula given by Junseok Chang [10]. Q_w is the wall heat loss, A_c is the area in contact with the gases, $T_g(K)$ is the gas temperature, $T_w(K)$ is the cylinder wall temperature and ω (rad/s) is the average angular speed. The global heat transfer coefficient can be written as:

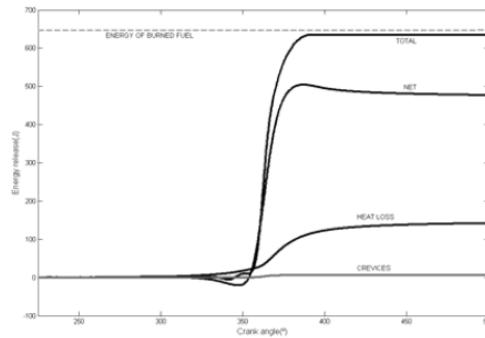
$$h_c(t) = \alpha_{scaling} L(t)^{-0.2} p(t)^{0.8} T(t)^{-0.73} v(t)^{0.8}$$

A scaling factor $\alpha_{scaling}$ is used for tuning of the coefficient to match specific engine geometry. Combustion-induced gas velocity is a function of the difference between motoring and firing pressure.

$$v(t) = C_1 \bar{S}_p + \frac{C_2 V_d T_r}{6 p_r V_r} (p - P_{motoring})$$

The main idea for using this equation is to keep the velocity constant during the un firing period of the cycle, and to then impose a steep velocity rise once combustion pressure departs from motoring pressure. The subscript r denotes a reference crank angle, such as intake valve closing.

Next figure shows the net cumulative heat release obtained from a diesel oil fuel consumption of 0.015 g/cycle, 1800 RPM and 0% EGR. Combustion efficiency comes from measured exhaust gas composition, 93-96%, so the energy released by the fuel per cycle (LHV=42.5 MJ/kg) is between 593-612J. Crevice losses are considered very low, about 2%.



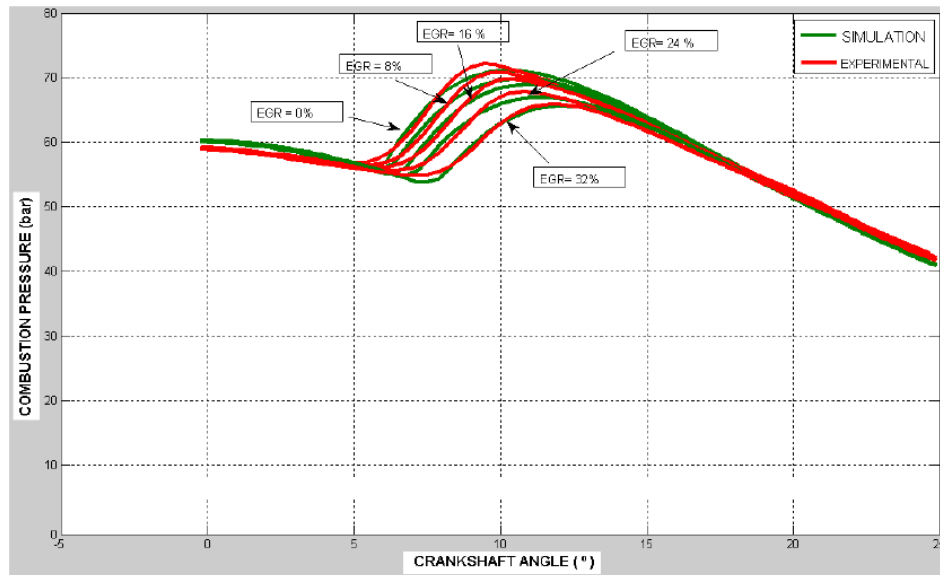
5 EXPERIMENTAL AND SIMULATION RESULTS

Following table defines engine tests performed with mixtures of rapeseed biodiesel and diesel oil compatible with EN590.

Diesel oil (%)	Rapeseed biodiesel (%)	Fuel air equivalence ratio (referred to diesel oil)	Engine speed (rpm)	EGR rate
100	0	0.3 / 0.45 / 0.6	1800 / 2100 / 2400	Variable with operative condition
70	30			
35	65			
0	100			

In order to improve mixture homogeneity combustion chamber has been modified with a high swirl level design. This has been performed with a high relationship cylinder diameter/bowl diameter that promotes high tangential fluid velocity in the proximity of top dead centre. Final piston dimension comes from swirl model results.

Following figure shows simulation and experimental results of the combustion pressure chamber for the following test conditions: 1800 rpm / fuel 100% rapeseed biodiesel / EGR rate 16% / compression ratio 16:1



6 CONCLUSIONS

- Rapeseed Biodiesel fuel cannot be used in HCCI mode with advance injection strategy
- High injection delay allow HCCI combustion with rapeseed biodiesel when high swirl level and EGR rate are used together
- This operative condition reduce maximum attainable engine power when compared with diesel combustion mode
- NOx and soot emission are almost null, although it has been appreciated of CO and HC emissions

[1] Liu H, Yao M, Zhang B, Zheng Z. Influence of fuel and operating conditions on combustion characteristics of a homogeneous charge compression ignition engine. *Energy & Fuel* 2009; 23(3): 1422-30.

[2] Christensen M, Hultqvist A, Johansson B. Demonstrating the multifuel capability of a homogeneous charge compression ignition engine with variable compression ratio. *SAE paper* 1999-01-3679; 1999.

[3] Demirbas, A. Biodiesel from vegetable oils via transesterification in supercritical methanol. *Energy Conversion Management* 2002, 43: 2349-2356.

[4] M.S. Graboski and R.L. McCormick. Combustion of Fat and Vegetable Oil Derived Fuels in Diesel Engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1998. 24(2) 125-164.

[5] Speidel, H.K., Lightner, R.L., Ahmed, I. Biodegradability of new engineered fuels compared to conventional petroleum fuels and alternative fuels in current use. *Applied Biochemical Biotechnol* 2000. 84:879-897.

- [6] Sastry, G.S.R., Krishna Murthy, A.S.R., Ravi Prasad, P., Bhuvanewari, K., Ravi, P.V. Identification and determination of bio-diesel in Diesel. *Energy Sources Part A*. 2006. 28: 1337-1342
- [7] Demirbas, A. Biodiesel fuels from vegetable oils via catalytic and non-catalytic supercritical alcohol transesterifications and other methods: a survey. 2003. *Energy and Conversion Management* 44: 2093-2109.
- [8] McCormick, R.L.; Graboski, M.S.; Alleman, T.L.; Hearing, A.M.; Tyson, K.L. Impact of biodiesel source material and chemical structure on emissions of criteria pollutants from a heavy-duty engine. *Environmental Science Technology*. 2001, 35, 1742-1747
- [9] Lee, T.; Reitz, R.D. The effect of intake boost pressure on MK (modulated kinetics) combustion. *JSME Int. J.* 2003, 46, 451-459.
- [10] Junseok Chang et al. "New heat Transfer Correlation for an HCCI engine derived from measurements of instantaneous surface heat flux". *Sae Paper* 2004-01-2996.



Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

Fuel Processing Technology

journal homepage: www.elsevier.com/locate/fuproc

Experimental analysis of low temperature combustion mode with diesel and biodiesel fuels: A method for reducing NOx and soot emissions

Francisco J. Jiménez-Espadafor^{*}, Miguel Torres, José A. Velez, Elisa Carvajal, José A. Becerra

Escuela Superior de Ingenieros de Sevilla, Avda. Camino de los Descubrimientos, s/n. 41092 Sevilla, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 18 June 2011

Received in revised form 9 November 2011

Accepted 15 November 2011

Available online 10 December 2011

Keywords:

Biodiesel

HCCI

Diesel

Engine

ABSTRACT

One of the main advantages of biodiesel fuels is that almost eliminate carbon dioxide emissions based on the CO₂ consumption during plant growth. However it is accepted for most researchers that when burned in diesel engines there is an increase of the NOx emissions when these are compared to the NOx emissions produced by mineral diesel fuel.

HCCI with diesel fuel is being considered as an alternative combustion process in the internal combustion engine, mainly because of the huge potential for simultaneous reduction of NOx and soot emissions while fuel conversion efficiency is not compromised, in fact, it is usually increased.

The HCCI combustion process can accept a variety of fuel types, like biodiesel and mixtures with mineral diesel fuel. The main reason for burning biodiesel fuel in HCCI combustion mode is that it enables the simultaneous reduction of NOx and soot emissions to current standard requirements, as well as the elimination of CO₂.

This paper shows a methodology for HCCI combustion mode of biodiesel mixtures based on a high swirl ratio and EGR rate combined with late injection where HRR, NOx, CO, HC and soot emissions have been analyzed. This strategy has reduced fuel wall impingement encountered when early injection is used. Bowl in piston geometry has been designed with a dedicated swirling flow model and a NOx emission of biodiesel fuel has been reduced.

© 2011 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

HCCI is being considered as an alternative combustion process in the internal combustion engine, integrating features of both spark ignition (SI) and compression ignition (CI) engines. HCCI combustion is initiated by spontaneous auto ignition of multiple sites under high-temperature and high-pressure conditions. Subsequently, the physical and chemical properties of the fuel, mixture components, environmental conditions, including pressure and temperature, and engine operating conditions, such as engine speed and load, play an important role in the ignition timing and combustion duration of HCCI combustion [1]. Since combustion occurs by the auto-ignition of the fuel/air mixture, the HCCI process can accept a variety of fuel types.

As a state of the art internal combustion system, HCCI has the potential for nearly zero NOx and soot emissions, with diesel like engine efficiency [2]. The main reason why HCCI systems are being developed is because of their potential for ultra-low emissions, at least for NOx and soot, that will be needed to meet future worldwide emissions

standards, and the possible avoidance of costly after treatment systems. This ultra low NOx level is sometimes reached with the inclusion of EGR. This is a well-known in-cylinder NOx emissions reduction technique, particularly in modern diesel engines. In diesel combustion mode, however, EGR has a severe drawback—the strong trade-off between NOx and soot. The reduction in NOx is offset by an increase in particles and smoke. In HCCI combustion mode, EGR has three main effects:

1. An increment of the EGR rate results in a reduction in NOx.
2. The control of the start of ignition through the EGR rate.
3. The soot level is almost negligible and has low sensitivity to the EGR rate.

Certain fuel characteristics can contribute to promote engine operation in HCCI combustion mode and facilitate its integration in practical applications [3]. Therefore the choice of fuel can have a significant impact on both engine design and control strategies. Fuel volatility is important in order to easily form a homogeneous charge and auto-ignition characteristics. Fuels with single-stage ignition are less sensitive to changes in load and speed, which can ease the requirements on an HCCI control system over a wide range of engine operating conditions [4]. Test results [5] show that almost any liquid fuel can be used in an HCCI engine using a variable compression ratio.

Fatty-acid methyl ester, commonly known as biodiesel, is the generic term used to describe vegetable or animal oils and fats which

Abbreviations: A/F, Air/fuel ratio; ATDC, After top dead center; BTDC, Before top dead center; C, Carbon; CI, Compression ignition; CO, Carbon monoxide; CO₂, Carbon dioxide; d_{cup} , Bowl diameter; DI, Direct injection; EGR, Exhaust Gas Recirculation; H, Hydrogen; HC, Total hydrocarbon emission; H₂O, Water; HCCI, Homogeneous Charge Compression Ignition; HRR, Heat Release Rate; NOx, Nitrogen oxides; O, Oxygen; rpm, Revolutions per minute; SI, Spark ignition; TDC, Top dead center.

^{*} Corresponding author. Tel.: +34 954487245; fax: +34 954487243.

E-mail address: fcjjea@esi.us.es (F.J. Jiménez-Espadafor).

have been transesterified with methanol or ethanol [6]. Biodiesel can be presented in pure form (B 100 indicates 100% biodiesel), or mixed with diesel fuel in different proportions. The requirements of biodiesel of any proportion are regulated in Europe by EN 14214 and by ASTM D 6751-07b in USA. These standards ensure aging stability and the elimination of the contamination produced by the transesterification process. Biodiesels have been thoroughly studied in diesel engines and they have been shown to be highly compatible [7].

The advantages of biodiesel fuel are based on its renewability, extremely low sulfur and aromatic content [8], high cetane number – usually higher than mineral diesel fuel, higher biodegradability [9] and the presence of oxygen in its molecules, making it a cleaner-burning fuel [10].

Some of the drawbacks of biodiesel are its high viscosity, low energy content, high cloud and pour points and an increment of NOx emissions, when compared with mineral diesel fuel in conventional diesel combustion [11]. Oxygen in biodiesel contributes to the observed increase in NOx emissions when burning biodiesel in diesel engines; up to 15% has been reported [7]. According to the Zeldovich mechanism, formation of NOx is prominent at high temperature, but also depends on oxygen content. Despite the long experience and relative introduction of biodiesel, chemical kinetics modeling of biodiesel combustion is in development [12,13]. This paper studies the effect of biodiesel content on homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine performance both experimentally and by simulation. Combustion experiments were performed in a single cylinder HCCI engine using blends of mineral diesel oil compatible with EN 590 and colza biodiesel compatible with EN 14214. Fuel injection was fixed at 10° before TDC, earlier than system known as modulated kinetics (MK) which combines high swirl level and EGR rates [14], but later than conventional diffusive diesel combustion. Other injection strategy as earlier fuel injection timing with biodiesel fuel was analyzed, about 50°–45° before top dead center. However even with only 30% of biodiesel fuel engine irregularity increased, CO and HC emissions grew up and lubricating oil was dissolved by fuel destroying the engine after a few running hours. This behavior made this start of injection incompatible with biodiesel fuel and the strategy proposed in this paper was analyzed.

2. Experimental study

The experimental part of this study is based on the test system designed to run the naturally-aspirated, four strokes, single cylinder DI diesel engine DEUTZ FL1 906, transformed to operate in HCCI combustion mode. In DI combustion mode, the original engine powered by diesel fuel had a rated power of 11 kW at 3000 rpm and a maximum torque of 45 Nm at 2100 rpm. The original engine configuration was modified with the following subsystems/adjustments: independent control of EGR, intake air pre-heating (not used in this study), a compression ratio of 18.4:1, start of injection at 10° before TDC, high swirl bowl in the piston combustion chamber and an increase of the maximum injection pressure up to ≈650 bar. This change in the injection pressure improves mixture homogeneity: the surface volume ratio of fuel drops increases, promoting faster fuel evaporation and a reduction of the injection period was also achieved. Table 1 shows the main characteristics of the modified engine running in HCCI combustion mode and the experimental installation is represented in Fig. 1. In order to control the HCCI combustion process, exhaust gases are cooled down to ambient temperature before mixing with the inlet air. Required EGR is calculated as follows:

$$\text{EGR}(\% \text{ mass}) = \frac{\dot{m}_{\text{EGR}}}{\dot{m}_{\text{EGR}} + \dot{m}_{\text{AIR}}} \times 100. \quad (1)$$

The experimental tests with EGR have been carried out from an initial load condition without EGR and with a fixed fuel air

Table 1
Characteristics of the modified Deutz FL1 906 Engine.

Type	DI 4 stroke one cylinder
Cylinder displacement	708 cm ³
Bore	95 mm
Stroke	100 mm
Compression ratio	18.4:1
Piston bowl configuration	High swirl chamber
(Bore/bowl diameter)	(95/34.5)
Nozzle opening pressure	300 bar
Number of injector holes	5
Injector hole diameter	0.26 mm
Injector cone angle	120°
Intake valve opening (IVO)/closing (IVC), after TDC	–2°/216°
Exhaust valve opening (EVO)/closing (EVC), before BDC	36°/–182°
Lubricating	Gear oil pump
Injection pump	Mechanic
Refrigeration	By air, with a fan built in the flywheel

equivalence ratio and engine speed. Subsequently, the percentage of EGR is increased and fuel adjusted so that the fuel air equivalence ratio is maintained, with the charge intake temperature always remaining constant.

3. Fuel characteristics

In this section the main properties of the four tested fuels are compared. Fuels are formed from different percentages of diesel fuel, compatible with EN590, and colza biodiesel, compatible with EN 14214. The fuels have been named B0, B30, B65, B100, the number indicating the mass percentage of biodiesel in the mixture. The main fuel properties are tabulated in Table 2.

All biodiesel blends have higher density, viscosity, surface tension and lower volatility – having a narrow boiling range – than diesel fuel. These differences influence spray development, droplet atomization, as well as injector dynamics, leading to a larger droplet size which can cause longer liquid penetration but also increase wall impingement risk. This can increase un-burnt hydrocarbon and CO emissions, reduce combustion efficiency and also can contribute to solving lubricating oil and therefore damage the piston and liner. Another relevant property is the cetane index, which greatly affects autoignition characteristics [15]. A higher cetane index of the biodiesel blend suggests a higher cetane number and, therefore, may cause the start of ignition angle to advance when it is compared to diesel fuel.

4. Combustion chamber design for maximum swirl

The characteristics of biodiesel blends make air–fuel mixture formation difficult; see previous section, producing an increase of fuel wall-impingement [16,17]. In order to promote fuel vaporization and mixing during HCCI combustion mode, it is desirable to increase charge turbulence. The original piston of this engine has a bowl combustion chamber with a bore/bowl diameter ratio of 1.58, which was thought to produce a low swirl increase, and therefore compact bowl-in-piston combustion chamber designs centered on the cylinder axis have been considered. In order to evaluate the optimum bore/diameter for turbulence intensity increase, the fluid model developed at [18] that allows characterizing swirling flow as a function of engine speed and bowl diameter has been used. This is based on a swirl model, developed from fluid dynamics governing equations where charge temperature, gas composition and density are considered homogeneous in each zone of the whole combustion chamber volume. The model also considers the widely-adopted hypothesis in which flow can be treated as a solid-body vortex with uniform axial velocity [19], where swirl is the angular speed of the flow, named w . This design increases the tangential velocity of the

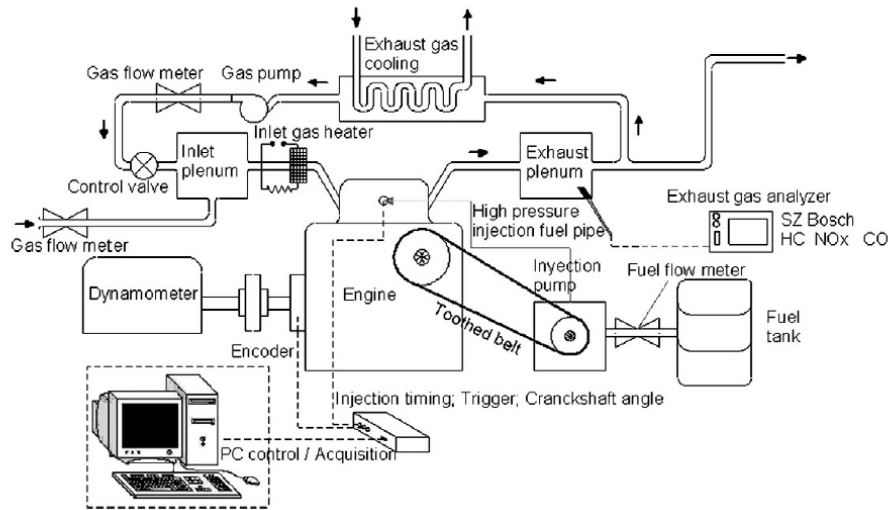


Fig. 1. Schematic experimental installation.

induction stroke swirling flow as the piston approaches TDC, forcing most of the charge flow into the bowl.

4.1. Selection of combustion bowl chamber diameter

In order to analyze the relationship between bowl dimensions and swirl intensity for turbulence control in the transformed engine described in Section 2, flow motion simulations were performed without considering combustion. The heat transfer rate increases sharply when combustion is considered, mainly due to the increase of gas temperature. Fig. 2 shows instantaneous swirl versus crankshaft angle in for different bowl diameters at 2100 rpm engine speed. From Fig. 3, the following can be observed:

- The less the bowl diameter (d_{cup}), the higher the swirl for all engine speeds.
- A huge increment of swirl between 10° and 20° before TDC, which multiplies swirl level at bottom dead center by a factor of ≈ 6 for the minimum d_{cup} .
- An advance of the angle where maximum swirl is produced when the bowl diameter diminishes.

For HCCI combustion with early injection timing (higher than 40° : 45° BTDC), this huge swirl level increase takes place close to the crankshaft angle where HCCI combustion starts and develops; for this reason, swirl intensity has an important influence in this combustion mode. In the case of HCCI combustion with late injection timing (-10° : 3° ATDC), combustion starts later than the angle of maximum swirl but contributes to promote air–fuel homogeneity. Fig. 3 shows

maximum swirl versus bowl diameter for several engine speeds. As expected, swirl intensity has an almost linear relationship with engine speed for each bowl diameter and follows an almost inverse cubic law with bowl diameter. When original and minimum bowl diameters are compared, 60 mm and 35 mm respectively, it can be appreciated that, at 2100 rpm engine speed, low bowl diameter piston produces maximum swirl of 2550 rad/s which is equal to an amplification factor of 4.6. The low bowl diameter piston finally adopted has $d_{cup} = 35$ mm and although it is expected to have more heat losses, it contributes more efficiently to homogenizing the gas mixture.

5. Phenomenological combustion model

A thermodynamic zero-dimensional model has been used to carry out the analysis and evaluation of HRR. In this model the combustion chamber is considered a perfect mixture reactor with variable volume and pressure, temperature and concentration of chemical species uniform with heat losses. Blow by losses has not been considered. Equations and simplifications that govern the mathematical model are needed due to the complex interaction between physics and chemical

Table 2
Main properties of tested fuels.

	Diesel	B 100	B 65	B 30
Density at 15 °C, kg/m ³	832.0	883.4	865.5	858.8
viscosity at 40 °C, cSt	2.9	4.6	5.4	3.3
Low heat value, MJ/kg	43.1	40.2	41.2	42.2
Distillation temperature (°C) (up to 95% distillation)	175–350	320–415	207–405	200–390
Cetane index [14]	47.0	52.6	52.2	47.6
Reduced chemical formula (based on C/H/O)	CH _{1.9}	CH _{1.85} O _{0.11}		
Stoichiometric A/F (mass)	14.67	12.96		

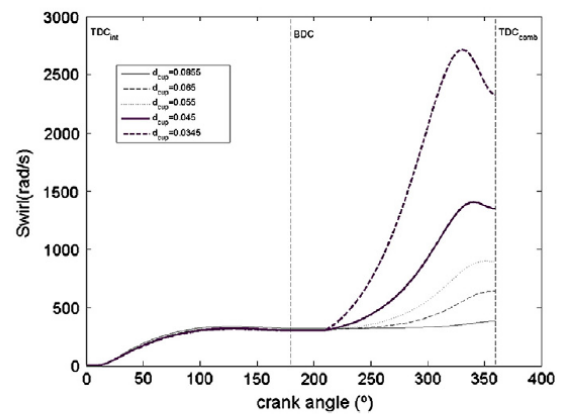


Fig. 2. Swirl in Region 2 versus crank angle for different bowl diameters at 2100 rpm engine speed.

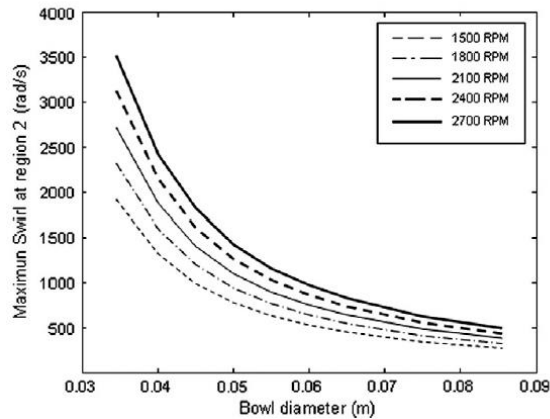


Fig. 3. Maximum swirl versus bowl diameter for different engine speeds.

phenomenon during combustion and are described in the following equations:

- Thermal state equation
- Combustion chamber volume
- First Principle of Thermodynamics
- Heat losses

Table 3
Engine test conditions.

Diesel oil (%)	Colza biodiesel (%)	Fuel air equivalence ratio (with reference to diesel oil)	Engine speed (rpm)	EGR rate
100	0	0.3/0.45/0.6	1800/2100/2400	Variable with operative condition
70	30			
35	65			
0	100			

The heat loss model is expressed as:

$$\frac{dQ_W}{dt} = A_c h_g (T_g - T_w) \frac{1}{\omega} \tag{2}$$

The heat transfer coefficient usually adopted for HCCI combustion mode, that of Junseok Chang [19], does not consider turbulent flow; for this reason the heat transfer coefficient h_g (W/m² K) used is based on the correlation formula given by Eiglmeier et al. [20], see Eq. (2). Q_W is the wall heat loss, A_c is the area in contact with the gases, T_g (K) is the gas temperature, T_w (K) is the cylinder wall temperature and ω (rad/s) is the average angular speed.

6. Experimental and simulation results

Two different injection modes are used for HCCI combustion; very early injection or late injection, in this case with high swirl level and

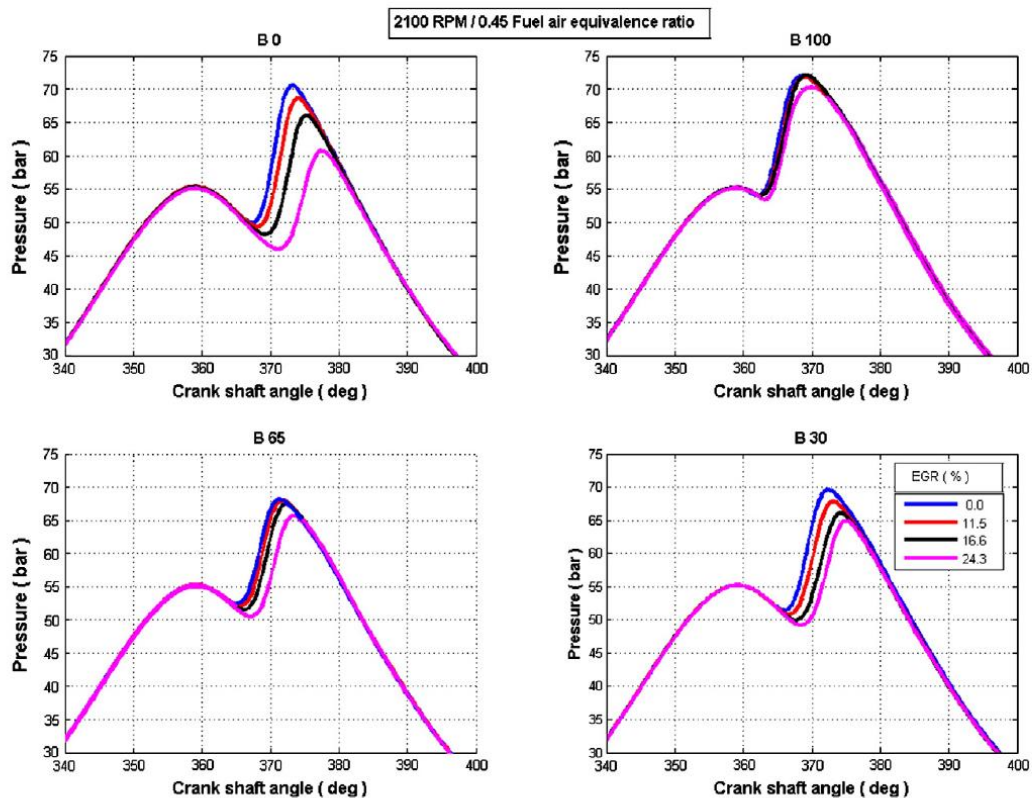


Fig. 4. Combustion chamber pressure for B0, B100, B30 and B65 at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates.

EGR. Running with early injection, 45° BTDC, produced very fast engine damage when using biodiesel fuel, both on its own and when mixed with diesel fuel. The lower volatility, higher surface tension and higher density of biodiesel fuel, compared to mineral diesel, lead to larger fuel droplet size and thus more impingement on the cylinder wall. This fuel is scraped drawn into the crankcase oil by the piston rings where the oil is quickly damaged [21].

Table 3 shows engine tests performed with mixtures of colza biodiesel and diesel oil compatible with EN590. All tests have been performed with late injection (10° BTDC), high swirl level (with the piston design of Section 3) and different EGR levels.

6.1. Effect of the mixing ratio of biodiesel on combustion

Figs. 4 and 5 show combustion chamber pressure and heat release rate for the four fuel mixtures at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates. According to Heat Release Rate (HRR), a single peak heat release pattern is observed, which indicates a premixed dominated combustion mode for all fuel mixtures tested whatever the EGR ratio, although some diffusive combustion can be seen. Fuel evaporation effects are shown as indicated by negative values of HRR just before combustion starts.

As can be appreciated in both graphs, ignition timing is advanced as the mixing ratio of biodiesel is increased. Differences between biodiesel and mineral diesel fuel in C/H/O composition and low heat value result in almost the same energy injected per cycle for all cases, mainly because the equivalence ratio is the same. Therefore, and in spite of the higher oxygen content of B100, the shorter ignition delay of biodiesel mainly can be explained through the cetane number. Although this fuel parameter has not been measured, the increase of the cetane

index with the percentage of biodiesel shown in Table 2 explains this result.

Combustion duration has been evaluated as the angle between the start of combustion and that corresponding to 10% of the magnitude of the peak of HRR on the falling side of the curve [22].

Another important aspect is that related to maximum of HRR. In spite of the lower ignition delay and therefore with higher gas temperature at the beginning of combustion, it can be observed that B100 produces a lower HRR maximum for any test condition. Because of the huge positive relationship between combustion rate and temperature well characterized by the Arrhenius Law, this result suggests that the chemical kinetics of mineral diesel fuel is faster than that of B100.

6.2. Effect of the EGR rate on combustion

EGR, a very well known method for NO_x reduction in diesel engines, is also a method in early injection HCCI combustion mode, to improve engine power mainly as a result of the increase of the ignition delay [23]. NO_x emissions for test conditions of this study (late injection), shown in Fig. 6, reveal clearly that any increase in EGR rate produces a reduction in NO_x for all fuel mixtures, but an increase of specific fuel consumption (not shown). Pure biodiesel fuel, B100, produces more NO_x emissions than all other fuels. This result follows the tendency observed in conventional diesel combustion for some biodiesel fuels [24]. Considering the higher ignition advance of B100 and therefore higher combustion temperature, it can be deduced that this fact contributes to the NO_x increase observed.

Related to HRR in Fig. 5, in all test conditions with late injection and with every fuel, any increase in the EGR rate produces a higher start of combustion delay. However the higher the percentage of biodiesel in

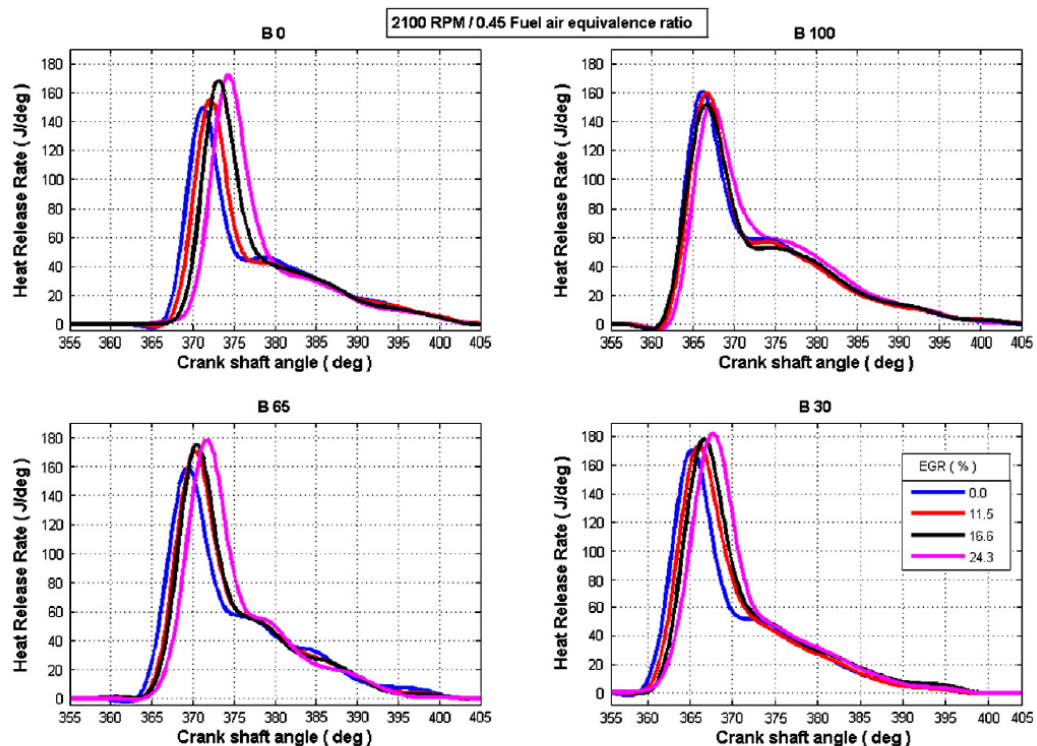


Fig. 5. Heat release rate for B0, B100, B30 and B65 at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates.

the fuel mixture, the smaller the delay. In the case of B100, a small start of combustion delay is only appreciated when the maximum EGR is applied, 24.3%; it can be concluded that B100 fuel is almost insensitive to EGR from this point of view. This result suggests that the chemical kinetics mechanism controls the start of ignition, being much more important than the temperature reduction that is accomplished through the thermal capacity increase of air fuel mixture when the EGR rate increases. This temperature reduction can be expected because of the continuous NOx fall with EGR increase, see Fig. 6.

Another relevant issue observed in Fig. 5 is that for B0, B30 and B65, any ignition delay produces an increase in the maximum HRR, a reduction of combustion duration and a reduction of NOx emissions, although the EGR rate is higher. This is different from the conventional diesel combustion process, where a higher heat release rate is normally accomplished by higher NOx concentration due to the increased combustion temperature. In this study, the increase of HRR with EGR is probably caused by better mixing due to the increase in time available produced by the higher ignition delay (caused by temperature reduction); this way increases the percentage of premixed combustion. This behavior was also observed by Su with late injection of diesel fuel [25] (in this case without EGR).

Soot emissions through smoke opacity measurement are shown in Fig. 7. Although the opacity index is low, it can be appreciated that it grows continuously for every EGR increase. This behavior is consistent with the same trade-offs between NOx and soot observed in conventional diesel combustion. Regarding fuel mixture, the observed tendency is consistent with almost all biodiesel types when burnt in conventional combustion mode: the higher the percentage of biodiesel in the fuel mixture, the lower the soot emissions and opacity [26]. Although high gas–fuel homogeneity in HCCI combustion mode is expected, biodiesel characteristics and the short period of time available for mixture formation suggest some lack of mixture homogeneity. Along these lines, this tendency can be explained through the same behavior observed in conventional diesel combustion: the increase of oxygen in the biodiesel molecule along with the lower stoichiometric need of air, see Table 2. The former enables more complete combustion and the latter reduces the probability of fuel-rich regions in the non-uniform fuel/air mixture [27,28].

The volume fraction of unburned hydrocarbons and carbon monoxide, versus EGR rate, are shown in Figs. 8 and 9, respectively. The increase in HC and CO emissions with EGR rate can be observed for all fuels tested. This behavior can be explained through the reduction of gas temperature on increasing the EGR rate, because the oxidation rate for HC and CO decreases with temperature. From the point of view of fuel composition, it can be appreciated in both Figs. 8 and 9

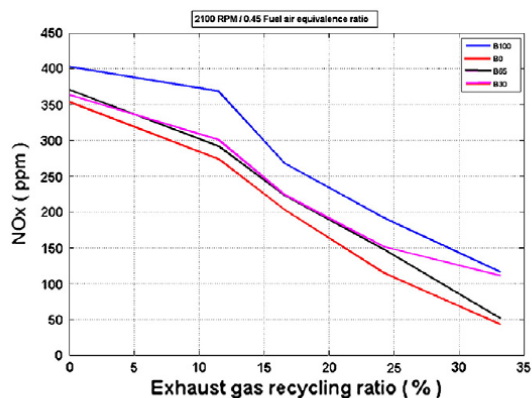


Fig. 6. NOx emissions for B0, B100, B30 and B65 at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates.

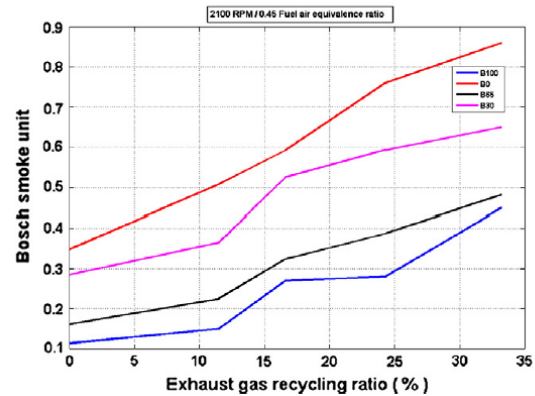


Fig. 7. Smoke emissions for B0, B100, B30 and B65 at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates.

that the HC and CO emissions increase, for a given EGR rate, with the biodiesel percentage in the mixture. This result highlights the importance of the biodiesel characteristics related to air–fuel mixture formation, which are poorer than those for mineral diesel fuel; although a decrease in HC and CO emissions could be expected due to:

- The higher gas temperature associated with the diminution of the ignition delay with biodiesel percentage
- The higher oxygen content of the biodiesel molecule

The observed increase in HC and CO emissions can be explained in terms of the worse biodiesel mixture formation characteristics (higher surface tension, lower volatility and narrow boiling range), which increase fuel wall impingement. This fuel is not completely oxidized and therefore appears as CO and HC.

7. Conclusions

In this paper the methodology and experimental results of a diesel engine transformed to operate in late injection HCCI combustion mode have been presented and discussed, burning different fuel formed by mixtures of mineral diesel fuel and biodiesel. The bowl in piston combustion chamber of the original engine has been modified according to a simplified swirl model in order to promote high swirl

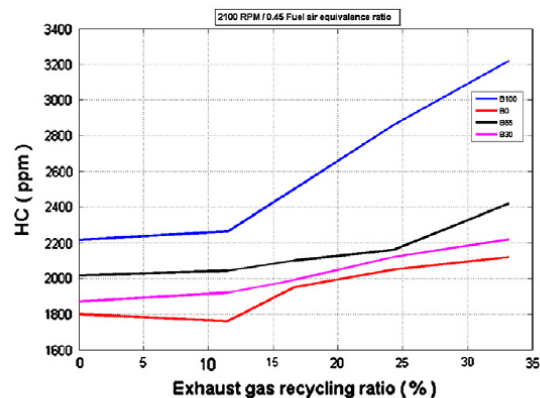


Fig. 8. HC emissions for B0, B100, B30 and B65 at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates.

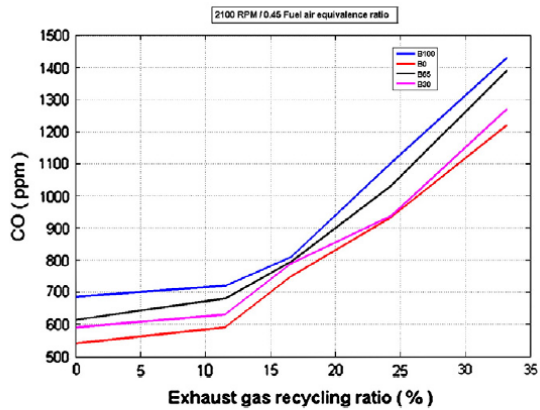


Fig. 9. CO emissions for B0, B100, B30 and B65 at 0.45 fuel–air equivalence ratio, 2100 rpm engine speed and different EGR rates.

flow at the proximity of TDC. The main conclusions from the analysis performed can be summarized as follows:

- Colza Biodiesel and its mixtures with diesel fuel with advance injection strategy in HCCI combustion mode shorten lubricating oil properties producing premature engine damage. This behavior has not allowed us to obtain valid results.
- High injection delay allows HCCI combustion with colza biodiesel when a high swirl level and EGR rate are used together. This operative condition reduces maximum attainable engine power when compared with diesel combustion mode, but radically reduces NOx and soot emissions.
- NOx emissions reduce as EGR increases, as with conventional diesel combustion. A small increase in NOx emissions is observed when the Biodiesel percentage increases, although this is probably related to ignition timing.
- Smoke opacity increases as EGR increases, like conventional diesel combustion, although a very low number of Bosch smoke units are observed in HCCI combustion mode. A marked reduction in soot emissions is observed when the Biodiesel percentage increases. This behavior can be related to the increase of oxygen in the biodiesel molecule along with the lower stoichiometric need of air which reduces the probability of fuel-rich regions in the non-uniform fuel/air mixture.

Acknowledgements

This paper is a part of item CTQ2007-68026-CO2-02/PPQ within the national R&D plan for the period 2007–2009 and has been backed by the Spanish Government (Ministry of Science and Education). The authors are grateful to the Ministry of Science and Education of Spain for their financial support.

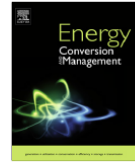
References

- [1] M. Lida, M. Hayashi, D.E. Foster, J.K. Martin, Characteristics of homogeneous charge compression ignition engine operation for variations in compression ratio, speed, and intake temperature while using n-butane as a fuel, *Journal of Engineering for Gas Turbine and Power* 125 (2003) 472–478.
- [2] M. Yoon, J.W. Kim, C.S. Lee, J.H. Lee, Effect of compression ratio and spray injection angle on HCCI combustion in a small DI Diesel engine, *Energy & Fuels* 20 (1) (2006) 69–76.
- [3] H. Liu, M. Yao, B. Zhang, Z. Zheng, effects of inlet pressure and octane numbers on combustion and emissions of a homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine, *Energy & Fuels* 22 (4) (2008) 2207–2215.
- [4] M. Christensen, A. Hultqvist, B. Johansson, Demonstrating the multi fuel capability of a homogeneous charge compression ignition engine with variable compression ratio, SAE paper 1999-01-3679, 1999.
- [5] H. Liu, M. Yao, B. Zhang, Z. Zheng, Influence of fuel and operating conditions on combustion characteristics of a homogeneous charge compression ignition engine, *Energy & Fuels* 23 (3) (2009) 1422–1430.
- [6] A. Demirbas, Biodiesel from vegetable oils via transesterification in supercritical methanol, *Energy Conversion and Management* 43 (2002) 2349–2356.
- [7] M.S. Graboski, R.L. McCormick, Combustion of fat and vegetable oil derived fuels in diesel engines, *Progress in Energy and Combustion Science* 24 (2) (1998) 125–164.
- [8] H.K. Speidel, R.L. Lightner, I. Ahmed, Biodegradability of new engineered fuels compared to conventional petroleum fuels and alternative fuels in current use, *Applied Biochemistry and Biotechnology* 84 (2000) 879–897.
- [9] G.S.R. Sastry, K. Murthy, P.R. Prasad, K. Bhuvanawari, P.V. Ravi, Identification and determination of bio-diesel in Diesel, *Energy Sources, Part A* 28 (2006) 1337–1342.
- [10] A. Demirbas, Biodiesel fuels from vegetable oils via catalytic and non-catalytic supercritical alcohol transesterifications and other methods: a survey, *Energy Conversion and Management* 44 (2003) 2093–2109.
- [11] R.L. McCormick, M.S. Graboski, T.L. Alleman, A.M. Hearing, K.L. Tyson, Impact of biodiesel source material and chemical structure on emissions of criteria pollutants from a heavy-duty engine, *Environmental Science & Technology* 35 (2001) 1742–1747.
- [12] S. Um, S.W. Park, Numerical study on combustion and emission characteristics of homogeneous charge compression ignition engines fueled with biodiesel, *Energy & Fuels* 24 (2) (2010) 916–927.
- [13] T. Fang, Y. Lin, T.M. Foong, C. Lee, Reducing NOx emissions from a biodiesel-fueled engine by use of low-temperature combustion, *Environmental Science & Technology* 42 (23) (2008) 8865–8870.
- [14] T. Lee, R.D. Reitz, The effect of intake boost pressure on MK (modulated kinetics) combustion, *JSME International Journal* 46 (2003) 451–459.
- [15] ASTM D976–06.
- [16] H.L. Fang, S.D. Whitacre, E.S. Yamaguchi, M. Boons, Biodiesel Impact on Wear Protection of Engine Oils, SAE paper 2007-01-4141, 2007.
- [17] O.R. Grover, D.N. Assanis, A spray wall impingement model based upon conservation principles, Proceedings of the Fifth International Symposium on *Diagnostics and modeling of combustion in internal combustion engines (COMODIA 2001)*, 1–4 July 2001, Nagoya.
- [18] F.J. Jimenez, M. Torres, J.A. Correa, J.A. Becerra, Effect of turbulence and external exhaust gas recirculation on HCCI combustion mode and exhaust emissions, *Energy & Fuels* 23 (9) (2009) 4295–4303.
- [19] J. Chang, O. Güralp, Z. Filipi, D. Assanis, T.W. Kuo, P. Najt, R. Rask, New heat Transfer Correlation for an HCCI engine derived from measurements of instantaneous surface heat flux, SAE paper No. 2004-01-2996, 2004.
- [20] C. Eigelmeier, H. Lettmann, G. Stiesch, G.P. Merker, A detailed phenomenological model for wall heat transfer prediction in diesel engines, SAE paper 2001-01-3265, 2001.
- [21] M. Andreae, H.L. Fang, K. Bhandary, Biodiesel and fuel dilution of engine oil, SAE paper 2007-01-4036, 2007.
- [22] X. Lü, H. Yuchun, J. Libin, Z. Linlin, H. Zhen, Heat release analysis on combustion and parametric study on emissions of HCCI engines fuelled with 2-Propanol/n-heptane blend fuels, *Energy & Fuels* 20 (2006) 1870–1878.
- [23] M. Torres, F.J. Jimenez-Espadafor, T. Sanchez, Combustion characteristics, emissions and heat release rate (HRR) Analysis of a homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine with EGR fuelled with diesel, *Energy & Fuels* 23 (2009) 2396–2404.
- [24] W. Marshall, L.G. Schumacher, S. Howell, Engine exhaust emissions evaluation of a Cummins L10E when fuelled with a biodiesel blend, SAE paper No. 952363, 1995.
- [25] W.H. Su, T.J. Lin, H. Zhao, Y.Q. Pei, Research and development of an advanced combustion system for the direct injection diesel engine, Proceedings of the IMechE, Part D: *Journal of Automobile Engineering* 219 (2004) 241–252.
- [26] Assessment and Standards Division (Office of Transportation and Air Quality of the US Environmental Protection Agency, A comprehensive analysis of biodiesel impacts on exhaust emissions, 2002, EPA420-P-02-001.
- [27] C.Y. Choi, G.R. Bower, R.D. Reitz, Effects of biodiesel blended fuels and multiple injections on DI diesel engines, SAE paper 970218, 1997.
- [28] K. Sison, N. Ladomatos, H. Song, H. Zhao, Soot generation of diesel fuels with substantial amounts of oxygen-bearing compounds added, *Fuel* 86 (2007) 345–352.



Contents lists available at ScienceDirect

Energy Conversion and Management

journal homepage: www.elsevier.com/locate/enconman

Numerical study of HCCI combustion fueled with diesel oil using a multizone model approach



José Antonio Vélez Godiño*, Miguel Torres García, Fco José Jiménez-Espadafor Aguilar, Elisa Carvajal Trujillo

Thermal Power Group, Department of Energy Engineering, University of Seville, Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Sevilla, Camino de los Descubrimientos, s/n, 41092 Sevilla, Spain

ARTICLE INFO

Article history:
Received 28 May 2014
Accepted 19 October 2014

Keywords:
HRR (heat release rate)
EGR (exhaust gas recirculation)
HCCI (homogeneous charge compression ignition)
In-cylinder NO_x

ABSTRACT

The main goal of this study is to analyze the potential of a *multi-zone combustion modeling* to simulate the homogeneous charge compression ignition (HCCI) in a process using mineral diesel fuel. The *multi-zone combustion modeling* consists of several volumes, named zones, that are located in fixed positions inside the combustion chamber and takes as homogeneous the composition and temperature for each volume being the pressure the same for all the zones. The start of combustion and its development were considered through specific formulations that were fitted to the model through a comparison between combustion chamber pressure measurements and model results. The model was applied to the HCCI combustion mode with both early and late injection, in the latter case with high turbulence intensity, and showed a very good capability for process simulation. The model also included the kinetics of NO_x and CO formation and gave data that were close to the experimental results.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The HCCI has a big potential for NO_x, soot and smoke emissions [1] reduction. This technology is based on the auto-ignition [2] process of a homogenous air–fuel mixture without the need of an external device to achieve ignition. Being possible, at least theoretically, the combustion of almost any gaseous or liquid fuel as petrol [3], diesel, H₂ or biofuels, just to mention some of the most popular. The lack of an external device to achieve ignition involves the control of the ignition process by the chemical-kinetics oxidation mechanisms.

Diesel-fueled HCCI can be listed into three major categories depending on the fueling technique. The last two methodologies have been studied in this work:

1. Premixed HCCI, where the fuel is injected with the air at the intake [4]. This method is mainly used with petrol fuel.

2. Early direct-injection HCCI, in which fuel is injected in-cylinder in advance to TDC so that a homogeneous charge can be accomplished prior to auto-ignition [5].
3. Late direct-injection HCCI, in which fuel is injected later than in conventional diesel combustion, with high swirl levels and EGR [5] that allow mixture homogenization, rapid mixing and enough time delay for mixing.

Big efforts have been made in the last decade in different technical field [6] with computational fluid dynamics (CFD) and combustion multi-zone models also towards HCCI combustion [7]. CFD models are a powerful tool for analyzing fluid processes including combustion. However it is time consuming and the results are very sensitive to initial conditions. The multi-zone model is faster and it allows a deeper insight of the mechanisms that control this combustion process. Moreover, CFD combustion code has to use also the same sub-models used in multi-zone model. Heat transfer from combustion gases to cylinder walls, piston and head are also simulated with CFD using the same sub-models used in the multi-zone model. In this regard, you should have to consider that charge temperature is the most controlling variable of the HCCI combustion process and that heat losses can account for more than 30% of the energy liberated by fuel.

In the last decade, a considerable amount of research effort has been directed towards the investigation of HCCI combustion and,

Abbreviations: ATDC, after top dead center; BDC, bottom dead center; BTDC, before top dead center; CFD, computational fluid dynamics; DI, direct injection; EGR, exhaust gas recirculation; EVC, exhaust valve closing; EVO, exhaust valve opening; HCCI, homogeneous combustion compression ignition; HRR, heat release rate; IVO, inlet valve opening; IVC, inlet valve closing; N, number zones; RPM, revolutions per minute; S, chemical species; TDC, top dead center.

* Corresponding author. Tel.: +34 954486111; fax: +34 954487243.

E-mail address: jose.velez@abeinsaepc.abengoa.com (J.A.V. Godiño).

Nomenclature

H_p	lower heating value (J/kg)	\dot{Q}_i	heat flux (W)
m	mass (kg)	L	characteristic length (m)
\dot{m}	mass flow (kg/s)	v	gas velocity (m/s)
C_V	specific heat capacity at constant volume (J/kg K)	α_{scaling}	scaling factor
C_P	specific heat capacity at constant pressure (J/kg K)	C_1, C_2	constant
T	temperature (K)	E_{ACT}	activation energy (J/kg)
t_{IG}	combustion start (s)	τ	delay ignition (s)
P	pressure (N/m ²)	ω	average angular speed (rad/s)
V	volume (m ³)	θ	crankshaft angle (rad)
R	ideal gas constant (J/kg K)		
Q_w	wall heat loss (kJ)		

in particular, diesel HCCI [8–10] where the difficulty in achieving diesel HCCI combustion has been highlighted. The absence of an ignition mechanism has led researchers to explore a range of control strategies. However, to carry out this research solely in the laboratory would be inefficient, expensive and impractical since there are numerous variables that have complex interactions. Fundamental tools, such as CFD or combustion multi-zone models, need to be applied in order to provide an insight into the combustion process. Codes of this nature are computationally very intensive and usually require some simplifications to expedite the solution while attempting to maintain accuracy. Fully coupled CFD/kinetic models have employed a number of different combustion methodologies. Kusaka and Daisho [11] made no explicit modification to the reaction rate due to mixing; the only mixing considered to occur during combustion was that normally calculated by the CFD code. Results with a detailed kinetic scheme showed a more rapid combustion event than in the experiment. However, the relatively coarse grid that was used meant that the mass in colder zones could have been underestimated. Kong et al. [12] coupled the KIVA-3V CFD code with kinetics modified for turbulence effects and found a similar effect; i.e., when a turbulence effect was not used, a higher energy release rate was predicted than was found experimentally. All of these models suffer from a major drawback: the huge computational load, which precludes the efficient and rapid analysis of the HCCI process.

In the present study an aforementioned multi-zone model is used for the simulation of the closed part of the cycle of an HCCI engine and validated with experimental results [13,14]. Changes in the mixture composition in each zone due to combustion are determined using the governing equations. The global HRR is evaluated from the instantaneous release of energy during combustion for each zone.

For the heat release rate (HRR) a law to model the HCCI process was used. The parameters concerning this law were suited by an optimization process to allow the combustion chamber pressure given by the model to be fitted to the experimental data.

Since the CFD models are able to predict the fluid motion in a detailed way, these and their hybrids are of a high interest for supplementary investigations in exchange of a higher computational load [15]. CFD results could be compared to those resulting from the multi-zone approach presented in this work. These issues are the goals of oncoming researches.

2. Experimental methodology

The experimental results of this work are based on a test set up to run the naturally aspirated [16], four stroke, single cylinder DI diesel engine DEUTZ FL1 906, modified to operate in HCCI mode. In DI combustion mode, the original engine fueled with diesel fuel had a rated power of 11 kW at 3000 rpm and maximum torque of

45 Nm at 2100 rpm. The original engine configuration was modified with the following subsystems/adjustments: independent control of EGR [17], intake air pre-heating (not used in this work), start of injection 45° BTDC for early injection and 10° BTDC for late injection with high swirl through the bowl in piston and an increase of the maximum injection pressure up to 650 bar. This change in the injection pressure improves mixture homogeneity increasing the surface to volume ratio of the fuel drops and thus promoting faster fuel evaporation. In addition, reduction in the injection period was achieved. The main characteristics of the modified engine to run in HCCI combustion mode are shown in Table 1 and the experimental installation is represented in Fig. 1. In order to control the HCCI combustion process, exhaust gases were cooled down close to ambient temperature before mixing with inlet air. EGR was calculated as follows:

$$EGR(\%mass) = \frac{\dot{m}_{EGR}}{\dot{m}_{EGR} + \dot{m}_{Air}} \times 100 \quad (1)$$

For the experimental tests the engine started from initial load condition without EGR and with fixed injected fuel as well as engine speed. The experimental procedure then involved increasing the EGR percentage while keeping the intake temperature constant.

3. Model description

In this study, a thermodynamic multi-zone model has been developed in order to analyze and evaluate the parameters associated with an analytical HRR law. The combustion chamber is divided into N zones, being each zone contemplated as a reactor with perfect mixture and variable volume, free temperature, mass and chemical composition distributions (see Fig. 2) and with the same pressure in all zones. The model considers heat losses through the cylinder liner and engine head. The volume for each zone changes through all the engine as the cycle evolves according to a user-defined criteria.

In the developed multi-zone model, the combustion chamber is considered as a group of N zones and S chemical species where each zone is defined by $(4+S) \cdot N$ independent parameters. The model uses eight chemical species and it has $12 \cdot N$ independent variables.

The variables considered in the model with N independent zones are shown in Table 2.

The variables outlined above are related through a system of linear differential equations, although some simplifications are required since it is well known to exist interactions of great complexity between the physical and the chemical phenomena throughout the combustion process. The aforementioned equations are shown in Table 3.

Table 1
Characteristics of the modified Deutz FL1 906 engine.

Type	DI 4 stroke one cylinder
Cylinder displacement	708 cm ³
Bore	95 mm
Stroke	100 mm
Compression ratio	16:1
Piston bowl configuration (Bore/bowl diameter)	High swirl chamber (95/34.5)
Nozzle opening pressure	300 bar
Number of injector holes	5
Injector hole diameter	0.26 mm
Intake valve opening (IVO)/closing (IVC), after TDC	-2°/216°
Exhaust valve opening (EVO)/closing (EVC), before BDC	36°/-182°
Lubricating	Gear oil pump
Injection pump	Mechanical
Refrigeration	By air, with a fan driven by the flywheel

Mass and energy balances and thermal state equations for each chemical species have been applied to each zone of the model as discussed below.

3.1. First principle of thermodynamics

The energy balance was applied to the volume defined by each zone. The first principle of thermodynamics applied to the control volume formed by each different zone of the combustion chamber is [18]:

$$\dot{m}_i \cdot C v_i \cdot (T_i - T_0) + m_i \cdot \dot{C} v_i \cdot (T_i - T_0) + m_i \cdot C v_i \cdot \dot{T}_i - \dot{m}_i^{IN} \cdot C p \cdot (T - T_0) + \dot{m}_i^{OUT} \cdot C p_i \cdot (T_i - T_0) = -P \cdot \dot{V}_i + \dot{Q}_i \quad (2)$$

where m_i and \dot{m}_i are the mass and net mass flow in zone i , \dot{m}_i^{IN} is the mass flow into zone i and \dot{m}_i^{OUT} is the mass flow out from zone i , $C v_i$ and $C p_i$ are the specific heat capacities at constant volume and pressure, respectively, T_i is the temperature in zone i , T_0 is the reference temperature, P is the in cylinder pressure and \dot{Q}_i is the heat flux

through the chamber walls plus the power released by the fuel in each zone. The term $\dot{C} v_i$ is null when there is no change in chemical species, this is, just before injection and once combustion has finished.

3.2. Thermal state equation and mass balance

Pressure is the same for all volumes and it is calculated at each CA step using the ideal gas relation for every species:

$$-\dot{P} \cdot V_i + \dot{m}_i \cdot R_i \cdot T_i + m_i \cdot \dot{R}_i \cdot T_i + m_i \cdot R_i \cdot \dot{T}_i = P \cdot \dot{V}_i \quad (3)$$

This model considers for the thermodynamic variables (P , T , m , V) a dependency on time and position of each zone with the exception of P , which is the same in all zones for each crank angle step. The model includes diffusive mass and heat transfer models to the cylinder wall, considering mass composition perfectly homogeneous in each zone. The term \dot{R}_i is null when there is no change in chemical species, this is, just before injection and once combustion has finished.

The total mass in the cylinder is the sum of the masses of each zone:

$$\sum_{i=1}^N \dot{m}_i = \dot{m}_{cyl} = \sum_{i=1}^N \frac{P_{cyl} V_i}{R_i T_i} \quad (4)$$

Considering the configuration of the zones, the mass flow between adjacent zones:

$$\dot{m}_i - \dot{m}_i^{IN} + \dot{m}_i^{OUT} = 0 \quad (5)$$

The heat losses model is written as follows:

$$\frac{dQ_w}{d\theta} = A_c h_c (T_g - T_w) \frac{1}{\omega} \quad (6)$$

The heat transfer coefficient h_c (W/m² K) is based on the correlation formula given by Junseok Chang [19]. Q_w is the wall heat loss, θ is the crankshaft angle(rad), A_c is the area in contact with

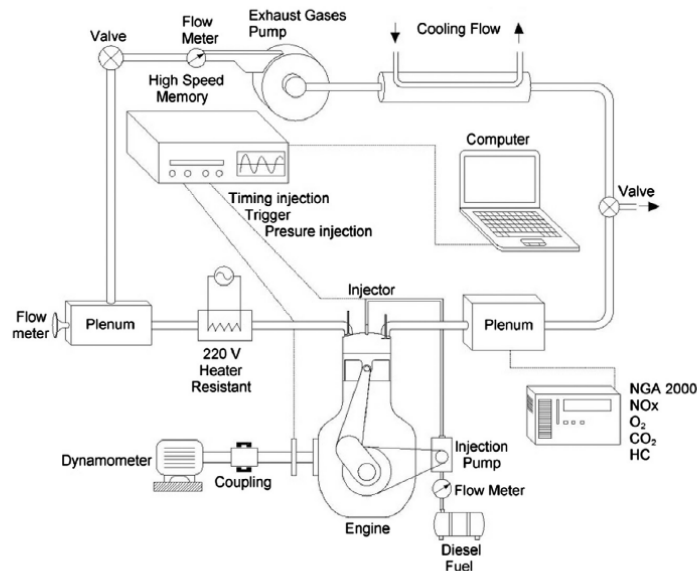


Fig. 1. Schematic experimental installation.

the gases, T_g (K) is the gas temperature in the outer zone, T_w (K) is the cylinder wall temperature and ω (rad/s) is the average angular speed. The global heat transfer coefficient is written as follows:

$$h_c(t) = \alpha_{scaling} L(t)^{-0.2} P(t)^{0.8} T(t)^{-0.73} v(t)^{0.8} \quad (7)$$

where L is a characteristic length, P and T are the outer zone pressure and temperature, respectively, v is the gas velocity and a scaling factor $\alpha_{scaling}$ is used for tuning the coefficient to match a specific engine geometry. Combustion-induced gas velocity is a function of the difference between motoring and firing pressure [20].

$$v(t) = C_1 \bar{v}_p + \frac{C_2}{6} \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (P - P_{motoring}) \quad (8)$$

The purpose of this equation is to maintain velocity at a constant rate at the compression–expansion periods of the cycle, and then to impose an abrupt velocity rise once the combustion pressure deviates from the motoring pressure. The subscript r stands for a reference crank angle, such as the closure of the intake valve. C_1 and C_2 are constants that are fitted depending on the engine nature, although these constants do have physical units [18].

3.3. Start of combustion model

Start of combustion is modeled with the functional law [21], for the determination of the ignition delay at each zone it is adopted a mechanism similar to the one used to estimate the ignition delay in DI diesel engines. The ignition delay, in each zone i , is defined as the time interval between inlet valve closing and combustion initiation:

$$\tau_i = A_D \cdot \rho_i^{B_D} \cdot [O_2]_i^{C_D} \cdot [Fuel]_i^{D_D} \cdot EXP\left(\frac{-E_{ACT,D}}{R \cdot T_i}\right) \quad (9)$$

Combustion starts at t_{iC} when:

$$\int_0^{t_{iC}} \frac{1}{\tau} = 1 \quad (10)$$

where A_D , B_D , C_D , D_D are obtained experimentally, ρ_i is the density in zone i , $E_{ACT,D}$ is the activation energy, $[O_2]_i$ and $[Fuel]_i$ are the molar concentrations of oxygen and fuel, respectively, in zone i being 0 the instant of inlet valve closure.

3.4. Analytical law for HRR in HCCI combustion mode

The fuel consumption rate (kg/(s m³)) is estimated using an exponential expression of the form [20–22]:

$$\Delta m_i^{COM} |^{FUEL} = A_C \cdot \rho_i^{B_C} \cdot [O_2]_i^{C_C} \cdot [Fuel]_i^{D_C} \cdot EXP\left(\frac{E_{ACT,C}}{R \cdot T_i}\right) \quad (11)$$

Table 2
Variable Specifications.

Variable	Number of variables
Pressure	1
Temperature	N
Mass in each zone	N
Mass flow between neighboring zones	$N - 1$
Fuel mass	N
Oxygen mass	N
Nitrogen mass	N
Carbon dioxide mass	N
Water mass	N
Carbon monoxide mass	N
Nitric oxide mass	N
Nitrogen dioxide mass	N
	12- N total variables

Table 3
Equation Specifications.

Equations	Number of equations
First principle of thermodynamics [11]	N
Thermal state equation [11]	N
Total charge mass balance	N
Fuel mass balance	N
Oxygen mass balance	N
Nitrogen mass balance	N
Carbon dioxide mass balance	N
Water mass balance	N
Carbon monoxide mass balance	N
Nitric oxide mass balance	N
Nitric dioxide mass balance	N
	12- N total equations

where A_C , B_C , C_C , D_C are shape factors (combustion rate constants) to be obtained experimentally through an optimization process. This equation is applied with the fuel, oxygen, composition density and temperature at each zone and therefore allows the development of the combustion process on them. Multiplication of the instantaneous fuel consumption for each zone by the lower heating value, H_p , gives HRR. Summing up HRR for each zone at each time yields HRR for the whole combustion process.

3.5. NO_x and CO emission models

The exhaust gases contain small amounts of oxides of nitrogen and CO; the relative amounts of these gases depend on the

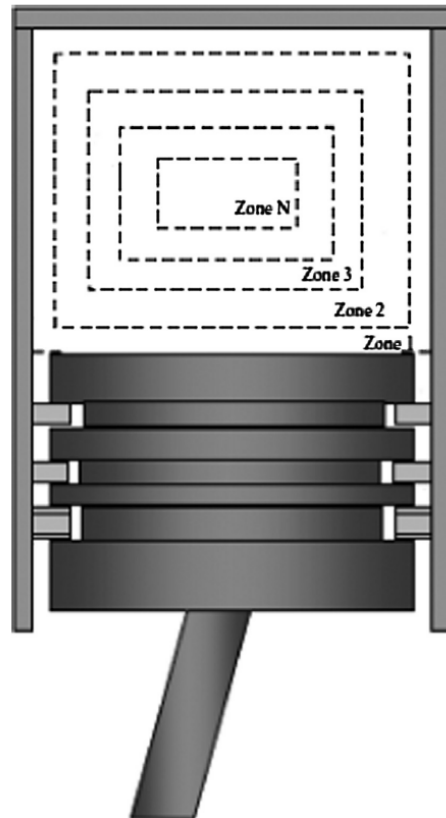


Fig. 2. Geometric configuration of the multi-zone model.

Table 4
NO_x formation reactions.

Equation number	Chemical reaction
1	N + NO = N ₂ + O
2	N + O ₂ = NO + O
3	N + OH = NO + H
4	NO + HO = NO ₂ + H
5	NO ₂ + O = NO + O ₂
6	NO ₂ + H = NO + OH
7	NO + O + M = NO ₂ + M
8	N + CO ₂ = NO + NO
9	N ₂ O + O = NO + NO
10	N ₂ O + O = N ₂ + O ₂
11	N ₂ O + H = N ₂ + OH
12	N ₂ O + M = N ₂ + O + M
13	N ₂ O + OH = N ₂ + HO ₂

combustion process and operating conditions. Usually the concentrations in the exhaust for various pollutant species differ significantly from calculated equilibrium values showing the importance of chemical kinetics in the process of formation of pollutant. The mechanism of NO_x formation, i.e. NO and NO₂, from atmospheric nitrogen has been studied extensively and this is implemented in the model [23,24]. The formation of NO_x and CO is described by the chemical reactions listed in Table 4.

In hydrocarbon flames for the premixed case, the CO concentration raises very fast to a maximum value in the flame zone, generally reaching higher values than those obtained at the equilibrium for the adiabatic combustion of the reactant mixture. The CO formation mechanism can possibly be modeled by a one-step reaction [22,23] applied in every zone where a reaction between the hydrocarbon fuel and molecular oxygen is produced to form CO and H₂ and empirically calculated by:



This approach that is a quasi-global model has been used with success to model the energy release rates in the combustion process for many hydrocarbon fuels [25]. The CO from the combustion process is oxidized to CO₂ at a relatively slow rate in comparison to CO formation. The reaction for oxidation in hydrocarbon flames is:



where the rate constant is well known for this reaction since it has been measured in numerous investigations [24]. The resolution of the CO emission equation is analogous to that for NO_x emission.

4. Strategy for combustion process identification

Both the ignition delay and fuel instantaneous consumption evolution are modeled using mathematical functions [21] and these satisfactorily compensate for the lack of a kinetic mechanism to reproduce diesel fuel combustion.

In order to equate the referred mathematical correlations to the proposed HCCI multi-zone model, it is necessary to tune the five different coefficients previously discussed for both functional laws. To accomplish this task has been used a specific methodology to solve non-linear least-squares problems [26], considering the variations between the experimental and the modeled in-cylinder pressure evolution as the objective function to be minimized. As a particular aspect, the whole error evolution was not considered in the optimization process, but only the data associated with the interval in which combustion takes place. Adoption of this procedure allows more accurate results, since dissipation errors in compression and expansion phases are avoided.

After facing different problems – mainly related to computing capacity and uncontrollable dispersion of results – the optimization process was restricted only to the proportionality factor of each correlation, considering the values previously proposed by other authors for the other parameters involved in the functional law, the optimization of which is described in this section:

$$MIN_{A_C, A_D} \left[\sum (P(A_C, A_D) - P_{EXP})^2 \right] \quad (14)$$

where A_C and A_D are proportionality coefficients associated with combustion and delay functional laws, respectively, P is the modeled in-cylinder pressure and P_{EXP} is the measured experimental in-cylinder pressure. The modeled in-cylinder pressure applies from the instant of inlet valve closure (IVC) until the exhaust valve opening (EVO) therefore the simulation model operates during that part of the engine cycle where there is not fluid exchange between inlet or outlet ports.

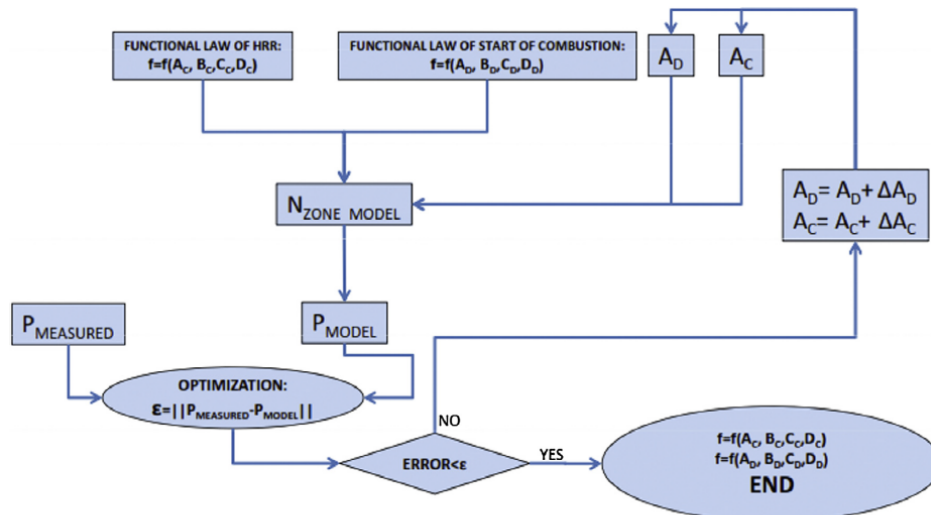


Fig. 3. Scheme of the optimization procedure.

Table 5
The percentage volume of each zone.

Sub-volumes	Computational time (s)
5	45
10	131
20	321
50	1240
100	4062

The scheme for the numerical solution procedure to obtain A_c and A_D , with the other parameters kept constant, is shown in Fig. 3. The model is a direct type: the start is the pressure chamber curve obtained from the functional laws for the start of combustion and HRR and the end is characterized by the optimized parameters. The computation time can be increased in the optimization process since a direct model is being solved in every iteration and the rate of convergence highly depends on the initial conditions settled and the accuracy. The dominant factor in computation time are the initial conditions.

The influence of the number of sub-volumes into which the combustion chamber is divided on the computational time using a 2.00 GHz processor is shown in Table 5.

The parameter values corresponding to two functional laws with early injection are shown in Table 6. Analogous results were obtained for late fuel injection. As it can be observed from Table 6 the parameters B_C, B_D, C_C, C_D, D_C and D_D remain constant and A_C and A_D are the controlling parameters that allow good fitting in the optimization process.

5. Validation and results

The main purpose of the present work was to develop a multi-zone model for performances prediction and analysis of

HCCI combustion mode (chamber pressure, HRR and emissions) characteristics with early and late injection with diesel fuel.

The relevance of the number of zones (see Fig. 2) on the parameters to be optimized (A_c and A_D) was tested for two operational conditions. It was observed that from $N = 10$ the optimized parameters remain almost unchanged. Given the huge positive relationship between the number of zones and computational time, this ratio was fixed at 10 for all load conditions.

In this section has also been evaluated the HRR corresponding to a zero dimensional model, this is, considering only one volume defined by the piston and the cylinder; this means in terms of the multi-dimensional model $N = 1$. When this is the case, it is not required optimization process and the HRR is evaluated feeding the model with the measured combustion pressure [27]. The HRR obtained through this procedure is named experimental.

5.1. Validations with early injection

The mass distribution and mass flow between zones at 1800 rpm and a fuel–air ratio of 0.34 with early fuel injection (45° BTDC) are shown for the optimized results in Table 6 and Table 7, showing the percentage volume of each zone. Most of the mass is located in the center zone (zone 10) at IVC as it can be observed in Fig. 4. During compression, the mass flows from the center zone to the outer zones. Fig. 5 shows that due to the combustion of the hotter inner zones the mass is transferred towards the outer zones. This is the explanation given for the rapid mass increase observed in the outer zones in the first stages of the main combustion process. When combustion starts in the outer zones the mass flows from the outer zones towards the core. The most outer zone does not reach combustion due to the low temperature and therefore the accumulative mass grows in all cases.

The temperature field obtained by the model with early fuel injection at 1800 rpm with a fuel–air ratio of 0.34 is shown in Fig. 6. In the external zone, a rapid increase of the temperature

Table 6
Parameters of the functional law with early injection (45° BTDC).

RPM	Fuel–air ratio	EGR (% mass)	Combustion parameters				Start of combustion parameters			
			A_C	B_C	C_C	D_C	A_D	B_D	C_D	D_D
1200	0.304	0.00	71.043	0	1.5	1.3	0.004005	0.13	−0.53	−0.35
1200		45.00	71.974	0.004451						
1200		65.00	58.926	0.004889						
1800	0.209	0.00	256.358	0	1.5	1.3	0.001689	0.13	−0.53	−0.35
1800		32.00	194.627	0.0010567						
1800		40	114.569	0.000801						
1800	0.341	0.00	311.255	0	1.5	1.3	0.003004	0.13	−0.53	−0.35
1800		20.00	142.695	0.006519						
1800		35.00	117.817	0.004664						
1800	0.581	0.00	582.071	0	1.5	1.3	0.001676	0.13	−0.53	−0.35
1800		15.00	343.067	0.002752						
1800		22.00	225.960	0.003004						
1800	0.21	28.00	47.341	0.006809	1.5	1.3	0.002386	0.13	−0.53	−0.35
2100		0.00	351.610	0.002403						
2100		12.00	262.511	0.002573						
2100	0.321	21.00	207.879	0.002687	1.5	1.3	0.002687	0.13	−0.53	−0.35
2100		30.00	187.865	0.002718						
2100		40.00	167.249	0.004808						
2100	0.489	0.00	293.815	0	1.5	1.3	0.004808	0.13	−0.53	−0.35
2100		25.00	145.366	0.007208						
2100		35.00	2778.034	0.007208						
2100	0.755	0.00	650.104	0	1.5	1.3	0.003364	0.13	−0.53	−0.35
2100		20.00	356.010	0.004005						
2100		30.00	168.690	0.004653						
2100	0.755	36.00	129.931	0.006408	1.5	1.3	0.004652	0.13	−0.53	−0.35
2100		0.00	339.780	0.005718						
2100		11.00	140.599	0.010194						
2100	0.755	18.00	85.586	0.011214	1.5	1.3	0.011214	0.13	−0.53	−0.35
2100		24.00	80.283	0.018423						
2100		34.00	84.154	0.018423						

Table 7
Computational time versus zone number.

Zone	Volume fraction (%)
1	1
2	1
3	1
4	1
5	1
6	2
7	6
8	17
9	30
10	40

can be noticed during combustion of the rest of the zones. This change is due to the combined effects of the heat release, mass transfer and pressure increase over the rest of the zones. All zones

except the external zone reach a maximum combustion temperature above 1000 K during this period and almost all zones remain above this temperature 20° ATDC.

A comparison was made between the experimental and the calculated in cylinder pressure with advanced fuel injection (45° BTDC) for fuel–air ratios of 0.34 and 0.45, which in turn correspond to different EGR mass percentages, at engine speeds of 1800 and 2100 rpm. Measured and simulated combustion pressure and both, the experimental HRR and the simulated HRR from the multidimensional model are shown in Figs. 7 and 8. The results show a good match between the experimental and numerical results for all the EGR conditions. The model is able to fit the maximum pressure, the angle of start of combustion, the pressure ramp and the pressure down for any EGR rate. The HRR from the multi-dimensional model yields the expected heat release rate of the HCCI combustion: a rapid release of the energy content of the fuel corresponding to the rapid combustion of the premixed air–fuel

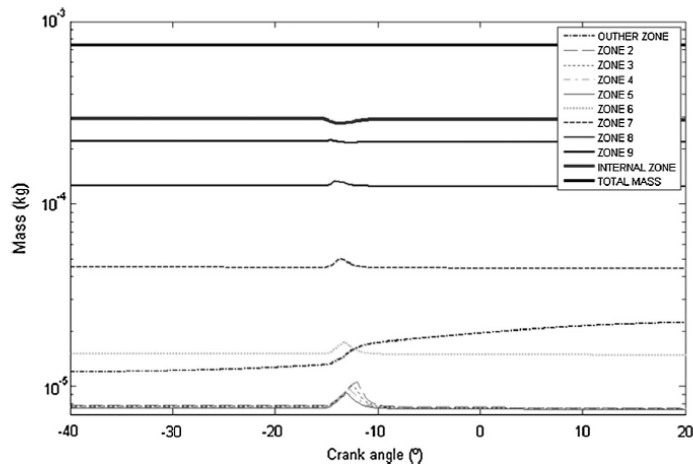


Fig. 4. Mass accumulated in zones during combustion at 1800 rpm and a fuel–air ratio of 0.34.

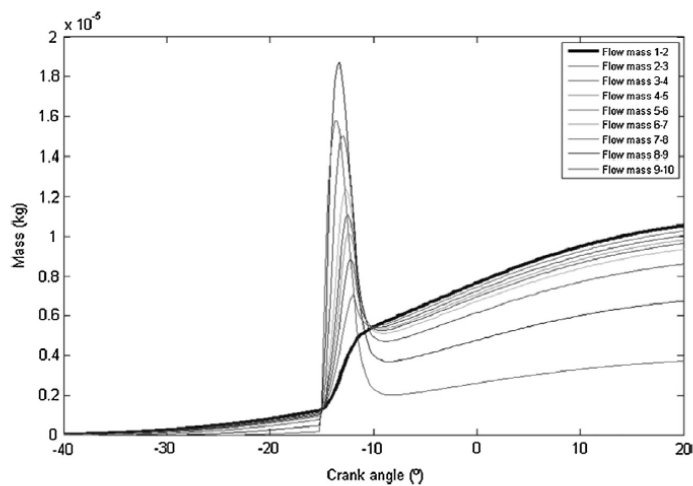


Fig. 5. Mass flow between zones during combustion at 1800 rpm and a fuel–air ratio of 0.34.

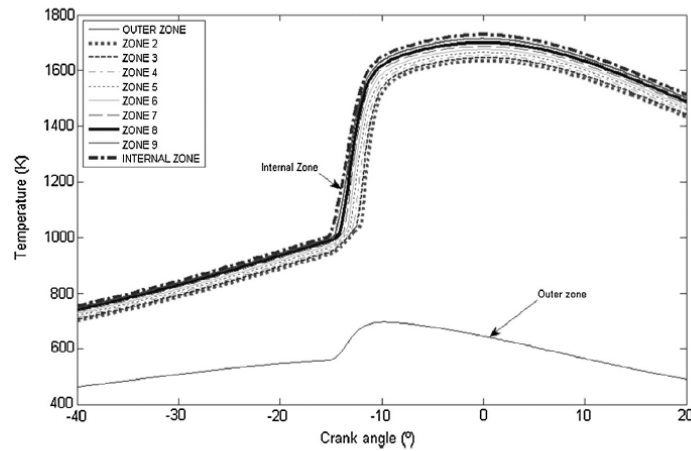


Fig. 6. Temperature field obtained from the multi-zone model simulation at 1800 rpm and a fuel-air ratio of 0.34.

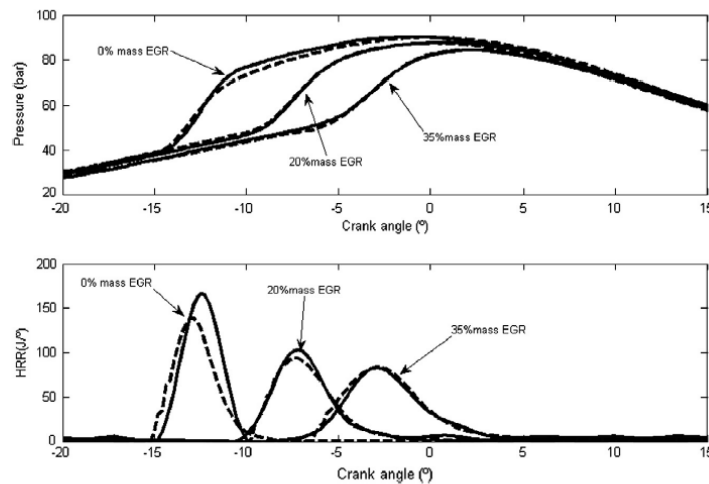


Fig. 7. Comparison of experimental (solid line) and calculated (dashed line) pressure traces and HRR at 1800 rpm and a fuel-air ratio of 0.34. Fuel injected 45° BTDC.

mixture. The start of combustion delay produced by the EGR is clearly captured by the model, which confirms the huge effect of charge temperature on the HCCI process. In this regard it is interesting to highlight the effect of the fuel-air ratio on the start of combustion due to the higher charge temperature. For the same charge conditions, these are pressure and temperature that are directly related to the fuel-air ratio, $\Delta t_{\text{start combustion}}$ is almost constant. However, $\Delta \theta_{\text{start combustion}} \sim 2 \cdot \pi \cdot \text{RPM} / 60 \cdot \Delta t_{\text{start combustion}}$, is a hard function of RPM and therefore it is expected an angle delay increase when engine speed goes higher. Comparing start of combustion for 0% EGR at 1800 RPM, Fig. 7, and at 2100 RPM, Fig. 8, it can be appreciated that the start of combustion angle delay is higher for the lower engine speed. This effect is mainly due to the higher fuel-air ratio at 2100 RPM and it is completely captured by the model.

Regarding the comparison between experimental and multi-dimensional model of the HRR, it is observed that both are quite similar. This can be interpreted as the real combustion process

does not differ hardly from a homogenous charge process, being most of the charge at quite similar conditions – except the outer zone. Moreover and because the finer structure of the chamber volume, it is expected that results from the multi-dimensional model are closer to the real HRR.

On increasing the EGR rate, the charge temperature after mixing with inlet air does not raise since recirculated gases are cooled down to ambient temperature avoiding an early start of combustion with early injection and a reduction of in-cylinder trapped mass, which is accompanied by a reduction in the quantity of oxygen. The reduction of the EGR rate produces an advance in the start of combustion and therefore the increase of the cylinder pressure before TDC. This increases the amount of negative work before TDC and from a certain start of combustion crank angle, any higher engine torque requires higher amounts of fuel.

The exhaust measurements and the calculated emissions at EVO are shown in Table 8. All emissions are under predicted by about 5% for CO.

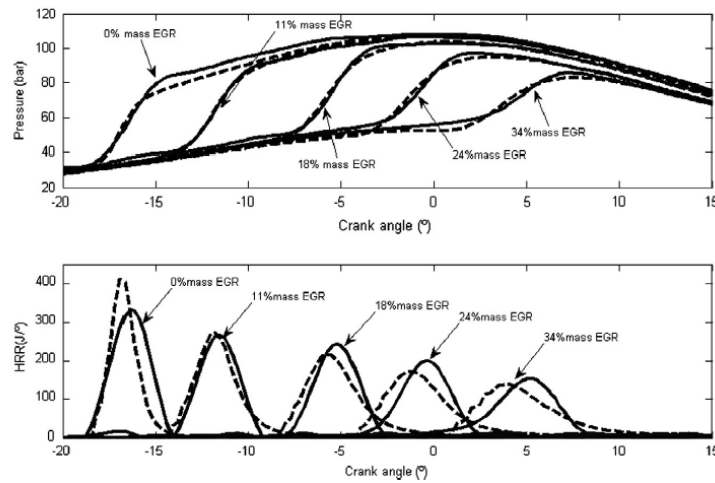


Fig. 8. Comparison of experimental (solid line) and calculated (dashed line) pressure traces and HRR at 2100 rpm and a fuel–air ratio of 0.45. Fuel injected 45° BTDC.

Table 8
Measured and calculated emissions, 2100 rpm, 0.45 fuel–air ratio and 45° ATDC fuel injection.

Species	%EGR (mass)	Measured (ppm)	Calculated (ppm)
CO	0	200	180
	11	280	251
	18	310	289
	24	420	395
	34	502	460
NO _x	0	300	340
	11	280	220
	18	185	115
	24	30	13
	34	26	8

can be seen in Figs. 9 and 10. The plots are for fuel–air ratios of 0.2 and 0.45, which correspond to different EGR mass percentages and engine speeds of 2100 and 2400 rpm, respectively. The results show a good match for combustion chamber pressure between the experimental and numerical results for all the EGR conditions. The model is able to fit the maximum pressure, the angle of start of combustion, the pressure ramp –underestimated– and the pressure down for any EGR rate. Maximum difference between the measured and the predicted combustion pressure is less than 2.3%. Difference between measured and predicted area of the pressure – crank angle curve between IVO (inlet valve opening) and EVC (exhaust valve closing) is 2.1%; this means that the indicated work is correctly evaluated by the model. For both engines speeds, increasing the EGR rate reduces charge temperature and therefore start of combustion is delayed. The calculated HRR from the multi-dimensional model follows a heat release rate pattern that partially differs to that expected for the HCCI combustion (as those observed in Figs. 7 and 8 in early injection): although there is a

5.2. Validations with late injection

Comparison of experimental and calculated cylinder pressures for the cases examined with delayed fuel injection (10° BTDC)

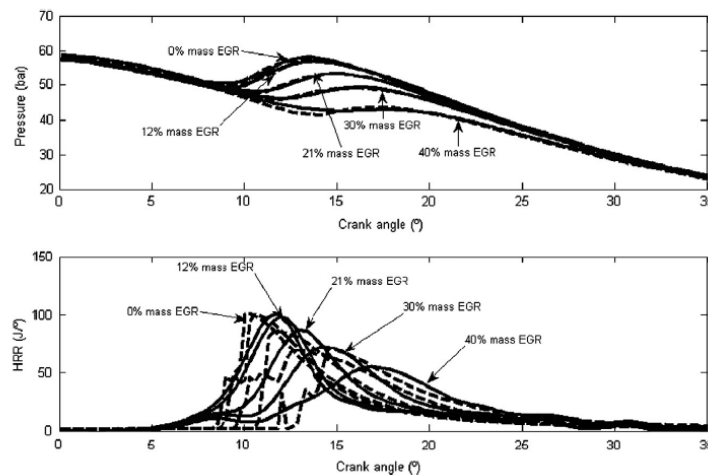


Fig. 9. Comparison of experimental (solid line) and calculated (dashed line) pressure traces and HRR at 2100 rpm for a fuel–air ratio of 0.20 with late injection. Fuel injected 10° BTDC.

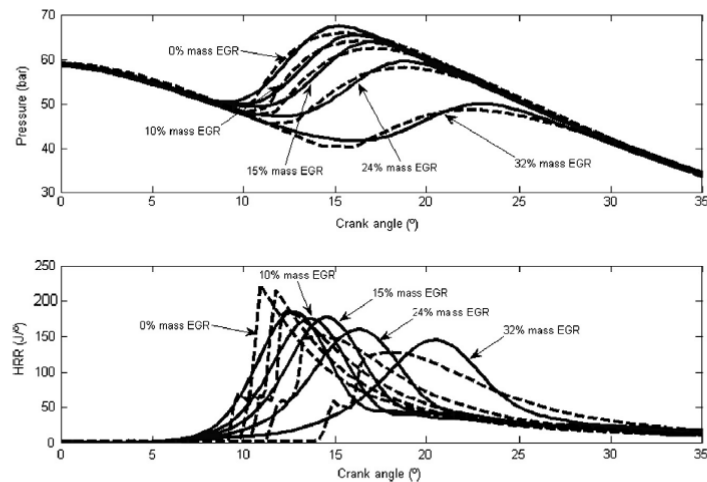


Fig. 10. Comparison of experimental (solid line) and calculated (dashed line) pressure traces and HRR at 2400 rpm and a fuel-air ratio of 0.45. Fuel injected 10° BTDC.

Table 9
Measured and calculated emissions, 2400 rpm, 0.45 fuel-air ratio and 10° ATDC fuel injection.

Species	%EGR (mass)	Measured (ppm)	Calculated (ppm)
CO	0	645	578
	10	896	713
	15	952	875
	24	1100	1352
	32	1600	1932
NO _x	0	373	468
	10	273	301
	15	208	245
	24	122	90
	32	69	43

rapid release of the fuel energy, the kick seen for all the HRR curves highlights a different pattern and therefore it is expected that a small part of the air-EGR-fuel mixture is not homogeneous. Comparing both types of injection strategies, it can be seen that start of combustion delay is roughly 30° for the early injection and close to 18° for the late injection. This huge reduction in the start of combustion delay is congruent with the observed HRR pattern for late injection and it can be stated that the performed late injection precludes gathering full homogenous charge. Nevertheless, increasing flow turbulence or changing the chosen injection angle for late injection could allow a completely homogeneous charge.

Regarding the comparison between experimental and multi-dimensional model of the HRR, it is observed that both present similar maximum but there is a mismatch for the start of combustion angle and for the first part of the combustion process. This can be interpreted as the real combustion process differs markedly from a homogenous charge process, being the charge non-homogeneous between zones. Considering these results, the expected combustion process has to be closer to a multi-zone structure than to the only one zone model.

The exhaust measurements and the calculated emissions at EVO are shown in Table 9. All emissions are under predicted by about 6% for CO.

As it has been shown in Figs. 9 and 10, EGR allows the control of the rate of combustion and to improve the reduction of NO_x as in early injection, but worsens engine power as result of the excessive

delay of the start of combustion giving an increase of specific fuel consumption in late injection (not shown).

6. Conclusions

A multi-zone numerical model for HCCI combustion mode is presented in this paper. The model predicts the performance of the HCCI engine in terms of combustion pressure, HRR, NO_x and CO emissions. Main combustion events as start of combustion angle, pressure gradient, maximum pressure –this is slightly underestimated– or indicated work match test measurements giving a proper estimation of the HRR. This follows the expected pattern for HCCI combustion mode characterized by a huge maximum of the heat release rate corresponding to the combustion of the homogeneous premixed charge. In this regard, start of combustion angle delay is almost double for early injection comparing to late injection giving to the later a not completely homogeneous charge. More intensive charge motion or different strategies for late injection should be analyzed in order reach full homogenous charge.

Regarding pollutant emissions model predictions of NO_x are well characterized, especially in the examined cases at low loads. The growth of NO_x with the engine load and the reduction with the increase of the EGR ratio is captured by the model. There exists a small difference between the experimental and the calculated values of load and EGR that can be explained with an underestimation of the wall quenching, as it is described by the multi-zone model.

The model also is capable of predicting CO emissions within an order of magnitude, despite the difference in the slopes between experimental and calculated CO emissions versus load and EGR. This difference is explained with an underestimation of the oxidation rate.

The developed model is found to be a useful tool in the study of HCCI combustion mode providing information for the development of strategies towards the control of the combustion process. Comparing to CFD models, the multi-zone model developed in this work runs very fast and it allows the study of different design solutions. In this regard, the most relevant output of the model is the temperature distribution inside the combustion chamber; changing cylinder diameter modifies temperature distribution and therefore the control of the ignition process.

Acknowledgements

This work is part of item DPI2013-46485-C3-3-R within the I+D+I National Plan in the period 2013-2016 and has been backed by the Spanish Government (Ministry of economy and competitiveness). The authors are grateful to the Ministry of Science and Education of Spain for their financial support.

References

- [1] Yao Mingfa, Zheng Zhaolei, Liu Haifeng. Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines. *Prog Energy Combust Sci* 2009;35:398–437.
- [2] Christensen M, Johansson B, Einewall P. Homogeneous charge compression ignition (HCCI) using isoctane, ethanol and natural gas – a comparison with spark ignition operation. *SAE Paper No. 972874*; 1997.
- [3] Cinar C, Can O, Sahin F, Serdar Yucesu H. Effects of premixed diethyl ether (DEE) on combustion and exhaust emissions in a HCCI-DI diesel engine. *Appl Therm Eng* 2010;30:360–5.
- [4] Kozarac D, Vuilleumier D, Saxena S, Dibble RW. Analysis of benefits of using internal exhaust gas recirculation in biogas-fueled HCCI engines. *Energy Conversion and Management*. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2014.04.085>.
- [5] Shuaiying M, Zunqing Z, Haifeng L, Quanchang Z, Mingfa Y. Early injection and late injection. Experimental investigation of the effects of diesel injection strategy on gasoline/diesel dual-fuel combustion. *Appl Energy* 2013;109:202–12.
- [6] Tan G, Glicksman LR. Application of integrating multi-zone model with CFD simulation to natural ventilation prediction. *Energy Build* 2005;37:1049–57.
- [7] Barths H, Felsch C, Peters N. Mixing models for the two-way-coupling of CFD codes and zero-dimensional multi-zone codes to model HCCI combustion. *Combust Flame* 2009;156:130–9.
- [8] Ganesh D, Nagarajan G. Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion of diesel fuel with external mixture formation. *Energy* 2010;35:148–57.
- [9] Jiménez-Espadafor FJ, García M Torres, Correa Herrero JA, Becerra Villanueva JA. Effect of turbulence and external exhaust gas recirculation on HCCI combustion mode and exhaust emissions. *Energy Fuels* 2009;23(9):4295–303.
- [10] Yang D, Wang Z, Wang J-X, Shuan S. Experimental and chemical kinetics analysis of active atmosphere with different fuels in HCCI combustion. *Energy Fuels* 2010;24:4872–8.
- [11] Kusaka J, Daisho Y. Multi-dimensional modeling combined with a detailed kinetics (Application for HCCI of Natural Gas). In: *Proc 5th COMODIA*. 2001. p. 330–6.
- [12] Kong SC, Marriot CD, Rutland CJ, Reitz RD. Experiments and CFD modeling of direct injection gasoline HCCI engine combustion. *SAE Paper No. 2002-01-1925*; 2002.
- [13] Yao M, Huang Ch, Zheng Z. Multidimensional numerical simulation on dimethyl ether/methanol dual-fuel Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) engine combustion and emission processes. *Energy Fuels* 2007;21:812–21.
- [14] Heywood JB. *Internal combustion engine fundamentals*. 3th ed. Singapore: McGraw-Hill Book Company; 1998.
- [15] Chang J, Orgun G, Zoran F, Assanis D, Kuo T-W, Najt P, et al. New heat transfer correlation for an HCCI engine derived from measurements of instantaneous surface heat flux. *SAE Paper No. 2004-01-2996*; 2004.
- [16] Torres M, Jiménez-Espadafor FJ, Sanchez T, Becerra JA. A new heat rate (HRR) law for homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion mode. *Appl Therm Eng* 2009;29:3654–62.
- [17] Li X, Xu Z, Guan Ch, Huang Z. Impact of exhaust gas recirculation (EGR) on soot reactivity from a diesel engine operating at high load. *Appl Therm Eng* 2014;68(1–2):100–6.
- [18] Komninou NP, Hountalas DT, Kouremenos DA. Description of in-cylinder combustion processes in HCCI engines using a multi-zone model. *SAE Technical Paper No. 2005-01-0171*; 2005.
- [19] Chang J, Filipi ZS, Tang-Wei K, Assanis DN, Najt PM, Rask RB. Investigation of mixture preparation effects on gasoline HCCI combustion aided by measurements of wall heat flux. *J. Eng. Gas Turbines Power* 2008;130(6). <http://dx.doi.org/10.1115/1.2943194>. 9 pages.
- [20] Bowman Craig T. Kinetics of pollutant formation and destruction in combustion. *Prog Energy Combust Sci* 1975;1:33–45.
- [21] Caton JA. The thermodynamic characteristics of high efficiency, internal-combustion engines. *Energy Convers Manage* 2012;58:84–93.
- [22] *Matlab®. High-Performance Numeric Computation and Visualization Software*. The Math Works Inc.; 1992.
- [23] Torres M, Jiménez-Espadafor FJ, Sanchez T. Experimental study of the performance of a modified diesel engine operating in homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion mode versus the original diesel combustion mode. *Energy* 2009;34:159–71.
- [24] Torres M, Jiménez-Espadafor FJ, Carvajal E, Becerra JA. Predictive modelling of a Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) engine with EGR fuelled with diesel. *Energy Fuels* 2009;23:5383–93.
- [25] Feng Hongqing, Zhang Chunhong, Wang Meiyang, Liu Daojian, Yang Xiaoxi, Lee Chia-fon. Availability analysis of n-heptane/iso-octane blends during low-temperature engine combustion using a single-zone combustion model. *Energy Convers Manage* 2014;84:613–22.
- [26] Wu H-W, Wang R-H, Ou D-J, Chen Y-Ch, Chen T-Y. Reduction of smoke and nitrogen oxides of a partial HCCI engine using premixed gasoline and ethanol with air. *Appl Energy* 2011;88:3882–90.
- [27] Torres M, Jiménez-Espadafor FJ, Sánchez T. Combustion characteristic, emissions and heat release rate analysis of a homogeneous charge compression ignition engine with exhaust gas recirculation fuelled with diesel. *Energy Fuels* 2009;23:2396–404.

Referencias

1. Stanton, D. "Systematic development of highly efficient and clean engines to meet future commercial vehicle greenhouse gas regulations". SAE Int. J. Engines. 2013. Vol. 6(3). doi:10.4271/2013-01-2421.
2. Internacional Energy Agency; "Key World Energy Statistics"; 2014.
3. U.S. Department of Energy, Energy Information Administration. "Annual energy outlook 2012". Report No. DOE/EIA-0383(2012). Washington, D.C. June 2012.
4. <https://www.dieselnet.com/standards/>.
5. Charalambides, A.G. "Advances in internal combustion engines and fuel technologies" (Chapter 4: Homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines.). Edited by Hoon Kiat Ng. ISBN 978-953-51-1048-4, 318 pages, Publisher: InTech, Chapters published March 20, 2013.
6. Yao M, Zheng Z, Liu H. "Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines". Prog Energy Combust Sci. 2009. Vol. 35: 398–437.
7. "CHEMKIN Tutorials Manual". CHEMKIN 10112, Reaction Design: San Diego. 2011.
8. Noguchi M, Tanaka T, Takeuchi Y. "A study on gasoline engine combustion by observation of intermediate reactive products during combustion". SAE paper 790840. 1979.

9. Mueller CJ, Martin GC, Briggs TE, Duffy KP. "An experimental investigation of in-cylinder processes under dual-injection conditions in a DI diesel engine". SAE Paper 2004-01-1843. 2004.
10. Kitamura T, Ito T, Senda J, Fujimoto H. "Mechanism of smokeless diesel combustion with oxygenated fuels based on the dependence of the equivalence ratio and temperature on soot particle formation". *Int J Engine Res*. 2002. Vol. 3: 223-248.
11. Potter M, Durrett R, Motors G. "Design for compression ignition high-efficiency clean combustion engines". 12th Annual diesel engine emissions reduction (DEER) conference. 2006.
12. Y. Sun, "Diesel combustion optimization and emissions reduction using adaptive injection strategies (AIS) with improved numerical models". PhD Thesis. University of Wisconsin-Madison. 2007.
13. Christensen M, Hultqvist A, Johansson B. "Demonstrating the multi fuel capability of a homogeneous charge compression ignition engine with variable compression ratio". SAE paper 1999-01-3679. 1999.
14. White CM, Steeper RR, Lutz AE. "The hydrogen-fuelled internal combustion engine: a technical review". *International Journal of Hydrogen Energy*. 2006. Vol. 31: 1292–1305.
15. Gomes Antunes JM, Mikalsen R, Roskilly AP. "An investigation of hydrogen-fuelled HCCI engine performance and operation". *International Journal of Hydrogen Energy*. 2008. Vol. 33: 5823–5828.
16. Smith JR, Aceves SM, Westbrook C, Pitz W. "Modeling of homogeneous charge compression ignition (HCCI) of methane". United States. doi:10.2172/630880. 1997.
17. Megaritis A, Yap D, Wyszynski ML. "Effect of inlet valve timing and water blending on bioethanol HCCI combustion using forced induction and residual gas trapping". *Fuel*. 2008. Vol. 87(6): 732–739.

-
18. Saxena S, Schneider S, Aceves S, Dibble R. "Wet ethanol in HCCI engines with exhaust heat recovery to improve the energy balance of ethanol fuels". *Appl Energy*. 2012. Vol. 98: 448–457.
 19. Yao MF, Huang C, Zheng ZL. "Multi-dimensional numerical simulation on dimethyl ether/methanol dual fuel HCCI engine combustion and emission processes". *Energy Fuel*. 2007. Vol: 21(2): 812–821.
 20. Kong SC "A study of natural gas/DME combustion in HCCI engines using CFD with detailed chemical kinetics". *Fuel*. 2007. Vo. 86(10): 1483–1489.
 21. Jothi NKM, Nagarajan G, Renganarayanan S. "Experimental studies on homogeneous charge CI engine fueled with LPG using DEE as an ignition enhancer". *Renew Energy*. 2007. Vol. 32(9): 1581–1593.
 22. Szybist JP, McFarlane J, Bunting BG. "Comparison of simulated and experimental combustion of biodiesel blends in a single cylinder diesel HCCI engine". SAE paper 2007-01-4010. 2007.
 23. Lu XC, Qian Y, Yang Z, Han D, Ji J, Zhou X et al. "Experimental study on compound HCCI (homogenous charge compression ignition) combustion fuelled with gasoline and diesel blends". *Energy*. 2014. Vol. 64: 707-718.
 24. Lu XC, Han D, Huang Z. "Fuel design and management for the control of advanced compression-ignition combustion modes". *Progress in Energy and Combustion Science*. 2011. Vol. 37: 741-783.
 25. Dec JE. "A computational study of the effects of low fuel loading". SAE paper 2002;01-1309. 2002.
 26. Dec JE. "Advanced compression-ignition engines- understanding of the in-cylinder processes". *Proceeding of the Combustion Institute*. 2009. Vol. 32: 2727-2742.
 27. Bendu H, Murugan S. "Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion: mixture preparation and control strategies in diesel

- engines". *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2014. Vol. 38: 732-746.
28. US Department of Energy. "A report to the U.S. Congress: homogeneous charge compression ignition (HCCI) technology". 2001.
29. Schiessl R, Maas U. "Analysis of end gas temperature fluctuations in an SI engine by laser-induced fluorescence". *Combust Flame*. 2003. Vol. 133:19–27.
30. Stanglmaier RH, Li J, Matthews RD. "The effect of in-cylinder wall wetting location on the HC emissions from SI engines". SAE paper 1999-01-0502. 1999.
31. Kumar P, Rehman A. "Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion engine: a review". *IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering*. 2014. Vol. 11: 47-67.
32. Onishi S, Jo SH, Shoda K, Jo PD, Kato S. "Active thermo-atmosphere combustion (ATAC) – a new combustion process for internal combustion engines". SAE paper 790501. 1979.
33. Noguchi M, Tanaka T, Takeuchi Y. "A study on gasoline engine combustion by observation of intermediate reactive products during combustion". SAE paper 790840. 1979.
34. Najt PM, Foster DE. "Compression-ignited homogeneous charge combustion". SAE Paper 830264. 1983.
35. Thring RH. "Homogeneous-charge compression-ignition (HCCI) engines". SAE Paper 892068. 1989.
36. Aoyama T, Hattori Y, Mizuta J, Sato Y. "An experimental Study on Premixed-Charge Compression Ignition Gasoline Engine". SAE Paper 960081. 1996.
37. Saqaff A Al-Kaf, Ahmad S, Abbas HA. "Radical combustion: new concept for two stroke engines". *J Sci Technol Dev*. 2000 Vol. 17: 91–99.

-
38. Ishibashi Y. "Basic understanding of activated radical combustion and its two-stroke engine application and benefits". SAE Paper 2000-01-1836. 2000.
39. Tanaka S, Ayala F, Keck JC, Heywood JB. "Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives". *Combust Flame*. 2003. Vol. 132: 219–239.
40. Kim DS, Kim MY, Lee CS "Reduction of nitric oxides and soot by premixed fuel in partial HCCI engine". *J Eng Gas Turbines Power*. 2006. Vol. 128(3): 497–505.
41. Iida M, Hayashi M, Foster DE, Martin JK "Characteristics of homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine operation for variations in compression ratio, speed, and intake temperature while using n-butane as a fuel". *ASME*. 2003. Vol. 125: 472–478.
42. Zhao F, Asmus T, Assanis D, Dec J, Eng J, Najt P. "Homogenous charge compression ignition (HCCI) engines; key research and development issues", SAE International. Warrendale, PA. 2003
43. Olsson JO, Tunestål P, Ulfvik J, Johansson B. "The effect of cooled EGR on emissions and performance of a turbocharged HCCI engine", SAE Paper 2003-01-0743. 2003.
44. Christensen M, Johansson B, Einewall P. "NO_x emissions in HCCI operation depend on the fuel characteristic". SAE Technical Paper Series No 972824. 1997.
45. Haraldsson G, Tunestål P, Johansson B, Hyvönen J. "HCCI combustion phasing in a multi cylinder engine using variable compression ratio". SAE Technical Paper 2002-01-2858. 2002.
46. Reitz RD, Sun Y, Nevin RM, Gonzalez MA. "PCCI investigation using variable intake valve closing in a heavy duty diesel engine". SAE paper 2007-01-0903. 2007.

47. Genzale CL, Kong SC, Reitz RD. "Modeling the effects of variable intake valve timing on diesel HCCI combustion at varying load, speed, and boost pressures". *J Eng Gas Turbines Power*. 2008 Vol. 130(5): 052806.
48. Law D, Kemp D, Allen J, Kirkpatrick G, Copland T. "Controlled combustion in and IC-engine with a fully variable valve train". SAE Paper 2001-01-0251. 2001.
49. Oakley A, Zhao H, Ladommatos N, Ma T. "Dilution effects on the controlled auto-ignition (CAI) combustion of hydrocarbon and alcohol fuels". SAE Paper 2001-01-3606. 2001
50. Yao MF, Zheng ZQ, Zhang B, Chen Z. "The effect of PRF fuel octane number on HCCI operation". SAE paper 2004-01-2992. 2004.
51. Li T, Okabe Y, Izumi H, Shudo T, Ogawa H. "Dependence of ultra-High EGR low temperature diesel combustion on fuel properties". SAE paper 2006-01-3387. 2006.
52. Starck L, Lecointe B, Forti L, Jeuland N. "Impact of fuel characteristics on HCCI combustion: performances and emissions". *Fuel*. 2010. Vol. 89(10): 3069–3077.
53. Aceves SM, Flowers D, Martinez-Frias J, Espinosa-Losa F, Pitz WJ, Dibble R. "Fuel and additive characterization for HCCI combustion". SAE paper 2003-01-1814. 2003.
54. Iida M, Aroonsrisopon T, Hayashi M, Foster D, Martin J. "The effect of intake air temperature, compression ratio and coolant temperature on the start of heat release in an HCCI (homogeneous charge compression ignition) engine". SAE Paper 2001-01-1880. 2001.
55. Richter M, Engström J, Franke A, Aldén M, Hultqvist A, Johansson B. "The influence of charge inhomogeneity on the HCCI combustion process". SAE Paper 2000-01-2868. 2000.

-
- 56.Ladommatos N, Adelhalim SM, Zhao H, Hu Z. "The effects of carbon dioxide in exhaust gas recirculation on diesel engine emissions", Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering. 1998. Vol. 212(1): 25-42.
- 57.Chen R, Milovanovic N. "A computational study into the effect of exhaust gas recycling on homogeneous charge compression ignition combustion in internal combustion engines fueled with methane". Int J Therm Sci. 2002. Vol. 41: 805–813.
- 58.Machrafi H, Cavadias S, Guibert P "An experimental and numerical investigation on the influence of external gas recirculation on the HCCI autoignition process in an engine: thermal, diluting and chemical effects". Combust Flame. 2008. 476–489.
- 59.Christensen M, Johansson B, Einewall P. "Homogeneous charge compression ignition (HCCI) using iso octane, ethanol and natural gas: a comparison with spark ignition operation". SAE 972874; 1997.
- 60.Yao M, Zhang B, Zheng Z, Chen Z, Xing Y. "Effects of exhaust gas recirculation on combustion and emissions of a homogeneous charge compression ignition engine fuelled with primary reference fuels". Proc Inst Mech Eng D J Automob Eng. 2007. Vol. 221(2): 197–213.
- 61.Torres García M. "Aportaciones al progreso de combustión homogénea (HCCI) en los motores de combustión interna alternativos de cuatro tiempos alimentados con gasóleos". Tesis doctoral. Universidad de Sevilla (España). 2006.
- 62.Morimoto SS, Kawabata Y, Sakurai T, Amano T. "Operating characteristics of a natural gas-fired homogeneous charge compression ignition engine (performance improvement using EGR)". SAE Paper 2001-01-1034. 2001.
- 63.Shi L, Cui Y, Deng K, Peng H, Chen Y. "Study of low emission homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine using
-

- combined internal and external exhaust gas recirculation (EGR)". *Energy*. 2006. Vol. 31: 2665-2676.
64. Thirouard B, Cherel J, Knop V. "Investigation of mixture quality effect on CAI combustion". SAE paper 2005-01-0141. 2005.
65. Zheng ZL, Yao MF. "Charge stratification to control HCCI: experiments and CFD modeling with n-heptane as fuel". *Fuel*. 2009. Vol: 88(2): 354–365.
66. Zheng ZL, Yao MF. "Numerical simulation of the effects of charge stratification on combustion and emissions". *Energy Fuel*. 2007. Vol. 21(4): 2018–2026.
67. Dodge LG, Simescu S, Neely GD, Maymar MJ, Dickey DW, Savonen CI. "Effect of small holes and high injection pressures on diesel engine combustion". SAE paper 2002-01-0494. 2002.
68. Wang X, Huang Z, Zhang W, Kuti OA, Nishida K. "Effects of ultra-high injection pressure and micro-hole nozzle on flame structure and soot formation of impinging diesel spray". *Applied Energy*. 2011. Vol. 88: 1620–1628.
69. Karthikeya ST, Amba PRG, Madhumurthy K. "Homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines: a review". *Arch Computat Methods Eng*. doi: 10.1007/s11831-015-9153-0. 2015.
70. Wendy HK, Shahrir A, Kamaruzzaman S, Zulkifli MN, Azhari S. "CFD investigation of fluid flow and turbulence field characteristics in a four-stroke automotive direct injection engine". *J Inst Eng*. 2008. Vol. 69(1).
71. Viggiano A, Magi V. "A comprehensive investigation on the emissions of ethanol HCCI engines". *Appl Energy*. 2012. Vol. 93: 277–287.
72. Au MY, Girard JW, Dibble R, Flowers D, Aceves SM, Joel M, et al. "1.9-liter four-cylinder HCCI engine operation with exhaust gas recirculation". SAE 2001-01-1894. 2001.

-
- 73.Min X, Yong G, Yi C, Lei S, Kang-yao D. "Effects of injection pressure, exhaust gas recirculation and intake pressure on the cycle-to-cycle variations of HCCI combustion". J Energy Inst. 2015. doi:10.1016/j.joei.2015.01.017.
- 74.Singh G, Singh AP, Agarwal AK. "Experimental investigations of combustion, performance and emission characteristics of biodiesel fuelled HCCI engine using external mixture formation technique". Sustainable Energy Technologies and Assessments. 2014; Vol. 6: 116-128.
- 75.Takeda Y, Keiichi N, Keiichi N. "Emission characteristics of premixed lean diesel combustion with extremely early staged fuel injection". SAE paper 961163. 1996.
- 76.Hashizume T, Miyamoto T, Akagawa H, Tsujimura K. "Combustion and emission characteristics of multiple stage diesel combustion". SAE paper 980505. 1998.
- 77.Iwabuchi Y, Kawai K, Shoji T, Takeda Y. "Trial of new concept diesel combustion system: premixed compression-ignited combustion". SAE 1999-01-0185. 1999.
- 78.Yokota H, Kudo YN, H. Kakegawa, T. et al. "A new concept for low emission diesel combustion". SAE 970891. 1997.
- 79.Yanagihara H. "Ignition timing control at Toyota "UNIBUS" combustion system". Proceedings of the IFP international congress. 2001. 35–42.
- 80.Gowthaman S, Sathiyagnanam AP. "A review on methods of homogeneous charge preparation for HCCI mode engine". Int. J. Mech. Eng. & Rob. Res.2015. Vol. 4. No. 2.
- 81.Su WH, Lin TJ, Pei YQ. "A compound technology for HCCI combustion in a DI diesel engine based on the multi-pulse injection and the BUMP combustion chamber". SAE paper 2003-01-0741. 2003.

82. Walter B, Gatellier B. "Near zero NOx emissions and high fuel efficiency diesel combustion: the NADITM concept using dual mode combustion". *Oil Gas Sci Technol*. 2003. Vol. 58(1): 101–114.
83. Kimura S, Aoki O, Ogawa H, Muranaka S, Enomoto Y. "New combustion concept for ultra-clean and high-efficiency small DI diesel engines". SAE paper 1999-01-3681. 1999.
84. Kimura S, Aoki O, Kitahara Y, Aiyoshizawa E. "Ultra-clean combustion technology combining a low-temperature and premixed combustion concept for meeting future emission standards". SAE paper 2000-01-0200. 2000.
85. Odaka M, Suzuki H, Koike N, Ishii H. "Search for optimizing method of homogeneous charge diesel combustion". SAE paper 1999-01-0184. 1999.
86. Midlam-Mohler S. "Diesel HCCI with external mixture preparation". 10th Diesel engine emissions reduction (DEER) workshop. 2004.
87. Aroonsrisopon T, Werner P, Waldman JO, Sohm V, Foster DE, Morikawa T, et-al. "Expanding the HCCI operation with the charge stratification". SAE paper 2004-01-1756. 2004.
88. Berntsson AW, Denbratt I. "HCCI combustion using charge stratification for combustion control". SAE paper 2007-01-0210. 2007.
89. Inagaki K, Fuyuto T. "Combustion system with premixture-controlled compression ignition". *R&D Rev Toyota CRDL*. 2006. Vol.41(3): 35–46.
90. Xu HM, Fu HY, Williams H, Shilling I. "Modelling study of combustion and gas exchange in a HCCI (CAI) engine". SAE paper 2002-01-0114. 2002.
91. Ogink R, Golovitchev V. "Gasoline HCCI modeling: an engine cycle simulation code with a multi-zone combustion model". SAE paper 2002-01-1745. 2002.

-
92. Narayanaswamy K, Rutland CJ. "Cycle simulation diesel HCCI modelling studies and control". SAE paper 2004-01-2997. 2004.
93. Komninos NP, Rakopoulos CD. "Modelling HCCI combustion of biofuels: A review". *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2012. Vol. 16: 1588-1610.
94. Naik CV, Pitz WJ, Westbrook CK, Sjöberg M, Dec JE, Orme J, et-al. "Detailed chemical kinetic modeling of surrogate fuels for gasoline and application to an HCCI engine". SAE paper 2005-01-3741. 2005.
95. Andrae JCG, Björnbom P, Cracknell RF, Kalghatgi GT. "Auto-ignition of toluene reference fuels at high pressures modelled with detailed chemical kinetics". *Combust Flame*. 2007. Vol. 49(1–2): 2–24.
96. Fiveland SB, Assanis DN. "Development of a two-zone HCCI combustion Model accounting for boundary layer effects". SAE paper No 2001-01-1028. 2001.
97. Noda T, Foster DE. "A numerical study to control combustion duration of hydrogen-fueled HCCI by using multi-zone chemical kinetics simulation". SAE paper No 2001-01-0250. 2001.
98. Amano T et al. "Modeling of the effect of air/fuel ration and temperature distribution on HCCI engines". SAE paper No 2001-01-1024. 2001.
99. Easley WL et al. "Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry". SAE paper No 2001-01-1029. 2001.
100. Komninos N, Hountalas D, Kouremenos D, "Development of a new multi-zone model for the description of physical processes in HCCI engines". SAE Technical Paper 2004-01-0562. 2004.
101. Aceves SM, Westbrook C, Smith J et al. "A multi-zone model for prediction of HCCI combustion and emissions," SAE Technical Paper 2000-01-0327. 2000.

102. Babajimopoulos A, Assanis DN, Fiveland SB. "An approach for modeling the effects of gas exchange processes on HCCI combustion and its application in evaluating variable valve timing control strategies". SAE paper 2002-01-2829. 2002.
103. Flowers DL, Aceves SM, Martinez-Frias J, Hessel R, Dibble RW. "Effect of mixing on hydrocarbon and carbon monoxide emissions prediction for isooctane HCCI engine combustion using a multi-zone detailed kinetics solver". SAE paper 2003-01-1821. 2003.
104. Kong SC, Reitz RD. "Use of detailed chemical kinetics to study HCCI engine combustion with consideration of turbulent mixing effects". J Eng Gas Turbines Power. 2002. Vol. 124(3): 702–707.
105. Su WH, Huang HZ. "Development and calibration of a reduced chemical kinetic model of n-heptane for HCCI engine combustion". Fuel. 2005. Vol. 84(9): 1029–1040.
106. Jia M, Xie MZ. "A chemical kinetics model of iso-octane oxidation for HCCI engines". Fuel. 2006. Vol. 85(17–18): 2593–2604.
107. Ohashi T, Yang X, Takabayashi T, Urata Y, Kubota S, Katsuyama H. "Ignition and combustion simulation in HCCI engines". SAE paper 2006-01-1522. 2006.
108. Kraft M et al. "Investigation of combustion emissions in a HCCI engine. Measurements and a new computational model". 28th International Symposium on Combustion. The Combustion Institute. Pittsburgh, PA. 2000.
109. Bengtsson J, Strandh P, Johansson R, Tunesta P, Johansson B. "Hybrid modeling of homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine dynamics: a survey". Int. J. of Control. 2007. Vol. 80(11): 1814–1847.

-
110. Haraldsson G, Tunestål P, Johansson B, Hyvönen J. "HCCI closed-loop combustion control using fast thermal management". SAE Technical Paper 2004-01-0943. 2004.
 111. Strandh P, Bengtsson J, Johansson R, Tunestål P et al. "Variable valve actuation for timing control of a homogeneous charge compression ignition engine". SAE Technical Paper 2005-01-0147. 2005.
 112. Olsson J, Tunestål P, Johansson B. "Closed-loop control of an HCCI engine". SAE Technical Paper 2001-01-1031. 2001.
 113. Agrell F, Ångström H, Eriksson B, Wikander J et al. "Integrated simulation and engine test of closed loop HCCI control by aid of variable valve timings". SAE Technical Paper 2003-01-0748. 2003.
 114. Bidarvatan M, Shahbakhti M, Jazayeri S. "Model-based control of combustion phasing in an HCCI engine". SAE Int. J. Engines. 2012. Vol. 5(3).
 115. Szybist J, Edwards K, Foster M, Confer K et al. "Characterization of engine control authority on HCCI combustion as the high load limit is approached". SAE Int. J. Engines. 2013. Vol. 6(1).
 116. Lahti J, Moskwa J. "Dynamic engine control for HCCI combustion". SAE Int. J. Engines. 2012. Vol. 5(3).
 117. Strandh P, Bengtsson J, Johansson R, Tunestål P, et al. "Cycle-to-cycle control of a dual-fuel HCCI engine". SAE Technical Paper 2004-01-0941. 2004.
 118. Han S, Kim H, Bae C. "Strategy for mode transition between low temperature combustion and conventional combustion in a diesel engine". SAE Int. J. Engines. 2013. Vol. 6(3).
 119. Asad U, Divekar P, Chen X, Zheng M et al. "Mode switching control for diesel low temperature combustion with fast feedback algorithms". SAE Int. J. Engines. 2012. Vol. 5(3).

120. Demirbas A. "Biodiesel: a realistic fuel alternative for diesel engines". New York. Springer. 2008. ISBN: 9781846289941.
121. Cherubini F, Bird ND, Cowie A, Jungmeier G, Schlamadinger B, Woess-Gallasch S. "Energy and greenhouse gas-based LCA of biofuel and bioenergy systems: key issues, ranges and recommendations". *Resour Conserv Recycl.* 2009. Vol. 53: 434–447.
122. Eurostat SHARES (SHort Assessment of Renewable Energy Sources) <http://ec.europa.eu/eurostat/web/energy/data/shares>; consultado el 02/11/15.
123. Rakopoulos CD, Michos CN. "Generation of combustion irreversibilities in a spark ignition engine under biogas–hydrogen mixtures fueling". *Int J Hydrogen Energy.* 2009. Vol. 34: 4422–4437.
124. Ji C, Liang C, Wang S. "Investigation on combustion and emissions of DME gasoline mixtures in a spark-ignition engine". *Fuel.* 2011. Vol. 90: 1133–1138.
125. Rakopoulos DC, Rakopoulos CD, Papagiannakis RG, Kyritsis DC. "Combustion heat release analysis of ethanol or n-butanol diesel fuel blends in heavy-duty DI diesel engine". *Fuel.* 2011. Vol. 90: 1855–1867.
126. Rakopoulos CD, Rakopoulos DC, Giakoumis EG, Dimaratos AM. "Investigation of the combustion of neat cottonseed oil or its neat bio-diesel in a HSDI diesel engine by experimental heat release and statistical analyses". *Fuel.* 2010. Vol. 89: 3814–3826.
127. Rakopoulos DC, Rakopoulos CD, Giakoumis EG, Papagiannakis RG, Kyritsis DC. "Experimental-stochastic investigation of the combustion cyclic variability in HSDI diesel engine using ethanol–diesel fuel blends". *Fuel.* 2008. Vol. 87: 1478–1491.
128. Rakopoulos CD, Antonopoulos KA, Rakopoulos DC, Hountalas DT. "Multi-zone modeling of combustion and emissions formation in DI diesel

-
- engine operating on ethanol–diesel fuel blends”. *Energy Convers Manage.* 2008. Vol. 49: 625–643.
129. Rakopoulos CD, Antonopoulos KA, Rakopoulos DC. “Experimental heat release analysis and emissions of a HSDI diesel engine fueled with ethanol–diesel fuel blends”. *Energy.* 2007. Vol. 32: 1791–1808.
130. Rakopoulos CD, Antonopoulos KA, Rakopoulos DC. “Development and application of multi-zone model for combustion and pollutants formation in direct injection diesel engine running with vegetable oil or its bio-diesel”. *Energy Convers Manage.* 2007. Vol. 48: 1881–1901.
131. Rakopoulos CD, Antonopoulos KA, Rakopoulos DC. “Multi-zone modelling of diesel engine fuel spray development with vegetable oil, bio-diesel or diesel fuels”. *Energy Convers Manage.* 2006. Vol. 47: 1550–1573.
132. Rakopoulos CD, Rakopoulos DC, Giakoumis EG, Kyritsis DC. “The combustion of n-butanol/diesel fuel blends and its cyclic variability in a DI diesel engine”. *Proc Inst Mech Eng Part A: J Power Energy.* 2011. Vol. 225: 289–308.
133. Arcoumanis C, Bae C, Crookes R, Kinoshita E. “The potential of di-methyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: a review”. *Fuel.* 2008. Vol. 87: 1014–1030.
134. Christensen M, Johansson B, Amneus PJH, Mauss F. “Supercharged homogeneous charge compression ignition”, SAE paper no. 980787. 1998.
135. Yap D, Megaritis A. “Applying forced induction to bioethanol HCCI operation with residual gas trapping”. *Energy Fuels.* 2005. Vol. 19: 1812–1821.

136. Megaritis A, Yap D, Wyszynski ML. "Effect of inlet valve timing and water blending on bioethanol HCCI combustion using forced induction and residual gas trapping". *Fuel*. 2008. Vol. 87: 732–739.
137. Tsolakis A, Megaritis A, Yap D. "Application of exhaust gas fuel reforming in diesel and homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines fuelled with biofuels". *Energy*. 2008. Vol. 33: 462–470.
138. Manente V, Tunestal P, Johansson B. "Influence of the wall temperature and combustion chamber geometry on the performance and emissions of a mini HCCI engine fuelled with DEE". SAE paper no. 2008-01-0008. 2008.
139. Shudo T, Ono Y. "HCCI combustion of hydrogen, carbon monoxide and dimethyl ether". SAE paper no. 2002-01-0112. 2002.
140. Chen Z, Konno M, Oguma M, Yanai T. "Experimental study of CI natural gas / DME homogeneous charge engine". SAE paper no. 2000-01-0329. 2000.
141. Zheng ZQ, Yao MF, Chen Z, Zhang B. "Experimental study on HCCI combustion of dimethyl ether (DME)/methanol dual fuel". SAE paper no. 2004-01-2993. 2004.
142. Jothi NKM, Nagarajan G, Renganarayanan S. "Experimental studies on homogeneous charge CI engine fueled with LPG using DEE as an ignition enhancer". *Renew Energy*. 2007. Vol. 32: 1581–1593.
143. Arcoumanis C, Bae C, Crookes R, Kinoshita E. "The potential of di-methyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: a review". *Fuel*. 2008. Vol. 87: 1014–1030.
144. Jia M, Xie M. "A chemical kinetics model of iso-octane oxidation for HCCI engines". *Fuel*. 2006. Vol. 85: 2593–2604.

-
145. Ng CKW, Thomson MJ. "A computational study of the effect of fuel reforming, EGR and initial temperature on lean ethanol HCCI combustion". SAE paper no. 2004-01-0556. 2004.
 146. Martinez-Frias J, Aceves SM, Flowers DL. "Improving ethanol life cycle energy efficiency by direct utilization of wet ethanol in HCCI engines". *Trans ASME J Energy Resour Technol.* 2007. Vol. 129: 332–337.
 147. Szybist JP. "Fuel-specific effect of exhaust gas residuals on HCCI combustion: a modelling study". SAE paper no. 2008-01-2402. 2008.
 148. Yang D, Wang Z, Wang J-X, Shuai S. "Experiment and chemical kinetics analysis of active atmosphere with different fuels in HCCI combustion". *Energy Fuels.* 2010. Vol. 24: 4872–4878.
 149. Yao MF, Qin J, Zheng ZQ. "Numerical study of the combustion mechanism of a homogeneous charge compression ignition engine fuelled with dimethyl ether and methane, with a detailed kinetics model. Part 1: the reaction kinetics of dimethyl ether". *Proc Inst Mech Eng Part D: J Automob Eng.* 2005. Vol. 219: 1213–1223.
 150. Hoffman SR, Abraham J. "A comparative study of n-heptane, methyl decanoate, and dimethyl ether combustion characteristics under homogeneous-charge compression-ignition engine conditions". *Fuel.* 2009. Vol. 88: 1099–1108.
 151. Herbinet O, Pitz WJ, Westbrook CK. "Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate". *Combust Flame.* 2008. Vol. 154: 507–528.
 152. Brakora JL, Reitz RD. "Investigation of NO_x predictions from biodiesel-fueled HCCI engine simulations using a reduced kinetic mechanism". SAE paper no. 2010-01-0577. 2010.
 153. Saisirirat P, Foucher F, Chanchaona S, Mounaïm-Rousselle C. "Spectroscopic measurements of low-temperature heat release for

- homogeneous combustion compression ignition (HCCI) n-heptane/alcohol mixture combustion". *Energy Fuels*. 2010. Vol. 24: 5404–5409.
154. Mack JH, Flowers DL, Buchholz BA, Dibble RW. "Investigation of HCCI combustion of diethyl ether and ethanol mixtures using carbon 14 tracing and numerical simulations". *Proc Combust Inst*. 2005. Vol. 30: 2693–2700.
155. Yao M, Zheng Z, Liang X. "Numerical study on the chemical reaction kinetics of DME/methanol for HCCI combustion process", SAE paper no. 2006-01-1521. 2006.
156. Ogawa H, Miyamoto N, Kaneko N, Ando H. "Combustion control and operating range expansion with direct injection of reaction suppressors in a premixed DME HCCI engine". SAE paper no. 2003-01-0746. 2003.
157. Yamada H, Yoshii M, Tezaki A. "Chemical mechanistic analysis of additive effects in homogeneous charge compression ignition of dimethyl ether". *Proc Combust Inst*. 2005. Vol. 30: 2773–2780.
158. Mosbach S, Kraft M, Bhave A, Mauss F, Mack JH, Dibble RW. "Simulating a homogeneous charge compression ignition engine fuelled with a dee/etoh blend". SAE paper no 2006-01-1362. 2006.
159. Komninos NP, Rakopoulos CD. "Comparison of a detailed and a reduced ethanol oxidation mechanism in HCCI combustion using a multi-zone model". *Open Renew Energy J*. 2011. Vol. 4: 47–59.
160. Sjoberg M, Dec JE. "Effects of EGR and its constituents on HCCI autoignition of ethanol". *Proc Combust Inst*. 2011. Vol. 33: 3031–3038.
161. Visakhamoorthy S, Tzanetakis T, Haggith D, Sobiesiak A, Wen JZ. "Numerical study of a homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine fuelled with biogas". *Appl Energy*. 2012. Vol. 92: 437–446.

-
162. Kim HJ, Park SH, Lee KS, Lee CS. "A study of spray strategies on improvement of engine performance and emissions reduction characteristics in a DME fuelled diesel engine". *Energy*. 2011. Vol. 36: 1802–1813.
163. Chen Z, Yao M, Zheng Z, Zhang Q. "Experimental and numerical study of methanol/dimethyl ether dual-fuel compound combustion". *Energy Fuels*. 2009. Vol. 23: 2719–2730.
164. Huang C, Yao M, Lu X, Huang Z. "Study of dimethyl ether homogeneous charge compression ignition combustion process using a multi-dimensional computational fluid dynamics model". *Int J Therm Sci*. 2009. Vol. 48: 1814–1822.
165. Park SW. "Numerical study on optimal operating conditions of homogeneous charge compression ignition engines fuelled with dimethyl ether and n-heptane". *Energy Fuels*. 2009. Vol. 23: 3909–3918.
166. Kong S-C. "A study of natural gas/DME combustion in HCCI engines using CFD with detailed chemical kinetics". *Fuel*. 2007. Vol. 86: 1483–1489.
167. Yu RX, Bai XS, Vressner A, Hultqvist A, Johansson B, Olofsson J, et al. "Effect of turbulence on HCCI combustion", SAE paper no. 2007-01-0183. 2007.
168. Joelsson T, Yu R, Bai XS, Vressner A, Johansson B. "Large eddy simulation and experiments of the auto-ignition process of lean ethanol/air mixture in HCCI engines", SAE paper no. 2008-01-1668. 2008.
169. Viggiano A, Magi V. "Multidimensional simulation of ethanol HCCI engines", SAE paper no. 2009-24-0031. 2009.
170. Um S, Park SW. "Numerical study on combustion and emission characteristics of homogeneous charge compression ignition engines fuelled with biodiesel". *Energy Fuels*. 2010. Vol. 24: 916–927.
-

171. Torres García M, Jiménez-Espadafor Aguilar F, Sánchez Lencero TM. "Experimental study of the performances of a modified diesel engine operating in homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion mode versus the original diesel combustion mode". *Energy*. 2009. Vol. 34 (2): 159-171.
172. Andrae M, Fang HL, Bhandary K. "Biodiesel and fuel dilution of engine oil", SAE paper 2007-01-4036. 2007.
173. Jiménez-Espadafor FJ, Torres M, Vélez JA, Carvajal E, Becerra JA. "Experimental analysis of low temperature combustion mode with diesel and biodiesel fuels: A method for reducing NOx and soot emissions". *Fuel Processing Technology*. 2012. Vol. 103: 57-63.
174. Jiménez FJ, Torres M, Correa JA, Becerra JA. "Effect of turbulence and external exhaust gas recirculation on HCCI combustion mode and exhaust emissions". *Energy & Fuels*. 2009. Vol. 23 (9): 4295–4303.
175. Su WH, Lin TJ, Zhao H, Pei YQ. "Research and development of an advanced combustion system for the direct injection diesel engine". *Proceedings of the IMechE, Part D: Journal of Automobile Engineering*. 2014. Vol. 219: 241–252.
176. Graboski MS, McCormick RL. "Combustion of fat and vegetable oil derived fuels in diesel engines". *Progress in Energy and Combustion Science*. 1998. Vol. 24 (2): 125–164.
177. Marshall W, Schumacher LG, Howell S. "Engine exhaust emissions evaluation of a Cummins L10E when fuelled with a biodiesel blend". SAE paper No. 952363. 1995.
178. Aceves SM, Flowers DL, Martinez-Frias J, Espinosa-Losa F, Christensen M, Johansson B, et-al. "Analysis of the effect of geometry-generated turbulence on HCCI combustion by multi-zone modelling". SAE paper 2005-01-2134. 2005.

-
179. MATLAB 7.8. The MathWorks Inc. 2009.
 180. Megel M, Westmoreland B, Jones G, Phillips F et al. "Development of a Structurally Optimized Heavy Duty Diesel Cylinder Head Design Capable of 250 Bar Peak Cylinder Pressure Operation". SAE Int. J. Engines. 2011. Vol. 4 (3): 2736-2755.
 181. Heywood JB. "Internal Combustion Engine Fundamentals". London. McGraw-Hill. 1988.
 182. Godiño JAV, García MT, Aguilar FJJE, Trujillo EC. "Numerical study of HCCI combustion fuelled with diesel oil using a multizone model approach". Energy Convers Manag. 2015. Vol. 89: 885–895.
 183. McBride BJ, Zehe MJ, Gordon S. "NASA Glenn Coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species". NASA report TP-2002-211556. 2002.
 184. Fiveland SB, Assanis DN. "Development and validation of a quasi-dimensional model for HCCI engine performance and emissions studies under turbocharged conditions". SAE paper 2002-01-1757. 2002.
 185. Eichelberg G. "Some New investigations on old combustion engine problems". Engineering. 1939. Vol. 148: 463-446.
 186. Annand WJD. "Heat transfer in the cylinder of reciprocating internal combustion engines". Proc Instn Mech Engrs. 1963. Vol. 177: 973-990.
 187. Annand WJD, Ma TH. "Instantaneous heat transfer rates to the cylinder head surface of a small compression-ignition engine". Proc Instn Mech Engrs. 1971. Vol. 185: 976-987.
 188. Overbye VD, Bennethum JE, Uyehara OA, Myers PS. "Unsteady heat transfer in engines". SAE Transactions. 1961. Vol. 69: 461-494.

189. Woschni G. "A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine". SAE Paper 670931. 1967.
190. Sihling K, Woschni G. "Experimental investigation of the instantaneous heat transfer in the cylinder of a high speed diesel engine". SAE Paper 790833. 1979.
191. Huber K, Woschni G, Zeilinger K. "Investigations on heat transfer in internal combustion engines under low load and motoring conditions". SAE Paper 905018. 1990.
192. Sitkei G, Ramanaiah GV. "Rational approach for calculation of heat transfer in diesel engines". SAE Paper 720027. 1972.
193. Hohenberg GF. "Advanced approaches for heat transfer calculations". SAE Paper 790825. 1979.
194. Han SB, Chung YJ, Kwon YJ, Lee S. "Empirical formula for instantaneous heat transfer coefficient in spark-ignition engine". SAE Paper 972995. 1997.
195. Chang J, Guralp O, Filipi Z, Assanis D, Kuo TW, Najt P, Rask R. "New heat transfer correlation for an HCCI engine derived from measurements of instantaneous surface heat flux". SAE Paper 2004-01-2996. 2004.
196. Wannatong K, Chanchaona, Sanitjai S. "Simulation algorithm for piston ring dynamics". Simulation Modelling Practice and Theory. 2008. Vol. 16: 127–146.
197. Armas O, Rodriguez J, Payri F, Martin J, Agudelo JR. "Effect of the trapped mass and its composition on the heat transfer in the compression cycle of a reciprocating engine". Applied Thermal Engineering. 2005. Vol. 25: 2842–2853.

-
198. Ting LL, Mayer JE. "Piston ring lubrication and cylinder bore wear analysis. Part 1: theory". *Journal of Lubrication Technology*. 1974. 305–314.
199. Namazian M, Heywood JB. "Flow in the piston–cylinder–ring crevices of a spark-ignition engine: effect on hydrocarbon emissions, efficiency and power". SAE paper 820088. 1982.
200. Abdi Aghdam E, Kabir MM. "Validation of a blowby model using experimental results in motoring condition with the change of compression ratio and engine speed". *Exp Therm Fluid Sci*. 2010. Vol. 34: 197–209.
201. Hohenberg G. "Definition und eigenschaften des thermodynamischen verlustwinkels von kolbenmaschinen". *Automobil-Industrie*. 1976. Vol. 4: 15–21.
202. Bowman CT. "Kinetics of pollutant formation and destruction in combustion". *Prog. Energy Combust. Sci*. 1975. Vol 1: 33-45.
203. Lavole GA, Heywood JB, Keck JC. "Experimental and theoretical investigation of nitric oxide formation in internal combustion engines". *Combust. Sci. Technol*. 1970. Vol 1: 313-326.
204. Sundeep Ramachandran. "Rapid thermodynamic simulation model of an internal combustion engine on alternate fuels". IMES. 2009. Vol. II.
205. Arsie I, Pianese C, Rizzo G, "Models for the prediction of performance and emissions in a spark ignition engine: a sequentially structured approach". SAE Technical Paper 980779. 1998.
206. http://www.wamit.com/manualv7.1/wamit_v7manualch10.html.
207. Aoyama T, Hattori Y, Mizuta J, Sato Y. "An experimental study on premixed charge compression ignition gasoline engine". SAE paper 960081. 1996.

