



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:

ÍNDICE GENERAL

- MEMORIA
- ANEXOS
- PRESUPUESTO

MEMORIA

ÍNDICE MEMORIA

1.1 Introducción, motivación y justificación

1.2 Objetivos

1.3 Estructura del documento

2. Marco teórico

2.1 Métodos de predicción del tiempo de retraso

2.1.1 Introducción al fenómeno de autoencendido

2.1.2 Mecanismo de baja T

2.1.3 Mecanismo de media T

2.1.4 Mecanismo de alta temperatura

2.1.5 Transición entre mecanismos

2.1.6 Portadores de cadena

2.1.7 Tiempo de retraso

2.1.8 Criterios para el cálculo del tiempo de retraso

2.1.9 Productos de cada etapa del proceso

2.2 Formación de óxidos de nitrógeno en la combustión de combustibles fósiles

2.2.1 Formación de NOX térmico

2.2.2 Formación de NOX súbito

2.2.3 Formación de NO₂

2.2.4 Formación de N₂O

2.2.5 Tecnologías para la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno

2.2.6 Recirculación de gases de escape

2.3 Métodos numéricos para el estudio del tiempo de retraso: Mecanismos de cinética química. Chemkin.

2.2.1 Formación de NOX térmico

2.2.2 Formación de NOX súbito

2.2.3 Formación de NO2

2.2.4 Formación de N2O

2.2.5 Tecnologías para la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno

2.2.6 Recirculación de gases de escape

2.3 Métodos numéricos para el estudio del tiempo de retraso: Mecanismos de cinética química. Chemkin.

3. Metodología

3.1 Descripción de la instalación experimental

3.1.1 Ubicación

3.1.2 Motor

3.1.4 Sistema de adquisición de datos. Sensores

3.2 Mecanismo de cinética química empleado. Submodelo de NOx

3.3 Modelos de Chemkin

3.4 Definición del tiempo de retraso.

3.5 Estudio paramétrico realizado.

3.6 Combustibles de sustitución

4. Resultados

4.1 Introducción

4.2 Definición de la composición inicial de la mezcla

4.2.1 Descripción código Matlab

4.3 Validación de los mecanismos de cinética química

4.3.1 Definición del cálculo del error

4.3.2 Resultados de las Simulaciones

4.3.2.1 Introducción

4.3.2.2 Señales analizadas

4.3.2.2 Simulaciones con 82% iso-octano, 18% hexeno

4.3.2.3 Simulaciones con 70% tolueno, 30% hexeno

4.3.2.4 Simulaciones con 65% iso-octano, 30% tolueno

4.3.2.5 Simulaciones con 50% n-heptano, 50% tolueno

4.3.2.6 Simulaciones con 50% iso-octano, 35% tolueno, 15%hexeno

4.3.2.7 Simulaciones con 47% iso-octano, 35% tolueno, 18%hexeno

4.3.2.8 Simulaciones con 98% iso-octano, 2% n-heptano

4.3.2.9 Comentario de los resultados obtenidos

4.3.3 Fuentes de error

4.3.3.2 Heterogeneidades en la temperatura inicial

4.3.3.3 Heterogeneidades en las pérdidas de calor

4.3.3.4 Combustible de sustitución

4.3.4 Estudio de sensibilidad

4.3.4.1 Variación de la temperatura inicial

4.3.4.2 Simulaciones adiabáticas

4.3.4.3 Simulaciones variación de dosado

4.3.4.4 Sensibilidad PSR

4.3.5 Obtención de un nuevo combustible de sustitución

4.3.5.1 Introducción

4.3.5.2 Resultados de las simulaciones con 10% iso-octano, 90% tolueno

5. Conclusiones y trabajos futuros

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ANEXO I

ANEXO II

ANEXO III

ANEXO IV

ANEXO V

ANEXO VI

ANEXO VII

ANEXO VIII

ANEXO IX

ANEXO X

ANEXO XI

1.1 Introducción, motivación y justificación

Debido a la nueva legislación que regula las emisiones de óxidos de nitrógeno (NOx), el estudio de nuevas formas de controlar y reducir dichas emisiones ha adquirido una mayor importancia.

El control de emisiones realizando post-tratamientos a los gases de escape tiene diversos inconvenientes, siendo los principales el elevado coste económico de los mismos y la necesidad de introducir nuevos elementos en el escape del motor dificultando el mantenimiento.

Por ello, es de gran interés el estudio de nuevos métodos que reduzcan las emisiones en el proceso de combustión, como son el desarrollo de nuevos motores basados en combustión a baja temperatura. Este tipo de motores emplea mezclas homogéneas con tasas gases de escape recirculados elevadas (EGR, "Exhaust gas recirculation" por sus siglas en inglés) y dosados inferiores al estequiométrico. El empleo de dosados pobres implica una menor producción de hollín, mientras que la elevada tasa de EGR implica una menor cantidad de oxígeno en la mezcla de aire y combustible, lo que conlleva menores temperaturas de combustión y menores producciones de NOx.

El encendido de las mezclas homogéneas en estos motores está controlado por cinética química. Para obtener un buen rendimiento, la unidad de control del motor (ECU por sus siglas en inglés) del motor debe garantizar que la tasa de EGR, la temperatura, la presión y los parámetros de inyección son los óptimos para que el encendido ocurra en el instante óptimo para maximizar el rendimiento. Una comprensión detallada de la cinética química permite predecir los tiempos de retraso con mucha más exactitud, con lo que se pueden ajustar los parámetros de control para conseguir que la mezcla encienda en el punto adecuado y obtener así un elevado rendimiento.

Finalmente, para realizar estas predicciones se van a emplear mecanismos de cinética química, los cuales sólo existen para combustibles puros, mientras que la gasolina es una mezcla de muchas especies químicas. Por ello, es necesario definir combustibles de sustitución más sencillos pero con unos parámetros físico-químicos similares que permita realizar las simulaciones.

1.2 Objetivos

Los objetivos de este trabajo final de grado se presentan a continuación. Se componen fundamentalmente de tres objetivos principales:

Validar varios mecanismos de cinética química en cuanto a tiempos de retraso y producción de NOx en un motor.

Evaluar distintos criterios para el cálculo de tiempos de retraso.

Proponer un nuevo combustible de sustitución para gasolina de 98 octanos

1.3 Estructura del documento

El presente proyecto consta de dos documentos: memoria y presupuesto.

En el documento memoria se realiza una descripción teórica de los conceptos necesarios para la comprensión de los estudios realizados, así como una presentación y descripción de los resultados obtenidos, concluyendo con las conclusiones extraíbles del estudio. Así, el documento memoria queda estructurado en los siguientes capítulos:

El capítulo 1 presenta una introducción en la cual se plantea la motivación y la justificación del trabajo, así como los objetivos del mismo.

El capítulo 2 incluye el marco teórico, en el cual se describen los aspectos fundamentales para la comprensión del trabajo realizado.

El capítulo 3 detalla la metodología seguida en el trabajo, explicando a su vez la herramienta de simulación empleada y los datos utilizados.

El capítulo 4 contiene los resultados obtenidos en el presente trabajo divididos en la determinación de las condiciones iniciales, las simulaciones con distintos combustibles de sustitución, el estudio de sensibilidad frente a heterogeneidades y el desarrollo de un nuevo combustible de sustitución.

El capítulo 5 analiza las principales conclusiones que se han extraído del trabajo realizado, así como trabajos futuros que complementen los resultados obtenidos.

En el documento presupuesto se desarrollarán los costes y los costes unitarios de los materiales y la mano de obra empleados para la realización del trabajo.

2. Marco teórico

2.1 Métodos de predicción del tiempo de retraso

2.1.1 Introducción al fenómeno de autoencendido

Se conoce como autoencendido a la combustión espontánea de una mezcla de aire y fuel bajo unas condiciones termodinámicas dadas. El autoencendido es un tipo de proceso de combustión donde domina la cinética química sobre los procesos físicos de tipo convectivo y/o difusivo ($Da=0$), y se produce por acumulación de compuestos activos (portadores de cadena) hasta alcanzar una concentración crítica que desencadena el encendido.

$$Da = \frac{t_{físico}}{t_{químico}}$$

Ecuación 2.1. Definición del número de Damköhler.

El autoencendido de una mezcla homogénea se caracteriza por que se da una combustión espontánea generalizada, es decir, todos los diferenciales de volumen bajo idénticas condiciones autoencienden a la vez. Del mismo modo, la combustión evoluciona simultáneamente en todo el volumen de control y teóricamente no se forma ningún frente de llama, es decir, supone una discontinuidad temporal (pero no espacial) de la mezcla.

El proceso de autoencendido se puede esquematizar de forma muy simplificada de la siguiente forma:

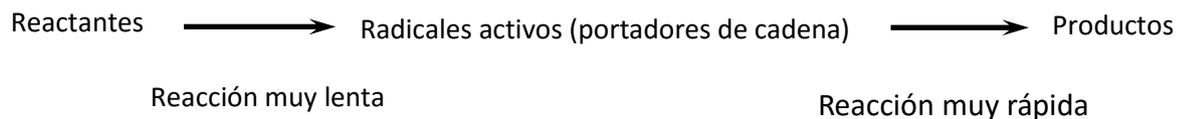


Figura 2.1. Esquema del proceso de autoencendido.

Existen tres mecanismos distintos de encendido de un combustible en función de la T.

2.1.2 Mecanismo de baja T

Se trata de un mecanismo por degradación de cadena. En él, el fuel es atacado por radicales libres (portadores de cadena) para deshidrogenarse y formar múltiples radicales libres e hidrocarburos de cadena corta.

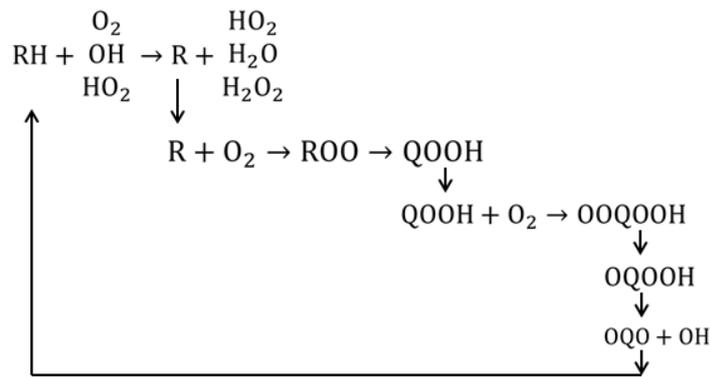


Figura 2.2. Esquema de las reacciones químicas principales en el mecanismo de baja temperatura.

Las otras vías de descomposición del fuel se encuentran inactivas debido a su alta energía de activación (E_a). Es más, debido al carácter endotérmico de $\text{RH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{R} + \text{HO}_2$ este cambio químico deja de ser relevante cuando se tienen suficientes portadores de cadena como para seguir con la descomposición del fuel.

Para $T < 900\text{K}$ la escisión β (descomposición de hidrocarburos para dar una olefina C_nH_{2n} y un compuesto activo) de los radicales alquilo es extremadamente lenta (por ser de elevada energía de activación E_a), de ahí que los alquilo se combinen con el oxígeno molecular para formar alquilperóxidos, ROO.

Los alquilperóxidos sufren una isomerización (movimiento interno de un H hacia el final de la cadena) para formar un alquilhidroperóxido, QOOH.

Debido a la baja temperatura, el alquilhidroperóxido sólo puede reaccionar con el oxígeno molecular para formar carbonilhidroperóxido, OOQOOH. Éste finalmente degenera en QQOOH y OQO además de dar lugar a radicales OH. De nuevo la escisión β es muy lenta. Los hidrocarburos de cadena más corta son atraídos por nuevos radicales activos y el ciclo comienza de nuevo.

2.1.3 Mecanismo de media T

Esta etapa del proceso de autoencendido sucede tras la etapa de baja T, y es consecuencia directa de la misma.

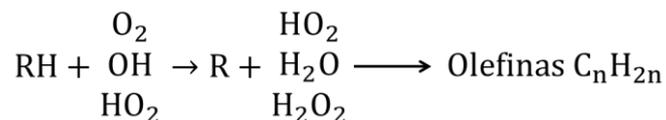


Figura 2.3. Esquema de las reacciones químicas principales del mecanismo de media temperatura.

Cuando la T alcanza valores medios, debido a la exotermia de las reacciones de cadena explicadas anteriormente o debido a un proceso externo, la producción de ROO y OOQOOH compite con la formación de olefinas por parte de los radicales alquilo (R) y alquilhidroperóxido (QOOH).

Esta competición resulta en una menor producción de portadores de cadena, y por tanto, en una pérdida de reactividad.

Se origina entonces el llamado comportamiento de Coeficiente Negativo de Temperatura (NTC por sus siglas en inglés "Negative Temperature Coefficient"), mediante el cual los tiempos de retraso se reducen en menor medida al aumentar la T (pudiendo llegar a aumentar).

Dicha zona NTC puede explicarse de dos maneras:

Pensando en un proceso de autoencendido típico en un motor de combustión interna alternativo, las distintas fases del autoencendido son identificables mediante la ley de liberación de calor:

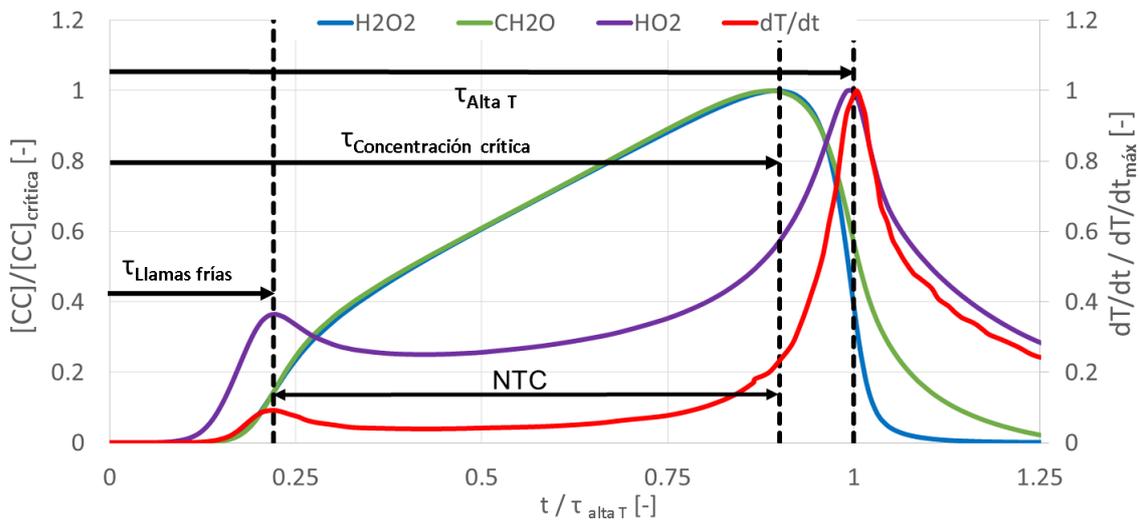


Figura 2.4. Gráfica representativa de las distintas fases del autoencendido relacionadas con propiedades físicas y químicas.

Es decir, la química de baja T (previamente explicada) da lugar a una breve exotermia que hace aumentar la T hasta que la formación de olefinas compite con la formación de portadores de cadena resultando en una pérdida de la reactividad (NTC).

Cuando la T ha aumentado lo suficiente como para permitir la descomposición del $H_2O_2 + M \rightarrow 2OH + M$, los OH que se generan atacan a los hidrocarburos presentes, entre los que destaca el formaldehído como trazador del fenómeno de autoencendido, oxidándolo en CO y dando lugar a la etapa de alta temperatura.

Otra forma de ver reflejado el comportamiento NTC es representando el tiempo de retraso en relación con la etapa de alta temperatura (referido al máximo incremento de P o T) en función de la temperatura:

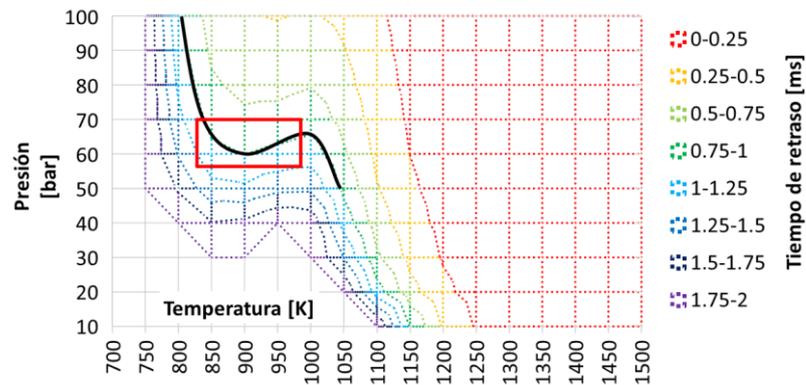


Figura 2.5. Mapas de contorno P-T donde el tiempo de retraso aparece como curvas de nivel. Detalle de la zona NTC.

Para temperaturas muy bajas, la etapa de alta temperatura apenas se produce y la exotermia debida a la degeneración de la cadena es la única relevante.

Para temperaturas muy altas, los tiempos característicos de la zona NTC son tan cortos que ésta es prácticamente nula, por lo que la exotermia de las llamas frías coincide con la de alta temperatura.

Para temperaturas intermedias aparecen todas las etapas del autoencendido, por lo que la máxima exotermia ya no es la de las llamas frías, sino una más tardía (de ahí el aumento del tiempo de retraso con la temperatura).

Además, dependiendo del comportamiento de la zona NTC así será el comportamiento del tiempo de retraso.

Si la presión se reduce, la fracción molar de oxígeno (X_{O_2}) se reduce o si el dosado relativo (Fr) se reduce entonces la zona NTC se desplaza hacia temperaturas más bajas. Además, en ese caso la zona NTC se hace más pronunciada (sus tiempos característicos aumentan y, por tanto, aumenta la diferencia entre llamas frías y llamas de alta temperatura).

El final de la zona de llamas frías está marcado por la aparición de la reacción de tercer cuerpo, que descompone el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en dos radicales OH, dando inicio al mecanismo de alta temperatura.

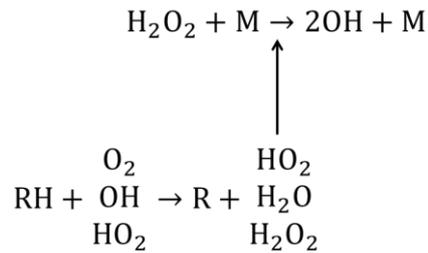


Figura 2.6. Esquema de la aparición de la reacción de tercer cuerpo que señala el fin de la zona NTC.

2.1.4 Mecanismo de alta temperatura

Para temperaturas lo suficientemente altas el craqueo térmico del combustible cobra relevancia y abre una nueva vía predominante en la descomposición del combustible.

La descomposición unimolecular del fuel produce dos radicales alquilo $\text{RH} \rightarrow \text{Q} + \text{Q}'$, o un radical alquilo más un hidrógeno $\text{RH} \rightarrow \text{Q} + \text{H}$ (deshidrogenación del fuel a alta temperatura).

Los radicales alquilo son ahora capaces de descomponerse mediante escisión β .

Además, se sabe que los radicales OH tan solo son estables a alta temperatura, por lo que la acumulación de OH es un buen trazador de las etapas exotérmicas, y en este caso, del encendido.

De hecho, picos d OH pueden verse en la máxima exotermia de las llamas frías, de la oxidación de CH_2O a CO y de la etapa de alta temperatura (oxidación del CO a CO_2).

2.1.5 Transición entre mecanismos

I. Control de la etapa de llamas frías:

Las reacciones en cadena de baja temperatura que dan lugar a las llamas frías poseen una gran dependencia de la T.

Aunque se aprecia también cierta dependencia con la X_{O_2} y el Fr, ésta es mucho menor pues en esta primera etapa del proceso de autoencendido siempre hay suficiente oxígeno y fuel para reaccionar.

Si se aíslan los efectos de X_{O_2} y Fr a base de colocar la mezcla aire-fuel a idénticas presión y temperatura y con la misma C_p , se observa:

- Si Fr aumenta, las llamas frías suceden antes.
- Si X_{O_2} aumenta, las llamas frías suceden antes.
- Si T aumenta, las llamas frías suceden antes.
- SI P aumenta, las llamas frías suceden antes.

Además, como el efecto de la T es el dominante, en términos de motor se da que:

- Si X_{O_2} disminuye, el EGR aumenta, dando lugar a un mayor C_p , y alcanzándose temperaturas menores durante el tiempo de retraso. En este caso, las llamas frías suceden más tarde (para una misma temperatura inicial).
- Si Fr aumenta, aumenta así mismo el C_p , alcanzándose temperaturas más bajas durante el tiempo de retraso. En este caso, las llamas frías suceden más tarde, siendo esta tendencia la opuesta a lo esperado.

La etapa de llamas frías está causada por las reacciones $RH+HO_2 \rightarrow R+H_2O_2$.

De hecho, la máxima exotermia de las llamas frías coincide con un máximo de concentración de HO_2 y con una tasa de formación de formaldehído máxima.

El final de la etapa de llamas frías está dado por la aparición de la zona NTC. La pérdida de reactividad causada por la competencia entre la formación de portadores de cadena y de largas olefinas estables provocan una pérdida de reactividad que hace que cese la exotermia.

El fuel deja de combinarse con el O_2 , deja de formarse HO_2 (de ahí que suceda en $\max [HO_2]$). Comienza la zona NTC.

II. Control de la etapa NTC:

Durante la zona NTC el HO_2 que queda se combina con el fuel lentamente. La concentración de formaldehído (que no es más que un hidrocarburo de cadena corta) llega a un máximo y se mantiene aproximadamente constante, sin que apenas se aprecie descomposición del mismo.

La oxidación del CH_2O no es posible debido a que durante la zona NTC no se genera apenas OH por la competencia con la formación de olefinas.

Una vez la lenta descomposición del fuel hace que la temperatura aumente, el H_2O_2 acumulado partir de las reacciones del HO_2 es capaz de descomponerse a través de la reacción de tercer cuerpo, ver figura 6.

Como se ha explicado previamente, esta reacción es la que controla el final de la zona NTC. Así, cuando comienza la descomposición del H_2O_2 en OH , dichos OH atacan al formaldehído, oxidándolo en CO .

No se ve acumulación de radicales OH pues estos son consumidos por el CH_2O .

La aparición de CO es un buen estimador del final de la zona NTC, así como la aparición de un máximo en H_2O_2 o una tasa de desaparición máxima de CH_2O .

III. Control de la etapa de alta temperatura:

Se produce la oxidación del CO en CO₂. Se observa un consumo de O₂. Debido a la alta exotermia existente aparece un pico de OH. Se termina de formar el H₂O (que ya empezó a generarse en las llamas frías). Ver figura 4.

2.1.6 Portadores de cadena

Los portadores de cadena son especies químicas que presentan un comportamiento acumulativo durante el tiempo de retraso, un efecto multiplicador en su velocidad de reacción (se trata de una reacción en cadena) y se consumen al desencadenarse el encendido.

Los portadores de cadena más característicos en la combustión, así como su evolución durante la misma, son:

- Formaldehído, CH₂O: Típico trazador del autoencendido. Su concentración crítica representa el inicio de la combustión.
- Peróxido de hidrógeno, H₂O₂: Controla el fin de la zona NTC.
- Radical hidroperóxido, HO₂: Típico trazador de las llamas frías.
- Todo pico de OH y de HO₂ se corresponde con un pico de exotermia (llamas frías o etapa de alta temperatura)
- El pico de exotermia de llamas frías coincide con una tasa de generación máxima de CH₂O y H₂O₂.
- El pico de exotermia de alta temperatura coincide con una tasa de desaparición máxima de CH₂O y H₂O₂.
- La zona NTC comienza con el ligero aumento de temperatura causado por las llamas frías, mientras que termina con la descomposición del H₂O₂ en dos OH mediante la reacción de tercer cuerpo ya mencionada con anterioridad.
- El OH generado mediante la reacción anterior no se acumula, puesto que se consume en su mayor parte en la oxidación del CH₂O a CO. En consecuencia, la descomposición del CH₂O, provocada por los OH, está controlada por la descomposición del H₂O₂, que forma radicales OH.
- El radical HO₂ se consume al oxidar el fuel en la etapa de combustión a alta temperatura.

2.1.7 Tiempo de retraso

El tiempo de inducción o tiempo de retraso es el tiempo de encendido en el cual se acumulan los portadores de cadena antes de alcanzar la concentración crítica.

Durante el tiempo de retraso, no se aprecian reacciones exotérmicas, por lo que no se observa liberación de calor. Tras el tiempo de retraso τ se produce la liberación de calor. Ver figura 4.

Cabe destacar que si bien durante el tiempo de retraso no hay exotermia, la actividad química es muy intensa, produciéndose y acumulándose portadores de cadena por oxidación del combustible hasta alcanzar la concentración crítica. Ver figura 4.

2.1.8 Criterios para el cálculo del tiempo de retraso

El cálculo del tiempo de retraso se realiza siguiendo diferentes criterios que pueden clasificarse en criterios físicos y criterios químicos.

Los criterios físicos dependen de propiedades físicas como la liberación de calor (Q), la tasa de liberación de calor (dQ/dt), la derivada de la presión (dP/dt) o la derivada de la temperatura (dT/dt , equivalente al criterio dP/dt).

Los criterios químicos dependen de propiedades químicas como son las concentraciones de los principales portadores de cadena trazadores del autoencendido es decir, $[CH_2O]$, $[H_2O_2]$, $[HO_2]$, $[OH]$.

En el ámbito experimental los criterios químicos son difíciles de emplear, pues obtener una evolución de las concentraciones de los portadores de cadena durante un ensayo experimental es generalmente inviable. Por ello, en este TFG se emplearán los criterios físicos, de los cuales es mucho más viable obtener datos experimentales.

Los criterios físicos para el cálculo del tiempo de retraso se pueden clasificar en criterios dependientes de la presión y criterios dependientes de la liberación de calor:

- Criterios basados en la presión: Debido a que la presión es una medida experimental, son más fiables. Además, la presión suele ser una señal fácil de filtrar, con lo cual, el cálculo de la derivada de la presión no padece un ruido excesivo. Por contra, en casos concretos como autoencendidos muy bruscos (picado de motor) se generan ondas de presión muy fuertes en la cámara que hacen que la señal sea muy difícil de filtrar, por lo que el dP/dt es difícil de obtener.
- Criterios basados en la liberación de calor: El problema fundamental de estos criterios es que la liberación de calor es una variable calculada a partir de otras variables experimentales, por lo que no es medida directamente. En el cálculo de la liberación de calor influyen las pérdidas de calor, las deformaciones y las fugas, siendo todos estos parámetros calculados a partir de modelos. Por tanto, la liberación de calor está vinculada a muchas hipótesis, y dependiendo de lo buenos que sean los modelos, así de óptima será la ley de liberación de calor y así de buenos serán los resultados. Además, en el cálculo influye la derivada de la presión y la derivada del volumen, con lo cual todo el ruido y todas las incertidumbres de estas señales (presión y volumen) aparecen amplificadas en la liberación de calor. La ley de liberación de calor se obtiene mediante la ecuación de la energía.

I. Estudio del autoencendido en función de propiedades físicas con valores normalizados.

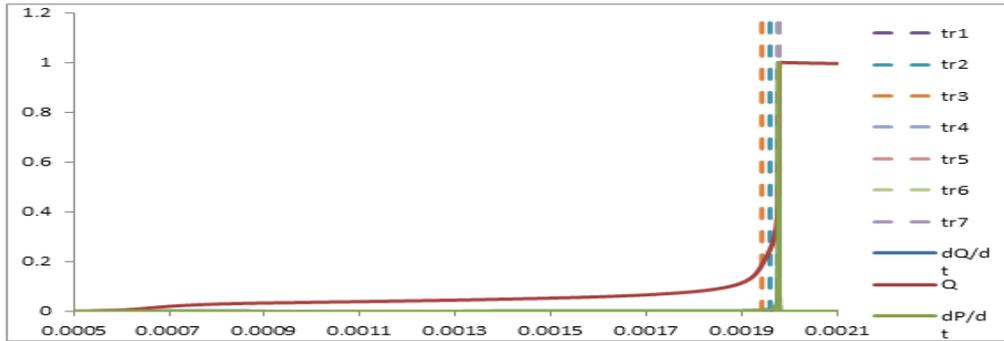


Figura 2.7. Estudio del autoencendido en función de propiedades físicas con valores normalizados.

II. Estudio del autoencendido en función de la concentración de los principales portadores de cadena con valores normalizados

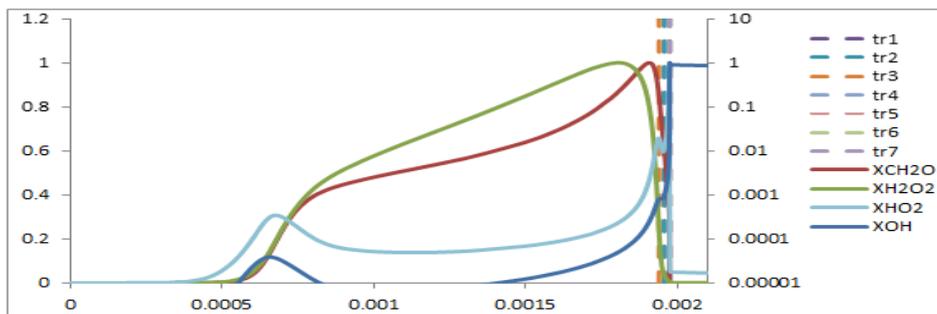


Figura 2.8. Estudio del autoencendido en función de la concentración de los principales portadores de cadena con valores normalizados

III. Estudio del autoencendido en función de la concentración de los principales productos con valores normalizados.

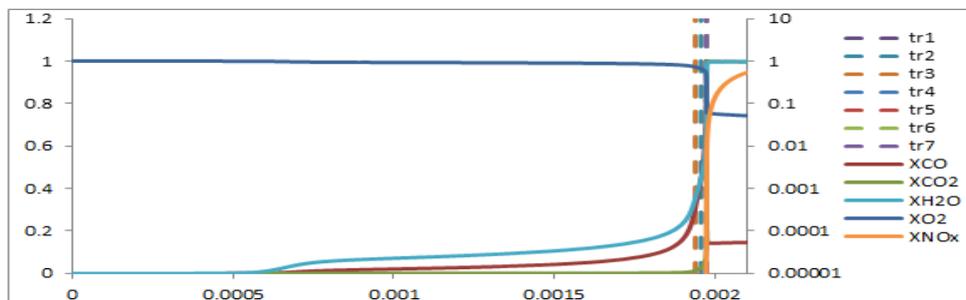


Figura 2.9. Estudio del autoencendido en función de la concentración de los principales productos con valores normalizados.

Los criterios empleados para el cálculo del tiempo de retraso en el presente TFG son los siguientes:

- 1) Método mediante el gradiente de presiones desarrollado en [Heufer, Bugler, Curran, 2013]. $dP/dt=\max$. Consiste en la obtención de la derivada de la presión con respecto al tiempo, para posteriormente seleccionar el instante de encendido como el tiempo en el cuál dicha derivada es máxima.
- 2) Método mediante el calor liberado, instante en el que se alcanza un 25% del calor total liberado. Consiste en la selección del instante de encendido como el tiempo en el cual se alcanza el 25% del calor total liberado.
- 3) Método mediante el calor liberado, pendiente. Recta que pase por el 25% y el 50% del calor total liberado desarrollado en [Dec, 2004]. El tiempo es el punto en el que esa recta corta a 0. Consiste en el cálculo de los tiempos en los cuales el calor liberado alcanza el 25% y el 50% de su máximo respectivamente, para posteriormente trazar una recta que una esos puntos. El punto en el cual esta recta intersecciona con el eje del tiempo, será considerado el instante de encendido.
- 4) Método mediante la tasa de calor liberado. Instante en el que se alcanza un 25% del máximo. Consiste en la selección del instante de encendido como el tiempo en el cual se alcanza el 25% del máximo de la tasa de liberación de calor.
- 5) Método mediante la tasa de calor liberado. Recta que pase por el 25% y el 50% del máximo de la tasa de calor liberado desarrollado en [Mitakos, Blomberg, Vandersickel, Wright, Schneider, Boulouchos, 2013]. El tiempo es el punto en el que la recta corte a 0. (Se toma el 25% y el 50% para alejarse de la zona en la que el ruido es más relevante). Consiste en el cálculo de los tiempos en los cuales la tasa de calor liberado alcanza el 25% y el 50% de su máximo respectivamente, para posteriormente trazar una recta que una esos puntos. El punto en el cual esta recta intersecciona con el eje del tiempo, será considerado el instante de encendido.
- 6) Método mediante la tasa de calor liberado desarrollado en [Colin, Pires, Jay, 2005]. $dQ/dt=\max$. Consiste en la selección del instante de encendido como el tiempo en el cual se alcanza el máximo de la tasa de liberación de calor.
- 7) Método mediante la derivada de la tasa de calor liberado. d^2Q/dt^2 . Instante en el que se alcanza el máximo. Consiste en la selección del tiempo de retraso como el instante en el cual la derivada de la tasa de liberación de calor alcanza el máximo.

Se observa en las gráficas que para un motor adiabático el criterio del máximo dP/dt y el criterio de la máxima dQ/dt coinciden, siendo ambas señales equivalentes. Como se ha mencionado en los principales portadores de cadena, estos criterios coinciden con los picos de OH y de HO2 y una tasa de desaparición máxima de CH2O y H2O2.

El criterio del 25% del calor liberado es un método de cálculo del tiempo de retraso puramente estadístico, que no está respaldado por ningún punto característico físico ni químico, y que tiene como objetivo la obtención de un punto en el cual se hay producido una exotermia significativa para seleccionarlo como tiempo de retraso.

El criterio del 25% de la dQ/dt es un método estadístico que no está respaldado por ningún punto característico físico ni químico, y que toma como inicio de la combustión un tiempo anterior a la máxima dQ/dt .

El criterio de la máxima d^2Q/dt^2 toma como instante de encendido el punto de inflexión o de cambio de curvatura de la dQ/dt . Es un método matemático que no está respaldado por ningún punto característico químico, teniendo en cuenta solamente un punto característico de una señal física. Obtiene tiempos de retraso que se sitúan entre los obtenidos por el 25% de la dQ/dt y el máximo de la dQ/dt .

Los criterios de cálculo del tiempo de retraso que emplean las rectas pendientes de dos puntos de las señales del calor liberado y la dQ/dt son métodos estadísticos que pretenden por un lado normalizar el instante de inicio de la combustión y por otro lado emplear valores para el cálculo alejados de la zona en la cual el ruido es significativo (mientras la exotermia sea reducida, las señales de calor liberado y de dQ/dt tienen un orden de magnitud similar al ruido de las medidas experimentales, lo cual puede inducir errores).

Finalmente, cabe destacar que el principal problema que presentan los métodos que emplean la señal del calor liberado Q es que los resultados que proporciona se ven distorsionados para encendidos en doble etapa, debido a la exotermia de las llamas frías (presentes en las gráficas, como se puede observar mediante el incremento de la señal de calor liberado Q antes de la exotermia principal de la combustión a alta temperatura). Se observa en las gráficas que para estos criterios el tiempo de retraso es más corto que en el resto, siendo este efecto más pronunciado cuanto mayor sea la zona de llamas frías.

2.1.9 Productos de cada etapa del proceso

En función de la etapa del proceso de combustión y el mecanismo de baja, media o alta temperatura que tiene mayor influencia en la misma, se obtienen diferentes especies químicas como productos que se expondrán a continuación:

- En la etapa de llamas frías se tienen altas concentraciones de hidrocarburos sin quemar. Se inicia la producción de H_2O y CO , en mínimas cantidades. La producción de óxidos de nitrógeno, debido a las bajas temperaturas, es apenas apreciable. El consumo de oxígeno es muy reducido.
- En la etapa de la zona NTC, el formaldehído se oxida y se tienen elevadas concentraciones de CO , así como un notable incremento en la producción de H_2O . Se inicia la producción de CO_2 . La producción de óxidos de nitrógeno continúa siendo mínima, así como el consumo de oxígeno.
- Tras la etapa de alta temperatura, el CO se oxida a CO_2 , que es el principal producto de la combustión, consumiendo para ello oxígeno. Se obtiene un pico en la formación de H_2O , que alcanza su máximo. Debido a las elevadas temperaturas alcanzadas en esta etapa, se observa una elevada producción de óxidos de nitrógeno.

2.2 Formación de óxidos de nitrógeno en la combustión de combustibles fósiles

El término general de los óxidos de nitrógeno engloba desde un punto de vista formal los siguientes compuestos: NO, NO₂, N₂O₂, N₂O₄, N₂O, N₂O₃ y NO₃, siendo éste último inestable.

Los principales óxidos de nitrógeno emitidos durante la combustión de combustibles fósiles son, el óxido nítrico (NO), dióxido de nitrógeno (NO₂) y óxido nitroso (N₂O). El término NO_x se aplica solo a los dos primeros, debido a su presencia mayoritaria y facilidad de transformación mutua en presencia del O₂ del aire.

A la temperatura ambiente el oxígeno y el nitrógeno tienen poca tendencia a reaccionar entre sí, puesto que su reacción de formación es extremadamente endotérmica. La energía necesaria sólo está disponible a temperaturas altas, como las generadas en los procesos de combustión (de 1573K a 2773K). Incluso a tales temperaturas únicamente se producen cantidades muy pequeñas de NO, pero tienen importancia en términos de presencia en la atmósfera.

En general podemos decir que el tiempo de residencia de los gases en la zona de combustión, así como la temperatura de la llama, y la concentración de oxígeno determinan la cantidad de NO que realmente se forma.

Si el efluente de la combustión se enfría lentamente a medida que es emitido, el NO se convertiría en O₂ y N₂. Sin embargo, en la mayor parte de los equipos de combustión, una fracción importante de la energía térmica de los productos gaseosos se cede rápidamente ya bien por la conversión en trabajo o por transferencia de calor. Bajo tales circunstancias el NO permanece en los escapes a baja temperatura, pues no tiene tiempo de descomponerse.

El NO₂ aparece debido a la reacción del NO con el O₂, pero esto tan sólo sucede a bajas temperaturas (menos de 423K); así pues se encuentra muy poco NO₂ en la mezcla gaseosa a temperaturas de combustión y podemos decir que el 90 % del total de NO_x que se emite es NO.

Centrándonos ya en los mecanismos de formación de los óxidos de nitrógeno podemos distinguir tres tipos, a los que denominaremos:

NO_x térmico: producido por oxidación del nitrógeno contenido en el aire de combustión.

NO_x del combustible, resultante de la oxidación del nitrógeno contenido en el combustible. Este mecanismo de formación de NO_x no será estudiado en profundidad, debido a que la presencia de nitrógeno en combustibles para automoción es despreciable.

NO_x súbito, se forma por conversión del nitrógeno molecular en presencia de hidrocarburos, en el frente de la llama.

Por tanto la cantidad de NOX producido depende fundamentalmente, del diseño y tipo de motor, de las propiedades del combustible y de las condiciones en que tienen lugar la combustión, como la temperatura, el exceso de aire y el tiempo de residencia.

2.2.1 Formación de NOX térmico

El mecanismo de reacciones que se producen es conocido con el nombre de Zeldovich, el cual se expone a continuación:

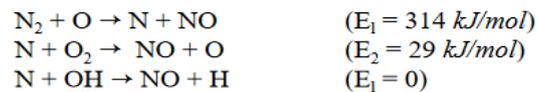


Figura 2.10. Mecanismo de Zeldovich.

La formación del NO térmico crece exponencialmente con la temperatura y es considerable la cantidad del mismo que se puede generar en presencia de una llama con temperaturas a partir de los 1773K. Del mismo modo, cuando las temperaturas de combustión son inferiores a 1273K, las emisiones de NO se reducen significativamente, dependiendo en tal caso, del contenido en nitrógeno del combustible.

La conversión es pues favorecida por las altas temperaturas, e intervienen además como condiciones favorables el tiempo de residencia en la zona de llama y la concentración de oxígeno, siendo proporcional la formación de NO térmico a la raíz cuadrada de la concentración de oxígeno.

La formación de NO térmico, es el mecanismo predominante por el que se producen las emisiones de NOX, cuando se queman combustibles líquidos y gaseosos.

2.2.2 Formación de NOX súbito

La formación del NO súbito se produce por reacción de nitrógeno molecular con fragmentos de hidrocarburos en el frente de llama. Los enlaces N=N pueden romperse fácilmente en presencia de radicales CH, CH₂, etc.

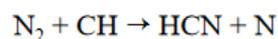


Figura 2.11. Reacción de formación de nitrógeno molecular

Los NOX se forman en el frente de llama, donde las temperaturas son altas y donde existe una concentración importante de átomos de oxígeno libre.

Como la temperatura de los gases de combustión decrece conforme el pistón se aleja del PMS, la formación del NO térmico deja de producirse rápidamente debido a que la reacción de formación es fuertemente endotérmica. La concentración de radicales necesarios para la formación de NOX del

combustible también decrece debido a que se consumen los hidrocarburos por el proceso de combustión.

2.2.3 Formación de NO₂

La cantidad de NO₂ observada en la práctica varía entre el 1-5 % del total de NO_x producido, dependiendo del tipo de motor y la operación.

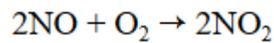


Figura 2.12. Reacción de formación de NO₂.

Esta reacción es favorecida termodinámicamente por el descenso de temperatura.

2.2.4 Formación de N₂O

El N₂O se forma entre las temperaturas de 1073K y 1373K en la zona de postcombustión y tiene relación con la cantidad de HCN y NH₃. A temperaturas superiores a estas, el N₂O es inestable, reduciéndose a N₂.

La cantidad formada en la mayoría de las instalaciones convencionales de combustión es pequeña. Esto ocurre porque en la mayoría de las plantas los radicales del tipo HCN son producidos en la zona de combustión, donde las temperaturas son del orden de 1773K, a las cuales no se forma N₂O. Al llegar los gases a temperaturas de 1073K a 1373K, intervalo de formación del N₂O, los radicales HCN necesarios para su formación se han consumido en otras reacciones.

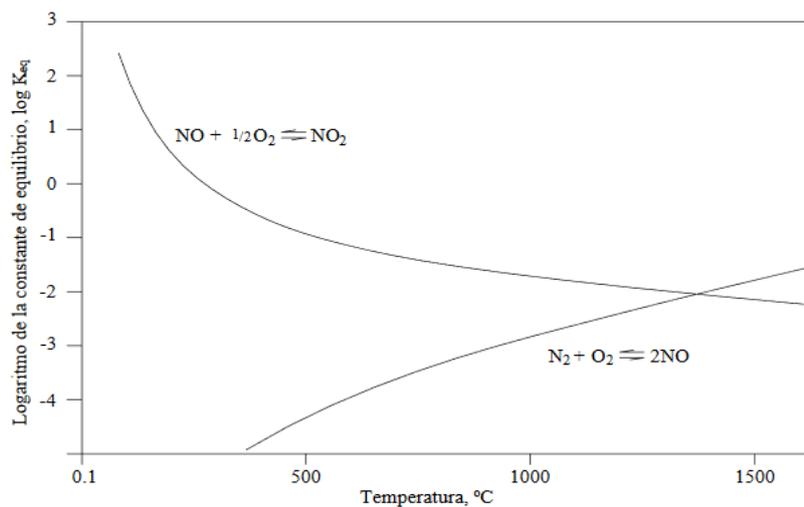


Figura 2.13. Evolución de la formación de NO₂ y NO con la temperatura.

2.2.5 Tecnologías para la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno

Como se ha descrito previamente, los óxidos de nitrógeno (NOX) formados durante la combustión de combustibles fósiles son principalmente el NO, NO₂ y N₂O. El NO contribuye en más de un 90 % del total de NOX emitido, en la mayoría de los sistemas de combustión.

Las técnicas para reducir las emisiones de óxidos de nitrógeno se dividen en primarias y secundarias. Las medidas primarias, han sido desarrolladas para controlar la formación de NOX en el motor, mientras que las secundarias son sistemas para el tratamiento de los humos de combustión. Debido al ámbito de aplicación del presente TFG, sólo serán descritas las técnicas primarias, en concreto las relacionadas con la recirculación de gases de escape.

Las medidas primarias necesitan tomar en cuenta los diferentes mecanismos de formación además de los principales parámetros de NOX:

- Temperatura de combustión.
- Contenido de O₂ en la zona de combustión.
- Tiempo de residencia del nitrógeno en la zona de alta temperatura.

Las medidas básicas para evitar la formación de NOX térmico pasan por la reducción de las temperaturas máximas, del tiempo de residencia, y de la concentración de oxígeno atómico en zonas de alta temperatura.

2.2.6 Recirculación de gases de escape

La recirculación de gases de escape (EGR) tiene como finalidad reducir el nivel de oxígeno disponible en la zona de combustión, el cual implica a su vez un enfriamiento, que produce un descenso en la temperatura de la llama. De esta forma, se reduce la formación tanto de NO combustible como térmico. La recirculación de los gases para mezclarlos con el aire de combustión, ha resultado ser una medida muy efectiva para la reducción de NOX en procesos relacionados con los motores de combustión interna alternativos. El EGR se puede clasificar en EGR interno y EGR externo.

El EGR externo se realiza mediante un circuito de recirculación. Puede ser de alta presión y temperatura (en verde en la figura) o de baja presión y temperatura (en azul en la figura).

El EGR externo de alta presión se recircula sin pasar por el turbogrupo (la turbina y el compresor). Debido a la elevada temperatura de los gases del EGR, la densidad de la mezcla en la cámara de combustión se reduce, reduciéndose a su vez por lo tanto el rendimiento volumétrico del motor.

El EGR externo de baja presión se recircula pasando por el turbogrupo. La temperatura de estos gases de escape recirculados es más baja que en el caso de alta presión, por lo que no se reduce la densidad de la mezcla en la cámara de combustión y no se reduce el rendimiento volumétrico. Sin embargo, las menores temperaturas de este método presentan diversos problemas de condensación de gases recirculados, que conllevan la corrosión del circuito de recirculación y afectan muy

negativamente a la vida útil del compresor. Por ello, este método requiere del empleo de sistemas de filtrado y de un mantenimiento más exhaustivo que el anterior.

Éste es el método de EGR empleado en el motor de dos tiempos.

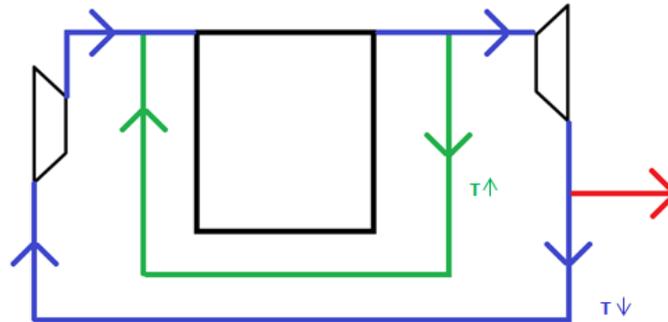


Figura 2.14. Esquema de los circuitos de recirculación de EGR interno.

El EGR interno se realiza controlando la apertura y cierre de válvulas de la cámara de combustión, así como el volumen muerto, para mantener gases de escape internos en el motor (IGR), evitándose así el sistema de recirculación. Este sistema es el más sencillo, pero presenta los inconvenientes de ser muy difícil de controlar y disminuir el rendimiento volumétrico del motor.

Este método de EGR también se encuentra presente en el motor de dos tiempos, no por diseño específico, sino por las propias características de cualquier motor de dos tiempos.

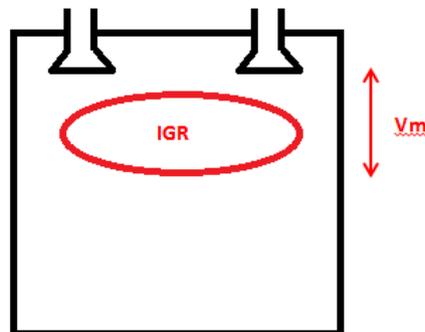


Figura 2.15. Esquema del método de EGR interno.

Finalmente, cabe destacar que si bien el EGR reduce la concentración de oxígeno en la mezcla inicial del motor, por lo que el tiempo de retraso tiende a alargarse; también aumenta la temperatura de dicha mezcla, con el consiguiente efecto de acortar el tiempo de retraso. El balance entre estos dos efectos determinará la evolución del tiempo de retraso en el autoencendido. No obstante, la temperatura alcanzada en la combustión será siempre inferior a la de un caso sin empleo de EGR, por lo que la emisión de óxidos de nitrógeno será menor independientemente de los efectos comentados para el tiempo de retraso.

2.3 Métodos numéricos para el estudio del tiempo de retraso: Mecanismos de cinética química. Chemkin.

El objetivo de realizar simulaciones teóricas que predigan el comportamiento observado en los experimentos de autoencendido en mezclas homogéneas es obtener modelos predictivos que permitan obtener resultados precisos en un tiempo computacional reducido sin necesidad de realizar ensayos experimentales.

Para el desarrollo de estos modelos predictivos se emplean métodos numéricos para el estudio del tiempo de retraso, concretamente mecanismos de cinética química. Los mecanismos de cinética química son conjuntos de especies y reacciones químicas, junto con sus propiedades termodinámicas, que describen el comportamiento de dichas especies para cualquier reacción que se produzca dentro de unos rangos de propiedades físicas y químicas. Las distintas reacciones de un modelo de cinética química aparecen como términos fuente en la ecuación de conservación de especies de cada una de las especies involucradas, con las concentraciones de las especies como incógnitas, siendo el modelo completo un sistema de ecuaciones diferenciales.

La ventaja de la validación de las reacciones de un modelo de cinética química es su reproducibilidad en cualquier ambiente y reacción que cumpla los criterios previamente mencionados, dotándolos así de gran versatilidad.

Los modelos de cinética química empleados para las simulaciones de combustión están clasificados en función del combustible que se quiere simular, siendo los combustibles con mayor contenido en carbonos los que presentan un mayor número de especies y reacciones. A su vez, y debido a la gran cantidad de reacciones y especies químicas que tiene en cuenta estos modelos, se pueden clasificar el modelos detallados y modelos reducidos, siendo los primeros más exactos pero de un mayor tiempo computacional y los segundos menos exactos pero de un tiempo computacional menor. Esto permite emplear el modelo más adecuado para cada aplicación concreta, siendo los modelos detallados adecuados por ejemplo para estudios teóricos exhaustivos, donde la exactitud de los resultados es crítica, y los modelos reducidos adecuados por ejemplo para la programación de los elementos de control de un motor, donde el tiempo computacional es crítico.

Un ejemplo de modelo de cinética química detallado es el modelo "Gasoline Surrogate" desarrollado por el "Lawrence Livermore National Laboratory", que consta de 1404 especies químicas y 6003 reacciones. Por otra parte, los dos modelos reducidos de este mecanismo constan de 679 y 323 especies respectivamente.

Debido a la gran dificultad de resolución de los sistemas de ecuaciones diferenciales con tan elevado número de ecuaciones e incógnitas, se han desarrollado diversos elementos de software que resuelvan y proporcionen los resultados de interés de estos modelos.

El software de resolución de ecuaciones diferenciales de cinética química empleado en este TFG es el CHEMKIN PRO, desarrollado por Reaction Design (ANSYS), y que incluye distintos modelos que permiten resolver mecanismos de cinética química para el estudio de tiempos de retraso,

velocidades de combustión, composiciones de equilibrio, temperaturas de llama, emisiones contaminantes, etc.

CHEMKIN trabaja con un fichero que contiene las reacciones y las especies químicas del mecanismo y otro fichero que contiene las propiedades termodinámicas de las especies químicas. Dicho mecanismo se resuelve para un modelo físico que representa un problema concreto. Por ejemplo, el modelo de reactor cerrado homogéneo motor de combustión interna alternativo (ICE) permite resolver el mecanismo químico bajo condiciones de cámara de combustión de un motor.

A su vez, y en función del modelo de simulación que se emplee, se deberán introducir determinados parámetros como valores iniciales. Los modelos y los parámetros que se han empleado en este TFG serán desarrollados en el apartado de METODOLOGÍA.

3. Metodología

3.1 Descripción de la instalación experimental

3.1.1 Ubicación

La ubicación de la instalación experimental es la Universidad Politécnica de Valencia, en el edificio de investigación 6D, perteneciente al grupo CMT-Motores Térmicos. En el interior de dicho edificio 6D se encuentran diversos laboratorios de ensayos con motores, habiéndose implementado la instalación en la sala de ensayos número 7.

3.1.2 Motor

En motor mediante el cual se han realizado los ensayos a partir de los cuales se han obtenido los datos experimentales para la realización del presente TFG se trata de un modelo en desarrollo por parte del grupo Renault-Francia Automóviles en colaboración con el grupo CMT-Motores Térmicos.



Figura 3.1. Motor de dos tiempos.

La descripción detallada del motor será adjuntada en el Anexo correspondiente, comentándose en este documento solamente los aspectos característicos más destacables del motor, que son los siguientes:

- El empleo de una bomba de barrido independiente, la cual está materializada en la instalación por medio de un compresor de aire a baja presión.
- La combinación utilizada de lumbreras de admisión y válvulas de escape situadas en la cabeza del cilindro, cuya apertura y cierre se puede variar mediante el sistema VVT (Variable Valve Timing o Distribución de Válvulas Variable). De este modo, el motor se puede clasificar como de barrido asimétrico y uniflujo.
- El sistema de inyección directa asistido por aire, que permite unos más eficientes consumos de combustible.

- La lubricación de todos los elementos del motor se realiza mediante aceite SAE5W30. Se trata de un sistema de lubricación independiente, hecho que permite reducir los problemas de arranque en frío, ya que es posible forzar al aceite a alcanzar la temperatura de trabajo antes de poner el motor en marcha.
- La refrigeración del motor se realiza mediante un circuito de agua. Del mismo modo que el sistema de lubricación, la refrigeración también es un sistema independiente, reduciendo del mismo modo los problemas del arranque en frío.

Las especificaciones técnicas del motor vendrán referidas en la tabla 1 presentada a continuación.

Motor de gasolina de dos tiempos	
Diámetro del pistón (mm)	70.5
Carrera del cilindro (mm)	76.8
Longitud de la biela (mm)	141.5
Relación de compresión	11
Máximo levantamiento de las válvulas de escape (mm)	7.208
Velocidad máxima (rpm)	5000
Potencia máxima (KW)	15

Tabla 3.1. Especificaciones técnicas del motor.

3.1.4 Sistema de adquisición de datos. Sensores

Sensores de presión: Se emplean cinco sensores de presión instantánea que se encuentran en el interior y en las proximidades de la cámara de combustión, detallados en la figura 2.

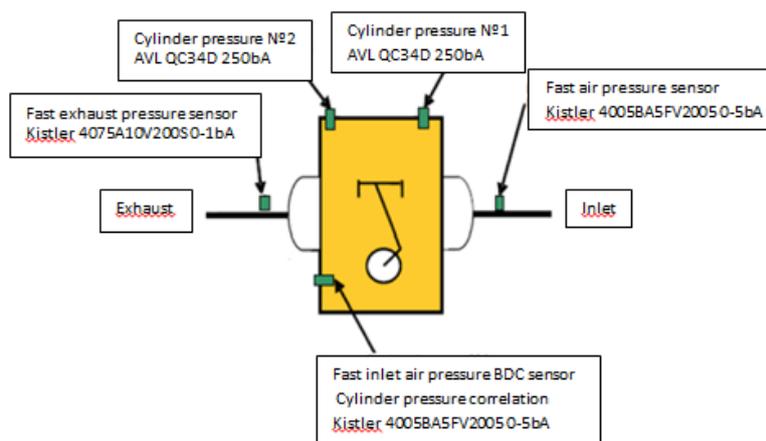


Figura 3.2. Distribución de los captadores de presión situados en el interior y en las proximidades de la cámara de combustión del motor de dos tiempos.

Sensores de posición: Los sensores de posición registran la posición instantánea del cigüeñal lo que permite, conociendo la geometría del motor, detallar la evolución de la posición del pistón en función del tiempo a partir de la evolución de las variaciones del ángulo del cigüeñal con respecto al tiempo.

Sensores de apertura y cierre de válvulas: Se ha instalado una galga extensiométrica en cada uno de los balancines, de modo que se registren sus deformaciones instantáneas causadas por el movimiento de las válvulas. De esta forma se puede determinar el momento de apertura y cierre del sistema de admisión y escape.

Caudalímetros: Se emplean para controlar el caudal de aire, combustible, EGR, agua, aceite del motor.

Sensores de temperatura: Se emplean termopares para realizar las medidas de temperatura en zonas críticas del motor como el sistema de admisión, la zona de estabilización junto a las lumbreras, la salida de la cámara de combustión (gases de escape).

Sensores para la determinación de la composición de los gases de escape: Una sonda lambda mide la cantidad de oxígeno. Una sonda absorbe parte de los gases y los conduce al analizado de emisiones de la marca HORIBA, instrumento que determina las emisiones contaminantes presentes en los gases de escape. Un medidor de humos determina la opacidad de los gases de escape.

La calibración y el correcto funcionamiento de los sensores y los sistemas de adquisición de datos son fundamentales para obtener medidas precisas, coherentes y representativas de los ensayos realizados. Para ello, es fundamental conocer las tolerancias de los sensores, así como la fiabilidad de los datos obtenidos. Unos datos que proporcionen información imprecisa condicionan en gran medida las conclusiones que se pueden extraer de los ensayos experimentales.

Con respecto a los datos obtenidos a partir de los sensores previamente descritos, cabe destacar que las mediciones de oxígeno mediante la sonda lambda son las más imprecisas, siendo contrastado este hecho con la experiencia en múltiples ensayos en los cuales se ha empleado, pudiendo dar valores no tan fiables como el resto de sensores.

Así mismo, la sonda de análisis de los gases de escape no proporciona una composición completa de dichos gases, sino que detalla algunas de las especies químicas más representativas como son el O₂, CO₂, CO, NO_x, CH₄, HC (hidrocarburos sin quemar, se realiza una medición del número de carbonos).

3.2 Mecanismo de cinética química empleado. Submodelo de NOx

El mecanismo de cinética química empleado para las simulaciones es el desarrollado por el “Lawrence Livermore National Laboratory” para la simulación de mezclas de combustibles de sustitución para la gasolina. Consta de 1404 especies químicas y 6003 reacciones. Se ha proporcionado a Chemkin el documento del mecanismo de cinética química y el documento de propiedades termodinámicas.

A este mecanismo principal se le ha acoplado un submodelo de NOx desarrollado por el Combustion Research Group de la UC San Diego, que consta de 28 especies y 52 reacciones. Este mecanismo incluye la formación de NOx por vía térmica y la formación de NOx súbitos por conversión del nitrógeno molecular en presencia de hidrocarburos, en el frente de la llama. Se ha proporcionado a Chemkin el documento del mecanismo de cinética química CK_2014-10-04 y el documento de propiedades termodinámicas THERM_2012-09-07.

3.3 Modelos de Chemkin

Los modelos de Chemkin que se han empleado han sido el ICE para realizar las simulaciones del motor de combustión interna alternativo de dos tiempos y el reactor cerrado homogéneo (PSR por sus siglas en Inglés “Perfect Stirred Reactor”) para realizar las simulaciones del estudio paramétrico de sensibilidad de los NOx y el tiempo de retraso frente al dosado relativo y la fracción molar de oxígeno, así como las simulaciones para realizar el estudio de la composición inicial de la mezcla.

El reactor cerrado homogéneo consiste en un volumen adiabático ideal en el cual, a partir de unos datos de presión y temperatura iniciales y una composición química inicial, resuelve la ecuación de la energía durante el tiempo de simulación estipulado, obteniendo la evolución de las propiedades físicas y químicas de la mezcla inicial para cada instante.

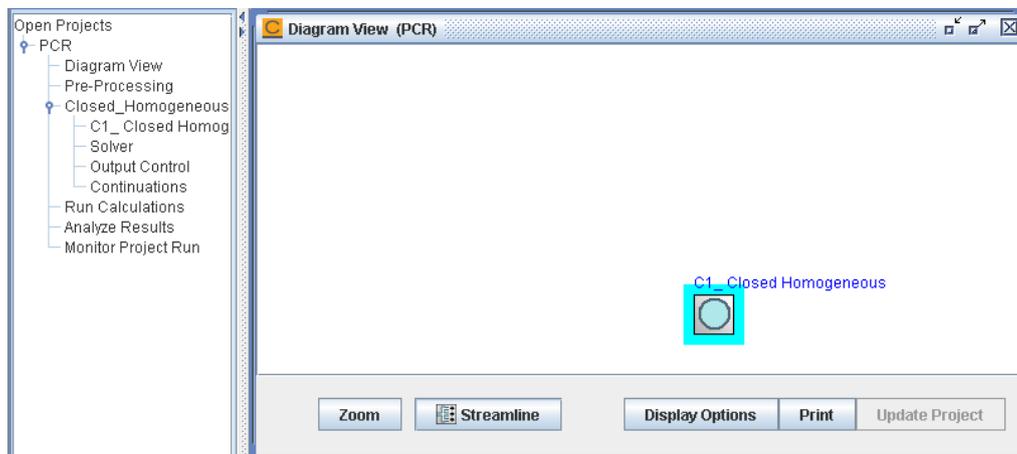


Figura 3.4. Imagen de la pantalla inicial de CHEMKIN para un modelo de PCR.

La presión y la temperatura iniciales se corresponden con las presiones y temperaturas medias de encendido de los diferentes experimentos evaluados en este trabajo. La composición química inicial se calcula en función del dosado relativo y la fracción molar de oxígeno, suponiendo una mezcla de aire y combustible en la cual el aire es aire seco compuesto por N₂, O₂, Ar.

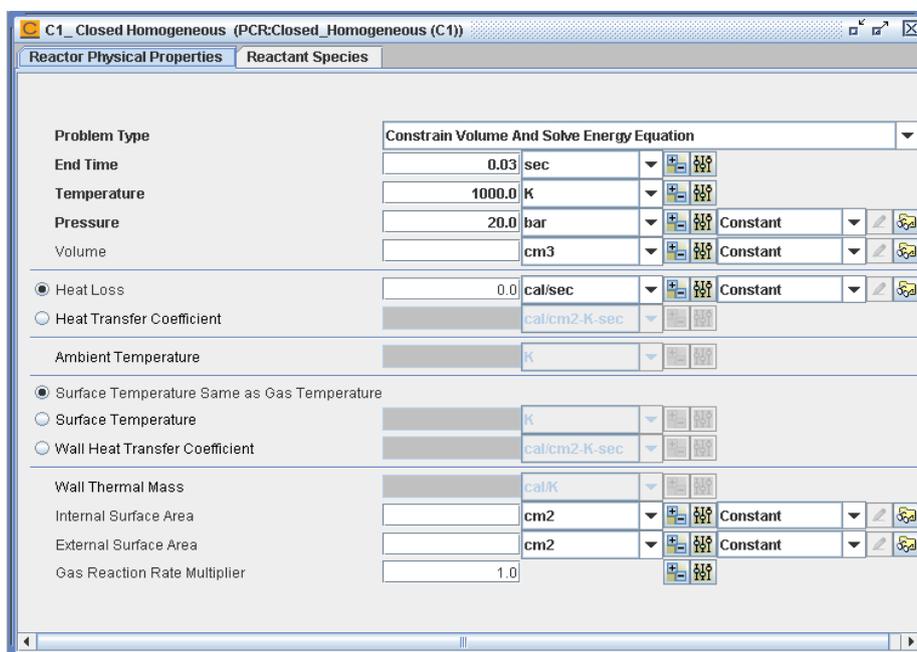


Figura 3.5. Imagen de la pantalla de CHEMKIN en la cual se requieren de los valores iniciales de las propiedades físicas para un modelo PCR.

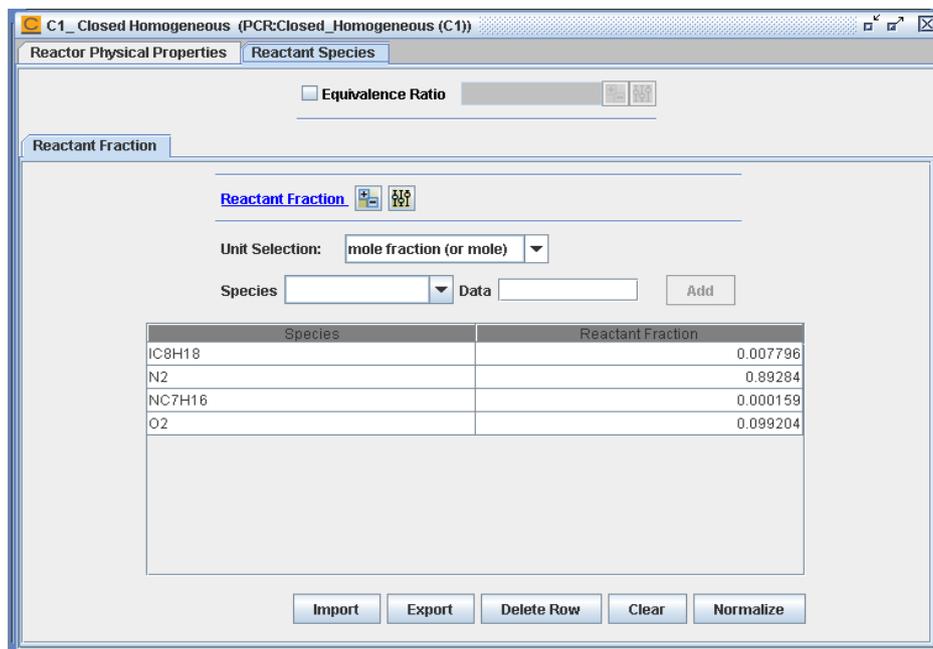


Figura 3.6. Imagen de la pantalla de CHEMKIN en la cual se requieren de los valores iniciales de las propiedades químicas para un modelo PCR.

La principal ventaja del PSR es la simplicidad del cálculo, al suponer condiciones ideales. En consecuencia, el tiempo de simulación es mucho más reducido frente al modelo de ICE, aunque los resultados no pueden compararse con los de un motor real. Sin embargo, permite obtener resultados de sensibilidad de distintos parámetros físico-químicos con los que establecer relaciones y órdenes de magnitud que podrán ser empleados para contrastar hipótesis de un modo mucho más rápido que empleando el modelo ICE.

El motor de combustión interna (ICE por sus siglas en Inglés “Internal Combustion Engine”) simula las condiciones de un motor cero-dimensional homogéneo. Para realizar las simulaciones con este modelo, se debe proporcionar a Chemkin los datos de la temperatura y la presión iniciales, la composición química inicial y los datos geométricos del motor, así como el modelo de pérdidas de calor y el tiempo de simulación.

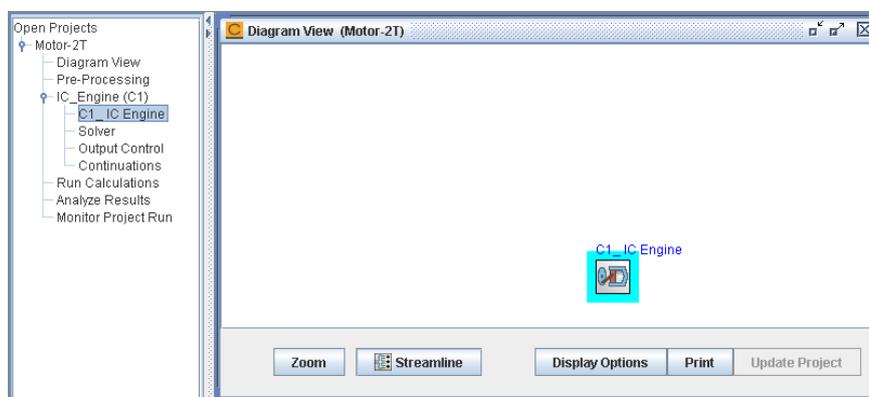


Figura 3.7. Imagen de la pantalla inicial de CHEMKIN para un modelo de ICE.

- La presión inicial es un dato obtenido en cada ensayo experimental.
- La geometría del motor es proporcionada a Chemkin en forma de un perfil de volúmenes, del mismo modo, las pérdidas de calor son proporcionadas a Chemkin en forma de un perfil de pérdidas de calor.
Los perfiles de volúmenes y pérdidas de calor introducidos en Chemkin están recortados, puesto que no es necesario introducir un número excesivo de puntos, ya que Chemkin trabaja con una nube de los mismos, interpolando entre ellos cuando le resulta necesario, ya que emplea un paso de tiempo variable a la hora de realizar las simulaciones, siendo más detallada la zona de la combustión (con pasos de tiempo más cortos) y menos detalladas el resto de zonas (con pasos temporales más largos), en función de la criticidad de las reacciones químicas presentes en cada instante.
- El tiempo de simulación se corresponde con el tiempo transcurrido desde que la mezcla homogénea se encuentra en la cámara de combustión hasta el momento en el cual, posteriormente a la combustión de la mezcla, la temperatura es lo suficientemente baja como para considerar que la composición en ese instante es la misma que la de los gases de escape.
- La composición inicial y la temperatura inicial se obtienen mediante el método desarrollado en el presente TFG.

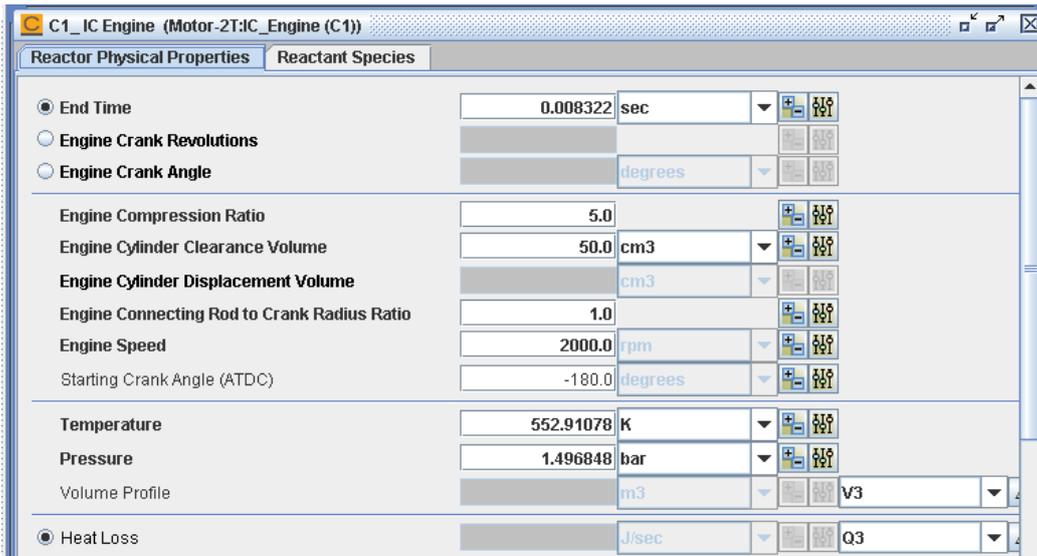


Figura 3.8. Imagen de la pantalla de CHEMKIN en la cual se requieren de los valores iniciales de las propiedades físicas para un modelo PCR.

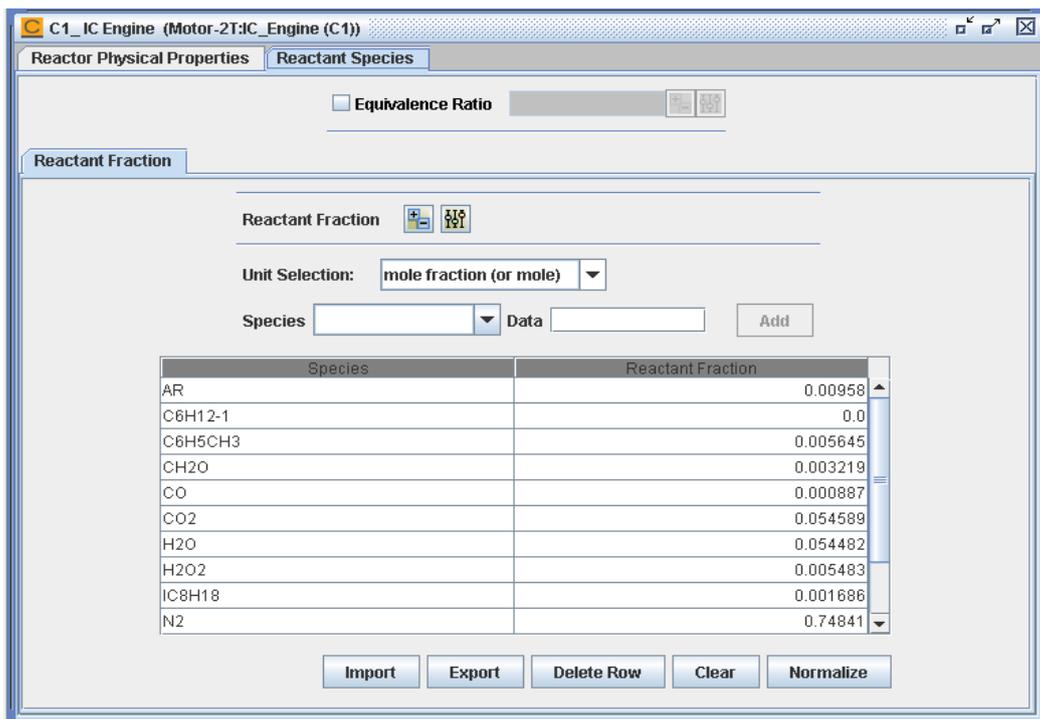


Figura 3.9. Imagen de la pantalla de CHEMKIN en la cual se requieren de los valores iniciales de las propiedades químicas para un modelo ICE.

El ICE es la herramienta que nos permite simular el comportamiento del motor de dos tiempos, y los resultados de las simulaciones de este modelo serán comparadas con los resultados de los ensayos experimentales. En comparación con el PSR, este modelo presenta menos simplificaciones, simulando un motor real de una forma mucho más efectiva. Si bien las herramientas CFD realizan

simulaciones mucho más detalladas y ajustadas al comportamiento de un motor real, la ventaja del modelo empleado en este trabajo es la obtención de resultados lo suficientemente buenos en un tiempo de simulación mucho más corto.

3.4 Definición del tiempo de retraso.

- 1) Método mediante el gradiente de presiones. $dP/dt=\max$. Consiste en la obtención de la derivada de la presión con respecto al tiempo, para posteriormente seleccionar el instante de encendido como el tiempo en el cuál dicha derivada es máxima.
- 2) Método mediante el calor liberado, instante en el que se alcanza un 25% del calor total liberado. Consiste en la selección del instante de encendido como el tiempo en el cual se alcanza el 25% del calor total liberado.
- 3) Método mediante el calor liberado, pendiente. Recta que pase por el 25% y el 50% del calor total liberado. El tiempo es el punto en el que esa recta corta a 0. Consiste en el cálculo de los tiempos en los cuales el calor liberado alcanza el 25% y el 50% de su máximo respectivamente, para posteriormente trazar una recta que una esos puntos. El punto en el cual esta recta intersecciona con el eje del tiempo, será considerado el instante de encendido.
- 4) Método mediante la tasa de calor liberado. Instante en el que se alcanza un 25% del máximo. Consiste en la selección del instante de encendido como el tiempo en el cual se alcanza el 25% del máximo de la tasa de liberación de calor.
- 5) Método mediante la tasa de calor liberado. Recta que pase por el 25% y el 50% del máximo de la tasa de calor liberado. El tiempo es el punto en el que la recta corte a 0. (Se toma el 25% y el 50% para alejarse de la zona en la que el ruido es más relevante). Consiste en el cálculo de los tiempos en los cuales la tasa de calor liberado alcanza el 25% y el 50% de su máximo respectivamente, para posteriormente trazar una recta que una esos puntos. El punto en el cual esta recta intersecciona con el eje del tiempo, será considerado el instante de encendido.
- 6) Método mediante la tasa de calor liberado. $dQ/dt=\max$. Consiste en la selección del instante de encendido como el tiempo en el cual se alcanza el máximo de la tasa de liberación de calor.
- 7) Método mediante la derivada de la tasa de calor liberado. d^2Q/dt^2 . Instante en el que se alcanza el máximo. Consiste en la selección del tiempo de retraso como el instante en el cual la derivada de la tasa de liberación de calor alcanza el máximo.

3.5 Estudio paramétrico realizado.

La selección de los ensayos que cumplen las condiciones de homogeneidad necesarias para poder plantear la hipótesis del autoencendido de una mezcla homogénea es una parte fundamental de este trabajo. Para ello se han tenido en cuenta los siguientes parámetros:

- Dosado relativo Fr: Los ensayos con un dosado relativo ligeramente pobre tendrán una mayor facilidad para mezclarse homogéneamente. El rango de dosados relativos tomados en los ensayos varía en un rango de 0.3 a 0.8.
- Masa de aire trasegada por el inyector: Cuanto mayor sea esta masa de aire, la mezcla aire combustible será más homogénea en el inyector, permitiendo chorros de inyección óptimos que pulverizan adecuadamente el combustible en la cámara de combustión, favoreciendo la homogeneidad de la mezcla.
- Ángulos de inicio y fin de la inyección (SOI y EOI por sus siglas en Inglés “Start of injection”, End of injection”), medidos en grados de giro del cigüeñal antes del punto muerto superior (°BTDC por sus siglas en inglés “Before top dead center”): Definen el tiempo que dura la inyección. Mayores tiempos de inyección conllevan generalmente mayores grados de homogenización, con algunas particularidades. Cuanto mayor sea el SOI, más homogénea será la mezcla. Sin embargo, las mezclas más homogéneas se asocian a EOI medios, debido a que si la inyección se alarga demasiado el combustible no tiene tiempo a mezclarse adecuadamente en la cámara de combustión antes de que se produzca el autoencendido.
- Desviación de la presión: Se calcula la desviación estándar de la presión media indicada entre 250 ciclos como medida de la estabilidad. Si dicha desviación estándar es baja (combustión estable) se trata de un autoencendido, si es alta (dispersión cíclica) se trata de un encendido por bujía.

	A	B	C	D	CB	CC	CD	CE
	Test number	Date	Time test	Test title	Start of the air-fuel injection 1 [° BTDC]	Start of the air-fuel injection 2 [° BTDC]	End of the air-fuel injection 1 [° BTDC]	End of the air-fuel injection 2 [° BTDC]
1								
2								
3	C	19/12/2014	10:47:39	CMT5440	0	0	0	0
4	B45	19/12/2014	11:03:47	CMT5441	100.0625	0	42.93775	0
5	B46	19/12/2014	11:22:09	CMT5442	140.58025	0	80.2185	0
6	A30_155_140	19/12/2014	11:42:39	CMT5443	155.171	0	139.947	0
7	A30_155_100	19/12/2014	11:47:37	CMT5444	155.198	0	99.948	0
8	A30_155_80	19/12/2014	11:51:54	CMT5445	155.198625	0	79.948625	0
9	A30_155_45	19/12/2014	11:56:23	CMT5446	155.196125	0	44.946125	0
10	A30_140_120	19/12/2014	12:01:24	CMT5447	140.199125	0	119.949125	0
11	A30_140_100	19/12/2014	12:05:09	CMT5448	140.19775	0	99.94775	0
12	A30_140_80	19/12/2014	12:11:17	CMT5449	140.196875	0	79.946875	0
13	A30_140_45	19/12/2014	12:15:48	CMT5450	140	0	44.94875	0
14	A30_110_95	19/12/2014	12:20:04	CMT5451	110.0005	0	94.9455	0
15	A30_110_75	19/12/2014	12:23:29	CMT5452	110	0	74.947875	0
16	A30_110_45	19/12/2014	12:27:32	CMT5453	110	0	44.947375	0
17	A30_80_65	19/12/2014	12:30:35	CMT5454	80.00025	0	64.944375	0
18	A30_80_45	19/12/2014	12:33:32	CMT5455	80.000375	0	44.945375	0

Figura 3.10. Ejemplo de la selección de ensayos para los experimentos a 4000 rpm. Detalle del criterio de los ángulos de inicio y de fin de la inyección.

	rpm	Presión Inicial (bar)	Temperatura Inicial (K)
CMT5444	4000	1.50842058	557.522474
CMT5445	4000	1.52055009	557.717553
CMT5447	4000	1.49684781	552.91078
CMT5448	4000	1.50895258	553.740331
CMT5449	4000	1.50304882	552.557326
CMT6393	2500	1.46516035	493.05047
CMT6394	2500	1.44400769	496.326909
CMT6395	2500	1.4650283	476.834909
CMT6396	2500	1.43908221	470.8138
CMT6397	2500	1.43571986	486.649638
CMT6398	2500	1.42544875	490.285252
CMT6399	2500	1.48464494	497.25368
CMT6400	2500	1.47414383	503.349617
CMT6401	2500	1.4645694	510.016579
CMT6402	2500	1.51422037	502.710223
CMT6403	2500	1.49563291	511.910406
CMT6404	2500	1.49512303	484.525458
CMT6405	2500	1.48765948	502.070735
CMT6408	2500	1.4805195	508.792562
CMT6409	2500	1.47663882	510.335038
CMT6413	2500	1.49591908	501.147127
CMT6856	2000	1.40595936	530.823059
CMT6861	2000	1.42424876	532.881183
CMT6870	2000	1.42377604	529.52678
CMT6871	2000	1.42237784	530.635265
CMT6873	2000	1.40823	529.638354
CMT6874	2000	1.41774499	533.637807
CMT6875	2000	1.4191092	532.923615
CMT6886	2000	1.43934332	539.082066

Tabla 3.2. Estudio paramétrico de los diferentes ensayos

La tabla 2 detalla los diferentes ensayos seleccionados para realizar el estudio, así como su clasificación por régimen de giro, su presión inicial y su temperatura inicial. El resto de condiciones iniciales se detallarán en el capítulo correspondiente de la memoria.

3.6 Combustibles de sustitución

El Lawrence Livermore National Laboratory propone seis combustibles de sustitución para la gasolina (REF). EN el estudio realizado se complementarán dichos combustibles de sustitución con el 98% iso-octano, 2% n-heptano, mezcla que se corresponde con el octanaje de la gasolina empleada en los experimentos.

Surrogate	Iso-Octano (IC8H18)	N-Heptano (NC7H16)	Tolueno (C6H5CH3)	1-Hexeno (C6H12)
1	47%	0%	35%	18%
2	50%	0%	35%	15%
3	0%	50%	50%	0%
4	65%	0%	35%	0%
5	0%	0%	70%	30%
6	82%	0%	0%	12%
7	98%	2%	0%	0%

Tabla 3.3. Composición de los distintos combustibles de sustitución empleados para las simulaciones en CHEMKIN.

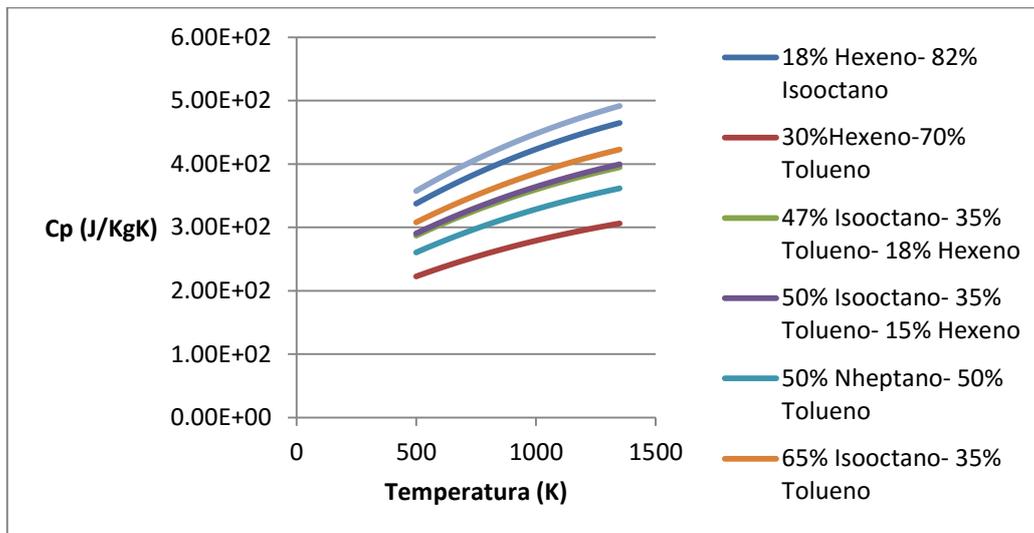


Figura 3.11. Evolución del Cp en función de la temperatura para los distintos combustibles de sustitución empleados para las simulaciones en CHEMKIN.

4. Resultados

4.1 Introducción

El apartado de resultados de este TFG incluye en primer lugar el cálculo de la composición inicial de aire, combustible y EGR, así como un cálculo de la temperatura inicial, para cada ensayo.

Esta información permitirá la realización de diversas simulaciones con seis combustibles de sustitución compuestos por mezclas binarias o terciarias, así como con una mezcla de 98% iso-octano, 2% n-heptano, tal y como se ha detallado en el apartado de Metodología. Los resultados obtenidos se emplearán para realizar el cálculo de los tiempos de retraso de cada simulación y caso experimental, empleando para ello los siete criterios citados anteriormente. También se expondrán los resultados de los óxidos de nitrógeno producidos en los ensayos experimentales, y su comparación con las simulaciones.

Posteriormente se realizará un estudio de sensibilidad de los tiempos de retraso y la producción de óxidos de nitrógeno para distintas condiciones empleando el modelo ICE, que simularán las posibles heterogeneidades en la cámara de combustión, a saber, variaciones en la temperatura inicial, variaciones en las pérdidas de calor, variaciones en el dosado relativo de la mezcla. Del mismo modo, se realizará un estudio de sensibilidad de los tiempos de retraso y la producción de óxidos de nitrógeno frente a distintas concentraciones de oxígeno y dosados relativos, con un carácter más general y cualitativo, empleando el modelo PSR.

Finalmente se desarrollarán nuevos combustibles de sustitución que muestren un comportamiento más cercano a los resultados experimentales, siendo el criterio elegido para la evaluación de los mismos el error del tiempo de retraso simulado frente al experimental.

4.2 Definición de la composición inicial de la mezcla

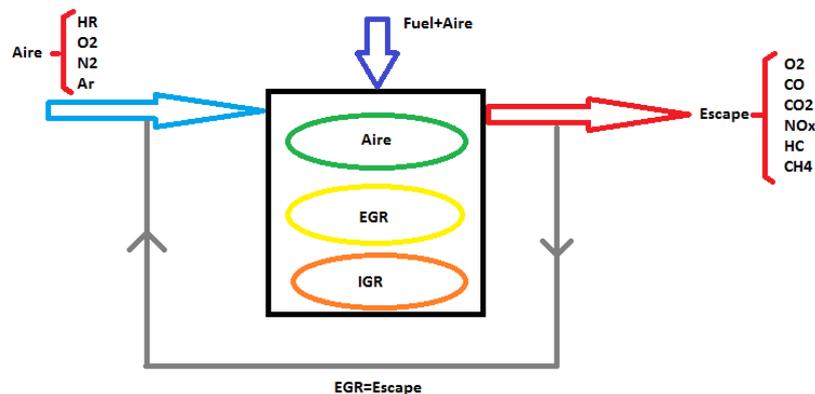


Figura 4.1. Esquema de los distintos flujos de gases presentes en el balance realizado para el cálculo de la composición inicial de la mezcla.

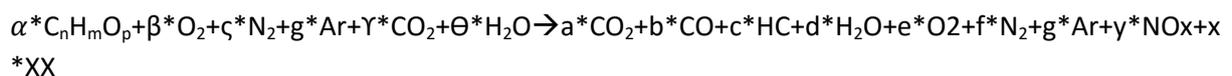
La definición de la composición inicial de la mezcla es de vital importancia para obtener unos resultados óptimos en las simulaciones. Una composición inicial inadecuada conlleva cometer grandes errores tanto en los tiempos de retraso como en los óxidos de nitrógeno simulados, así como en el resto de parámetros que caracterizan el autoencendido.

La sensibilidad de los resultados a la mezcla inicial es muy elevada, siendo de gran importancia la adecuada selección de las especies químicas así como su concentración. Este trabajo no es trivial, ya que se desconocen diversos aspectos de la mezcla inicial, y se deberá realizar un modelo en base a hipótesis tomadas a partir de la experiencia con ensayos de características similares.

Los parámetros a tener en cuenta para realizar el modelo de cálculo de la composición inicial de la mezcla son el aire de entrada al motor, la mezcla de fuel y aire aportada por el inyector, los gases de escape o gases producto de la combustión, el EGR (gases de escape recirculados) y el IGR (gases producto de la combustión que no son evacuados en el escape).

Los datos de partida son la composición del aire (fracción molar de nitrógeno, fracción molar de oxígeno, fracción molar de argón, humedad relativa), la masa de aire, el dosado relativo, la composición del combustible (que dependerá del combustible de sustitución que se emplee en cada simulación) y la fracción molar de diversas especies de los gases de escape (oxígeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono, óxidos de nitrógeno, hidrocarburos sin quemar (medidos mediante el número total de carbonos) y metano (de valor despreciable)).

Los gases producto de la combustión se reparten entre los gases de escape, el EGR (gases recirculados) y el IGR (gases no evacuados ni recirculados). Siendo todos estos gases productos de la combustión, la composición de los mismos es idéntica. En consecuencia, la reacción entre el fuel y el aire debe dar lugar a los gases de escape/EGR/IGR, lo que nos permite plantear la ecuación de la reacción química de combustión que se da en el motor:



Ecuación 1. Ecuación química inicial obtenida a partir del balance de las especies químicas.

A partir de la Ecuación 1, se determinarán los datos conocidos y las variables, así como las hipótesis necesarias para completar las ecuaciones.

- La composición del combustible y la composición del aire son conocidas. Las fracciones molares de CO₂, CO, O₂, NO_x y HC (hidrocarburos sin quemar) son conocidas.
- La fracción molar de Ar se obtiene del balance.
- La fracción molar de N₂ en los gases de escape se obtiene por balance de nitrógenos.
- Los NO_x se supondrán NO, debido a la inestabilidad del NO₂ a bajas temperaturas (ref teoría).

- Los hidrocarburos si quemar se supondrán CH_2O , dado que el fuel se descompone en aldehídos e hidrocarburos de cadena corta durante el tiempo de retraso. Al ser el CH_4 medido y de valor despreciable, se opta por tomar los hidrocarburos sin quemar como CH_2O , dado que es un buen trazador del autoencendido.
- La fracción molar de H_2O se obtendrá del balance.
- Los Otros (molécula XX) se supondrán obtendrá a partir de un estudio con el modelo PSR.

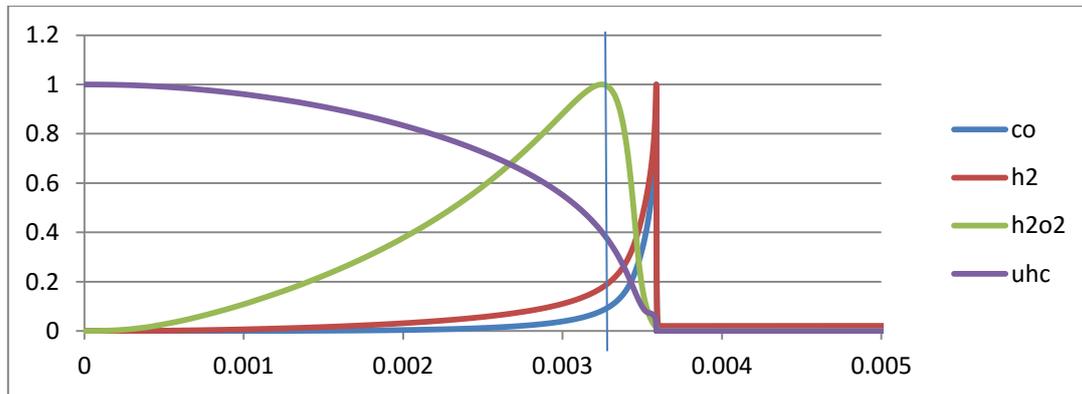


Figura 4.2. Gráfica que representa la concentración unitaria de distintas especies químicas para un modelo PSR. Detalle del máximo de H_2O_2 .

La molécula Otros se definirá como H_2O_2 , H_2 , OH o HO_2 , sabiendo por experiencia con otros ensayos experimentales que son las moléculas resultantes más comunes como productos de combustión.

Las moléculas de OH y HO_2 solamente son estables a muy altas temperaturas, por lo que se descompondrá completamente en los gases de escape recirculados, motivo por el cual será descartada.

Para la selección de H_2O_2 o H_2 como molécula Otros, se realizará un estudio en el modelo PSR para las condiciones de presión y temperatura medias de los experimentos y una composición inicial supuesta como una mezcla de aire puro (nitrógeno, oxígeno, argón) y combustible (98% iso-octano, 2% n-heptano) en condiciones estequiométricas. De dicho estudio se obtendrán las evoluciones de las concentraciones de H_2O_2 y H_2 .

Es conocido que el H_2O_2 es un buen trazador del proceso de autoencendido, coincidiendo el momento del encendido con la máxima concentración de H_2O_2 . Por lo tanto, el estudio de las concentraciones de las especies químicas en cuestión se realizará en el rango de tiempos anteriores al tiempo de encendido, es decir, la máxima concentración de H_2O_2 .

En la siguiente figura se muestra la relación $[\text{H}_2]/[\text{H}_2\text{O}_2]$ truncada en el tiempo de encendido. Se puede observar que el rango de tiempos en los cuales la concentración de H_2O_2 es mayor que la concentración de H_2 es claramente superior que el rango de tiempos en los cuales la concentración de H_2O_2 es menor que la concentración de H_2 .

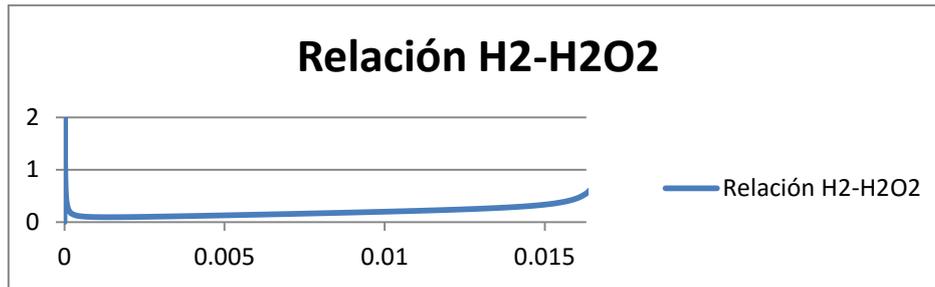
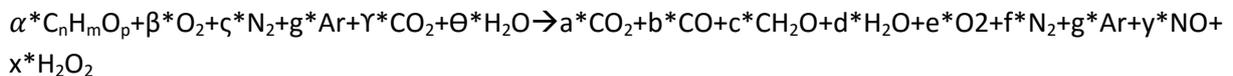


Figura 4.3. Gráfica que representa la relación entre la concentración de H2 y la concentración de H2O2.

En vista de los resultados obtenidos, y teniendo en cuenta la importancia del H2O2 como trazador del autoencendido, siendo el H2 simplemente un producto de la combustión, se ha optado por suponer la molécula Otros como H2O2.

Sin embargo, y para comprobar la validez de las hipótesis supuestas, se ha desarrollado un método de cálculo de la composición inicial de la mezcla empleando H2 en lugar de H2O2. Para las simulaciones realizadas con la composición inicial empleando H2, ningún caso de estudio alcanza el encendido, descartando por lo tanto el H2 como molécula viable y confirmando la hipótesis de empleo de H2O2.

Las ecuaciones empleadas en el modelo una vez definidas todas las incógnitas y los valores conocidos son las siguientes:



Ecuación 4.2. Ecuación química final obtenida a partir del balance de las especies químicas y teniendo en cuenta las hipótesis empleadas.

- (1) $\alpha * n + \Upsilon = a + b + c$
- (2) $\alpha * p + \beta * 2 + \Upsilon * 2 + \Theta = a * 2 + b + c + d + e * 2 + y + x * 2$
- (3) $\alpha * m + \Theta * 2 = c * 2 + d * 2 + x * 2$
- (4) $\zeta * 2 = f * 2 + y$
- (5) $X_{H_2O} = \frac{d}{a + b + c + d + e + f + g + y + x}$
- (6) $X_{N_2} = \frac{f}{a + b + c + d + e + f + g + y + x}$
- (7) $X_{CH_2O} = \frac{c}{a + b + c + d + e + f + g + y + x}$
- (8) $X_{CO_2} = \frac{a}{a + b + c + d + e + f + g + y + x}$
- (9) $X_{CO} = \frac{b}{a + b + c + d + e + f + g + y + x}$
- (10) $X_{O_2} = \frac{e}{a + b + c + d + e + f + g + y + x}$

Ecuación 4.3. Sistema de ecuaciones obtenido del desarrollo de la ecuación química planteada en la Ecuación 4.2.

Una vez planteadas estas ecuaciones, se resuelve el balance y se obtiene la composición del EGR.

La masa de aire y la masa de EGR son conocidas, pero no conocemos la masa de IGR. Para obtenerla se realizará un balance entálpico.

$$(1) m_m * C_{v_m} * T_m = m_a * C_{v_a} * T_a + m_{IGR} * C_{v_{IGR}} * T_{IGR}$$

$$(2) m_m = m_a + m_{IGR}$$

$$(3) P_a * V_a = m_m * R * T_m$$

Ecuación 4.4. Sistema de ecuaciones obtenido a partir del balance entálpico por resolución de la ecuación de la energía.

Siendo incógnitas la T_m y la m_{IGR} , se realizará un cálculo iterativo suponiendo un valor de C_{v_m} inicial, se resolverán las incógnitas y se recalculará en valor de C_{v_m} , comparándolo con el valor de C_{v_m} inicial. Mediante un bucle de programación "while" se repetirá el cálculo hasta que C_{v_m} inicial y final coincidan.

4.2.1 Descripción código Matlab

Del fichero de datos de entrada se leen para cada ensayo:

- La velocidad de giro del motor en rpm.
- La masa de aire en Kg/h.
- La masa de aire del inyector en Kg/h.
- La masa de EGR en Kg/h.
- La masa de fuel en mg.
- La TR (trapping ratio), porcentaje de aire atrapado en el cilindro que cuantifica el grado de cortocircuito del motor (valor adimensional).
- El ángulo de cierre de las válvulas de admisión en °.
- La presión en el cierre en bar.
- La temperatura en el cierre en °C.
- La temperatura en el escape en °C.
- La humedad relativa (HR) en porcentaje.
- La temperatura ambiente en °C
- La Thum (temperatura del humidificador) en °C.
- La presión de admisión en bar.
- El dosado relativo Fr.
- La fracción molar de oxígeno en base seca (X_{O_2bs}).
- La fracción molar de dióxido de carbono en base seca (X_{CO_2bs}).
- La fracción molar de monóxido de carbono en base seca (X_{CObs}).

- Los NOx en el EGR medidos en ppmv.
- Los hidrocarburos sin quemar en el EGR medidos en ppmv.

A continuación, se introduce la composición de la mezcla de combustible que se va a emplear para realizar la simulación, medida en tantos por uno en fracción molar. Las diferentes especies químicas empleadas para formar las mezclas son el n-heptano, iso-octano, tolueno, hexeno.

Posteriormente se introduce la geometría del motor, detallando el diámetro (en m) y la carrera (en m) del cilindro, así como el volumen muerto (en m³) y la longitud de la biela (en m). Estos datos son valores integrados en el código Matlab y no se importan de ningún fichero, pues permanecen constantes para todos los ensayos. Seguidamente se emplea la ecuación de Antoine para el agua, pasando de este modo las fracciones molares en base seca a base húmeda.

$$\log_{10} P = A - \frac{B}{C + T}$$

Ecuación 4.5. Ecuación de Antoine para el agua, donde P representa la presión de vapor y T la temperatura de saturación para esa presión.

Para el cálculo de Cp de cada elemento químico de la mezcla se emplea una función que contiene las constantes del polinomio Cp(T).

$$Cp = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 + \frac{f}{T^2}$$

Ecuación 4.6. Representación de la forma de los polinomios de Cp en función de la temperatura empleados en el modelo.

Finalmente, se resuelve el sistema de ecuaciones planteado anteriormente en Matlab por iteración y empleando la herramienta Solve.

A su vez, mediante la evaluación de los parámetros termodinámicos y la resolución de la ecuación de la energía se obtiene la temperatura inicial de la mezcla, que se muestra en la tabla del estudio paramétrico del apartado anterior de la memoria.

	X isoctano	X heptano	XO2	XN2	XAR	XH2O	XCO2	XCO	XCH2O	XH2O2	XNO
CMT5444	0.0064192	0.000131	0.11888471	0.74996549	0.00960033	0.05274955	0.05315075	0.00055732	0.00288033	0.00563699	2.4115E-05
CMT5445	0.00642049	0.00013103	0.11889033	0.74994506	0.00960009	0.05309134	0.0533179	0.00051803	0.00263149	0.00542654	2.7713E-05
CMT5447	0.00633248	0.00012923	0.11609502	0.74906541	0.00958881	0.05452945	0.05463696	0.00088774	0.00322194	0.00548778	2.5179E-05
CMT5448	0.0062911	0.00012839	0.11754323	0.74961983	0.00959592	0.05390259	0.05407059	0.0006362	0.00277641	0.00540914	2.6614E-05
CMT5449	0.00643299	0.00013129	0.11944431	0.74799774	0.00957518	0.05806875	0.05403489	0.00057693	0.00255796	0.00114856	3.1405E-05
CMT6393	0.00294842	6.0172E-05	0.0919059	0.75314436	0.0096409	0.05147907	0.06723951	0.00110653	0.00479579	0.01767441	4.9444E-06
CMT6394	0.0029992	6.1208E-05	0.06456989	0.74782064	0.00957278	0.06454528	0.08431027	0.0009095	0.00532508	0.01987577	1.0373E-05
CMT6395	0.00284235	5.8007E-05	0.11675431	0.75588573	0.00967597	0.04362071	0.0518096	0.00198816	0.00519611	0.01216627	2.7685E-06
CMT6396	0.00289693	5.9121E-05	0.11036946	0.75731801	0.00969431	0.04016102	0.05470063	0.00165056	0.005125	0.01802208	2.8833E-06
CMT6397	0.00298554	6.0929E-05	0.08654118	0.75582455	0.00967521	0.04446675	0.06862179	0.00102022	0.00490375	0.02589503	5.0583E-06
CMT6398	0.00305154	6.2276E-05	0.0646989	0.75031693	0.00960473	0.05784573	0.08278072	0.00090867	0.00536239	0.02535867	9.4424E-06
CMT6399	0.00280837	5.7314E-05	0.11086185	0.75520211	0.00966722	0.04639224	0.05599654	0.00148628	0.00453801	0.01298711	2.9536E-06
CMT6400	0.00286755	5.8521E-05	0.093443	0.7521223	0.00962781	0.05435628	0.06706695	0.00107817	0.00450392	0.01487099	4.5099E-06
CMT6401	0.00293356	5.9869E-05	0.0740792	0.74714991	0.00956418	0.06657991	0.07977583	0.00089239	0.00479008	0.01416747	7.5987E-06
CMT6402	0.00273628	5.5843E-05	0.11526624	0.75219348	0.00962871	0.05374621	0.05491972	0.00176339	0.00437448	0.00531276	2.8871E-06
CMT6403	0.00281789	5.7508E-05	0.09552433	0.74971395	0.00959698	0.06045167	0.06714679	0.00114333	0.004249	0.00929384	4.7186E-06
CMT6404	0.00272127	5.5536E-05	0.12388008	0.75559444	0.00967725	0.04347315	0.04742986	0.00249403	0.00498833	0.00969247	3.6335E-06
CMT6405	0.00291134	5.9538E-05	0.11038379	0.75799014	0.00970292	0.0380267	0.05428712	0.00121734	0.00421019	0.02119903	3.8992E-06
CMT6408	0.00293098	5.9816E-05	0.09717993	0.75277748	0.0096362	0.05152277	0.06421255	0.00097901	0.00427278	0.01642379	4.6986E-06
CMT6409	0.00290269	5.9239E-05	0.08761596	0.75188826	0.00962475	0.05360244	0.06962976	0.0009287	0.00448378	0.01926442	5.6515E-06
CMT6413	0.00284542	5.807E-05	0.11511848	0.75967036	0.00972444	0.03412474	0.05092036	0.00151111	0.00397087	0.02204965	6.488E-06
CMT6656	0.00639402	0.00013049	0.08840174	0.73884063	0.00945807	0.07339943	0.07079751	0.0012924	0.00597584	0.00526166	4.8196E-05
CMT6661	0.00645263	0.00013169	0.08982468	0.74100729	0.0094856	0.06929334	0.0698492	0.00082873	0.00501695	0.0080949	1.4996E-05
CMT6670	0.00638751	0.00013036	0.09506285	0.7403222	0.00947685	0.07144361	0.06764641	0.00080526	0.0050743	0.00363129	1.9377E-05
CMT6671	0.00649369	0.00013252	0.09145871	0.73850829	0.00945361	0.0756761	0.07025932	0.00099197	0.00505345	0.00195641	1.5918E-05
CMT6673	0.00643094	0.00013124	0.08922096	0.73916974	0.00946227	0.07254051	0.07002205	0.00165828	0.00584999	0.0054686	4.5416E-05
CMT6674	0.00641202	0.00013086	0.08883195	0.73866715	0.00945569	0.07479412	0.07099185	0.00156397	0.00503664	0.0040933	2.2446E-05
CMT6675	0.00653154	0.00013333	0.09269462	0.73824359	0.00945024	0.07664635	0.06991697	0.00097202	0.00472738	0.00066625	1.7739E-05
CMT6686	0.0063793	0.00013019	0.09456852	0.73857097	0.00945453	0.07358374	0.0677806	0.00070595	0.00755208	0.00124047	3.3637E-05

Tabla 4.1. Composición inicial de la mezcla de los distintos ensayos para el combustible de sustitución 98% iso-octano, 2% n-heptano.

4.3 Validación de los mecanismos de cinética química

4.3.1 Definición del cálculo del error

Para la validación de los mecanismos de cinética química, se calcularán los errores entre las simulaciones y los resultados experimentales siguiendo los siguientes métodos.

El cálculo del error relativo entre el tiempo de retraso obtenido mediante las simulaciones en Chemkin y el tiempo de retraso obtenido mediante los datos de los ensayos experimentales se realizará siguiendo la fórmula:

$$\varepsilon = \frac{tiCHEMKIN - tiEXP}{tCOMPR}$$

Ecuación 4.7. Definición del método de cálculo del error relativo en el tiempo de retraso.

Siendo:

tiCHEMKIN: Tiempo químico. Depende de la cinética química del fuel.

tiEXP: Tiempo químico. Depende de la cinética química del fuel.

tCOMPR: Tiempo físico. Como se supone el fuel ya evaporado y mezclado homogéneamente, el tiempo físico se reduce al tiempo característico de las pérdidas de calor, el cual depende directamente del tiempo de compresión, siendo este el tiempo disponible para transmitir calor. Se obtendrá mediante la fórmula:

$$tCOMPR = \frac{30}{N^{rev}(rpm)}$$

Ecuación 4.8. Definición del método de cálculo del tiempo de compresión.

Entonces:

$$\varepsilon = \frac{tiCHEMKIN - tiEXP}{tCOMPR} = \frac{tqCH}{tfisico} - \frac{tqEXP}{tfisico} = \frac{1}{DaCH} - \frac{1}{DaEXP}$$

Ecuación 4.9. Demostración de la expresión del error relativo en función de una desviación de la inversa de los números de Damköhler.

El error relativo definido de esta forma es una desviación en la inversa de los números de Damköhler de ambos procesos, simulación frente a experimento.

El cálculo del error relativo entre los NOx producidos en las simulaciones y los NOx producidos en los ensayos experimentales se realizará empleando la siguiente fórmula:

$$\varepsilon = \frac{NOx_{CHEMKIN} - NOx_{EXP}}{NOx_{EXP}}$$

Ecuación 4.10. Definición del método de cálculo del error relativo de los NOx.

Cabe destacar que todos los errores serán trabajados en valor absoluto, aunque e tendrá en cuenta el signo de los mismos a la hora de evaluar los estudios de sensibilidad.

4.3.2 Resultados de las Simulaciones

4.3.2.1 Introducción

El objetivo de este apartado del presente TFG es realizar las simulaciones con los combustibles de sustitución propuestos por el Lawrence Livermore National Laboratory, obtener los tiempos de retraso empleando para ello los criterios previamente descritos y calcular los errores entre los resultados experimentales y las simulaciones, para finalmente aportar unos intervalos de confianza que permitan predecir la fiabilidad de estos combustibles de sustitución.

En esta primera fase de simulación, se han elegido diez experimentos, tomando como criterio que presentaran condiciones tanto extremas como medias en cada grupo de régimen de giro, con el objeto de minimizar el tiempo de cálculo obteniendo resultados representativos en cuanto a valores medios y límites mínimos y máximos para todos los experimentos.

4.3.2.2 Señales analizadas

A continuación se detallarán las distintas señales analizadas para la obtención de lo resultados del presente TFG.

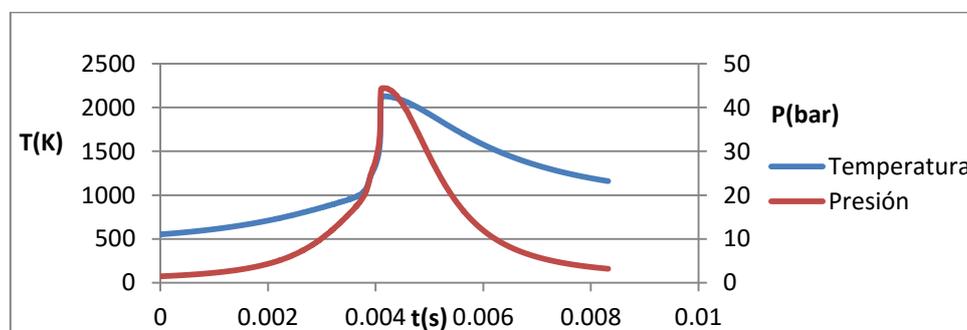


Figura 4.4. Gráfica representativa de la evolución de la temperatura simulada y la presión simulada para ensayo CMT-5447.

La gráfica de la evolución de la presión y la temperatura en la simulación muestra la correlación entre estas dos variables, observándose una evolución muy similar a partir de los instantes iniciales y durante toda la etapa del encendido, siendo las diferencias provocadas por las pérdidas de calor. Esto confirma lo mencionado previamente en el apartado del Marco teórico, las derivadas de estas señales son equivalentes para el cálculo del tiempo de retraso, empleándose la dP/dt por ser la presión una variable medida y la temperatura una variable calculada.

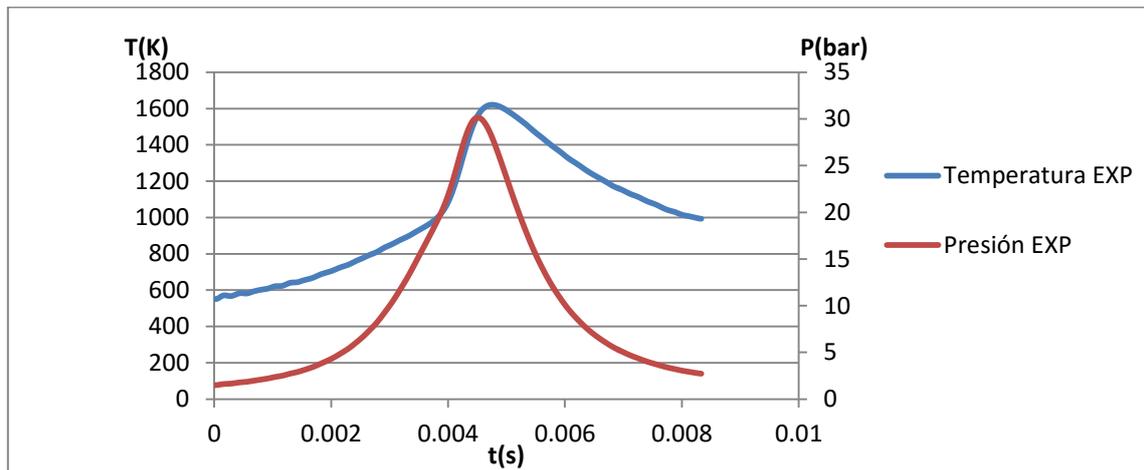


Figura 4.5. Gráfica representativa de la evolución de la temperatura experimental y la presión experimental para ensayo CMT-5447.

El gráfico que muestra las señales de temperatura y presión experimentales, que cumplen también con un elevado grado de correlación a partir de los instantes iniciales y durante toda la etapa del encendido. Sin embargo, los valores máximos obtenidos en ambas señales son significativamente menores que en el caso simulado.

Este efecto ocurre por los siguientes motivos:

Las presiones y temperaturas experimentales son valores medios, que incluyen los efectos de pared de la cámara de combustión. El modelo de CHEMKIN no incluye estos efectos, alcanzando valores mayores.

En el caso experimental no se produce un autoencendido súbito de toda la mezcla en la cámara de combustión, sino que este se realiza de una forma más pausada. En las simulaciones realizadas con CHEMKIN, toda la mezcla en la cámara de combustión enciende a la vez, obteniéndose señales muy bruscas, con elevadas pendientes. Este problema no afecta a los resultados obtenidos en el presente TFG, puesto que la evolución de la simulación hasta el tiempo de retraso se corresponde con la realidad, y el objetivo de los ensayos es realizar el cálculo de los tiempos de retraso. Además, debido a la relación exponencial de la producción de óxidos de nitrógeno con la temperatura, serán las zonas del motor más calientes las que produzcan la mayor cantidad de NOX (recordamos que la temperatura experimental es una media). Estas temperaturas máximas sí que se corresponden con el

orden de magnitud de las temperaturas obtenidas en las simulaciones, lo que permite el empleo de las mismas para realizar el estudio.

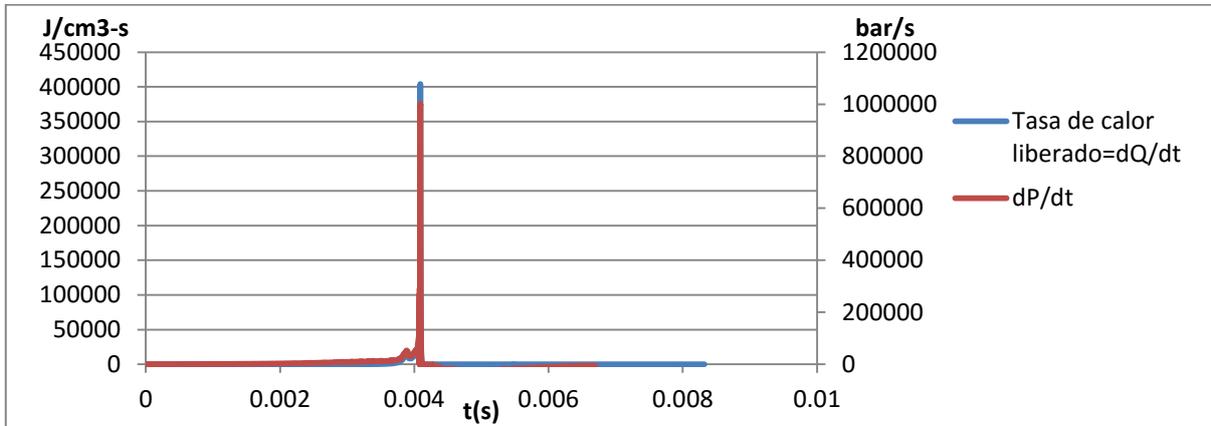


Figura 4.6. Gráfica representativa de la evolución de la tasa de liberación de calor simulada y la derivada de la presión simulada para ensayo CMT-5447.

El gráfico de la figura 6 muestra una comparación entre la dQ/dt simulada y la dP/dt simulada, ambas señales empleadas para el cálculo de distintos tiempos de retraso. Se observa que ambas señales son prácticamente equivalentes, produciéndose las diferencias entre ellas por las pérdidas de calor. Además, se puede apreciar la brusquedad de las señales y la elevada pendiente de las mismas, explicable por los efectos comentados previamente.

Cabe destacar el pequeño pico de exotermia y de incremento de presión que ocurre antes de obtenerse el máximo de ambas señales, y que representa la etapa de llamas frías del encendido

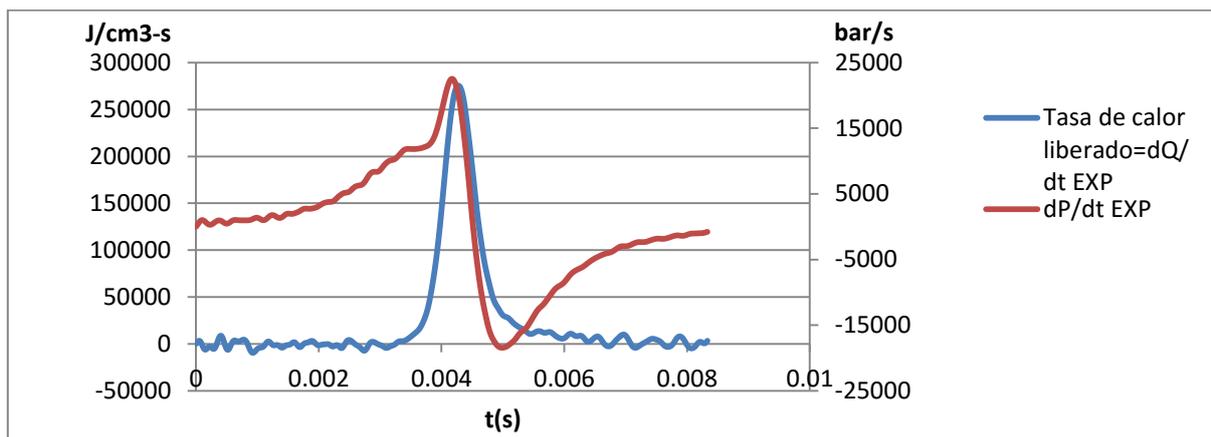


Figura 4.7. Gráfica representativa de la evolución de la tasa de liberación de calor experimental y la derivada de la presión experimental para ensayo CMT-5447.

Se observa en las señales experimentales como la evolución de las mismas es mucho más suave, debido a los efectos explicados con anterioridad.

Cabe destacar la imposibilidad de determinar la aparición de llamas frías mediante las señales experimentales, motivada por la presencia de ruido en las mismas de un orden de magnitud similar a la exotermia o el incremento de presión esperable en la etapa de llamas frías.

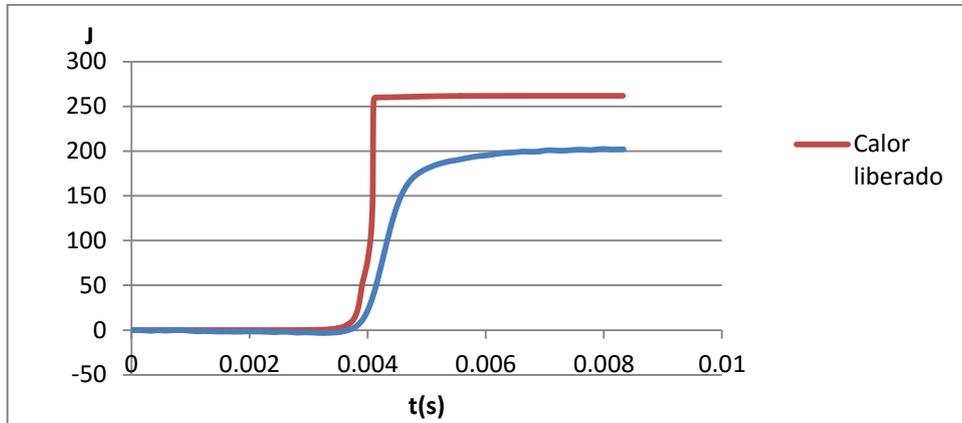


Figura 4.8. Gráfica representativa de la evolución de la ley de liberación de calor tanto simulada como experimental para el ensayo CMT-5447.

En el gráfico de la figura 8 se observa una comparación de las señales del calor liberado experimental y el calor liberado en la simulación.

La señal de calor liberado en la simulación presenta una pendiente mucho más brusca debido a los efectos comentados con anterioridad. A su vez, puede observarse que el valor alcanzado del calor liberado final no coincide en ambos casos. Esto se debe principalmente a las diferencias entre el poder calorífico de la gasolina experimental y el combustible de sustitución, y en menor medida al modelo de pérdidas de calor, que puede no ajustarse perfectamente a las pérdidas de calor reales.

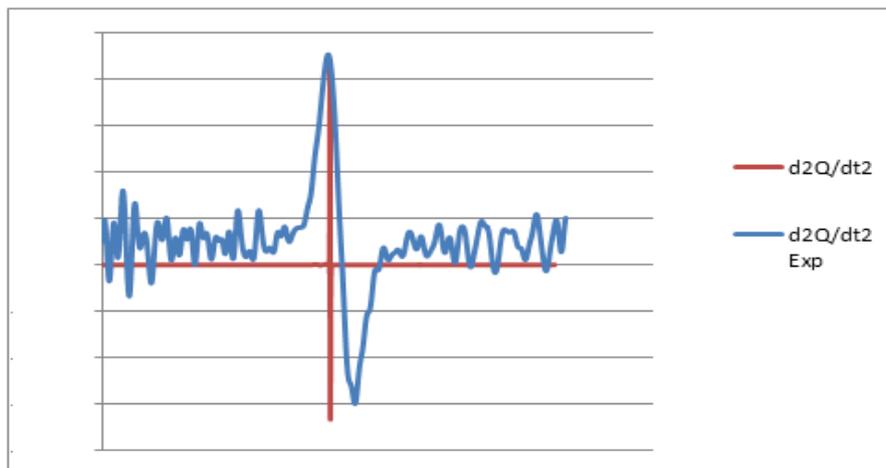


Figura 4.9. Gráfica cualitativa de la evolución de la derivada segunda de la ley de liberación de calor tanto simulada como experimental para el ensayo CMT-5447.

El gráfico de la figura 9 muestra la evolución de la señal de la derivada segunda de la liberación de calor. Se observa en la señal simulada un máximo y un mínimo claramente identificables y prácticamente coincidentes en el tiempo, debido a la brusquedad de la señal obtenida mediante CHEMKIN. En la señal experimental se observa la amplificación del ruido presente, aunque los resultados son lo suficientemente buenos como para obtener el máximo y el mínimo de la señal. Si bien el máximo de ambas señales prácticamente coincide, el mínimo de la señal experimental está desplazado en el tiempo, debido a que las señales experimentales presentan una evolución más suave que las simuladas.

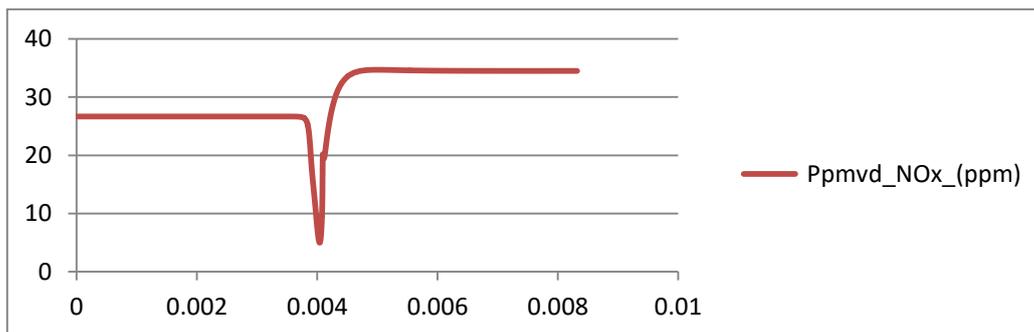


Figura 4.10. Gráfica representativa de la evolución de la concentración de óxidos de nitrógeno en el proceso de autoencendido del caso de simulación CMT-5447.

La gráfica de la evolución de la concentración de óxidos de nitrógeno en ppm muestra en una primera fase una concentración constante, correspondiente a la concentración de óxidos de nitrógeno en la mezcla inicial, sin observarse efectos de producción o reducción de NOx.

A partir de la zona de llamas frías, se inicia la producción de HCCO, y se alcanzan los niveles térmicos necesarios para que la reacción descrita en la figura 11 reduzca el NO (representante de la casi totalidad de los óxidos de nitrógeno a altas temperaturas), alcanzándose un mínimo de óxidos de nitrógeno en el tiempo de retraso o momento del autoencendido de alta temperatura, tal y como puede observarse en la escala de tiempos de la figura 10.

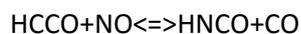


Figura 4.11. Reacción del HCCO para la reducción del NO, obtenida a partir del estudio del mecanismo de cinética química empleado en el presente TFG.

Una vez se produce el encendido, desaparece el HCCO se inicia la producción de óxidos de nitrógeno por vía térmica, hasta alcanzar un máximo para la máxima temperatura alcanzada, manteniéndose después constantes debido a la reducción de la temperatura.

4.3.2.2 Simulaciones con 82% iso-octano, 18% hexeno

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 82% iso-octano, 18% hexeno se detallan en la tabla 1 mostrada a continuación.

Los parámetros elegidos para el estudio de los resultados tanto para este caso como en el resto de combustibles de sustitución son los siguientes:

- EL error medio en porcentaje, obtenido para cada criterio de cálculo de tiempo de retraso, como una media de todos los errores en valor absoluto de cada caso en concreto.
- La desviación típica en porcentaje de los errores de los distintos casos de estudio para cada criterio de cálculo del tiempo de retraso.
- El número de ensayos válidos. Para cada combustible de sustitución propuesto por el Lawrence Livermore National Laboratory se han realizado diez simulaciones, empleando en todo momento los mismos casos de estudio. Sin embargo, algunos de estos casos presentan problemas que se detallarán más adelante, y que provocan el no encendido de las simulaciones realizadas, siendo esto dependiente del combustible empleado.
- La t de Student, calculada en función del número de casos válidos, para un intervalo de confianza del 95%.
- El semi-intervalo de confianza en porcentaje para un intervalo de confianza del 95%.
- El valor mínimo del intervalo de confianza en porcentaje.
- El valor máximo del intervalo de confianza en porcentaje.

	ϵ medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	3.76847915	2.21899584	8	2.36462425	1.85512694	1.91335221	5.6236061
tr2	3.89006595	2.06947401	8	2.36462425	1.73012357	2.15994238	5.62018952
tr3	3.65045387	1.90487291	8	2.36462425	1.59251361	2.05794026	5.24296747
tr4	2.63125164	2.47409114	8	2.36462425	2.06839196	0.56285968	4.69964359
tr5	2.87315959	2.70533076	8	2.36462425	2.26171311	0.61144648	5.13487271
tr6	4.2310669	2.07515679	8	2.36462425	1.73487449	2.49619241	5.96594139
tr7	3.41525957	2.98149163	8	2.36462425	2.49258938	0.92267019	5.90784895

Tabla 4.1. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 82% iso-octano, 18% hexeno.

La figura 12 muestra la relación entre el tiempo de retraso obtenido para los ensayos experimentales y el tiempo de retraso obtenido para las simulaciones, empleando para ello el criterio de cálculo del tiempo de retraso de máxima derivada de la presión (máximo dP/dt).

Se ha escogido representar este criterio por ser generalmente el más empleado para el cálculo del tiempo de retraso, dado que la presión es una señal medida y fácil de filtrar, como se ha explicado previamente.

El objetivo de esta gráfica es mostrar la cercanía de la relación entre el tiempo de retraso experimental y el tiempo de retraso simulado a un caso ideal de relación perfecta. También muestra si el tiempo de retraso simulado es más corto o más largo que el tiempo de retraso experimental. Si el punto de la gráfica se encuentra a la derecha de la línea que representa una recta de pendiente

unitaria, la simulación enciende antes que el experimento. Por el contrario, si el punto de la gráfica se encuentra a la izquierda de la recta de pendiente unitaria, el experimento enciende antes que la simulación.

A su vez, se ha realizado el cálculo del coeficiente de correlación R^2 , como parámetro estadístico que define la linealidad entre las dos variables estudiadas.

$$R^2 = \frac{\sigma^2_{SIM-EXP}}{\sigma^2_{SIM} * \sigma^2_{EXP}}$$

Ecuación 4.1. Cálculo del coeficiente de correlación R^2 .

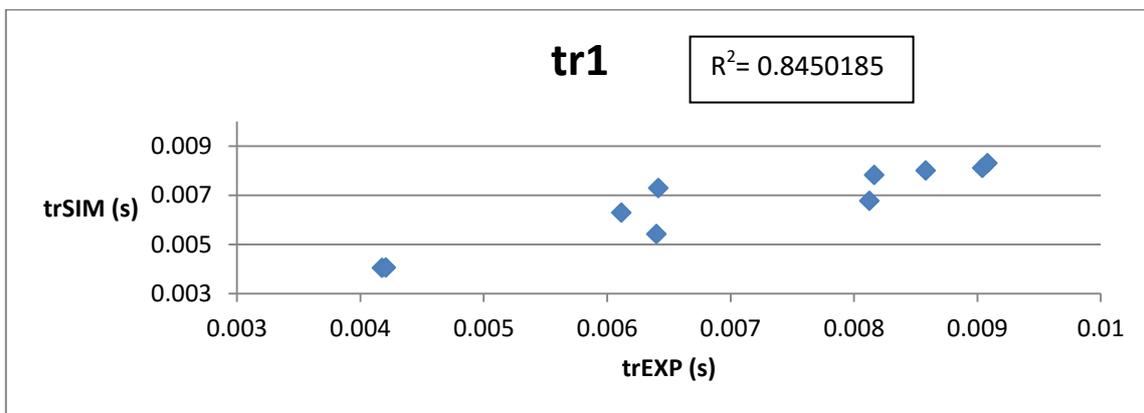


Figura 4.12. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 82% iso-octano, 18% hexeno.

El coeficiente de variación de los criterios de definición del tiempo de retraso, representado en la figura 13, define las diferencias de los resultados debidas al empleo de uno u otro criterio de cálculo de los tiempos de retraso. Para cada ensayo válido, se ha realizado un cálculo coeficiente de variación entre los tiempos de retraso obtenidos con cada criterio.

De este modo se estudiará la influencia del tiempo de retraso escogido en los resultados obtenidos. Coeficientes de variación bajos indicarán cierta homogeneidad entre los criterios de cálculo del tiempo de retraso es decir que los resultados obtenidos no serán fuertemente dependientes del criterio escogido. Coeficientes de variación elevados indicarán una gran diferencia entre los criterios para el cálculo del tiempo de retraso, dependiendo los resultados obtenidos en gran medida del criterio escogido.

$$C_V = \frac{\sigma}{|\bar{x}|} \cdot 100$$

Ecuación 4.2. Cálculo del coeficiente de variación expresado en porcentaje.

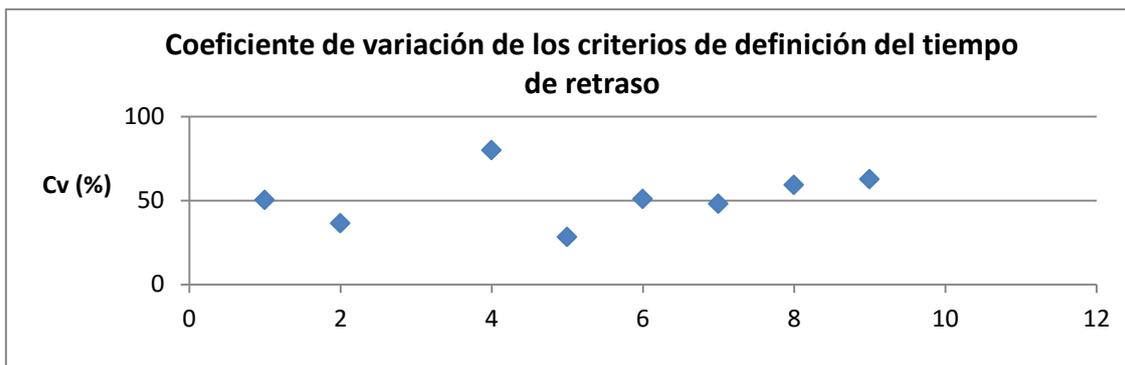


Figura 4.13. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 82% iso-octano, 18% hexeno.

A partir de los cálculos de las desviaciones típicas entre los tiempos de retraso para los distintos criterios empleados, se obtiene la tabla comparativa que permite determinar las diferencias entre los criterios empleados. Para la confección de dicha tabla se han empleado los siguientes parámetros, que coinciden con los parámetros utilizados en el resto de tablas para todos los combustibles de sustitución empleados:

- Coeficiente de variación (Cv) en porcentaje: La media de los coeficientes de variación calculadas previamente y mostradas en el gráfico anterior.
- Desviación típica en porcentaje: El resultado del cálculo de la desviación típica de los distintos coeficientes de variación previamente calculados.
- El número de ensayos válidos. Seleccionados mediante el criterio expuesto anteriormente.
- La t de Student, calculada en función del número de casos válidos, para un intervalo de confianza del 95%.
- El semi-intervalo de confianza en porcentaje para un intervalo de confianza del 95%.
- El valor mínimo del intervalo de confianza en porcentaje.
- El valor máximo del intervalo de confianza en porcentaje.

Comparación entre criterios	
Cv medio (%)	51.9579332
Desviación típica (%)	15.9041195
Número de ensayos	8
$t_{0.975, N-1}$	2.36462425
μ (%)	13.2961766
ic min (%)	38.6617566
ic max (%)	65.2541098

Tabla 4.2. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 82% iso-octano, 18% hexeno.

Cabe destacar que todas las gráficas y tablas obtenidas para este combustible de sustitución se obtendrán para el resto de combustibles, siguiendo los mismos pasos de cálculo y empleándose los mismos parámetros ya descritos.

El comentario completo de los resultados de todos los combustibles de sustitución se realizará en el apartado de “Comentario de los resultados obtenidos”.

4.3.2.3 Simulaciones con 70% tolueno, 30% hexeno

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 70% tolueno, 30% hexeno se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	ϵ medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	4.63095269	2.92217389	10	2.26215716	2.09039728	2.54055541	6.72134996
tr2	4.10653829	3.26535243	10	2.26215716	2.33589241	1.77064588	6.4424307
tr3	4.16169457	3.02032308	10	2.26215716	2.16060898	2.00108559	6.32230354
tr4	3.38706418	3.34583957	10	2.26215716	2.39346944	0.99359473	5.78053362
tr5	3.51134469	3.54729605	10	2.26215716	2.53758273	0.97376196	6.04892741
tr6	5.1075939	2.90149008	10	2.26215716	2.07560097	3.03199293	7.18319486
tr7	4.10911492	2.49757878	10	2.26215716	1.78666023	2.32245469	5.89577514

Tabla 4.3. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 70% tolueno, 30% hexeno.

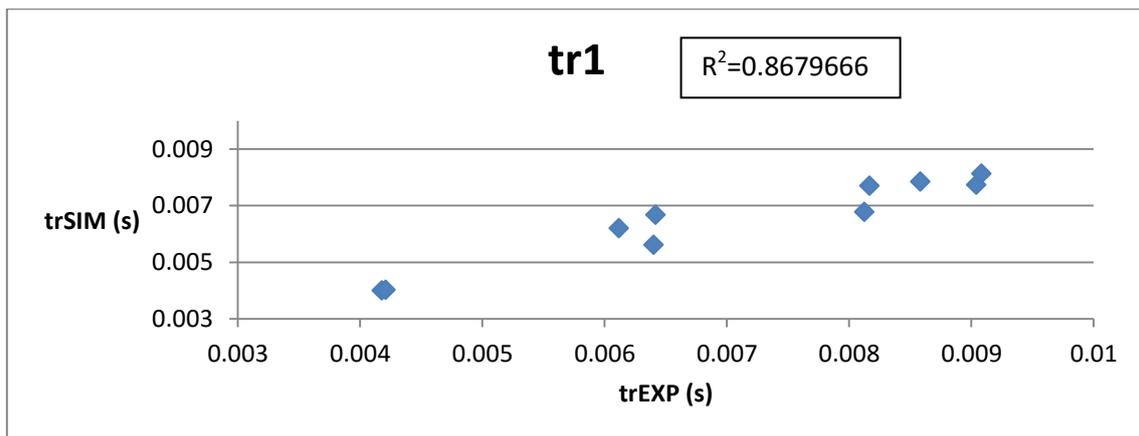


Figura 4.14. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 70% tolueno, 30% hexeno.

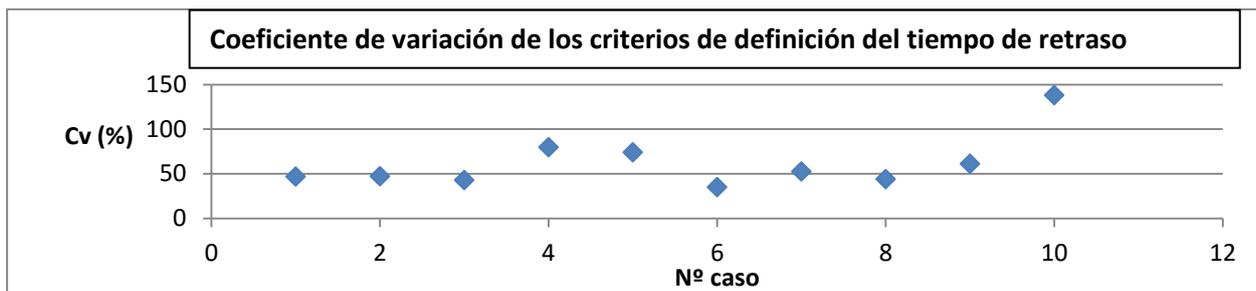


Figura 4.15. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 70% tolueno, 30% hexeno.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	62.0523293
Desviación típica (%)	30.2123002
Número de ensayos	10
$t_{0.975, N-1}$	2.26215716
μ (%)	21.6125776
ic min (%)	40.4397517
ic max (%)	83.6649069

Tabla 4.4. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 70% tolueno, 30% hexeno.

4.3.2.4 Simulaciones con 65% iso-octano, 30% tolueno

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 65% iso-octano, 30% tolueno se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	Error medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	4.99796296	4.03763433	8	2.36462425	3.37554678	1.62241619	8.37350974
tr2	4.73710794	2.67020141	8	2.36462425	2.23234425	2.5047637	6.96945219
tr3	4.71249028	2.46283072	8	2.36462425	2.05897801	2.65351228	6.77146829
tr4	4.51244495	5.58190532	8	2.36462425	4.66658963	0	9.17903458
tr5	4.96564124	5.96021421	8	2.36462425	4.98286378	0	9.94850502
tr6	6.4038392	3.13733572	8	2.36462425	2.6228783	3.7809609	9.0267175
tr7	4.37550826	4.2716948	8	2.36462425	3.57122623	0.80428204	7.94673449

Tabla 4.5. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 65% iso-octano, 30% tolueno.

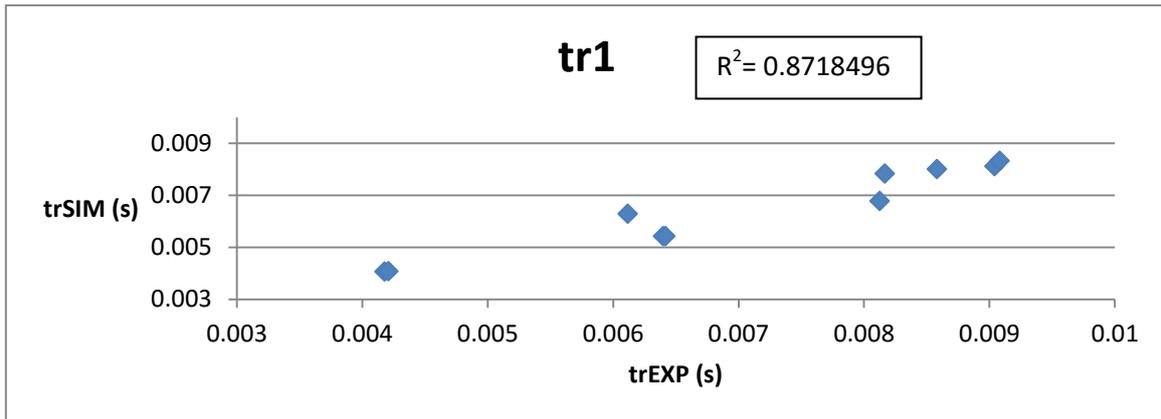


Figura 4.16. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 65% iso-octano, 30% tolueno.

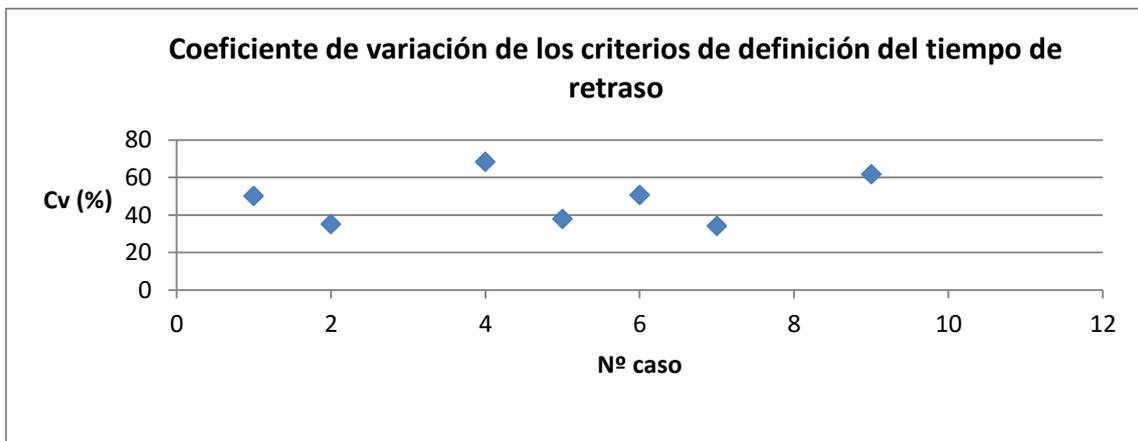


Figura 4.17. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 65% iso-octano, 30% tolueno.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	48.2162508
Desviación típica (%)	13.3433051
Número de ensayos	8
$t_{0.975, N-1}$	2.44691185
μ (%)	12.340499
ic min (%)	35.8757518
ic max (%)	60.5567498

Tabla 4.6. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 65% iso-octano, 30% tolueno.

4.3.2.5 Simulaciones con 50% n-heptano, 50% tolueno

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 50% n-heptano, 50% tolueno se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	3.24368113	2.44729536	9	2.30600414	1.88115774	1.3625234	5.12483887
tr2	2.82727076	1.79655456	9	2.30600414	1.38095408	1.44631668	4.20822484
tr3	2.73155945	1.65703948	9	2.30600414	1.2737133	1.45784615	4.00527275
tr4	5.35127104	4.0749684	9	2.30600414	3.132298	2.21897304	8.48356904
tr5	6.4706678	4.43247109	9	2.30600414	3.40709889	3.06356891	9.87776669
tr6	3.91926794	2.2436777	9	2.30600414	1.72464335	2.19462459	5.64391129
tr7	3.85147464	3.36139494	9	2.30600414	2.58379688	1.26767776	6.43527152

Tabla 4.7. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 50% n-heptano, 50% tolueno.

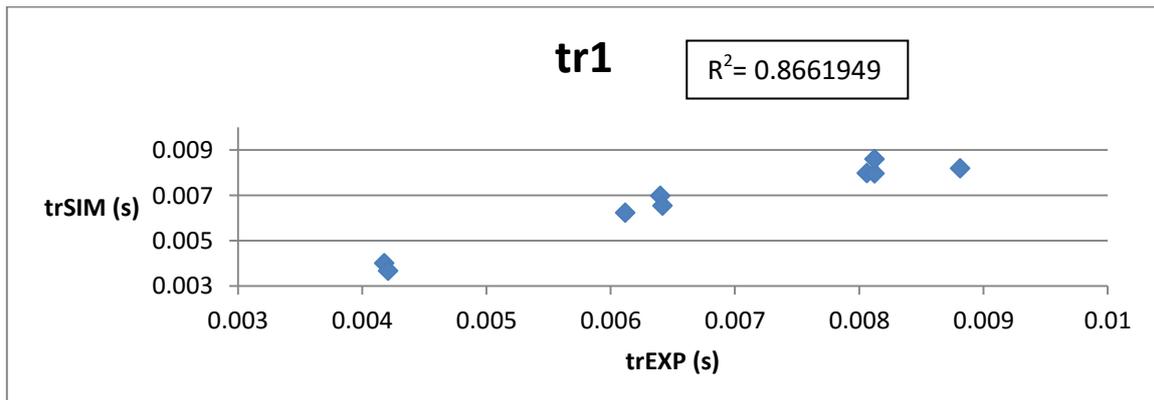


Figura 4.18. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 50% n-heptano, 50% tolueno.

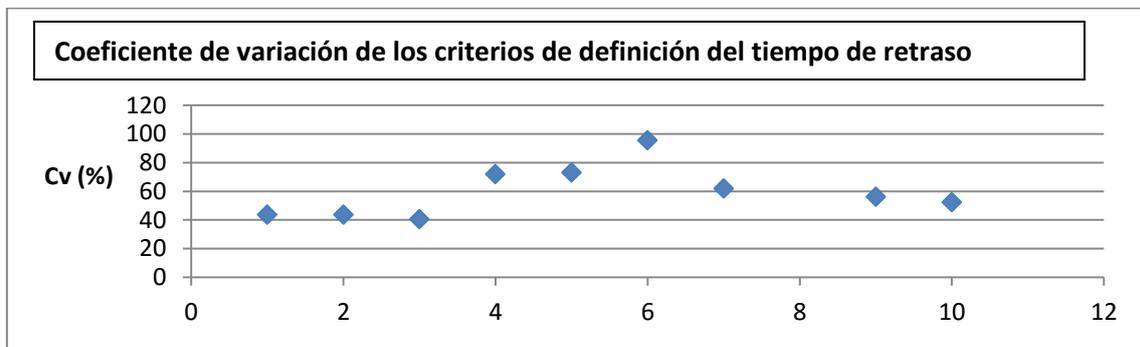


Figura 4.19. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 50% n-heptano, 50% tolueno.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	59.7401127
Desviación típica (%)	17.9129033
Número de ensayos	9
$t_{0.975,N-1}$	2.30600414
μ (%)	13.7690764
ic min (%)	45.9710363
ic max (%)	73.509189

Tabla 4.8. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 50% n-heptano, 50% tolueno.

4.3.2.6 Simulaciones con 50% iso-octano, 35% tolueno, 15%hexeno

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 50% iso-octano, 35% tolueno, 15%hexeno se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	ϵ medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975,N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	3.3045971	3.23753008	10	2.26215716	2.3159895	0.9886076	5.6205866
tr2	2.57935867	1.70872783	10	2.26215716	1.22235025	1.35700842	3.80170892
tr3	2.58483535	1.53636726	10	2.26215716	1.09905093	1.48578442	3.68388628
tr4	3.29738246	2.7684264	10	2.26215716	1.98041294	1.31696952	5.27779541
tr5	4.38917134	2.68208233	10	2.26215716	1.91864612	2.47052521	6.30781746
tr6	2.53279816	1.78008123	10	2.26215716	1.2733934	1.25940476	3.80619156
tr7	2.65054577	2.21381487	10	2.26215716	1.58366776	1.06687801	4.23421353

Tabla 4.9. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 50% iso-octano, 35% tolueno, 15% hexeno.

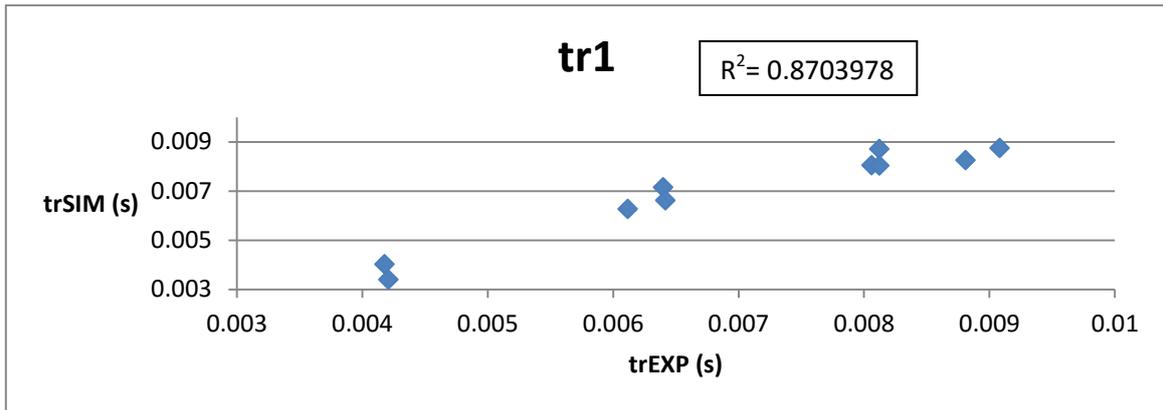


Figura 4.20. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 50% iso-octano, 35% tolueno, 15% hexeno.

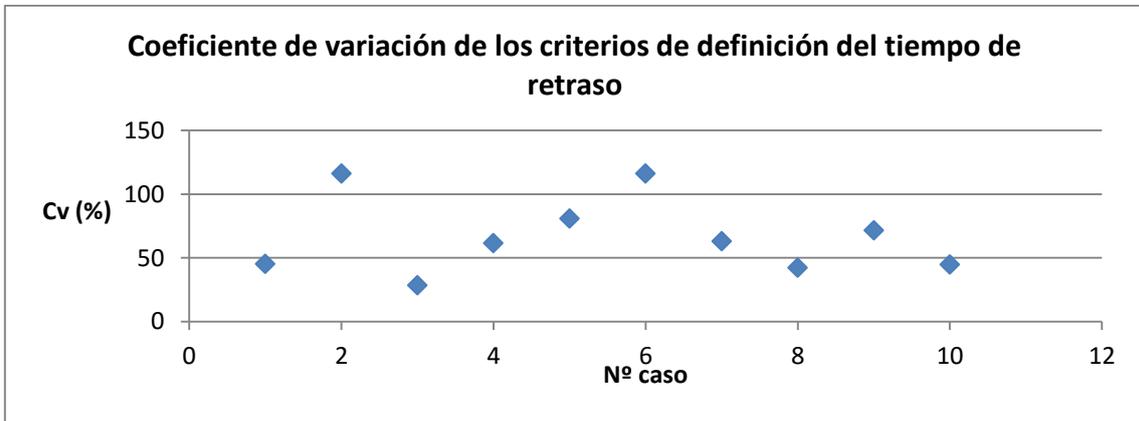


Figura 4.21. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 50% iso-octano, 35% tolueno, 15% hexeno.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	66.9259041
Desviación típica (%)	30.0976442
Número de ensayos	10
t _{0.975,N-1}	2.26215716
μ (%)	21.5305576
ic min (%)	45.3953465
ic max (%)	88.4564618

Tabla 4.10. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 50% iso-octano, 35% tolueno, 15% hexeno.

4.3.2.7 Simulaciones con 47% iso-octano, 35% tolueno, 18%hexeno

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 47% iso-octano, 35% tolueno, 18%hexeno se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	3.30705183	3.20423697	10	2.26215716	2.29217305	1.01487878	5.59922487
tr2	2.6369448	1.71825504	10	2.26215716	1.22916561	1.40777919	3.86611041
tr3	2.62269492	1.46709897	10	2.26215716	1.04949938	1.57319554	3.6721943
tr4	3.93474626	2.83742905	10	2.26215716	2.02977447	1.9049718	5.96452073
tr5	4.26605209	2.76479659	10	2.26215716	1.97781633	2.28823576	6.24386842
tr6	2.68811233	1.88291129	10	2.26215716	1.3469536	1.34115873	4.03506592
tr7	2.62499763	2.12504214	10	2.26215716	1.52016357	1.10483406	4.1451612

Tabla 4.11. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 47% iso-octano, 35% tolueno, 18%hexeno.

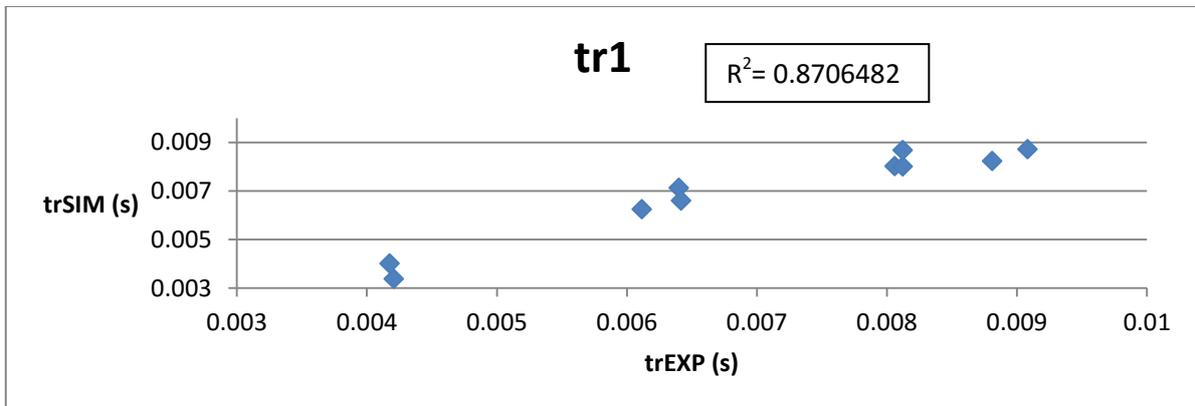


Figura 4.22. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 47% iso-octano, 35% tolueno, 18% hexeno.

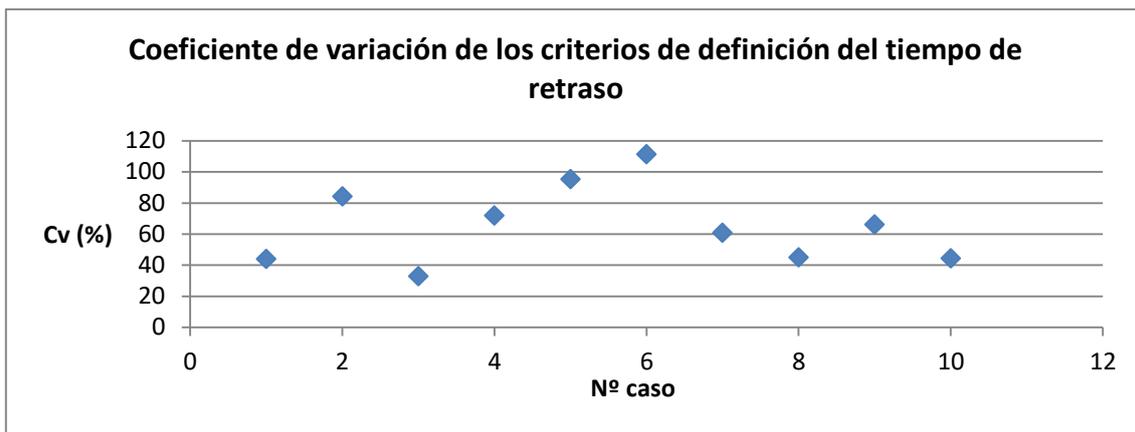


Figura 4.23. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 47% iso-octano, 35% tolueno, 18% hexeno.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	65.4926867
Desviación típica (%)	25.3751591
Número de ensayos	10
$t_{0.975, N-1}$	2.26215716
μ (%)	18.1522953
ic min (%)	47.3403914
ic max (%)	83.644982

Tabla 4.12. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 47% iso-octano, 35% tolueno, 18% hexeno.

4.3.2.8 Simulaciones con 98% iso-octano, 2% n-heptano

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 98% iso-octano, 2% n-heptano se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	2.69717462	2.27795699	27	2.05552944	0.90112977	1.79604485	3.5983044
tr2	2.53846257	1.9495782	27	2.05552944	0.77122745	1.76723512	3.30969002
tr3	2.89539	1.94662528	27	2.05552944	0.77005932	2.12533069	3.66544932
tr4	4.3722266	2.41640127	27	2.05552944	0.95589651	3.41633009	5.3281231
tr5	5.33474856	2.25441084	27	2.05552944	0.89181523	4.44293333	6.22656378
tr6	2.71925298	2.08901055	27	2.05552944	0.82638505	1.89286793	3.54563803
tr7	3.29313021	2.60383199	27	2.05552944	1.03004163	2.26308858	4.32317184

Tabla 4.13. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano.

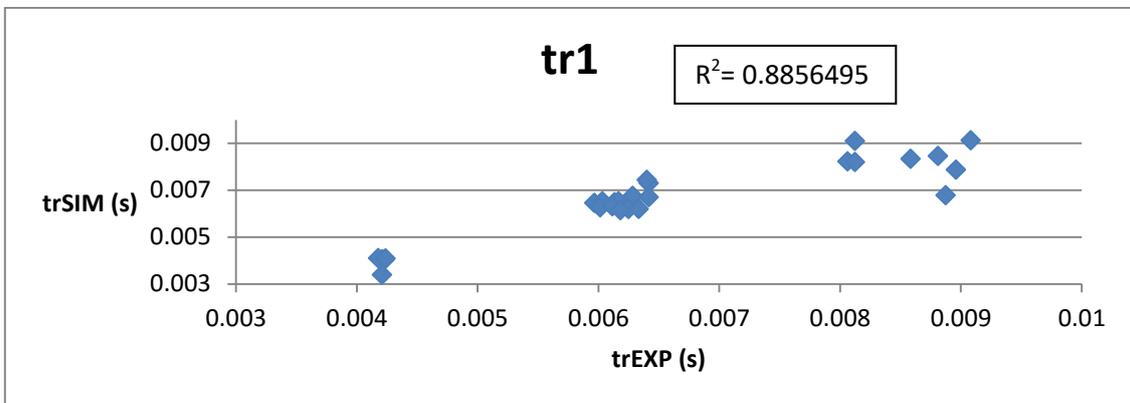


Figura 4.24. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano.

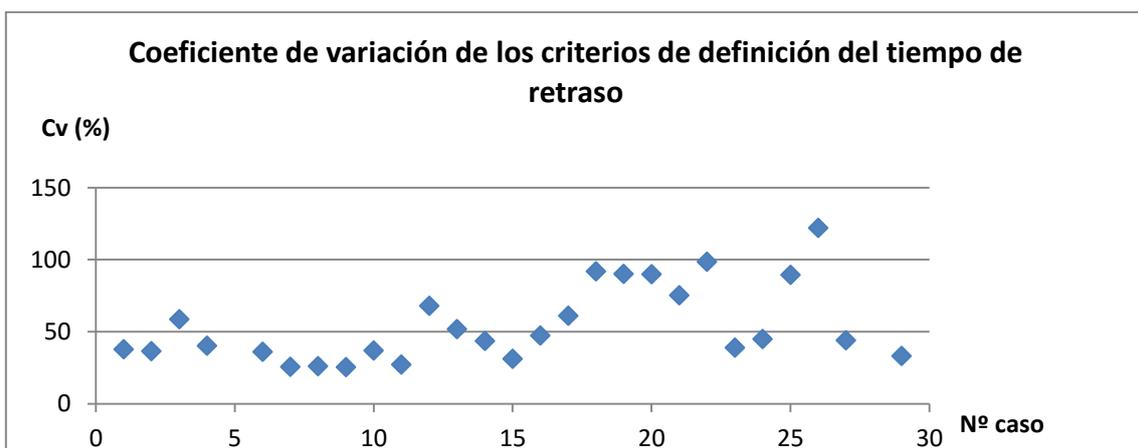


Figura 4.25. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	54.3983694
Desviación típica (%)	26.7553468
Número de ensayos	27
t _{0.975,N-1}	2.05552944
μ (%)	10.5840627
ic min (%)	43.8143067
ic max (%)	64.9824321

Tabla 4.14. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano.

La siguiente tabla muestra los resultados de la comparación entre los óxidos de nitrógeno producidos experimentalmente y los óxidos de nitrógeno producidos en las simulaciones. Se puede observar que los errores son muy elevados, lo cual se puede deber o bien a un fallo del submodelo de NOx empleado o bien a la presencia de diferentes heterogeneidades en la cámara de combustión del motor. La influencia de dichas heterogeneidades en la producción de NOx a partir de las simulaciones se determinará mediante los estudios de sensibilidad que se realizarán en los siguientes apartados.

ε medio NOx (%)	σ (%)	Número de ensayos	t _{0.975,N-1}	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
38.1104123	26.7236949	27	2.05552944	10.5715416	27.5388707	48.6819539

Tabla 4.15. Parámetros representativos de los óxidos de nitrógeno del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano.

4.3.2.9 Comentario de los resultados obtenidos

Los resultados de las simulaciones con los combustibles de sustitución propuestos por el Lawrence Livermore National Laboratory muestran en general unos errores elevados, siendo el tiempo de retraso de las simulaciones generalmente inferior al tiempo de retraso experimental.

Este efecto se confirma mediante las gráficas que representan la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para cada combustible de sustitución, que muestran una tendencia de las simulaciones a autoencender antes que los experimentos para los combustibles de sustitución propuestos por el Lawrence Livermore National Laboratory, denotando esto una reactividad mayor del combustible de sustitución propuesto en relación al combustible empleado en los ensayos experimentales.

Debido a estos resultados, es posible determinar que los combustibles de sustitución propuestos están diseñados para gasolinas americanas, de un octanaje menor a las gasolinas europeas, y por lo tanto, con una mayor predisposición al autoencendido.

Para obtener resultados más aproximados a los experimentales, se ha propuesto como combustible de sustitución el 98% iso-octano, 2% n-heptano. De este modo, se trabajará con un combustible de 98 octanos, valor muy cercano al de la gasolina empleada en los ensayos experimentales. Se obtienen por lo tanto resultados con unos errores menores en cuanto al cálculo del tiempo de retraso, así como unos errores más estratificados en relación a tiempos de retraso simulados más cortos o largos que los experimentales. Es decir, no hay una preponderancia de tiempos más cortos o más largos, siendo esto señal de que los errores de las simulaciones con este combustible de sustitución se deben a factores distintos al octanaje del combustible de sustitución.

Cabe destacar que los errores en el tiempo de retraso mostrados en esta tabla 13 referente al 98% iso-octano, 2% n-heptano son superiores para algunos criterios a los errores mostrados en las tablas de algunos de los combustibles de sustitución anteriores. Esto es debido a que el número de casos tenidos en cuenta para este combustible de sustitución es mayor, y los errores de varios de los casos considerados para este combustible y no para los demás son más elevados que los errores de los diez casos tomados para el estudio inicial, especialmente para el grupo de 2500rpm.

Realizando una comparación para los mismos casos, los errores del 98% iso-octano, 2% n-heptano son notablemente inferiores al resto de combustibles de sustitución empleados previamente. Se pueden consultar los detalles de los tiempos de retraso y los errores de los mismos para cada simulación en el Anexo.

Por otro lado, en relación a la comparación entre criterios de cálculo del tiempo de retraso, las gráficas de los coeficientes de variación para los distintos criterios de cálculo del tiempo de retraso muestran resultados con C_v elevados. Los resultados variarán mucho dependiendo del criterio escogido, esto quiere decir que los resultados obtenidos mediante un criterio sólo pueden compararse con otros resultados obtenidos con ese mismo criterio, y no se pueden comparar resultados obtenidos con criterios distintos.

Estos resultados son confirmados con las tablas que resumen la comparación entre criterios, apreciándose coeficientes de variación medios muy elevados, así como intervalos de confianza de gran amplitud, confirmando la gran heterogeneidad de los resultados en función del criterio empleado.

4.3.3 Fuentes de error

Los resultados de las simulaciones muestran errores de diferente orden de magnitud frente a los resultados experimentales. A continuación se detallarán las posibles fuentes de error y los métodos que se emplearán para evaluar la influencia que tienen en los errores totales así como para tratar de corregirlos.

4.3.3.1 Heterogeneidades en la composición de la mezcla

Se ha realizado un análisis previo para seleccionar los ensayos con un mayor grado de homogeneidad, y se ha empleado un modelo cero-dimensional para realizar las simulaciones de

dichos ensayos. Sin embargo, en la realidad es muy difícil obtener homogeneidades del 100%, siendo además el motor de dos tiempos empleado un motor no diseñado específicamente para trabajar en condiciones homogéneas.

Por lo tanto, la mezcla de aire, combustible y EGR en la cámara de combustión puede presentar diversas heterogeneidades, siendo las más influyentes en los resultados de las simulaciones las heterogeneidades en el dosado relativo Fr .

Dichas heterogeneidades en el dosado relativo están provocadas por el grado de optimización de la inyección y el tiempo de mezcla, parámetros descritos previamente en el apartado de Metodología.

El resultado de las heterogeneidades en el dosado relativo dentro de la cámara de combustión es la presencia de zonas con un dosado relativo más rico que el dosado medio, y zonas con un dosado relativo más pobre que el dosado medio.

Las zonas de dosado más rico tienen un C_p más elevado, con lo que la temperatura que alcanzan es inferior a las zonas de dosado más pobre. Sin embargo, las zonas de dosado más rico presentan una reactividad química más elevada.

La combinación de ambos efectos conlleva diferencias en el tiempo de retraso. Dependiendo de las condiciones iniciales del ensayo, las zonas más pobres alcanzarán antes la temperatura necesaria para el autoencendido y encenderán antes; o la mayor reactividad química de las zonas más ricas determinará un encendido más temprano. En cualquier caso, el autoencendido de las zonas más ricas o de las zonas más pobres desencadenará el encendido de toda la mezcla.

En relación a la producción de óxidos de nitrógeno, las zonas con un dosado relativo más rico que el medio presentarán una atmósfera más reductora que propiciará un mayor reburning de los óxidos de nitrógeno antes de desencadenarse la combustión, mientras que en las zonas con dosado relativo más pobre que el medio se producirá el efecto contrario.

Por otra parte, las zonas más ricas alcanzaran en la combustión temperaturas superiores a las zonas más pobres. Debido a que la producción de óxidos de nitrógeno depende exponencialmente de la temperatura, el efecto de los incrementos de temperatura de las zonas ricas compensa los decrementos de temperatura en las zonas pobres, produciéndose una mayor cantidad de óxidos de nitrógeno.

De nuevo, la combinación de ambos efectos determinará los resultados de la producción de óxidos de nitrógeno en el motor, que será necesariamente distinta al caso homogéneo supuesto.

Para evaluar los mencionados efectos de las heterogeneidades del dosado relativo en los tiempos de retraso y la producción de óxidos de nitrógeno, se realizará un estudio de sensibilidad frente al dosado relativo.

En una primera fase del estudio, se recalculará la composición inicial de la mezcla tomando para ello diez ensayos representativos de las distintas condiciones de operación del motor, empleando para ello dosados relativos con una variación de ± 0.1 y ± 0.2 con respecto al dosado medio. Se han tomado variaciones pequeñas porque debido a la preselección de los casos como los más homogéneos posibles, cabe esperar que las heterogeneidades presentes en la mezcla sean reducidas. Posteriormente, se realizarán las simulaciones con estas nuevas composiciones utilizando el modelo ICE.

En una segunda fase del estudio se empleará el modelo PSR para evaluar de un modo más cualitativo y general la influencia del empleo de distintos dosados relativos de trabajo en los tiempos de retraso y la producción de óxidos de nitrógeno. Dicho estudio se realizará para distintas concentraciones de oxígeno, puesto que los datos obtenidos de éste son los menos rigurosos de los valores iniciales empleados. De este modo, se estimará la influencia de posibles variaciones en la concentración de oxígeno frente a la concentración tomada de los ensayos experimentales.

4.3.3.2 Heterogeneidades en la temperatura inicial

La temperatura inicial se ha tomado como una variable homogénea, siendo los datos empleados un valor medio, sin embargo, en un motor de combustión interna alternativo las paredes de la cámara de combustión, en contacto con los circuitos refrigerantes del motor, están más frías que la mezcla de gases en su interior.

Esta diferencia de temperatura provoca un gradiente térmico, por lo que hay puntos en la cámara de combustión a una temperatura más fría que la temperatura media y, necesariamente, puntos a una temperatura mayor que la media.

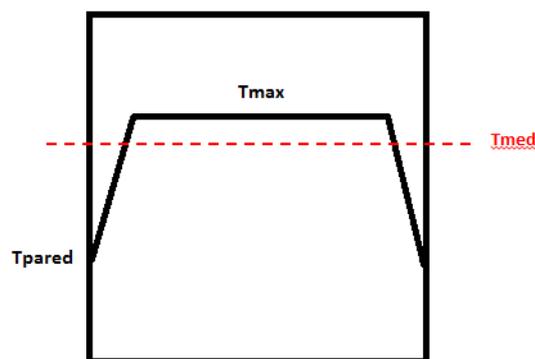


Figura 4.26. Esquema cualitativo del gradiente térmico provocado por el efecto pared en la cámara de combustión.

El gradiente térmico entre las paredes de la cámara de combustión y los gases calientes en su interior antes de la combustión es muy abrupto, y la influencia en la temperatura media no es muy elevada. Sin embargo, puede haber desviaciones de varios grados Kelvin entre la temperatura máxima y la temperatura media. Puesto que una temperatura inicial mayor implica tiempos de retraso más

cortos y unas temperaturas superiores en la combustión, con la consecuente mayor producción de óxidos de nitrógeno, mientras que una temperatura menor implica tiempos de retraso más largos y unas temperaturas inferiores en la combustión, con la consecuente menor producción de óxidos de nitrógeno; es de interés evaluar estos efectos realizando simulaciones con unas variaciones de temperatura con respecto a la temperatura media inicial.

4.3.3.3 Heterogeneidades en las pérdidas de calor

Las pérdidas de calor modelan las fugas de calor por las paredes de la cámara de combustión. Sin embargo, debido a que la combustión es un proceso muy rápido, la zona central de la cámara de combustión, que está alejada de las paredes, puede considerarse como adiabática durante el encendido.

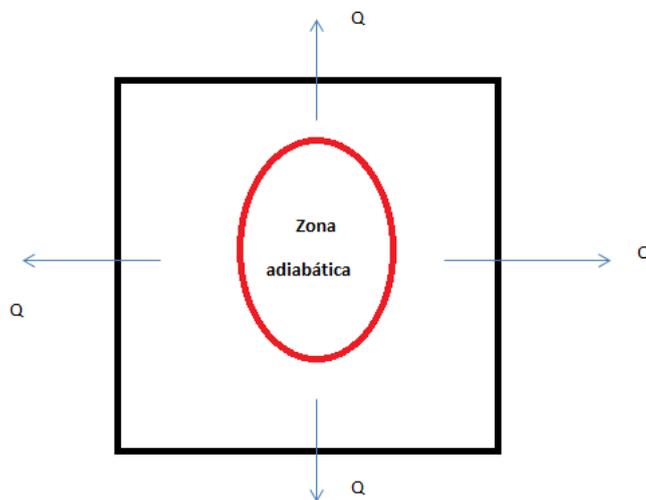


Figura 4.27. Esquema cualitativo de la zona adiabática dentro de la cámara de combustión.

Esta zona adiabática presentará tiempos de retraso más cortos, temperaturas más elevadas en la combustión y mayores producciones de óxidos de nitrógeno.

La realización de simulaciones tomando las pérdidas de calor como una constante igual a cero permitirán la evaluación de este efecto, sirviendo además para determinar la coherencia el modelo de pérdidas de calor empleado, y la influencia del mismo en los resultados.

4.3.3.4 Combustible de sustitución

La gasolina empleada en los ensayos experimentales, al igual que todas las gasolinas comerciales, es una mezcla de miles de especies químicas. Realizar simulaciones con modelos completos de la composición de la gasolina empleada es inviable debido en primer lugar a la complejidad de obtención de dichos modelos, y en segundo lugar al tiempo computacional que se requeriría.

Éste es el motivo de la utilización de combustibles de sustitución, que son generalmente mezclas binarias o terciarias de especies químicas, que simulan el comportamiento de la gasolina para determinados rangos de operación.

Los diferentes combustibles de sustitución son aproximaciones de una gasolina real, por lo que los resultados que se obtengan de su simulación tendrán asociados necesariamente diferentes errores debidos a que no se está simulando con la gasolina real. Además, el empleo de diversos combustibles de sustitución se justifica por el hecho de que cada uno se aproxima mejor a la gasolina en determinados aspectos (por ejemplo poder calorífico, Cp, tiempo de retraso, mecanismo de combustión...).

En consecuencia, los resultados de las simulaciones realizadas en el presente TFG estarán condicionados por lo adecuados que sean los combustibles de sustitución empleados. Por ello se realizarán simulaciones con distintos combustibles de sustitución propuestos por el Lawrence Livermore National Laboratory, así como con una mezcla de 98% iso-octano, 2% n-heptano, para la comparación de los resultados obtenidos con cada uno.

Finalmente, se desarrollarán nuevos combustibles de sustitución que se adapten del modo más óptimo a las condiciones de los ensayos experimentales realizados con el motor de dos tiempos.

4.3.4 Estudio de sensibilidad

A continuación se realizarán los análisis de sensibilidad frente a las fuentes de error previamente mencionadas.

4.3.4.1 Variación de la temperatura inicial

	tr-sim	tr-sim+5K	tr-sim+10K	tr-sim+20K	tr-sim-5K	tr-sim-10K	tr-sim-20K	tr-exp
CMT 5447	0.004089	0.004037	0.003989	0.003904	0.004146	0.004212	0.004381	0.004176
CMT 6401	0.006249	0.006149	0.006065	0.0059035	0.006369	0.006505	0.006889	0.006016
CMT 6871	0.009113	0.008878	0.008699	0.0084262	0.009472	0.010436	-	0.009082
	Error+0k	Error+5k	Error+10k	Error+20k	Error-5k	Error-10k	Error-20k	
CMT 5447	1.1658	1.8583	2.4924	3.6345	0.3991	0.4799	2.7245	
CMT 6401	1.9442	1.1111	0.4145	0.9385	2.9459	4.0801	7.2772	
CMT 6871	0.2022	1.3647	2.5572	4.3769	2.5975	9.0277	-	

Tabla 4.16. Variaciones en los tiempos de retraso y los errores de los mismos con respecto a los resultados experimentales para distintas variaciones de la temperatura inicial.

Se observa que una variación de la temperatura inicial reducida, implica variaciones significativas del tiempo de retraso. Esto es debido a que un pequeño incremento en la temperatura inicial puede suponer una transición de mecanismos de baja temperatura a mecanismos de media o alta temperatura (para aumentos de temperatura inicial) o una transición de mecanismos de alta temperatura a mecanismos de media o baja temperatura (para reducciones de a temperatura inicial).

Se observa que, al igual que ocurre con la variación de los tiempos de retraso, unas pequeñas variaciones de la temperatura inicial suponen una notable variación de los óxidos de nitrógeno producidos, ocurriendo generalmente un efecto de incremento en la producción de NOx con el incremento de la temperatura inicial y un decremento en la producción de NOx con el decremento de la temperatura inicial.

Sin embargo, cabe destacar variaciones en la producción de NOx poco intuitivas, como la producción de 7.417981 ppm en la simulación del caso CMT-6401 con un incremento de la temperatura inicial de 10K, mientras que en el caso con la temperatura inicial real si obtienen 13.37 ppm; o la producción de 7.582898 ppm de NOx en el caso CMT-6871 con un decremento en la temperatura inicial de 10K, mientras que para un decremento en a temperatura inicial de 20K la producción de NOx es de 17.20714 ppm.

Estos efectos se producen precisamente por las transiciones entre los mecanismos de alta, baja y media temperatura explicados previamente; junto con el efecto de la reacción química HCCO.

La transición entre los mecanismos de combustión provoca unas temperaturas máximas de mayor o menor magnitud, y determinan la aparición de la reacción HCCO.

Una temperatura máxima mayor provocará la aparición de más óxidos de nitrógeno por vía térmica, mientras que la reacción HCCO provocará una mayor reducción de los NOx antes del inicio de la combustión. La ponderación de estos dos efectos explica los resultados obtenidos.

4.3.4.2 Simulaciones adiabáticas

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el combustible de sustitución compuesto por una mezcla de 98% iso-octano, 2% n-heptano empleando la condición de motor adiabático se detallan en la tabla mostrada a continuación, siendo los parámetros de la misma los explicados con anterioridad.

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	2.54451065	1.88600846	10	2.26215716	1.34916918	1.19534147	3.89367982
tr2	2.83629075	2.16756594	10	2.26215716	1.55058327	1.28570749	4.38687402
tr3	2.64620082	1.77358509	10	2.26215716	1.26874634	1.37745448	3.91494716
tr4	2.44799318	1.65976153	10	2.26215716	1.18732187	1.26067131	3.63531505
tr5	3.11620845	2.01148743	10	2.26215716	1.43893143	1.67727702	4.55513987
tr6	2.72879714	2.31691804	10	2.26215716	1.65742332	1.07137382	4.38622046
tr7	2.19858614	1.1352418	10	2.26215716	0.81210306	1.38648309	3.0106892

Tabla 4.17. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano para simulaciones adiabáticas.

Realizando una comparación de los resultados obtenidos en los errores de los tiempos de retraso obtenidos mediante las simulaciones en relación a los tiempos de retraso obtenidos mediante los datos experimentales para los casos adiabáticos, con respecto a los errores obtenidos para los casos con pérdidas de calor, se obtiene un peor ajuste en los casos de 4000 y 2000 rpm, y un mejor ajuste en los casos de 2500 rpm.

El balance final en cuanto a errores medios es desfavorable en los casos adiabáticos, por lo que se puede concluir que si bien la zona de combustión adiabática tiene influencia en determinados experimentos, ésta es en general reducida, por lo que no supone una fuente de error de gran magnitud con respecto al cálculo de los tiempos de retraso.

Además, cabe señalar que el modelo de pérdidas de calor empleado para obtener los perfiles de calor, como resultado experimental, no supone una fuente de error primordial con respecto al cálculo de los tiempos de retraso.

Para una información más detallada de los resultados del análisis de sensibilidad con respecto a las simulaciones adiabáticas, consultar el Anexo.

ε medio NOx (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
45.3153163	41.4595318	10	2.26215716	29.6583624	15.6569539	74.9736786

Tabla 4.18. Parámetros representativos de los óxidos de nitrógeno del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano para simulaciones adiabáticas.

Los errores medios respecto a la producción de óxidos de nitrógeno en las simulaciones en relación a la producción de óxidos de nitrógeno en los ensayos experimentales para los casos adiabáticos son mayores que para los casos con pérdidas de calor.

Sin embargo, se observa que la suposición del motor como adiabático explica los resultados de parte de los casos, realizando una ponderación cualitativa entre las zonas del motor con pérdidas de calor y las zonas del motor adiabáticas por lo que se puede concluir que si bien este efecto no es determinante para explicar los errores de todos los ensayos, sí que tiene influencia en los mismos, llegando a ser muy importante en alguno de ellos.

Para una información más detallada de los resultados del análisis de sensibilidad con respecto a las simulaciones adiabáticas, consultar el Anexo.

4.3.4.3 Simulaciones variación de dosado

Influencia en el tiempo de retraso

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	4.98759987	5.69393525	8	2.36462425	4.76024899	0.22735088	9.74784887
tr2	4.03587557	4.56746992	8	2.36462425	3.81850041	0.21737516	7.85437598
tr3	3.92585211	4.12944231	8	2.36462425	3.45230016	0.47355195	7.37815227
tr4	11.0192903	7.03787097	8	2.36462425	5.88380738	5.13548292	16.9030977
tr5	13.892357	7.14064064	8	2.36462425	5.96972497	7.922632	19.8620819
tr6	4.4586177	5.36056944	8	2.36462425	4.48154821	0	8.94016591
tr7	7.21740437	6.93759712	8	2.36462425	5.79997634	1.41742803	13.0173807

Tabla 4.19. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano con una variación sobre el dosado relativo medio de +0.1.

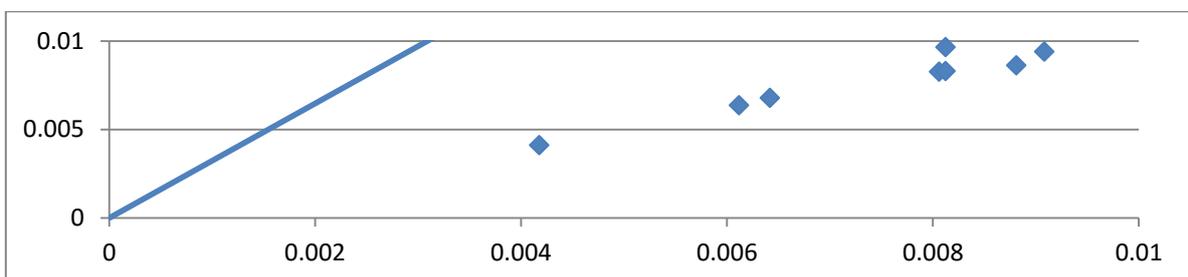


Figura 4.15. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para $Fr+0.1$.

	ϵ medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975,N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	7.91529067	8.78988125	8	2.36462425	7.34852462	0.56676605	15.2638153
tr2	4.88161843	5.77462702	8	2.36462425	4.827709	0.05390943	9.70932743
tr3	4.98404694	4.49393318	8	2.36462425	3.75702215	1.22702479	8.7410691
tr4	13.489521	9.74776952	8	2.36462425	8.14933926	5.3401817	21.6388602
tr5	15.9014801	10.0384006	8	2.36462425	8.39231291	7.50916715	24.293793
tr6	7.35273202	8.0457397	8	2.36462425	6.72640672	0.62632529	14.0791387
tr7	10.7571419	9.80442028	8	2.36462425	8.19670048	2.56044146	18.9538424

Tabla 4.20. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano con una variación sobre el dosado relativo medio de +0.2.

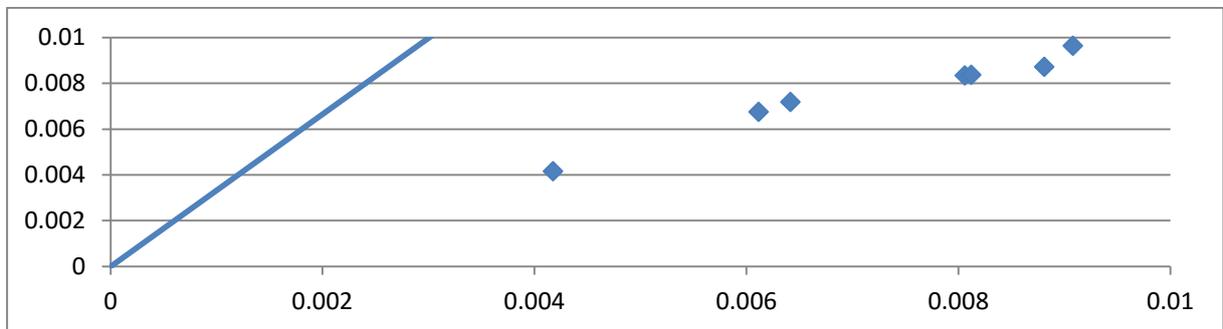


Figura 4.28. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para Fr+0.2.

	ϵ medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975,N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	4.44454425	4.81107994	9	2.30600414	3.69812341	0.74642083	8.14266766
tr2	3.83368315	3.59002177	9	2.30600414	2.75953501	1.07414814	6.59321817
tr3	4.27049341	3.46038107	9	2.30600414	2.65988435	1.61060906	6.93037777
tr4	9.16189072	5.66665114	9	2.30600414	4.35577365	4.80611707	13.5176644
tr5	11.5403735	5.61673621	9	2.30600414	4.31740564	7.22296789	15.8577792
tr6	3.9996994	4.30291891	9	2.30600414	3.30751626	0.69218314	7.30721567
tr7	6.2419907	5.7088585	9	2.30600414	4.3882171	1.8537736	10.6302078

Tabla 4.21. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano con una variación sobre el dosado relativo medio de -0.1.

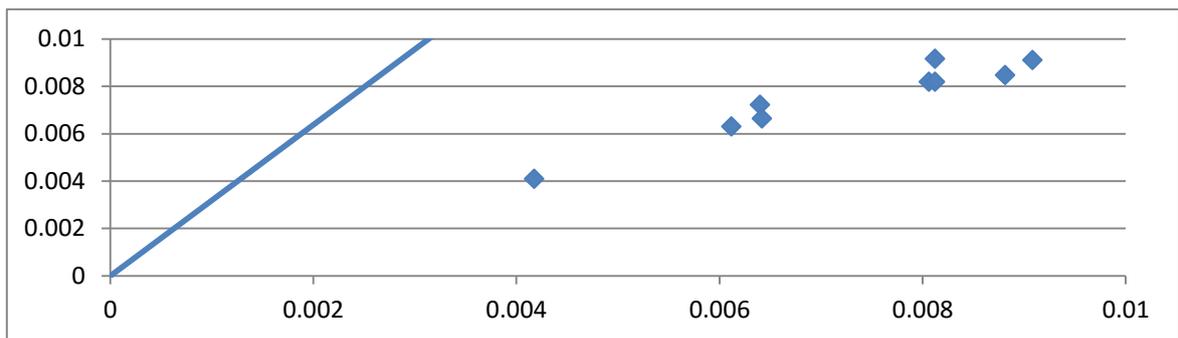


Figura 4.29. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para Fr-0.1.

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	3.8489803	3.8346201	8	2.36462425	3.20582263	0.64315767	7.05480293
tr2	3.63458145	2.84589892	8	2.36462425	2.37923104	1.25535041	6.01381249
tr3	3.81438799	2.45901862	8	2.36462425	2.05579101	1.75859698	5.870179
tr4	7.86308086	5.31108844	8	2.36462425	4.44018105	3.42289981	12.3032619
tr5	9.63786883	5.8127482	8	2.36462425	4.85957911	4.77828972	14.4974479
tr6	3.756019	3.87366288	8	2.36462425	3.23846321	0.51755579	6.9944822
tr7	5.9105044	5.04286151	8	2.36462425	4.21593773	1.69456667	10.1264421

Tabla 4.22. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 98% iso-octano, 2% n-heptano con una variación sobre el dosado relativo medio de 0.2.

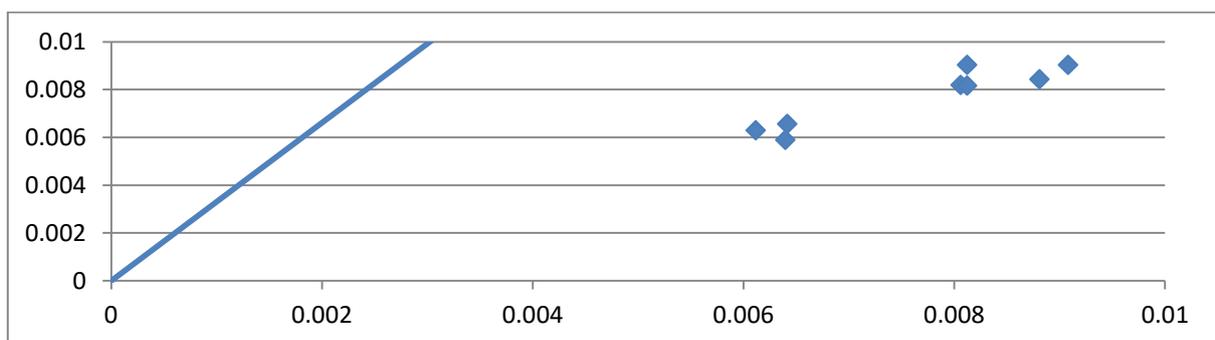


Figura 4.30. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para Fr-0.2.

Los resultados obtenidos para el estudio de sensibilidad de las heterogeneidades en la composición de la mezcla para el motor de dos tiempos en relación a los errores en los tiempos de retraso aportan datos concluyentes que confirman dichas heterogeneidades como una de las principales fuentes de error.

Como se puede observar en las tablas anteriores, los resultados medios son de un mayor error con respecto a las simulaciones con el dosado relativo medio. Sin embargo, como puede apreciarse en las gráficas, las variaciones de dosado relativo dan resultados muy positivos para grupos de experimentos concretos.

Es decir, dependiendo del grado de heterogeneidad de la mezcla, el empleo de una variación de dosado con respecto al dosado medio proporciona resultados muy ajustados a los resultados experimentales, pudiendo mediante la ponderación de los resultados obtenidos con variación de dosado relativo y los resultados obtenidos con dosado relativo medio explicarse los errores en los tiempos de retraso de todos los ensayos.

Este efecto es particularmente influyente en las simulaciones para el grupo de ensayos a 2500 rpm, que demuestran tener las mayores heterogeneidades, siendo éste el motivo principal de que los errores en los tiempos de retraso para estos experimentos sean superiores a los errores del resto de experimentos.

Influencia en la producción de óxidos de nitrógeno

ε medio NOx (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
44.0982324	17.7760695	8	2.36462425	14.861166	16.0075967	45.7299287

Tabla 4.23. Parámetros representativos de los óxidos de nitrógeno para Fr+0.1 .

ε medio NOx (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
56.300825	22.2376751	8	2.36462425	18.5911616	20.8194159	58.0017391

Tabla 4.24. Parámetros representativos de los óxidos de nitrógeno para Fr+0.2.

ε medio NOx (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
31.9951224	14.1217289	9	2.30600414	10.8549218	11.5416639	33.2515075

Tabla 4.25. Parámetros representativos de los óxidos de nitrógeno para Fr-0.1.

ε medio NOx (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
39.3380114	11.8972697	8	2.36462425	9.94636638	17.5902416	37.4829744

Tabla 4.26. Parámetros representativos de los óxidos de nitrógeno para Fr-0.2.

Los resultados de la influencia de las heterogeneidades en la mezcla para la producción de óxidos de nitrógeno en las simulaciones aportan datos concluyentes para determinar que este efecto es la principal fuente de error para el cálculo de los NOx simulados.

Cabe destacar que para un decremento de 0.1 en el dosado relativo, los errores medios en la producción de óxidos de nitrógeno son menores que los errores medios para el dosado medio.

Del mismo modo, los resultados con las diferentes variaciones de dosado permiten explicar todos los errores en la producción de óxidos de nitrógeno mediante la ponderación de los mismos, es decir, teniendo en cuenta las zonas del motor con un dosado más rico que el medio y las zonas del motor con un dosado más pobre que el medio.

4.3.4.4 Sensibilidad PSR

Para el estudio de sensibilidad del tiempo de retraso y la producción de óxidos de nitrógeno frente al dosado y la concentración de oxígeno en el modelo PSR se han tomado las siguientes consideraciones:

El rango de concentraciones de oxígeno varía de 0.08 a 0.15. Sin embargo, en ningún caso obtenemos del cálculo de la composición inicial de la mezcla una concentración de oxígeno superior al 0.1. El motivo por el cual se ha tomado este rango de concentraciones de oxígeno es la presencia de productos intermedios de la combustión, principalmente el CO y el H₂O₂, que contienen átomos de oxígeno y aumentan la reactividad de la mezcla.

Puesto en la mezcla inicial de los PSR no se han considerado estos compuestos, es necesario aumentar la cantidad de oxígeno para una mayor representatividad de las simulaciones.

Concentración 0.08 O₂

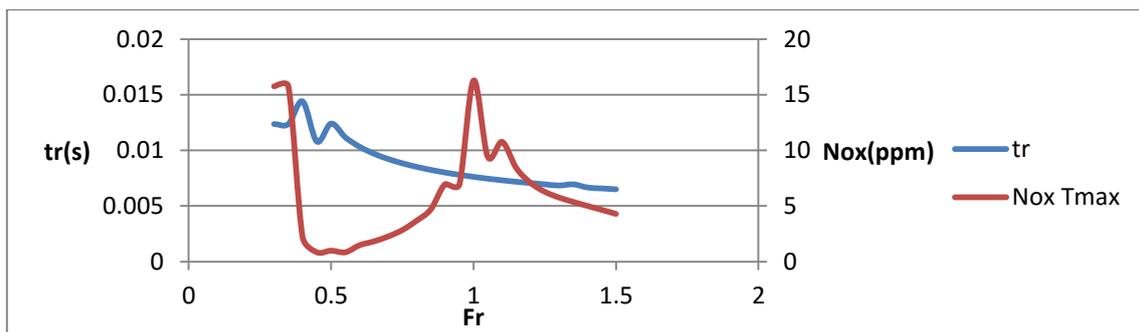


Figura 4.30. Gráfica representativa de la evolución del tiempo de retraso y la producción de NOx con el dosado relativo para una concentración de oxígeno de 0.08.

Para una concentración de oxígeno de 0.08, se puede observar que el mecanismo de cinética química no simula de forma coherente la producción de óxidos de nitrógeno, afectando también a los tiempos de retraso, sobre todo para dosados muy pobres. Sin embargo, en las simulaciones con los

ensayos del motor de dos tiempos, las concentraciones de oxígeno eran inferiores a este valor en algunos casos, mientras que los resultados eran coherentes. Esto demuestra la importancia de la inclusión de los productos intermedios de la combustión en la mezcla inicial, y valida la hipótesis de la necesidad de incluir una mayor concentración de oxígeno en los modelos PSR para obtener simulaciones representativas.

Sin embargo, los resultados obtenidos para esta concentración de oxígeno no invalidan el modelo de NOx empleado en las simulaciones, simplemente muestran que se ha alcanzado el límite para el cual el modelo es representativo. Tal y como se ha explicado en el marco teórico, los modelos de cinética química son solo válidos para ciertos rangos de propiedades físicas y químicas.

Concentración 0.1 O₂

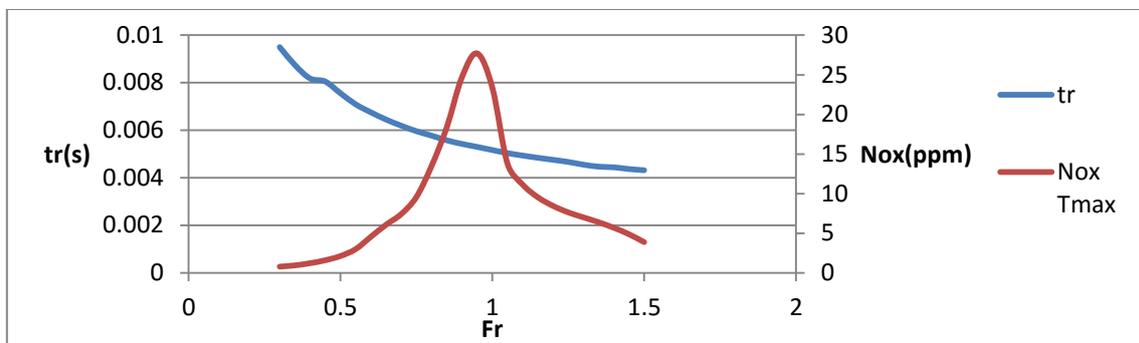


Figura 4.31. Gráfica representativa de la evolución del tiempo de retraso y la producción de NOx con el dosado relativo para una concentración de oxígeno de 0.1.

El caso con una concentración de oxígeno de 0.1 muestra resultados coherentes tanto en la producción de óxidos de nitrógeno como en los tiempos de retraso, confirmando las condiciones de las simulaciones están dentro del rango de representatividad del modelo.

Los óxidos de nitrógeno aumentan hasta alcanzar un máximo para un dosado relativo cercano a uno, donde las elevadas temperaturas alcanzadas provocan una gran producción de NOx por vía térmica. Posteriormente, la producción de óxidos de nitrógeno se reduce para dosados ricos, pues la atmósfera reductora provocada por el exceso de combustible permite una mayor recombinación de los mismos y una menor producción en el balance neto final.

Concentración 0.12 O₂

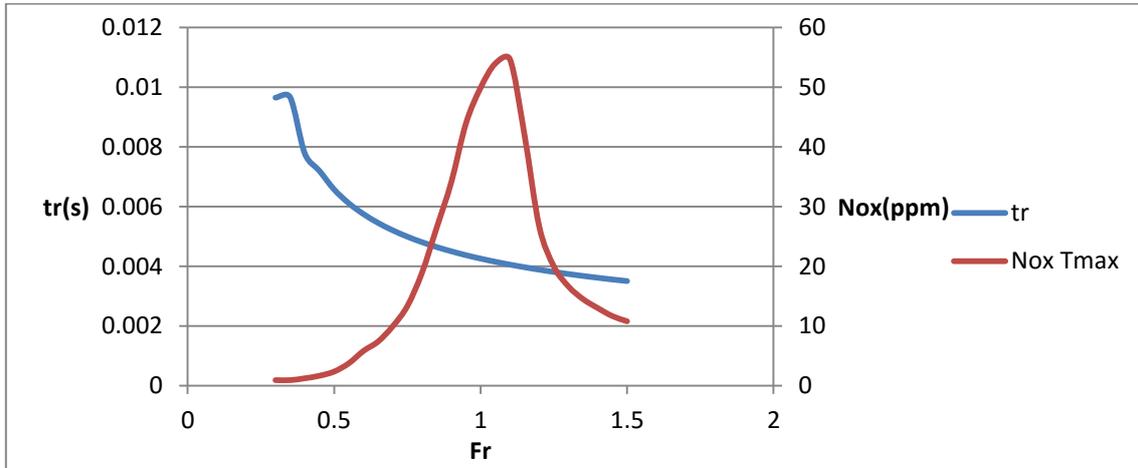


Figura 4.32. Gráfica representativa de la evolución del tiempo de retraso y la producción de NO_x con el dosado relativo para una concentración de oxígeno de 0.12.

Se observa para el caso con una concentración del 0.12 de oxígeno que los valores máximos alcanzados en la producción de óxidos de nitrógeno duplican los del caso anterior. Así mismo, se observa una notable reducción de los tiempos de retraso, sobre todo en los casos de dosados ligeramente pobres.

Concentración 0.15 O₂

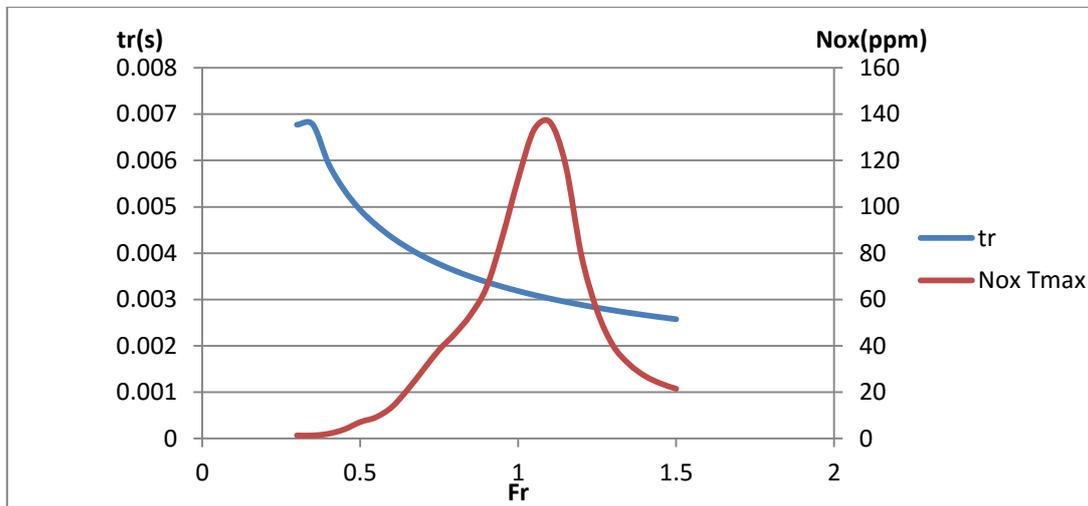


Figura 4.33. Gráfica representativa de la evolución del tiempo de retraso y la producción de NO_x con el dosado relativo para una concentración de oxígeno de 0.15.

Para una concentración de oxígeno del 0.15, los máximos valores en producción de óxidos de nitrógeno duplican holgadamente los del caso con una concentración de oxígeno del 0.12, mientras que los tiempos de retraso se ven nuevamente acortados.

Esto demuestra la enorme influencia que tiene la concentración de oxígeno en la producción de óxidos de nitrógeno, confirmando la importancia de los métodos de recirculación de gases de escape para la reducción de las emisiones de los mismos.

Del mismo modo, estos resultados permiten deducir la concentración de oxígeno como una de las fuentes de error de mayor influencia en los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con el motor de dos tiempos, pues es conocido que los datos obtenidos a partir de la sonda lambda para la medición del oxígeno son los más críticos en cuanto a margen de error.

4.3.5 Obtención de un nuevo combustible de sustitución

4.3.5.1 Introducción

El objetivo de este apartado es hallar nuevos combustibles de sustitución que se ajusten mejor a la gasolina empleada en los experimentos del motor de dos tiempos, en relación al tiempo de retraso.

Tal y como se ha demostrado mediante los cálculos anteriores, los combustibles de sustitución propuestos por el Instituto de San Diego se corresponden con una gasolina de un octanaje inferior al europeo, dando como resultado las simulaciones realizadas con estos combustibles de sustitución unos tiempos de retraso sistemáticamente más cortos que los tiempos de retraso experimentales.

Esta conclusión se ha confirmado mediante las simulaciones realizadas mediante un combustible de sustitución como es el 98% Iso-octano, 2%n-heptano. Esta mezcla tiene un número de octano de 98, en concordancia con la gasolina empleada en los experimentos con el motor de dos tiempos. Tal y como se ha observado, los tiempos de retraso obtenidos en las simulaciones con este combustible de sustitución se ajustan a los tiempos de retraso experimentales mucho mejor que las mezclas propuestas por el Instituto de San Diego, presentando además errores positivos y negativos, es decir, tiempos de retraso más cortos y más largos que los experimentales, en contraste con los anteriores combustibles de sustitución, que daban siempre tiempos de retraso más cortos.

Sin embargo, y a pesar de que la mezcla 98% Iso-octano, 2%n-heptano da resultados lo suficientemente ajustados como para realizar los cálculos para los estudios de sensibilidad al dosado relativo y a la temperatura inicial para comprobar la influencia de las heterogeneidades en la cámara de combustión con respecto al tiempo de retraso y la producción de NOx, y para comparar los distintos criterios empleados para calcular el tiempo de retraso, así como para explicar la evolución de las distintas variables físicas y químicas durante en autoencendido; se ha pretendido hallar combustibles de sustitución con características similares en cuanto a especies químicas a los combustibles propuestos por el Instituto de San Diego, que se ajusten mejor al comportamiento de las gasolinas europeas (con un octanaje superior) en general, y a los experimentos realizados con el motor de dos tiempos en particular.

Las distintas especies químicas consideradas para estos nuevos combustibles de sustitución han sido el Iso-octano, el n-heptano, el tolueno y el 1-Hexeno.

Para hallar estos nuevos combustibles de sustitución, se han realizado dos procedimientos.

En primer lugar, se ha considerado el motor tipificado empleado para realizar los ensayos del número de octano de un combustible. Para las condiciones de este motor (presión inicial, temperatura inicial, geometría del motor, relación de compresión, revoluciones por minuto), y con una composición inicial de combustible y aire (nitrógeno, oxígeno y argón) en proporción estequiométrica, se han realizado simulaciones con la mezcla 98% Iso-octano, 2% n-heptano y con las distintas especies químicas consideradas para componer el combustible de sustitución.

El primer objetivo de estas simulaciones era evaluar el comportamiento de las especies químicas individualmente, para obtener de este modo un orden de magnitud sobre las características del combustible de sustitución y la evolución del tiempo de retraso para las distintas composiciones de las mezclas.

Los resultados de las simulaciones han confirmado el comportamiento teórico de cada especie, obteniendo el 1-Hexeno el tiempo de retraso más corto junto con el n-Heptano, y teniendo el tolueno y el Iso-octano tiempos de retraso más largos.

A continuación, se han ajustado distintas mezclas de combustibles, tomando como criterio para asumir una mezcla como preliminarmente aceptable que el tiempo de retraso de dicha mezcla cumpliera con cierto error con respecto al tiempo de retraso de la mezcla de 98% Iso-octano, 2% n-heptano.

Tomando las mezclas que cumplían los requisitos, se han realizado las simulaciones en el motor de dos tiempos, teniendo para ello en cuenta las condiciones iniciales de presión y temperatura iniciales, los perfiles de volumen y pérdidas de calor y la composición química inicial, empleando el combustible de sustitución nuevo (con los correspondientes ajustes en las proporciones del resto de especies).

Se han elegido tres experimentos, uno para cada régimen de giro (4000, 2500 y 2000rpm), tomando como criterio para elegir los experimentos que presentaran unas condiciones medias de presión, temperatura y composición química iniciales dentro del rango de experimentos para cada régimen de giro.

Las simulaciones con las mezclas preliminares obtenidas en el motor de número de octano han presentado resultados muy heterogéneos en las distintas simulaciones con el motor de dos tiempos, con variaciones elevadas en cuanto a los errores en el tiempo de retraso.

En consecuencia, se ha repetido el proceso inicial para evaluar la mezcla de 98% Iso-octano, 2% n-heptano y las distintas especies químicas individualmente, empleando en esta ocasión de nuevo el motor del número de octano, pero cambiando las revoluciones por minuto a 3000 rpm, con el objetivo de trabajar en unas condiciones más similares al motor experimental.

Con estas nuevas condiciones, se han evaluado distintas mezclas, seleccionando aquellas que mejor se ajustaban a la mezcla de 98% Iso-octano, 2% n-heptano. A continuación, se han realizado las simulaciones de estas mezclas en las condiciones tipificadas del motor del número de octano, comprobando que las mezclas obtenidas con este nuevo método presentaban errores superiores en dicho motor que las mezclas ajustadas directamente con las condiciones tipificadas del motor. Este resultado es perfectamente normal, sin embargo, los errores son lo suficientemente bajos como para validar las nuevas mezclas en este motor.

Para finalizar este primer procedimiento, se han realizado las simulaciones con las nuevas mezclas halladas en el motor de número de octano a 3000 rpm en el motor de dos tiempos, siguiendo el mismo procedimiento que con las mezclas obtenidas con el motor de número de octano a 900 rpm.

Los resultados obtenidos han sido más ajustados que en el caso anterior, pero siguen presentando errores heterogéneos y superiores al objetivo marcado.

Las conclusiones que podemos extraer de este primer procedimiento son:

La determinación del número de octano en combustibles por medio del motor tipificado sólo asegura resultados muy aproximados para condiciones de presión, temperatura, composición química, régimen de giro y geometría similares a las de dicho motor; pudiendo dos combustibles muy similares para estas características tener comportamientos distintos para unas condiciones distintas.

La variación de las condiciones tipificadas en el motor del número de octano para ajustarse mejor a las características de un motor en particular proporciona resultados más ajustados para dicho motor, empeorando sólo ligeramente los errores en las condiciones tipificadas.

Los distintos grupos de experimentos realizados en el motor de dos tiempos, caracterizados por el régimen de giro, presentan grandes diferencias con respecto a sus características iniciales, dificultando en gran medida la determinación de un combustible de sustitución que se ajuste a todos ellos empleando el método del motor del número de octano.

El segundo procedimiento empleado para hallar nuevos combustibles de sustitución que se ajusten a los tiempos de retraso de los distintos experimentos con el motor de dos tiempos es el siguiente.

Debido a las dificultades para ajustar un combustible de sustitución empleando el motor del número de octano, se realizará dicho ajuste empleando el motor de dos tiempos, y se validarán posteriormente los combustibles hallados en el motor del número de octano.

Los motivos por los cuales se empleó el motor del número de octano para el primer procedimiento fueron en primer lugar el obtener combustibles de sustitución que cumplieran con la normativa en cuanto al octanaje de los mismos, siendo el objetivo hallar combustibles de sustitución para gasolinas europeas con un número de octano de 98.

En segundo lugar, se empleó el motor del número de octano debido a que las condiciones del mismo simplificaban en gran medida los cálculos, obteniendo de este modo resultados de las simulaciones en mucho menos tiempo.

Sin embargo, debido a que los resultados obtenidos en relación a los experimentos con el motor de dos tiempos no se ajustaban del modo deseado a los objetivos marcados en el inicio de este apartado, se ha procedido a emplear un método con unos tiempos de cálculo mucho mayores, pero que permitirán ajustar de forma muy aproximada los combustibles de sustitución al motor de dos tiempos.

Por ello, el objetivo de este segundo procedimiento es obtener un combustible de sustitución que obtenga mejores resultados que el 98% Iso-octano, 2% n-heptano para todos los experimentos en general en relación a los errores en el tiempo de retraso.

Para ello, en primer lugar se han elegido tres experimentos representativos (cada uno de un régimen de giro determinado) y se han realizado las simulaciones con cada especie química individualmente, comparando los resultados con los del 98% Iso-octano, 2% n-heptano.

A continuación, y en base a las características que presentaba cada especie química en el motor de dos tiempos, para cada régimen de giro se han hallado varios combustibles que se ajustan perfectamente en relación al tiempo de retraso con el motor y el combustible experimental.

Cabe destacar la excepción de los experimentos de 2500 rpm, cuyas condiciones iniciales y heterogeneidades hacen imposible hallar un combustible de sustitución que se ajuste a los resultados experimentales con el grado de aproximación tan elevado que se obtiene en los otros experimentos.

Finalmente, se ha hallado un combustible de sustitución que cumple con los objetivos marcados en este apartado en cuanto a error en el tiempo de retraso, para todos los experimentos.

Para concluir este apartado, se han realizado las simulaciones de los combustibles de sustitución hallados mediante este método en el motor tipificado de número de octano, obteniéndose las siguientes conclusiones:

Se ha hallado un combustible de sustitución que cumple con los objetivos marcados para todos los experimentos, mejorando los resultados obtenidos con el 98% Iso-octano, 2% n-heptano.

Las simulaciones realizadas con estos combustibles de sustitución en el motor tipificado del número de octano muestran resultados heterogéneos, presentando resultados ajustados y resultados más alejados de los objetivos marcados.

Estos resultados se explican debido a las grandes diferencias entre las condiciones de los dos motores, y confirman el último punto de las conclusiones obtenidas en el primer procedimiento.

4.3.5.2 Resultados de las simulaciones con 10% iso-octano, 90% tolueno

	ε medio (%)	σ (%)	Número de ensayos	$t_{0.975, N-1}$	μ (%)	ic min (%)	ic max (%)
tr1	2.19479319	1.86272448	27	2.05552944	0.73686926	1.45792393	2.93166245
tr2	2.29528468	2.00966789	27	2.05552944	0.79499814	1.50028654	3.09028282
tr3	2.73455195	1.93170481	27	2.05552944	0.76415697	1.97039498	3.49870892
tr4	3.57720697	1.94638831	27	2.05552944	0.76996557	2.80724139	4.34717254
tr5	4.47052103	1.87134646	27	2.05552944	0.74028001	3.73024102	5.21080103
tr6	2.26881241	1.85436285	27	2.05552944	0.73356151	1.5352509	3.00237392
tr7	2.59873719	2.18475847	27	2.05552944	0.86426166	1.73447552	3.46299885

Tabla 4.27. Parámetros representativos de los tiempos de retraso del combustible de sustitución de 10% iso-octano, 90% tolueno.

Los errores medios obtenidos para los distintos criterios de cálculo del tiempo de retraso son inferiores a los obtenidos mediante cualquier otro combustible de sustitución, confirmando que la mezcla de 10% iso-octano, 90% tolueno se ajusta mejor a los resultados experimentales en cuanto al cálculo del tiempo de retraso que el resto de combustibles de sustitución.

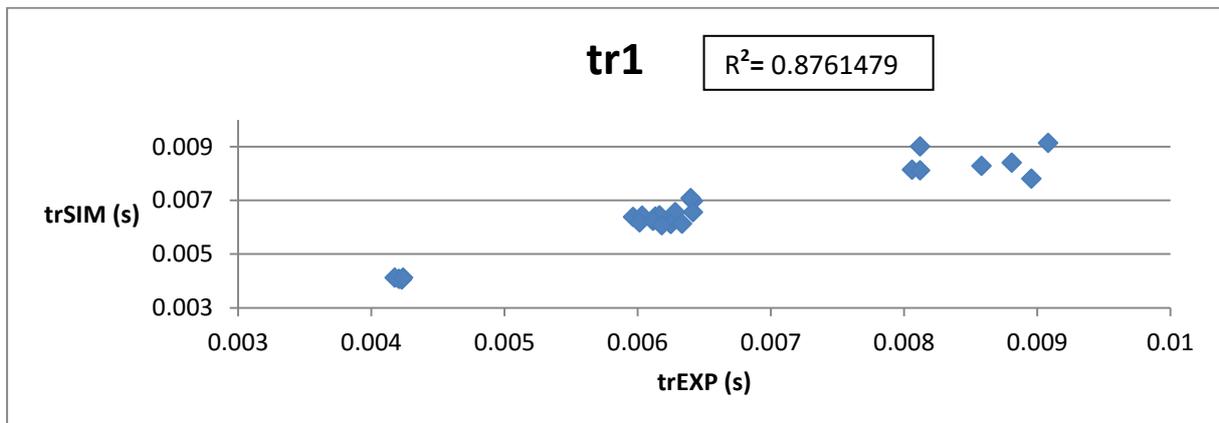


Figura 4.33. Gráfica que representa la correlación entre los tiempos de retraso simulados y los tiempos de retraso experimentales referidos al criterio de máxima derivada de la presión para el combustible de sustitución de 10% iso-octano, 90% tolueno.

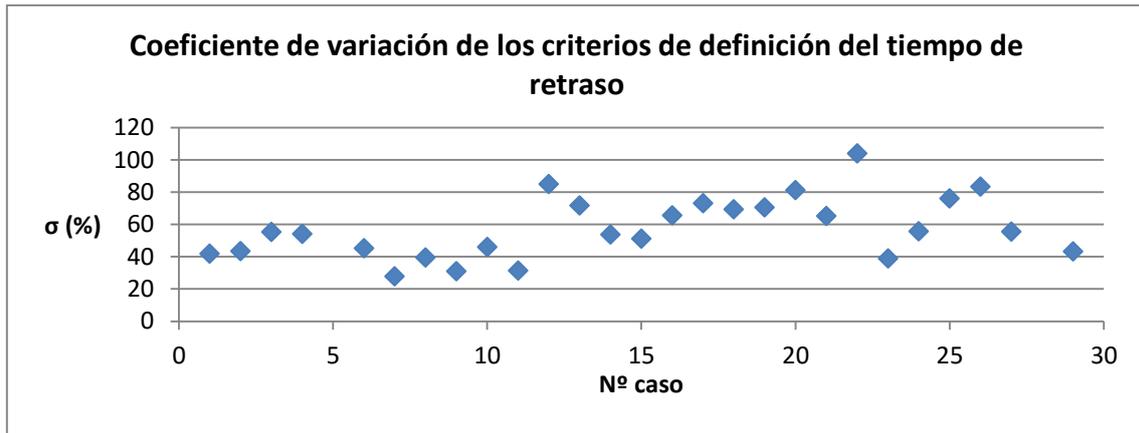


Figura 4.34. Gráfica que representa el coeficiente de variación entre los distintos errores de los tiempos de retraso para el combustible de sustitución de 10% iso-octano, 90% tolueno.

Comparación entre criterios	
Desviación media (%)	57.6668217
Desviación típica (%)	18.9604509
Número de ensayos	27
t _{0.975,N-1}	2.05552944
μ (%)	7.50050459
ic min (%)	50.1663171
ic max (%)	65.1673263

Tabla 4.28. Representación de los parámetros fundamentales para la comparación entre criterios de cálculo de tiempo de retraso para el combustible de sustitución de 10% iso-octano, 90% tolueno.

5. Conclusiones y trabajos futuros

Como conclusión al trabajo realizado, se destacarán los siguientes puntos:

La definición de un método de cálculo de las condiciones iniciales para las simulaciones de los ensayos realizados con el motor de dos tiempos desarrollo por parte del grupo Renault-Francia Automóviles en colaboración con el grupo CMT-Motores Térmicos.

La realización de simulaciones para siete combustibles de sustitución y se han comparado los resultados de las mismas para tiempos de retraso y producción de óxidos de nitrógeno con los resultados experimentales.

El cálculo de tiempos de retraso empleando siete criterios distintos y comparándolos entre ellos.

El estudio de sensibilidad para determinar la influencia de las heterogeneidades en los resultados de forma cualitativa.

El desarrollo de un nuevo combustible de sustitución con un mejor ajuste frente a los resultados experimentales en cuanto al tiempo de retraso.

Los trabajos futuros que se podrán desarrollar para complementar los resultados del trabajo realizado son los siguientes:

Realización de ensayos específicos para la comprobación experimental de los distintos criterios de cálculo del tiempo de retraso.

Realización de ensayos con homogeneidad controlada para validar el submodelo de NOx desarrollado por el "Combustion Research Group" de la UC San Diego.

Realización de simulaciones CFD detalladas para estudiar de forma cuantitativa las heterogeneidades que presenta el motor de dos tiempos.

BIBLIOGRAFÍA

@article{heufer_comparison_2013,

title = {A comparison of longer alkane and alcohol ignition including new experimental results for n-pentanol and n-hexanol},

volume = {34},

issn = {1540-7489},

doi = {10.1016/j.proci.2012.05.103},

journal = {Proceedings of the Combustion Institute},

author = {Heufer, K. A. and Bugler, J. and Curran, H. J.},

year = {2013},

pages = {511--518}

@article{colin_detailed_2005,

title = {Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations},

volume = {30},

issn = {1540-7489},

doi = {10.1016/j.proci.2004.08.058},

journal = {Proceedings of the Combustion Institute},

author = {Colin, Olivier and Pires da Cruz, Antonio and Jay, Stephane},

year = {2005},

pages = {2649--2656},@article{mitakos_ignition_2013,

title = {Ignition delays of different homogeneous fuel-air mixtures in a {Rapid} {Compression} {Expansion} {Machine} and comparison with a 3-stage-ignition model parametrized on shock tube data},

journal = {SAE Technical Papers},

author = {Mitakos, D. and Blomberg, C. and Vandersickel, A. and Wright, Y. and Schneider, B. and Boulouchos, K.},

year = {2013}@article{dec_isolating_2004,

title = {Isolating the effects of fuel chemistry on combustion phasing in an {HCCI} engine and the potential of fuel stratification for ignition control},

volume = {113},

journal = {SAE Technical Papers},

author = {Dec, John E. and Sjöberg, Magnus},

year = {2004},

pages = {239--257}

ANEXO I RESULTADOS 82% ISO-OCTANO, 18% HEXENO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5447-(18%hex-82%isoct)	4000.310871	0.00404045	0.00417676	-1.81759092	1.81759092
CMT-5449-(18%hex-82%isoct)	4000.092645	0.00405484	0.00420824	-2.04532558	2.04532558
CMT-6396-(18%hex-82%isoct)	2499.96258	0.00541608	0.0064001	-	-
CMT-6400-(18%hex-82%isoct)	2499.96413	0.0062917	0.00611675	1.45785881	1.45785881
CMT-6404-(18%hex-82%isoct)	2499.997	0.00728366	0.00641667	7.22485494	7.22485494
CMT-6857-(18%hex-82%isoct)	2000.15471	0.00810569	0.00904097	-6.23566434	6.23566434
CMT-6869-(18%hex-82%isoct)	2000.12977	0.00782433	0.00816614	-2.27888646	2.27888646
CMT-6871-(18%hex-82%isoct)	2000.128258	0.00830068	0.00908275	-5.21414679	5.21414679
CMT-6874-(18%hex-82%isoct)	1999.95665	0.00800248	0.00858352	-3.87350538	3.87350538
CMT-6882-(18%hex-82%isoct)	1999.94526	0.00677061	0.00812522	-	-

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error
0.0039164	0.00414551	-3.05501279	3.05501279	0.00380465	0.00395803	-2.04511526
0.00392382	0.0041249	-2.68113492	2.68113492	0.00380658	0.00397907	-2.30004669
0.00659871	0.00648343	-	-	0.00617958	0.00620009	-
0.00625042	0.00610009	1.25272764	1.25272764	0.00616812	0.00588342	2.3725097
0.0069615	0.00651667	3.70685816	3.70685816	0.00672158	0.00620001	4.34643278
0.00787293	0.0089993	-7.50971993	7.50971993	0.00765935	0.00868683	-6.85037674
0.00761041	0.00795782	-2.31619011	2.31619011	0.00741825	0.00764534	-1.51398657
0.00808459	0.00899942	-6.09927029	6.09927029	0.00788858	0.00872861	-5.6005252
0.00778356	0.00845852	-4.49961374	4.49961374	0.0075823	0.00820851	-4.17463799
0.00819199	0.00791688	-	-	0.00771507	0.00756271	-

Error	tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp
2.04511526	0.00397696	0.0038747	1.36358774	1.363587738	0.00395572	0.00374971
2.30004669	0.0040004	0.00392699	0.97876428	0.978764278	0.00397534	0.003802
-	0.00627246	0.00600009	-	-	0.00621431	0.00583342
2.3725097	0.00614896	0.00571675	3.60171755	3.601717547	0.00610753	0.00558341
4.34643278	0.00703097	0.00603334	8.31352691	8.313526913	0.00686051	0.00586667
6.85037674	0.00809395	0.00845768	-2.42506817	2.425068174	0.00809392	0.0082077
1.51398657	0.00773766	0.00741619	2.14331605	2.143316047	0.00770149	0.00710371
5.6005252	0.00828782	0.00852029	-1.54985229	1.54985229	0.0082871	0.00829113
4.17463799	0.00791988	0.00802101	-0.67418011	0.67418011	0.00788864	0.00781267
-	0.00852888	0.00735437	-	-	0.00836968	0.00702103

Error	Error	tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7
2.74696572	2.746965724	0.00403129	0.0042705	-3.18970707	3.18970707	0.00403129
2.31130321	2.311303206	0.00404456	0.00426032	-2.87681319	2.87681319	0.00404456
-	-	0.0065074	0.00653343	-	-	0.00641703
4.36759194	4.367591945	0.0062835	0.00616676	0.97285146	0.97285146	0.00687721
8.28199251	8.281992506	0.00733457	0.00660001	6.12130165	6.12130165	0.00707385
-0.75857485	0.758574854	0.00809459	0.00916596	-7.14299006	7.14299006	0.00809397
3.9855004	3.9855004	0.00781258	0.0082703	-3.05164266	3.05164266	0.00781258
-0.02689482	0.026894821	0.00828856	0.00918691	-5.98942309	5.98942309	0.00828855
0.50645329	0.506453294	0.00799127	0.00866685	-4.50380598	4.50380598	0.00799127
-	-	0.00915599	0.00827106	-	-	0.00877133

ANEXO II RESULTADOS 30% HEXENO, 70% TOLUENO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5447-(30%hex-70%tol)	4000.310871	0.00400105	0.00417676	-2.34301841	2.34301841
CMT-5449-(30%hex-70%tol)	4000.092645	0.0040193	0.00420824	-2.51916322	2.51916322
CMT-6396-(30%hex-70%tol)	2499.96258	0.00561593	0.0064001	-6.53459214	6.53459214
CMT-6400-(30%hex-70%tol)	2499.96413	0.00619727	0.00611675	0.67095344	0.67095344
CMT-6404-(30%hex-70%tol)	2499.997	0.00667048	0.00641667	2.11500274	2.11500274
CMT-6857-(30%hex-70%tol)	2000.15471	0.0077306	0.00904097	-8.73643777	8.73643777
CMT-6869-(30%hex-70%tol)	2000.12977	0.00769698	0.00816614	-3.12790155	3.12790155
CMT-6871-(30%hex-70%tol)	2000.128258	0.00813202	0.00908275	-6.3386389	6.3386389
CMT-6874-(30%hex-70%tol)	1999.95665	0.00785072	0.00858352	-4.88524345	4.88524345
CMT-6882-(30%hex-70%tol)	1999.94526	0.0067694	0.00812522	-9.03857523	9.03857523

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error
0.00381989	0.00414551	-4.34193947	4.34193947	0.0036605	0.00395803	-3.96734464
0.0038249	0.0041249	-4.00016547	4.00016547	0.00365205	0.00397907	-4.36041441
0.00693037	0.00648343	3.7244578	3.7244578	0.00664405	0.00620009	3.69956295
0.00612106	0.00610009	0.17478477	0.17478477	0.00603183	0.00588342	1.23674266
0.00650008	0.00651667	-0.13832889	0.13832889	0.00635225	0.00620001	1.26866981
0.00744434	0.0089993	-10.367221	10.367221	0.00718612	0.00868683	-10.0054674
0.00740715	0.00795782	-3.67138471	3.67138471	0.00714781	0.00764534	-3.31708356
0.00785211	0.00899942	-7.64922301	7.64922301	0.00760049	0.00872861	-7.5212417
0.00756823	0.00845852	-5.93514262	5.93514262	0.00730875	0.00820851	-5.99826513
0.0080763	0.00791688	1.06273518	1.06273518	0.00759903	0.00756271	0.24215338

Error	tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp
3.96734464	0.00395938	0.0038747	1.12919619	1.12919619	0.00395938	0.00374971
4.36041441	0.00397458	0.00392699	0.63450297	0.634502972	0.00396765	0.003802
3.69956295	0.00733507	0.00600009	11.1246851	11.1246851	0.00725299	0.00583342
1.23674266	0.00648347	0.00571675	6.38928588	6.389285882	0.00641433	0.00558341
1.26866981	0.0064665	0.00603334	3.60969089	3.609690891	0.00641592	0.00586667
10.0054674	0.00772051	0.00845768	-4.91482742	4.914827421	0.00771132	0.0082077
3.31708356	0.00730505	0.00741619	-0.74096443	0.740964427	0.00724828	0.00710371
7.5212417	0.0080857	0.00852029	-2.89742537	2.897425369	0.00806241	0.00829113
5.99826513	0.00780015	0.00802101	-1.47236947	1.472369473	0.00780014	0.00781267
0.24215338	0.00749803	0.00735437	0.95769403	0.957694032	0.00715546	0.00702103

Error	Error	tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7
2.79584952	2.795849522	0.00397928	0.0042705	-3.88320096	3.88320096	0.00395938
2.20882083	2.208820833	0.00401041	0.00426032	-3.33218374	3.33218374	0.00397453
11.8295676	11.82956756	0.00767163	0.00653343	9.48482367	9.48482367	0.00714303
6.92420526	6.924205261	0.00669933	0.00616676	4.43801841	4.43801841	0.00669932
4.57703029	4.577030285	0.00669808	0.00660001	0.81723302	0.81723302	0.00651967
-3.30943216	3.30943216	0.00773665	0.00916596	-9.52946132	9.52946132	0.00767571
0.96388435	0.963884349	0.00756193	0.0082703	-4.72277108	4.72277108	0.00723879
-1.52496422	1.524964218	0.00813283	0.00918691	-7.027683	7.027683	0.00807801
-0.08351392	0.083513917	0.00780031	0.00866685	-5.77685839	5.77685839	0.00780015
0.89617876	0.896178765	0.00858062	0.00827106	2.06370538	2.06370538	0.00802017

ANEXO III RESULTADOS 35% TOLUENO, 65% ISO-OCTANO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5447-(35%tol 65%isoct)	4000.310871	0.0040544	0.00417676	-1.63152312	1.63152312
CMT-5449-(35%tol 65%isoct)	4000.092645	0.00407019	0.00420824	-1.84061417	1.84061417
CMT-6396-(35%tol 65%isoct)	2499.96258	0.00541605	0.0064001	-	-
CMT-6400-(35%tol 65%isoct)	2499.96413	0.00628523	0.00611675	2.24655549	2.24655549
CMT-6404-(35%tol 65%isoct)	2499.997	0.00541612	0.00641667	-13.3410472	13.3410472
CMT-6857-(35%tol 65%isoct)	2000.15471	0.00810611	0.00904097	-7.79036092	7.79036092
CMT-6869-(35%tol 65%isoct)	2000.12977	0.00782393	0.00816614	-2.85169067	2.85169067
CMT-6871-(35%tol 65%isoct)	2000.128258	0.0083142	0.00908275	-6.40458286	6.40458286
CMT-6874-(35%tol 65%isoct)	1999.95665	0.00800197	0.00858352	-3.87732926	3.87732926
CMT-6882-(35%tol 65%isoct)	1999.94526	0.0067699	0.00812522	-	-

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error
0.00391255	0.00414551	-3.10641679	3.10641679	0.00378497	0.00395803	-2.30761566
0.00391764	0.0041249	-2.76355017	2.76355017	0.00378137	0.00397907	-2.63616114
	0.00648343	-	-		0.00620009	-
0.00623044	0.00610009	1.73819472	1.73819472	0.00615769	0.00588342	3.65726087
0.00692064	0.00651667	5.3863316	5.3863316	0.0066781	0.00620001	6.37468844
0.00785912	0.0089993	-9.50137328	9.50137328	0.00763188	0.00868683	-8.79111867
0.00758439	0.00795782	-3.11186347	3.11186347	0.0073652	0.00764534	-2.33441859
0.00807931	0.00899942	-7.6675981	7.6675981	0.00786652	0.00872861	-7.18404896
0.00776534	0.00845852	-4.62153542	4.62153542	0.00754637	0.00820851	-4.41460995
0.00814216	0.00791688	-	-	0.0076334	0.00756271	-

Error	tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp
2.30761566	0.00400417	0.0038747	1.72642927	1.726429269	0.00397729	0.00374971
2.63616114	0.0040412	0.00392699	1.52279021	1.522790212	0.00402936	0.003802
-	0.00741679	0.00600009	-	-	0.00735014	0.00583342
3.65726087	0.00649776	0.00571675	10.4142934	10.41429341	0.00641722	0.00558341
6.37468844	0.00722466	0.00603334	15.8846269	15.88462692	0.00714489	0.00586667
8.79111867	0.00808707	0.00845768	-3.08837119	3.088371187	0.00808699	0.0082077
2.33441859	0.00757478	0.00741619	1.32161893	1.321618931	0.00750421	0.00710371
7.18404896	0.00829339	0.00852029	-1.89078886	1.890788863	0.00829339	0.00829113
4.41460995	0.00798341	0.00802101	-0.25064078	0.250640778	0.00798292	0.00781267
-	0.00877142	0.00735437	-	-	0.00843296	0.00702103

Error	Error	tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7
3.03469475	3.03469475	0.00403897	0.0042705	-3.08732578	3.08732578	0.00403897
3.03159989	3.031599889	0.00405306	0.00426032	-2.76353057	2.76353057	0.00405306
-	-	0.00774982	0.00653343	-	-	0.00768373
11.1182847	11.11828474	0.00681901	0.00616676	8.69734056	8.69734056	0.00615684
17.0433053	17.04330531	0.00745198	0.00660001	11.3599175	11.3599175	0.00728349
-1.00588017	1.005880168	0.00809138	0.00916596	-8.95464625	8.95464625	0.00808707
3.33747937	3.337479374	0.00773927	0.0082703	-4.42512566	4.42512566	0.00740936
0.01880027	0.018800274	0.00829999	0.00918691	-7.3909649	7.3909649	0.00829339
1.1350854	1.135085403	0.00798413	0.00866685	-4.55186236	4.55186236	0.00798391
-	-	0.00938511	0.00827106	-	-	0.00914647

Anexo IV RESULTADOS 50% HEXENO, 50% TOLUENO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5447-(50%hep-50%tol)	4000.310871	0.00401434	0.00417676	-2.16580464	2.16580464
CMT-5449-(50%hep-50%tol)	4000.092645	0.00367649	0.00420824	-7.09012242	7.09012242
CMT-6396-(50%hep-50%tol)	2499.96258	0.00698263	0.0064001	4.85433739	4.85433739
CMT-6400-(50%hep-50%tol)	2499.96413	0.00623758	0.00611675	1.00686528	1.00686528
CMT-6404-(50%hep-50%tol)	2499.997	0.00654893	0.00641667	1.10210396	1.10210396
CMT-6856-(50%hep-50%tol)	2000.15471	0.00799001	0.00806183	-0.47882368	0.47882368
CMT-6870-(50%hep-50%tol)	2000.12977	0.00819494	0.00881198	-4.11387615	4.11387615
CMT-6871-(50%hep-50%tol)	2000.128258		0.00908275	-	-
CMT-6873-(50%hep-50%tol)	1999.95665	0.00797327	0.00812342	-2.00219524	2.00219524
CMT-6886-(50%hep-50%tol)	1999.94526	0.00860184	0.00812342	6.37900143	6.37900143

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error
0.00386293	0.00414551	-3.76809487	3.76809487	0.003727	0.00395803	-3.08054239
0.0043866	0.0041249	3.48939466	3.48939466	0.00403972	0.00397907	0.80866531
0.00680762	0.00648343	2.70157311	2.70157311	0.00666241	0.00620009	3.85261066
0.00617458	0.00610009	0.62075337	0.62075337	0.00609818	0.00588342	1.78963473
0.00645753	0.00651667	-0.49289513	0.49289513	0.00634569	0.00620001	1.21401154
0.00773955	0.00787435	-0.89872655	0.89872655	0.00751153	0.0076452	-0.89122163
0.00796185	0.00874948	-5.25120122	5.25120122	0.00775156	0.00847867	-4.84766615
	0.00899942	-	-		0.00872861	-
0.00772907	0.00797762	-3.31428302	3.31428302	0.00750541	0.00772767	-2.96367528
0.00834575	0.00797762	4.90851489	4.90851489	0.00811286	0.00772767	5.13600732

Error	tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp
3.08054239	0.00399356	0.0038747	1.5849116	1.584911605	0.00399245	0.00374971
0.80866531	0.00439324	0.00392699	6.21672559	6.216725593	0.00426666	0.003802
3.85261066	0.00706396	0.00600009	8.86548558	8.865485578	0.00694042	0.00583342
1.78963473	0.006417	0.00571675	5.8353605	5.835360497	0.0063522	0.00558341
1.21401154	0.00638341	0.00603334	2.91720005	2.917200055	0.0062973	0.00586667
0.89122163	0.00797856	0.00749938	3.19476263	3.194762634	0.00797279	0.00727023
4.84766615	0.0081835	0.00824951	-0.44009932	0.440099319	0.0081776	0.00804119
-		0.00852029	-	-		0.00829113
2.96367528	0.00796236	0.00756103	5.35148236	5.351482356	0.00795678	0.00737357
5.13600732	0.00859267	0.00756103	13.7554117	13.75541173	0.00858954	0.00737357

Error	Error	tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7
3.23683046	3.236830458	0.00399693	0.0042705	-3.64784934	3.64784934	0.00399467
6.19571317	6.195713172	0.00463472	0.00426032	4.99212906	4.99212906	0.00455208
9.22483988	9.224839877	0.00741547	0.00653343	7.35020562	7.35020562	0.007217
6.40649602	6.406496023	0.00675042	0.00616676	4.86382063	4.86382063	0.00621307
3.58852314	3.588523138	0.00655975	0.00660001	-0.3355156	0.3355156	0.00652164
4.68412218	4.684122175	0.00799001	0.00810349	-0.7565999	0.7565999	0.0079863
0.90943508	0.90943508	0.00819513	0.00893697	-4.9459409	4.9459409	0.00819091
-	-		0.00918691	-	-	
7.77669287	7.776692866	0.00797354	0.00820674	-3.10961702	3.10961702	0.00796967
16.2133574	16.21335737	0.00860211	0.00820674	5.27173339	5.27173339	0.00859816

ANEXO V RESULTADOS 47% ISO-OCTANO, 30% TOLUENO, 18% HEXENO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5447-(47%isooct-35%tol-18%hex)	4000.31087	0.00400834	0.00417676	-2.24570418	2.24570418
CMT-5449-(47%isooct-35%tol-18%hex)	4000.09265	0.00338475	0.00420824	-10.9801192	10.9801192
CMT-6396-(47%isooct-35%tol-18%hex)	2499.96258	0.00712867	0.0064001	6.07134417	6.07134417
CMT-6400-(47%isooct-35%tol-18%hex)	2499.96413	0.00624961	0.00611675	1.10708051	1.10708051
CMT-6404-(47%isooct-35%tol-18%hex)	2499.997	0.00660151	0.00641667	1.54031176	1.54031176
CMT-6856-(47%isooct-35%tol-18%hex)	2000.15471	0.00802225	0.00806183	-0.26390039	0.26390039
CMT-6870-(47%isooct-35%tol-18%hex)	2000.12977	0.00822548	0.00881198	-3.9102296	3.9102296
CMT-6871-(47%isooct-35%tol-18%hex)	2000.12826	0.00870813	0.00908275	-2.49763926	2.49763926
CMT-6873-(47%isooct-35%tol-18%hex)	1999.95665	0.00800639	0.00812342	-0.78022291	0.78022291
CMT-6886-(47%isooct-35%tol-18%hex)	1999.94526	0.00867454	0.00812342	3.67396628	3.67396628

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error	Error
0.0038616	0.00414551	-3.78577625	3.78577625	0.00372919	0.00395803	-3.05143346	3.05143346
0.00442669	0.0041249	4.0239137	4.0239137	0.00409089	0.00397907	1.49085444	1.49085444
0.00694651	0.00648343	3.85897245	3.85897245	0.00679973	0.00620009	4.99690187	4.99690187
0.00620703	0.00610009	0.89115783	0.89115783	0.00613597	0.00588342	2.10453021	2.10453021
0.00650174	0.00651667	-0.12444557	0.12444557	0.00640197	0.00620001	1.68301931	1.68301931
0.00778047	0.00787435	-0.62588545	0.62588545	0.00755904	0.0076452	-0.57441046	0.57441046
0.00799976	0.00874948	-4.99850482	4.99850482	0.00779574	0.00847867	-4.55312704	4.55312704
0.00844379	0.00899942	-3.70446339	3.70446339	0.00820529	0.00872861	-3.48902313	3.48902313
0.00777147	0.00797762	-1.37428294	1.37428294	0.00755576	0.00772767	-1.1460443	1.1460443
0.00842494	0.00797762	2.98204564	2.98204564	0.00819832	0.00772767	3.13760497	3.13760497

tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp	Error	Error
0.00400093	0.0038747	1.68319924	1.683199243	0.00399805	0.00374971	3.31148959	3.311489594
0.00432366	0.00392699	5.28903744	5.289037441	0.00376649	0.003802	-0.47341462	0.473414623
0.00713771	0.00600009	9.47999305	9.479993047	0.00691012	0.00583342	8.97239366	8.972393656
0.00635297	0.00571675	5.30177649	5.301776486	0.00609818	0.00558341	4.2896264	4.289626397
0.00677909	0.00603334	6.2145461	6.214546098	0.00636903	0.00586667	4.18629742	4.186297421
0.00789516	0.00749938	2.63877296	2.638772962	0.00800842	0.00727023	4.92162721	4.921627213
0.00819722	0.00824951	-0.34864672	0.348646719	0.00821043	0.00804119	1.12831595	1.128315948
0.00866322	0.00852029	0.95291487	0.952914867	0.00869217	0.00829113	2.67370502	2.673705021
0.00790116	0.00756103	2.26745742	2.267457421	0.00799375	0.00737357	4.1344613	4.134461303
0.00833672	0.00756103	5.17111837	5.171118365	0.00865898	0.00737357	8.56918971	8.569189709

tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7	tr7 Exp	Error	Error
0.00400867	0.0042705	-3.49131718	3.49131718	0.00400526	0.00405177	-0.62010738	0.62010738
0.0046145	0.00426032	4.72253615	4.72253615	0.00428045	0.0041249	2.07394854	2.07394854
0.00712867	0.00653343	4.96023306	4.96023306	0.0071024	0.00625009	7.10241412	7.10241412
0.00625902	0.00616676	0.76882939	0.76882939	0.00623971	0.00590008	2.83020392	2.83020392
0.00660151	0.00660001	0.01253398	0.01253398	0.00656858	0.00625001	2.65478431	2.65478431
0.00802254	0.00810349	-0.53973646	0.53973646	0.00801905	0.00785351	1.1036657	1.1036657
0.00822578	0.00893697	-4.74158764	4.74158764	0.00822195	0.00854116	-2.12822509	2.12822509
0.00870813	0.00918691	-3.19208371	3.19208371	0.00870416	0.0088536	-0.99632318	0.99632318
0.00800724	0.00820674	-1.32998552	1.32998552	0.00800354	0.00783181	1.14479621	1.14479621
0.0086751	0.00820674	3.12228019	3.12228019	0.00867116	0.00783181	5.59550787	5.59550787

ANEXO VI RESULTADOS 50% ISO-OCTANO, 30% TOLUENO, 15% HEXENO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5447-(50%isooct-35%tol-15%hex)	4000.31087	0.00401726	0.00417676	-2.12684161	2.12684161
CMT-5449-(50%isooct-35%tol-15%hex)	4000.09265	0.00338499	0.00420824	-10.9768658	10.9768658
CMT-6396-(50%isooct-35%tol-15%hex)	2499.96258	0.00715052	0.0064001	6.25342478	6.25342478
CMT-6400-(50%isooct-35%tol-15%hex)	2499.96413	0.00626634	0.00611675	1.24652851	1.24652851
CMT-6404-(50%isooct-35%tol-15%hex)	2499.997	0.00661337	0.00641667	1.63911164	1.63911164
CMT-6856-(50%isooct-35%tol-15%hex)	2000.15471	0.00803744	0.00806183	-0.16265256	0.16265256
CMT-6870-(50%isooct-35%tol-15%hex)	2000.12977	0.0082439	0.00881198	-3.78744163	3.78744163
CMT-6871-(50%isooct-35%tol-15%hex)	2000.12826	0.00873997	0.00908275	-2.28532565	2.28532565
CMT-6873-(50%isooct-35%tol-15%hex)	1999.95665	0.00802156	0.00812342	-0.67905844	0.67905844
CMT-6886-(50%isooct-35%tol-15%hex)	1999.94526	0.00870675	0.00812342	3.8887204	3.8887204

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error	Error
0.00386265	0.00414551	-3.77184183	3.77184183	0.00372475	0.00395803	-3.11054472	3.11054472
0.00439608	0.0041249	3.61570425	3.61570425	0.0040612	0.00397907	1.09499194	1.09499194
0.00695511	0.00648343	3.93061304	3.93061304	0.00679806	0.00620009	4.98299374	4.98299374
0.00620989	0.00610009	0.91496582	0.91496582	0.00613586	0.00588342	2.10368022	2.10368022
0.0065091	0.00651667	-0.06312898	0.06312898	0.00640483	0.00620001	1.70685262	1.70685262
0.00779375	0.00787435	-0.5373386	0.5373386	0.00757045	0.0076452	-0.49839791	0.49839791
0.00800519	0.00874948	-4.96226247	4.96226247	0.00778841	0.00847867	-4.60197687	4.60197687
0.00846796	0.00899942	-3.54333306	3.54333306	0.00822224	0.00872861	-3.37602922	3.37602922
0.00778698	0.00797762	-1.27093851	1.27093851	0.00757167	0.00772767	-1.03997327	1.03997327
0.00845515	0.00797762	3.18346013	3.18346013	0.00822762	0.00772767	3.33291296	3.33291296

tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp	Error	Error
0.00400769	0.0038747	1.77328624	1.773286243	0.00400298	0.00374971	3.3772147	3.377214701
0.00391657	0.00392699	-0.13902161	0.13902161	0.00373412	0.003802	-0.90505129	0.905051287
0.00698695	0.00600009	8.22371185	8.223711851	0.00689256	0.00583342	8.82601251	8.826012513
0.00616519	0.00571675	3.73699061	3.736990606	0.00611215	0.00558341	4.40604973	4.406049726
0.0064531	0.00603334	3.49802436	3.498024358	0.00637064	0.00586667	4.1996974	4.199697405
0.00802871	0.00749938	3.52915517	3.529155166	0.008025	0.00727023	5.0322091	5.032209099
0.00823347	0.00824951	-0.10695104	0.106951037	0.00822875	0.00804119	1.25047054	1.25047054
0.00872894	0.00852029	1.39112297	1.391122967	0.0087233	0.00829113	2.88129167	2.881291666
0.00801236	0.00756103	3.00879468	3.008794683	0.00800839	0.00737357	4.23206585	4.232065854
0.00869608	0.00756103	7.56676613	7.566766126	0.00869085	0.00737357	8.78165056	8.78165056

tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7	tr7 Exp	Error	Error
0.00401746	0.0042705	-3.3741214	3.3741214	0.00401401	0.00405177	-0.50353832	0.50353832
0.00451035	0.00426032	3.33383732	3.33383732	0.00428086	0.0041249	2.07938867	2.07938867
0.00715052	0.00653343	5.14231367	5.14231367	0.00712037	0.00625009	7.25219521	7.25219521
0.00626634	0.00616676	0.82986184	0.82986184	0.00624398	0.00590008	2.86577007	2.86577007
0.00660561	0.00660001	0.04670061	0.04670061	0.00658129	0.00625001	2.76067585	2.76067585
0.00803799	0.00810349	-0.43671515	0.43671515	0.00803418	0.00785351	1.2045535	1.2045535
0.00824426	0.00893697	-4.61838632	4.61838632	0.00824014	0.00854116	-2.00695722	2.00695722
0.00874019	0.00918691	-2.97831667	2.97831667	0.00873637	0.0088536	-0.78160275	0.78160275
0.00802194	0.00820674	-1.23200764	1.23200764	0.0080184	0.00783181	1.24388073	1.24388073
0.00870711	0.00820674	3.33572101	3.33572101	0.00870287	0.00783181	5.80689541	5.80689541

ANEXO VII RESULTADOS 98% ISO-OCTANO, 2% N-HEPTANO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error	Error
CMT-5444-(98%isooct-2%nhept)	4000	0.0040267	0.00422931	-2.70147115	2.701471151
CMT-5445-(98%isooct-2%nhept)	4000	0.00403642	0.0042085	-2.29442499	2.294424989
CMT-5447-(98%isooct-2%nhept)	4000	0.00408932	0.00417676	-1.16580967	1.165809667
CMT-5448-(98%isooct-2%nhept)	4000	0.00408247	0.00423963	-2.09553008	2.095530078
CMT-5449-(98%isooct-2%nhept)	4000		0.00420824	-	-
CMT-6393-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00647713	0.00613344	2.86405946	2.864059464
CMT-6394-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00644818	0.00596607	4.01763862	4.017638618
CMT-6395-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00728506	0.00641675	7.23588245	7.235882454
CMT-6396-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00742265	0.0064001	8.52126005	8.521260049
CMT-6397-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00652102	0.00616596	2.95878449	2.958784488
CMT-6398-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00651113	0.00603411	3.97514951	3.975149513
CMT-6399-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00644806	0.00628354	1.37102881	1.371028812
CMT-6400-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00631615	0.00611675	1.6616214	1.661621397
CMT-6401-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00624946	0.00601615	1.94420918	1.944209178
CMT-6402-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00675025	0.00628401	3.88535288	3.885352878
CMT-6403-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00631573	0.0061168	1.65772918	1.657729176
CMT-6404-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00669419	0.00641667	2.31263028	2.312630278
CMT-6405-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00620113	0.00624956	-0.4036043	0.403604299
CMT-6408-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00618459	0.00624977	-0.54316782	0.543167823
CMT-6409-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00612867	0.00618318	-0.45421632	0.454216319
CMT-6413-(98%isooct-2%nhept)	2500	0.00619147	0.00633366	-1.18497169	1.184971689
CMT-6856-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00821083	0.00806183	0.99330669	0.993306687
CMT-6861-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00786316	0.0089592	-7.30690597	7.306905973
CMT-6870-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00844339	0.00881198	-2.45726256	2.457262559
CMT-6871-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00911309	0.00908275	0.20223423	0.202234229
CMT-6873-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00819024	0.00812342	0.44540684	0.445406843
CMT-6874-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00832952	0.00858352	-1.69334268	1.693342684
CMT-6875-(98%isooct-2%nhept)	2000		0.00887447	-	-
CMT-6886-(98%isooct-2%nhept)	2000	0.00909493	0.00812342	6.47671351	6.47671351

tr2	tr2 Exp	Error	Error	tr3	tr3 Exp	Error
0.00390717	0.00415639	-3.32289682	3.32289682	0.00379882	0.0039793	-2.40634773
0.0039154	0.00411475	-2.65797552	2.65797552	0.0038071	0.00394807	-1.87958536
0.00395847	0.00414551	-2.49392205	2.49392205	0.00384129	0.00395803	-1.55654299
0.00395044	0.00416672	-2.88364273	2.88364273	0.00383165	0.00400005	-2.24535355
	0.0041249	-	-		0.00397907	-
0.00643243	0.00610011	2.7693172	2.7693172	0.00637383	0.00588344	4.08657167
0.00639789	0.00589941	4.15405495	4.15405495	0.0063403	0.00571609	5.20171235
0.00702731	0.00653342	4.11570547	4.11570547	0.00683282	0.00623342	4.99505581
0.00713405	0.00648343	5.42185521	5.42185521	0.00689659	0.00620009	5.80411833
0.00649293	0.0061493	2.86354924	2.86354924	0.00643451	0.00593266	4.18213264
0.00648111	0.00596743	4.28064326	4.28064326	0.00643153	0.00578408	5.39546772
0.00638632	0.00631687	0.5787421	0.5787421	0.00631381	0.00605019	2.19676083
0.00627916	0.00610009	1.49224561	1.49224561	0.00620961	0.00588342	2.71826874
0.00621688	0.00593282	2.36709398	2.36709398	0.00613902	0.00571618	3.52371112
0.00661	0.00635068	2.16097946	2.16097946	0.00643918	0.00606732	3.09886858
0.00625289	0.0060668	1.5507051	1.5507051	0.00615738	0.00585013	2.56042575
0.00660071	0.00651667	0.70027928	0.70027928	0.00650348	0.00620001	2.52892967
0.00618139	0.00621623	-0.29033772	0.29033772	0.0060765	0.00594958	1.05761991
0.00616225	0.00611644	0.38180171	0.38180171	0.00598376	0.00588311	0.83873173
0.00610404	0.00603318	0.59051874	0.59051874	0.00595261	0.00583319	0.99515992
0.0061671	0.006317	-1.24912558	1.24912558	0.00606553	0.00605031	0.12677884
0.00796169	0.00787435	0.58228963	0.58228963	0.00773555	0.0076452	0.60234064
0.00763777	0.00893836	-8.67059035	8.67059035	0.00743259	0.00864667	-8.09387158
0.00821687	0.00874948	-3.55074717	3.55074717	0.00801073	0.00847867	-3.11959829
0.00878495	0.00899942	-1.42979917	1.42979917	0.00849228	0.00872861	-1.5754994
0.0079498	0.00797762	-0.18545273	0.18545273	0.0077287	0.00772767	0.00686419
0.00808422	0.00845852	-2.49533795	2.49533795	0.00786069	0.00820851	-2.31878182
	0.0088328	-	-		0.00858282	-
0.00877245	0.00797762	5.2988806	5.2988806	0.00848673	0.00772767	5.06043085

Error	tr4	tr4 Exp	Error	Error	tr5	tr5 Exp
2.40634773	0.00402133	0.00392721	1.25493298	1.254932979	0.00401868	0.00380221
1.87958536	0.00403095	0.0039064	1.66053885	1.660538851	0.00402801	0.00377098
1.55654299	0.00408351	0.0038747	2.78409511	2.784095105	0.00408016	0.00374971
2.24535355	0.00407665	0.00394796	1.71583265	1.715832646	0.00407386	0.00383338
-		0.00392699	-	-		0.003802
4.08657167	0.00640287	0.00573344	5.57859399	5.578593991	0.00636511	0.0056001
5.20171235	0.00637542	0.00558277	6.60540334	6.605403339	0.00633929	0.00546612
4.99505581	0.00702731	0.00603341	8.28242826	8.282428265	0.00688988	0.00586675
5.80411833	0.00722584	0.00600009	10.2146016	10.21460161	0.00711645	0.00583342
4.18213264	0.00646959	0.00578268	5.72426538	5.724265384	0.00644252	0.00564936
5.39546772	0.00645611	0.00563406	6.85042031	6.850420309	0.00642804	0.00550071
2.19676083	0.00634467	0.00590019	3.70395939	3.703959393	0.00629368	0.00575019
2.71826874	0.00623366	0.00571675	4.30759423	4.307594226	0.00618816	0.00558341
3.52371112	0.00616391	0.00558285	4.8421018	4.8421018	0.00611939	0.00544953
3.09886858	0.00649957	0.00590063	4.99116464	4.991164639	0.00637064	0.00575062
2.56042575	0.00619082	0.00570013	4.08912017	4.089120173	0.00612876	0.00556679
2.52892967	0.00654876	0.00603334	4.29518689	4.295186889	0.00646892	0.00586667
1.05761991	0.00614545	0.00579959	2.88216534	2.882165344	0.00611775	0.00561627
0.83873173	0.00610829	0.00573312	3.12645163	3.126451628	0.00607166	0.00554979
0.99515992	0.00605913	0.00568319	3.13280331	3.132803307	0.00602429	0.00551653
0.12677884	0.00613596	0.00588364	2.10268161	2.102681606	0.00610856	0.0057003
0.60234064	0.00820371	0.00749938	4.69553552	4.695535522	0.00820021	0.00727023
8.09387158	0.00785671	0.00841748	-3.73843969	3.738439689	0.00785346	0.00820913
3.11959829	0.00843636	0.00824951	1.2456359	1.245635902	0.00843292	0.00804119
1.5754994	0.00910446	0.00852029	3.89447376	3.894473761	0.00910022	0.00829113
0.00686419	0.00818367	0.00756103	4.15087991	4.150879908	0.00818048	0.00737357
2.31878182	0.00832281	0.00802101	2.01202528	2.012025275	0.00831974	0.00781267
-		0.0083745	-	-		0.00818701
5.06043085	0.00908635	0.00756103	10.1687866	10.16878657	0.00908179	0.00737357

Error	Error	tr6	tr6 Exp	Error	Error	tr7
2.88633469	2.886334688	0.00402746	0.00431264	-3.80248562	3.80248562	0.00402539
3.42708586	3.427085859	0.00403715	0.004271	-3.11797797	3.11797797	0.00403482
4.40607225	4.406072252	0.00409012	0.0042705	-2.40504586	2.40504586	0.00408761
3.20638895	3.206388955	0.0040832	0.00430214	-2.91910019	2.91910019	0.0040809
-	-		0.00426032	-	-	
6.37504995	6.375049945	0.00647713	0.00616678	2.58627673	2.58627673	0.00646367
7.27647775	7.276477747	0.00644616	0.00598273	3.8618887	3.8618887	0.00643387
8.52611086	8.526110863	0.0072699	0.00658342	5.72063319	5.72063319	0.00721615
10.6919446	10.69194462	0.00742265	0.00653343	7.41013231	7.41013231	0.00738345
6.60972504	6.609725044	0.00651906	0.00621596	2.52580691	2.52580691	0.00651176
7.72779113	7.72779113	0.00651113	0.00603411	3.97514951	3.97514951	0.00650022
4.52910795	4.529107954	0.00644224	0.00636687	0.62810369	0.62810369	0.00641641
5.03957961	5.039579613	0.00631986	0.00616676	1.27584042	1.27584042	0.00630082
5.58216748	5.582167478	0.00625462	0.00604948	1.70949693	1.70949693	0.00623718
5.16684026	5.166840256	0.00676804	0.00641735	2.92241437	2.92241437	0.00671384
4.68304762	4.683047625	0.00632675	0.00615014	1.47175356	1.47175356	0.00629391
5.01875244	5.018752444	0.00668977	0.00660001	0.748034	0.748034	0.00666225
4.17897736	4.178977359	0.00620113	0.00633289	-1.09799991	1.09799991	0.00618796
4.34885557	4.348855573	0.00618221	0.00631643	-1.11852759	1.11852759	0.0061688
4.23135707	4.231357071	0.00612549	0.00621651	-0.75853707	0.75853707	0.00611519
3.40220548	3.40220548	0.00618953	0.00648367	-2.45114501	2.45114501	0.00617818
6.19985986	6.199859863	0.00821083	0.00810349	0.71555196	0.71555196	0.0082091
-2.37108343	2.371083426	0.00786335	0.00908421	-8.13909306	8.13909306	0.00786131
2.61151607	2.611516073	0.00844379	0.00893697	-3.28786666	3.28786666	0.00844151
5.39388024	5.393880237	0.00911349	0.00918691	-0.48945902	0.48945902	0.00911074
5.37942426	5.379424263	0.00819024	0.00820674	-0.11004102	0.11004102	0.00818834
3.38043761	3.380437606	0.00832952	0.00866685	-2.24891028	2.24891028	0.00832758
-	-		0.00897863	-	-	
11.3881376	11.3881376	0.00909513	0.00820674	5.92255898	5.92255898	0.00909242

tr7 Exp	Error	Error
0.00412514	-1.32990973	1.32990973
0.00411475	-1.06566886	1.06566886
0.00405177	0.47791415	0.47791415
0.00412505	-0.58873377	0.58873377
0.0041249	-	-
0.00591677	4.5574556	4.5574556
0.00574942	5.70376252	5.70376252
0.00626675	7.91169096	7.91169096
0.00625009	9.44467043	9.44467043
0.00594932	4.68695123	4.68695123
0.00581742	5.69001251	5.69001251
0.00611686	2.49624573	2.49624573
0.00590008	3.33946119	3.33946119
0.00574951	4.06391553	4.06391553
0.00610065	5.10988604	5.10988604
0.0058668	3.55924211	3.55924211
0.00625001	3.4353875	3.4353875
0.00606624	1.01436605	1.01436605
0.00601644	1.26962886	1.26962886
0.00596652	1.23891024	1.23891024
0.00613365	0.37109829	0.37109829
0.00785351	2.370567	2.370567
0.00870917	-5.65242512	5.65242512
0.00854116	-0.66436034	0.66436034
0.0088536	1.71430071	1.71430071
0.00783181	2.37680103	2.37680103
0.00827101	0.37708915	0.37708915
0.00866615	-	-
0.00783181	8.40406103	8.40406103

ANEXO XIII RESULTADOS 10% ISO-OCTANO, 90% TOLUENO

	rpm	tr1	tr1 Exp	Error 1	Error 1
CMT-5444-(10%isooct-90%tol)	4000	0.00405227	0.00422931	-2.36053782	2.360537818
CMT-5445-(10%isooct-90%tol)	4000	0.00406972	0.0042085	-1.85043832	1.850438323
CMT-5447-(10%isooct-90%tol)	4000	0.0041168	0.00417676	-0.79940967	0.799409667
CMT-5448-(10%isooct-90%tol)	4000	0.00412077	0.00423963	-1.58493008	1.584930078
CMT-5449-(10%isooct-90%tol)	4000	-	0.00420824	-	-
CMT-6393-(10%isooct-90%tol)	2500	0.0063894	0.00613344	2.1329428	2.132942797
CMT-6394-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00637833	0.00596607	3.43551362	3.435513618
CMT-6395-(10%isooct-90%tol)	2500	0.0069719	0.00641675	4.62618245	4.626182454
CMT-6396-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00707446	0.0064001	5.61966005	5.619660049
CMT-6397-(10%isooct-90%tol)	2500	0.0064394	0.00616596	2.27859282	2.278592821
CMT-6398-(10%isooct-90%tol)	2500	0.0064264	0.00603411	3.26911618	3.269116179
CMT-6399-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00635136	0.00628354	0.56522881	0.565228812
CMT-6400-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00624339	0.00611675	1.05527973	1.055279731
CMT-6401-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00617852	0.00601615	1.35308418	1.353084178
CMT-6402-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00655013	0.00628401	2.21766955	2.217669545
CMT-6403-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00622975	0.0061168	0.94122084	0.941220843
CMT-6404-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00654902	0.00641667	1.10291361	1.102913611
CMT-6405-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00613507	0.00624956	-0.95407097	0.954070966
CMT-6408-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00611719	0.00624977	-1.10478449	1.10478449
CMT-6409-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00606435	0.00618318	-0.99026632	0.990266319
CMT-6413-(10%isooct-90%tol)	2500	0.00612914	0.00633366	-1.70435502	1.704355023
CMT-6856-(10%isooct-90%tol)	2000	0.00813069	0.00806183	0.45903335	0.459033353
CMT-6861-(10%isooct-90%tol)	2000	0.0078	0.0089592	-7.72795931	7.727959306
CMT-6870-(10%isooct-90%tol)	2000	0.00840035	0.00881198	-2.74418256	2.744182559
CMT-6871-(10%isooct-90%tol)	2000	0.00913335	0.00908275	0.3373209	0.337320896
CMT-6873-(10%isooct-90%tol)	2000	0.00810878	0.00812342	-0.09762649	0.09762649
CMT-6874-(10%isooct-90%tol)	2000	0.00827699	0.00858352	-2.04351602	2.043516017
CMT-6875-(10%isooct-90%tol)	2000		0.00887447	-	-
CMT-6886-(10%isooct-90%tol)	2000	0.00900896	0.00812342	5.90358018	5.903580177

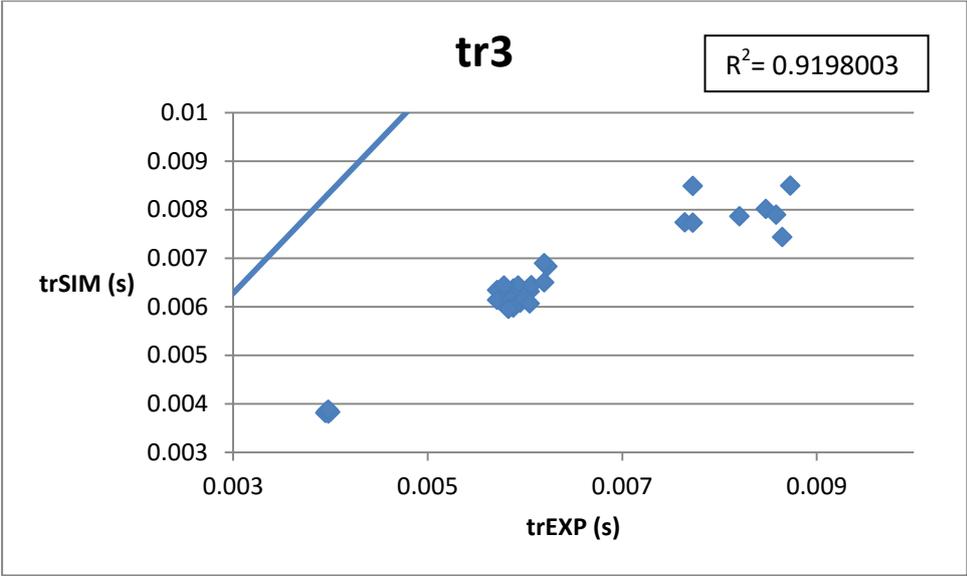
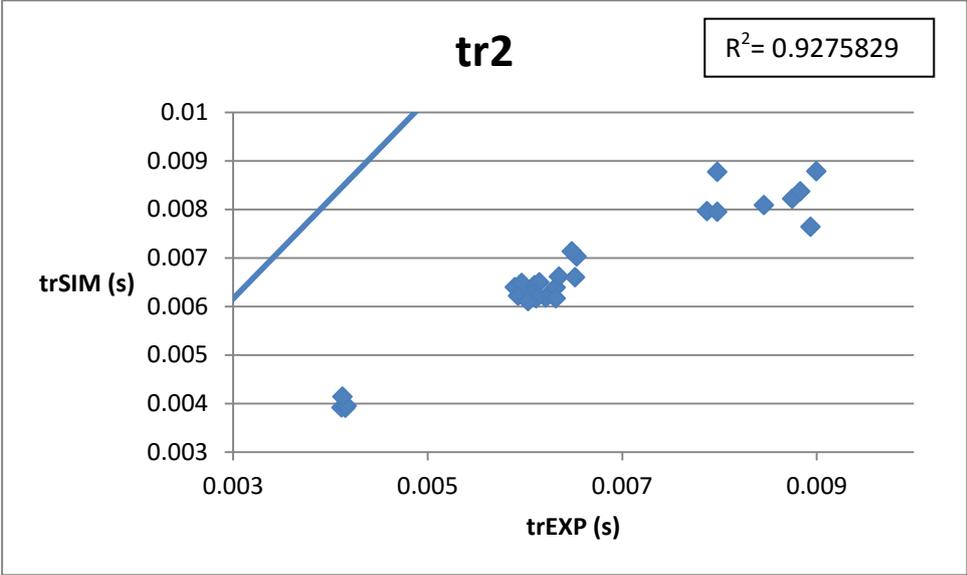
tr2	tr2 Exp	Error 2	Error 2	tr3	tr3 Exp	Error 3	Error 3
0.00386065	0.00415639	-3.94316349	3.94316349	0.00368916	0.0039793	-3.8685744	3.8685744
0.00386847	0.00411475	-3.28362886	3.28362886	0.00369209	0.00394807	-3.41305202	3.41305202
0.00390633	0.00414551	-3.18913538	3.18913538	0.00371804	0.00395803	-3.19978299	3.19978299
0.00390668	0.00416672	-3.46717606	3.46717606	0.00371869	0.00400005	-3.75142022	3.75142022
-	0.0041249	-	-		0.00397907	-	-
0.00629519	0.00610011	1.6256672	1.6256672	0.00620554	0.00588344	2.68417167	2.68417167
0.00628477	0.00589941	3.21134661	3.21134661	0.00621398	0.00571609	4.14909568	4.14909568
0.00673109	0.00653342	1.64720547	1.64720547	0.00654297	0.00623342	2.57959748	2.57959748
0.00685055	0.00648343	3.05932188	3.05932188	0.00668005	0.00620009	3.99964333	3.99964333
0.0063757	0.0061493	1.8866659	1.8866659	0.0063157	0.00593266	3.19201598	3.19201598
0.00636221	0.00596743	3.28979326	3.28979326	0.0062995	0.00578408	4.29521772	4.29521772
0.00625505	0.00631687	-0.5151329	0.5151329	0.00616629	0.00605019	0.96748583	0.96748583
0.00615543	0.00610009	0.46115395	0.46115395	0.00606746	0.00588342	1.53371874	1.53371874
0.00608647	0.00593282	1.28034398	1.28034398	0.00599069	0.00571618	2.28760279	2.28760279
0.00639811	0.00635068	0.39522946	0.39522946	0.00622696	0.00606732	1.33037692	1.33037692
0.00612401	0.0060668	0.4767301	0.4767301	0.00601827	0.00585013	1.40115908	1.40115908
0.00643744	0.00651667	-0.66028739	0.66028739	0.00632112	0.00620001	1.00924633	1.00924633
0.00609648	0.00621623	-0.99790439	0.99790439	0.00602476	0.00594958	0.62646157	0.62646157
0.00605142	0.00611644	-0.54181495	0.54181495	0.00597148	0.00588311	0.7363734	0.7363734
0.00601742	0.00603318	-0.1313396	0.1313396	0.00594901	0.00583319	0.96520159	0.96520159
0.00607789	0.006317	-1.99256725	1.99256725	0.00600152	0.00605031	-0.40665449	0.40665449
0.00778285	0.00787435	-0.60999703	0.60999703	0.00746765	0.0076452	-1.18367936	1.18367936
0.00747457	0.00893836	-9.75863035	9.75863035	0.00717892	0.00864667	-9.78497825	9.78497825
0.00806499	0.00874948	-4.56327384	4.56327384	0.00776353	0.00847867	-4.76758495	4.76758495
0.00867137	0.00899942	-2.18699917	2.18699917	0.00826567	0.00872861	-3.0862194	3.0862194
0.00778251	0.00797762	-1.30076607	1.30076607	0.0074874	0.00772767	-1.60182248	1.60182248
0.00792958	0.00845852	-3.52624462	3.52624462	0.00761322	0.00820851	-3.96858182	3.96858182
	0.0088328	-	-		0.00858282	-	-
0.0085733	0.00797762	3.97116727	3.97116727	0.00818415	0.00772767	3.04318419	3.04318419

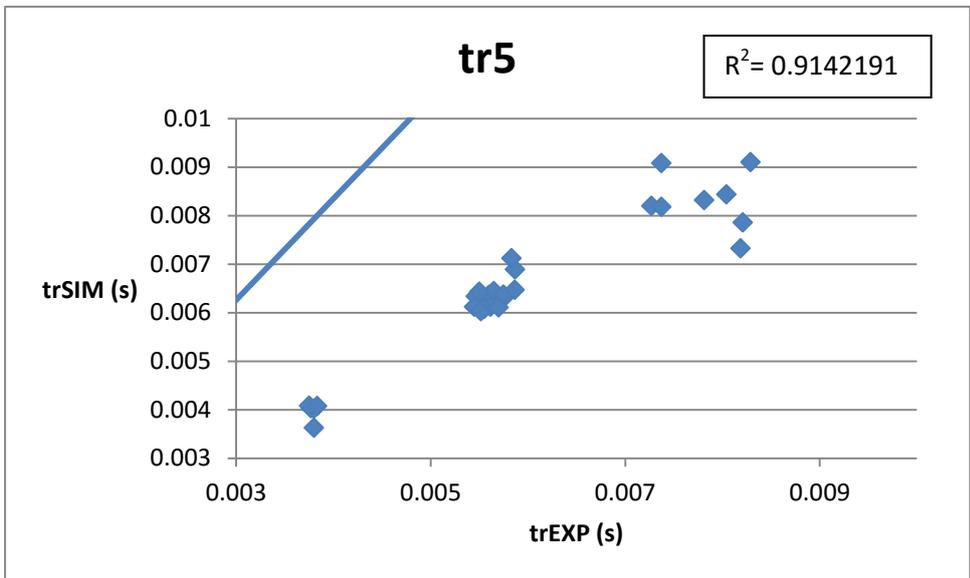
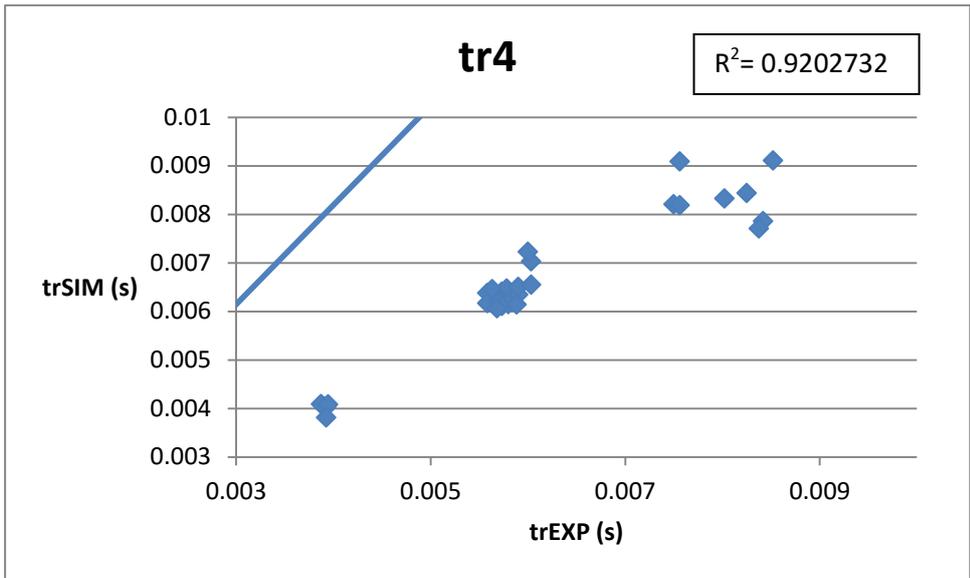
tr4	tr4 Exp	Error 4	Error 4	tr5	tr5 Exp	Error 5
0.00404197	0.00392721	1.53011965	1.530119645	0.00403702	0.00380221	3.13082802
0.00405839	0.0039064	2.02647218	2.026472184	0.0040532	0.00377098	3.76287253
0.00410448	0.0038747	3.06380177	3.063801772	0.00409832	0.00374971	4.64819225
0.00410751	0.00394796	2.12725931	2.127259313	0.00410115	0.00383338	3.57024229
	0.00392699	-	-		0.003802	-
0.00627499	0.00573344	4.51297732	4.512977325	0.00622503	0.0056001	5.20778328
0.00625823	0.00558277	5.62881167	5.628811672	0.00620656	0.00546612	6.17036941
0.00669029	0.00603341	5.47391993	5.473919931	0.00654982	0.00586675	5.69227753
0.00685384	0.00600009	7.11457661	7.114576609	0.00673937	0.00583342	7.54960295
0.0063757	0.00578268	4.94187372	4.941873718	0.00635189	0.00564936	5.85440004
0.00635246	0.00563406	5.98664531	5.986645309	0.00631369	0.00550071	6.77486613
0.00620626	0.00590019	2.55061773	2.550617726	0.00614591	0.00575019	3.29773295
0.00611558	0.00571675	3.32361089	3.323610893	0.00606282	0.00558341	3.99503795
0.00604111	0.00558285	3.8187768	3.8187768	0.00597279	0.00544953	4.36051748
0.0062365	0.00590063	2.79891464	2.798914639	0.0060749	0.00575062	2.70233192
0.00603732	0.00570013	2.80995351	2.809953506	0.00595063	0.00556679	3.19868929
0.00637784	0.00603334	2.87083689	2.870836889	0.00629716	0.00586667	3.58737744
0.00604836	0.00579959	2.07304868	2.073048677	0.00600719	0.00561627	3.25765236
0.00600022	0.00573312	2.22581829	2.225818295	0.00595107	0.00554979	3.34394724
0.00597622	0.00568319	2.44195331	2.441953307	0.00593503	0.00551653	3.48750707
0.00604521	0.00588364	1.34645661	1.346456606	0.00599927	0.0057003	2.49141381
0.00811767	0.00749938	4.12196886	4.121968856	0.00811269	0.00727023	5.61639986
0.00778713	0.00841748	-4.20233302	4.202333023	0.00778103	0.00820913	-2.85398343
0.00838609	0.00824951	0.9104959	0.910495902	0.00837897	0.00804119	2.25185607
0.00911511	0.00852029	3.96547376	3.965473761	0.00910556	0.00829113	5.42949357
0.0080953	0.00756103	3.56173991	3.561739908	0.00808908	0.00737357	4.7700576
0.00826248	0.00802101	1.60979194	1.609791942	0.00825579	0.00781267	2.95414427
	0.0083745	-	-		0.00818701	-
0.00899299	0.00756103	9.54633991	9.546339908	0.00898524	0.00737357	10.7444909

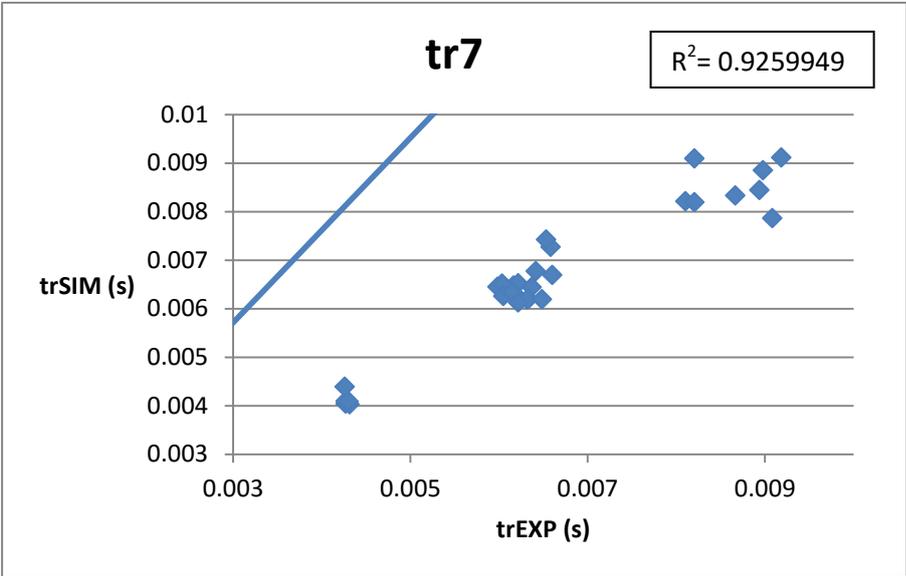
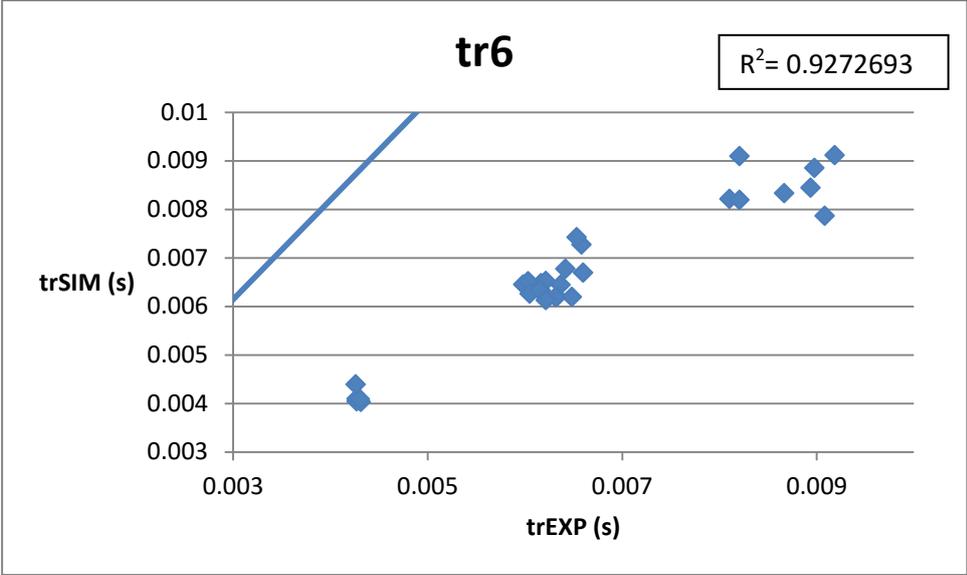
Error 5	tr6	tr6 Exp	Error 6	Error 6	tr7	tr7 Exp
3.130828021	0.00405286	0.00431264	-3.46373896	3.46373896	0.00404933	0.00412514
3.762872526	0.00406972	0.004271	-2.68380463	2.68380463	0.00406646	0.00411475
4.648192252	0.0041168	0.0042705	-2.04931253	2.04931253	0.00411311	0.00405177
3.570242288	0.00412077	0.00430214	-2.41827352	2.41827352	0.00411734	0.00412505
-		0.00426032	-	-		0.0041249
5.207783278	0.00638484	0.00616678	1.81718506	1.81718506	0.00636416	0.00591677
6.170369413	0.00636284	0.00598273	3.16759704	3.16759704	0.00634411	0.00574942
5.69227753	0.00696618	0.00658342	3.18968319	3.18968319	0.00691554	0.00626675
7.549602953	0.00706558	0.00653343	4.43454897	4.43454897	0.00701623	0.00625009
5.854400044	0.0064357	0.00621596	1.83117357	1.83117357	0.0064394	0.00594932
6.77486613	0.00642583	0.00603411	3.26430785	3.26430785	0.00642641	0.00581742
3.297732954	0.00635136	0.00636687	-0.12923798	0.12923798	0.00631555	0.00611686
3.995037947	0.00623632	0.00616676	0.57973209	0.57973209	0.00621182	0.00590008
4.360517478	0.00617852	0.00604948	1.07533026	1.07533026	0.00614815	0.00574951
2.702331922	0.00657934	0.00641735	1.34988103	1.34988103	0.00650012	0.00610065
3.198689291	0.00622348	0.00615014	0.6111619	0.6111619	0.00617797	0.0058668
3.587377444	0.0065627	0.00660001	-0.31089933	0.31089933	0.00652193	0.00625001
3.257652359	0.00613507	0.00633289	-1.64846658	1.64846658	0.00611752	0.00606624
3.34394724	0.00611011	0.00631643	-1.71936926	1.71936926	0.00608867	0.00601644
3.487507071	0.00606435	0.00621651	-1.26803707	1.26803707	0.00604499	0.00596652
2.491413813	0.00612683	0.00648367	-2.97365334	2.97365334	0.00611318	0.00613365
5.616399863	0.00813069	0.00810349	0.18127862	0.18127862	0.00812579	0.00785351
2.853983426	0.0078	0.00908421	-8.56137306	8.56137306	0.00779532	0.00870917
2.251856073	0.00840075	0.00893697	-3.57484666	3.57484666	0.00839612	0.00854116
5.42949357	0.00913367	0.00918691	-0.35497235	0.35497235	0.00912737	0.0088536
4.770057596	0.00810878	0.00820674	-0.65307435	0.65307435	0.00810442	0.00783181
2.954144272	0.00827734	0.00866685	-2.59675695	2.59675695	0.00827288	0.00827101
-		0.00897863	-	-		0.00866615
10.74449093	0.00900928	0.00820674	5.35023898	5.35023898	0.0090033	0.00783181

Error 7	Error 7
-1.01081639	1.01081639
-0.64378886	0.64378886
0.81788748	0.81788748
-0.1027471	0.1027471
-	-
3.72819726	3.72819726
4.95576252	4.95576252
5.40655763	5.40655763
6.38449543	6.38449543
4.08395123	4.08395123
5.07498751	5.07498751
1.65574573	1.65574573
2.59775286	2.59775286
3.32204053	3.32204053
3.32891937	3.32891937
2.59311711	2.59311711
2.26602917	2.26602917
0.42734105	0.42734105
0.6018622	0.6018622
0.65398524	0.65398524
-0.17060171	0.17060171
1.815147	1.815147
-6.09235179	6.09235179
-0.96692034	0.96692034
1.82514737	1.82514737
1.81736103	1.81736103
0.01247581	0.01247581
-	-
7.80991436	7.80991436

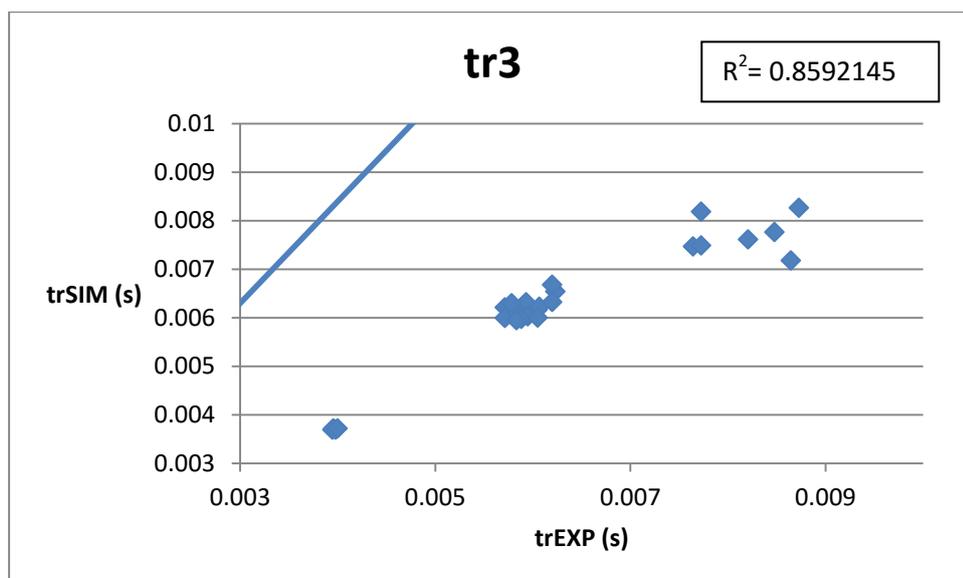
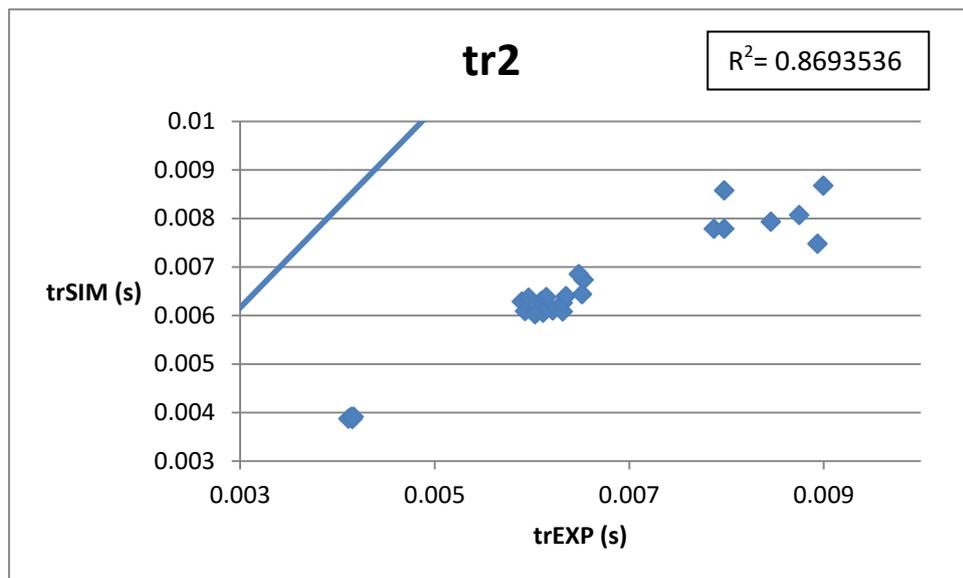
ANEXO IX GRÁFICAS 98% ISO-OCTANO, 2% N-HEPTANO

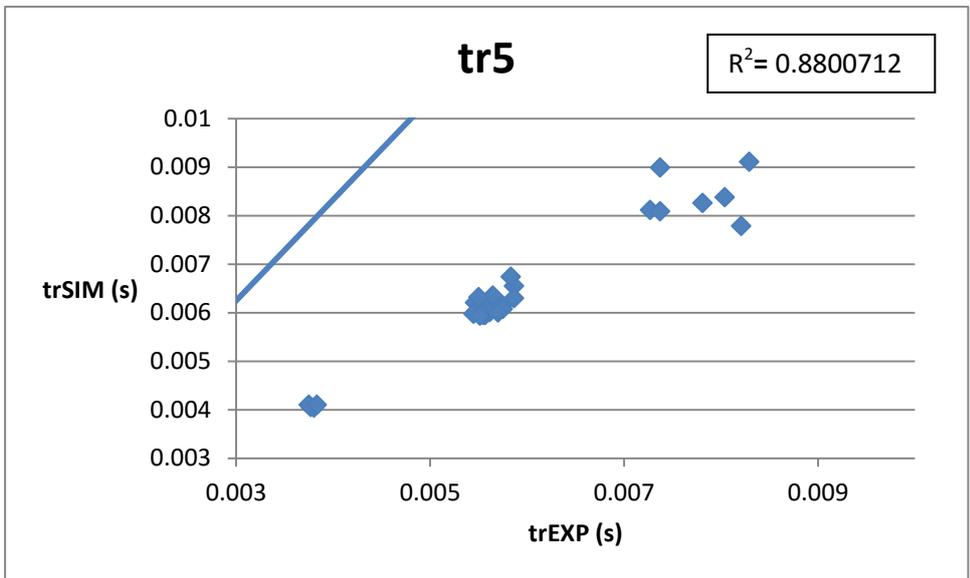
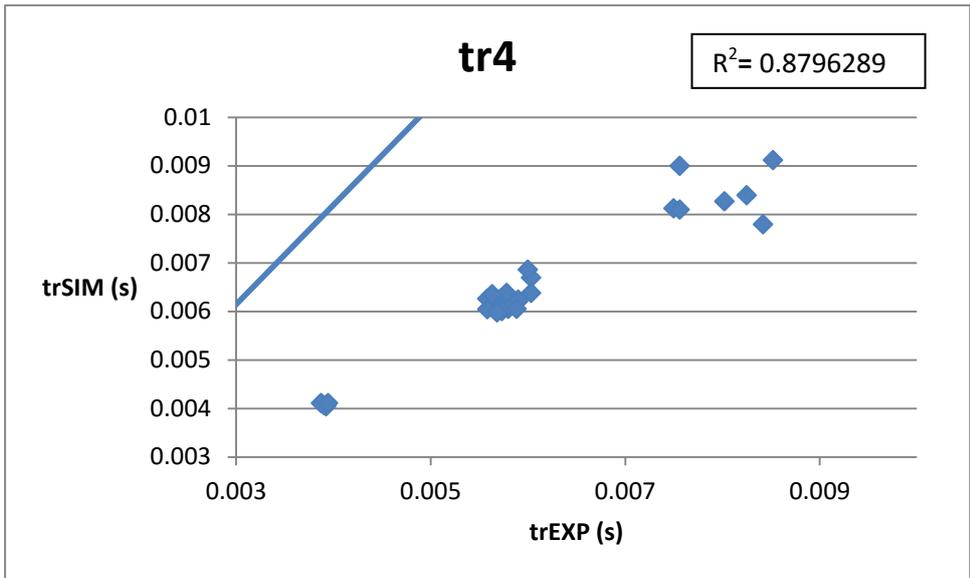


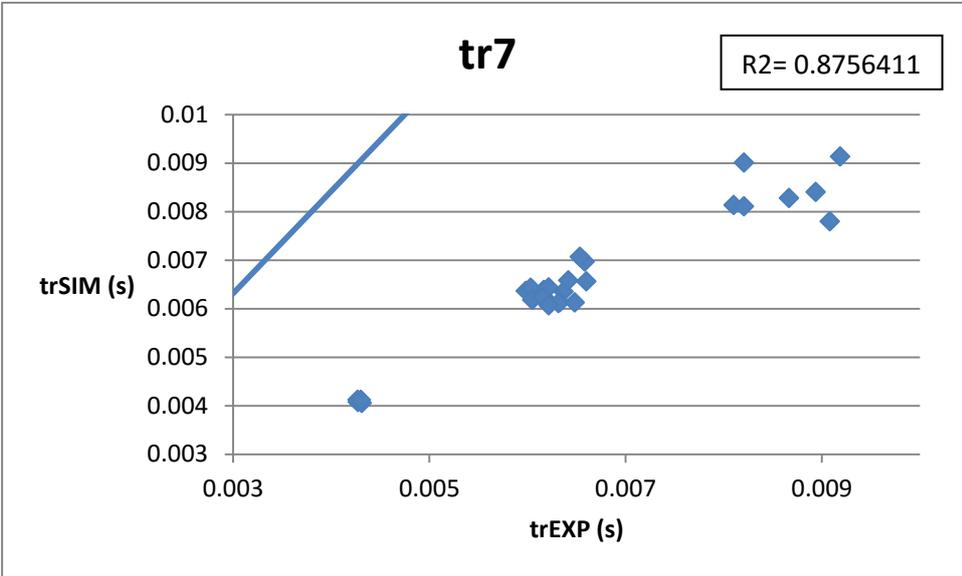
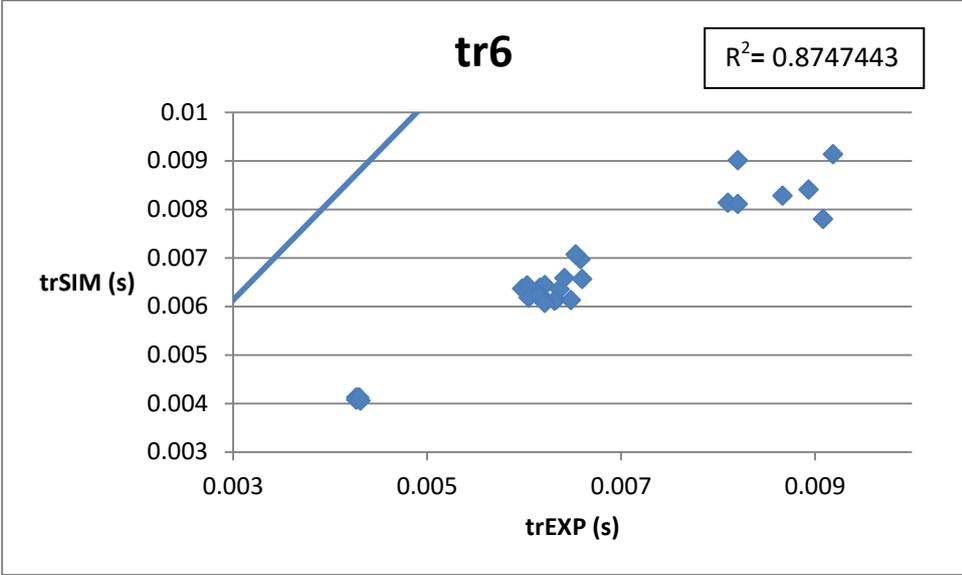




ANEXO X GRÁFICAS 10% ISO-OCTANO, 90% TOLUENO







ANEXO XI DESCRIPCIÓN DE LA INSTALACIÓN EXPERIMENTAL

Ubicación

La ubicación de la instalación experimental es la Universidad Politécnica de Valencia, en el edificio de investigación 6D, perteneciente al grupo CMT-Motores Térmicos. En el interior de dicho edificio 6D se encuentran diversos laboratorios de ensayos con motores, habiéndose implementado la instalación en la sala de ensayos número 7.

Motor

En motor mediante el cual se han realizado los ensayos se trata de un modelo en desarrollo por parte del grupo Renault-Francia Automóviles en colaboración con el grupo CMT-Motores Térmicos.



Figura 1. Motor de dos tiempos.

Debido a que el motor se encuentra en fase de desarrollo, cuenta con un único cilindro, así como con un sistema de escape no optimizado.

El motor consta de un cárter de tipo seco, cuyo depósito de aceite principal está implementado en la instalación mediante un sistema acondicionador independiente del motor.

En el interior del cárter se encuentran los árboles contrarrotantes o árboles de equilibrado, los cuales están dispuestos de modo que cada uno de ellos se encuentra encajado mediante el empleo de dos rodamientos situados en unos orificios mecanizados en el cárter. Dichos rodamientos incorporan un retén para evitar posibles fugas de aceite y están sujetos mediante anillos elásticos que soportan esfuerzos axiales.

El sistema de distribución es uno de los elementos críticos del motor. Su movimiento se origina gracias a un piñón conectado con el cigüeñal mediante una chaveta. Dicho piñón genera el movimiento de un disco de mayor tamaño con el que es posible medir el régimen de giro del motor. A su vez, este disco acopla con un engranaje encargado de dotar de movimiento a una correa

dentada, la cual hace girar al árbol de levas. De esta manera se consigue un movimiento acompasado de los diversos elementos del motor de dos tiempos.

El cigüeñal del motor se encuentra situado sobre dos cojinetes, y se le ha realizado un tratamiento superficial de nitruración con el objetivo de alcanzar la resistencia adecuada.

El volante de inercia se halla conectado al cigüeñal, y se trata de una pieza circular de elevada masa cuya función es regularizar el giro del motor gracias a la inercia de la misma.

La biela está unida al cigüeñal, transformando el movimiento lineal alternativo en movimiento rotacional. En el presente motor, la biela es una pieza fabricada en acero templado, a la que posteriormente se le ha realizado un tratamiento de nitruración de igual modo que al cigüeñal.

El bloque monocilíndrico proporciona una estructura rígida al motor de dos tiempos. Se trata de un componente que es capaz de soportar los esfuerzos del cigüeñal, y que une la bancada con la culata. Dicho bloque dispone de dos alojamientos mecanizados sobre los que se apoya el cigüeñal mediante una pareja de rodamientos axiales.

La culata está diseñada para albergar el inyector, el árbol de levas y los sistemas de apertura y cierre de las válvulas de escape. Del mismo modo, consta de cuatro orificios roscados a través de los cuales se introducen el inyector, la bujía y dos sensores de presión hasta el interior de la cámara de combustión.

Finalmente, con respecto a la bujía, el motor de dos tiempos ensayados se trata de un motor de encendido provocado. Sin embargo, bajo determinadas condiciones, el motor enciende antes de la activación de la bujía, produciéndose un autoencendido controlado (CAI por sus siglas en inglés "Controlled Auto-Ignition"). La evolución de la combustión mediante autoencendido que se produce bajo estas condiciones es el objeto de análisis de este TFG, por lo que se deberá realizar un análisis de los ensayos experimentales para determinar aquellos cuyas características se corresponden con el fenómeno representativo que deseamos estudiar. Esto se explicará en el apartado Ref.

El sistema de admisión del motor está formado por aquellos elementos que introducen en las lumbreras el aire fresco en las condiciones de presión, temperatura y humedad requeridas.

En primer lugar el aire fresco proveniente de la atmósfera se comprime mediante un compresor alternativo de pistones, que permite regular la presión del aire de entrada.

Tras pasar por el compresor, el aire circula por una serie de filtros que eliminan las posibles impurezas, para ser conducido a continuación a un intercambiador de calor mediante el cual se controla la temperatura del aire de entrada. Posteriormente se dirige a un deshumidificador que regula la humedad requerida.

De ese modo, las condiciones del aire de entrada pueden ser ajustadas para cada ensayo, pudiendo reproducir con exactitud las mismas condiciones en días con características distintas, así como realizar experimentos con distintas condiciones de forma controlada.

A continuación, el aire se acumula en un depósito de remanso que elimina los pulsos de presión originados en el proceso de admisión.

Por último, alrededor de las lumbreras se encuentra una zona de estabilización denominada plenum, que se encarga de distribuir de la forma más uniforme posible el aire que se va a introducir a través de las lumbreras.

De este modo, se pretende mejorar en la medida de lo posible la uniformidad del proceso de barrido, y consecuentemente, obtener un óptimo proceso de renovación de la carga.

Los aspectos característicos más destacables de este motor son los siguientes:

- El empleo de una bomba de barrido independiente, la cual está materializada en la instalación por medio de un compresor de aire a baja presión.
- La combinación utilizada de lumbreras de admisión y válvulas de escape situadas en la cabeza del cilindro, cuya apertura y cierre se puede variar mediante el sistema VVT (Variable Valve Timing o Distribución de Válvulas Variable). De este modo, el motor se puede clasificar como de barrido asimétrico y uniflujo.
- El sistema de inyección directa asistido por aire, que permite unos más eficientes consumos de combustible.
- La lubricación de todos los elementos del motor se realiza mediante aceite SAE5W30. Se trata de un sistema de lubricación independiente, hecho que permite reducir los problemas de arranque en frío, ya que es posible forzar al aceite a alcanzar la temperatura de trabajo antes de poner el motor en marcha.
- La refrigeración del motor se realiza mediante un circuito de agua. Del mismo modo que el sistema de lubricación, la refrigeración también es un sistema independiente, reduciendo del mismo modo los problemas del arranque en frío.

Las especificaciones técnicas del motor vendrán referidas en la tabla 1 presentada a continuación.

Motor de gasolina de dos tiempos	
Diámetro del pistón (mm)	70.5
Carrera del cilindro (mm)	76.8
Longitud de la biela (mm)	141.5
Relación de compresión	11
Máximo levantamiento de las válvulas de escape (mm)	7.208
Velocidad máxima (rpm)	5000
Potencia máxima (KW)	15

Tabla 1. Especificaciones técnicas del motor.

Sistema de adquisición de datos. Actuadores

El panel de control de la marca AVL con el que es posible fijar la velocidad de giro del motor de dos tiempos es el primero de los actuadores a considerar. Se trata de un elemento cuya denominación comercial es AVL Test System. Su funcionamiento se basa en la definición de una consigna, de modo que en todo momento se intenta igualar las revoluciones por minuto a las que gira el motor con dicho valor.

La ECU (Engine Control Unit), la cual es posible controlarla por medio del programa informático INCA (software desarrollado por el grupo ETAS). Gracias al empleo de este sistema de control es evidente que se pueden fijar multitud de parámetros relacionados con la operación del motor, siendo destacables:

- La cantidad de combustible inyectado por cilindro y ciclo.
- Los parámetros de inyección: tanto el inicio de la inyección (SOI), como el fin de la misma (EOI).
- La caracterización del inicio de la combustión mediante la activación o desactivación de la chispa en la bujía, así como por medio del ángulo en el que se producirá la descarga.

El tercer actuador a describir es aquel que permite controlar la apertura de las válvulas de escape, es decir, gobierna el funcionamiento del sistema VVT presentado en la sección anterior.

Con dicho fin se emplea la correspondiente válvula de control, la cual se acciona atendiendo a las consignas introducidas a través de un software considerablemente simple desarrollado por Opale.

Por medio de los componentes presentados es posible fijar la operación del motor en los puntos de funcionamiento deseados; no obstante, muchos más actuadores son requeridos con el fin de asegurar su óptima actuación.

Sistema de adquisición de datos. Sensores

Sensores de presión: Se emplean cinco sensores de presión instantánea que se encuentran en el interior y en las proximidades de la cámara de combustión. Por un lado, en dos orificios de la culata hay instalados sendos captadores de presión piezoeléctricos, los cuales registran la evolución de la presión en la cámara de combustión. El hecho de emplear redundancia en el registro de la variable de presión denota la importancia que tiene ésta para la evaluación del proceso de encendido y la evolución del motor a lo largo de todo el ensayo.

Por otro lado, en la zona inferior del cilindro se encuentra un captador de presión piezorresistivo, con el que se mide la presión en la cámara de combustión cuando el pistón se encuentra en posiciones cercanas al PMI.

Por último, existen dos captadores de presión piezorresistivos adicionales, situados junto al cilindro en el sistema de admisión y en el sistema de escape respectivamente.

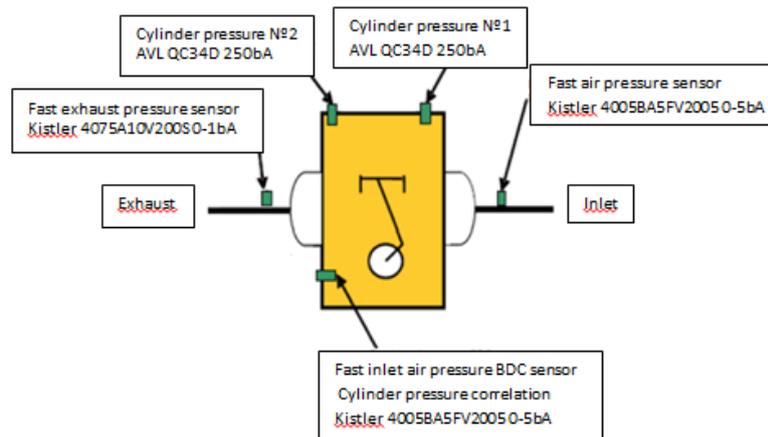


Figura 2. Distribución de los captadores de presión situados en el interior y en las proximidades de la cámara de combustión del motor de dos tiempos.

A su vez, se emplean sensores piezorresistivos para conocer los valores de presión en otros puntos críticos del motor, como el sistema de admisión, la zona de estabilización junto a las lumbreras, la salida de la cámara de combustión (gases de escape).

Sensores de posición: Los sensores de posición registran la posición instantánea del cigüeñal. La medida se realiza mediante un codificador angular de tipo óptico de la marca AVL, el cual está instalado en el eje del cigüeñal. Este sensor tiene la capacidad de registrar en alta frecuencia las variaciones en el ángulo del cigüeñal, lo que permite, conociendo la geometría del motor, detallar la evolución de la posición del pistón en función del tiempo a partir de la evolución de las variaciones del ángulo del cigüeñal con respecto al tiempo.

Cabe destacar además la presencia de otra pareja de captadores, que basando su operación en el efecto Hall, transmiten la posición del cigüeñal a la ECU del motor.

Sensores de apertura y cierre de válvulas: Se ha instalado una galga extensiométrica en cada uno de los balancines, de modo que se registren sus deformaciones instantáneas causadas por el movimiento de las válvulas. De esta forma se puede determinar el momento de apertura y cierre del sistema de admisión y escape.

Caudalímetros: Se emplean para controlar el caudal de aire, combustible, EGR, agua, aceite del motor.

Sensores de temperatura: Se emplean termopares para realizar las medidas de temperatura en zonas críticas del motor como el sistema de admisión, la zona de estabilización junto a las lumbreras, la salida de la cámara de combustión (gases de escape).

Sensores para la determinación de la composición de los gases de escape: Una sonda lambda mide la cantidad de oxígeno. Una sonda absorbe parte de los gases y los conduce al analizado de emisiones de la marca HORIBA, instrumento que determina las emisiones contaminantes presentes en los gases de escape. Un medidor de humos determina la opacidad de los gases de escape.

La calibración y el correcto funcionamiento de los sensores y los sistemas de adquisición de datos son fundamentales para obtener medidas precisas, coherentes y representativas de los ensayos realizados. Para ello, es fundamental conocer las tolerancias de los sensores, así como la fiabilidad de los datos obtenidos. Unos datos que proporcionen información imprecisa condicionan en gran medida las conclusiones que se pueden extraer de los ensayos experimentales.

Con respecto a los datos obtenidos a partir de los sensores previamente descritos, cabe destacar que las mediciones de oxígeno mediante la sonda lambda son las más imprecisas, siendo contrastado este hecho con la experiencia en múltiples ensayos en los cuales se ha empleado, pudiendo dar valores no tan fiables como el resto de sensores.

Así mismo, la sonda de análisis de los gases de escape no proporciona una composición completa de dichos gases, sino que detalla algunas de las especies químicas más representativas como son el O₂, CO₂, CO, NO_x, CH₄, HC (hidrocarburos sin quemar, se realiza una medición del número de carbonos).

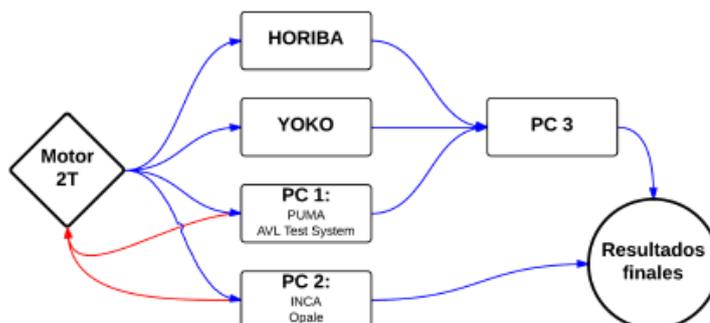


Figura 3. Diagrama del sistema informático de la instalación, en el que se muestran los flujos de instrucciones (en color rojo) e información (en color azul) de mayor importancia.

Las órdenes que recibe el motor de dos tiempos para su funcionamiento provienen de dos fuentes diferentes: el PC 1 y el PC 2; los cuales se describen a continuación.

El PC 1 consta de un ordenador y del actuador AVL Test System (con el que se fija la velocidad de giro del motor de dos tiempos). Respecto al ordenador, es importante mencionar que su uso va ligado al del programa informático PUMA, software desarrollado por la empresa AVL.

De este modo, la primera fuente de instrucciones sobre el motor es capaz de variar su velocidad de giro, así como de controlar los sistemas de lubricación y de refrigeración. La apariencia de estos dos sistemas englobados como PC 1.

Por otro lado, el PC 2 está formado únicamente por un segundo ordenador, el cual se caracteriza por controlar la ECU mediante el programa informático INCA, el cual ha sido desarrollado por el grupo ETAS. Asimismo, esta computadora incorpora también el software desarrollado por Opale, por lo que es capaz de gobernar la apertura de las válvulas de escape. Gracias a estos dos programas informáticos, el PC 2 es una fuente de multitud de instrucciones sobre el motor de dos tiempos.

Mediante la combinación de estos dos sistemas con el resto de actuadores presentados previamente es posible hacer funcionar el motor en el punto de operación deseado, y es lo que se conoce como proceso de accionamiento de la instalación.

El proceso de gestión de la información consiste en la recopilación y el tratamiento de la información obtenida a través de los sensores.

- El PC 2 no recibe grandes cantidades de información del motor, sino únicamente aquellos datos necesarios para el correcto funcionamiento de la ECU y del sistema de control de la apertura de las válvulas de escape. Asimismo, es importante destacar que el propio PC 2 es el encargado de recopilar la información de la ECU relativa a cada uno de los ensayos realizados.
- Por otro lado, el programa informático PUMA del PC 1 recibe muchos datos relacionados con las condiciones en las que está funcionando el motor de dos tiempos. Algunos de esos datos se muestran por pantalla, con el objetivo de controlar que no existe ningún problema durante la ejecución del plan de ensayos; además, sus valores medios son transmitidos al PC 3, el cual los recibe por medio del programa informático LabVIEW.
- El tercero de los caminos de los datos procedentes del motor tiene como destino una cadena de medida, cuyo nombre es YOKO (sistema de adquisición Yokogawa DL716, que consta de 16 canales de 16 bits con una frecuencia de adquisición máxima de 100KHz), al que llegan las

mediciones instantáneas. Dichos datos son enviados posteriormente al PC 3 por medio del software adecuado, y se emplean para controlar la aparición del fenómeno del picado a través de una serie de cálculos realizados con el programa informático LabVIEW.

- Por último, el analizador de emisiones de la marca HORIBA trabaja con los datos relativos a las sustancias contaminantes. Dicha información también se transmite al PC 3 mediante el uso del programa informático LabVIEW.

PRESUPUESTO

ÍNDICE PRESUPUESTO

1.1 Introducción

1.2 Presupuesto

1.2.1 Coste del material adquirido y amortización de equipos informáticos

1.2.2 Coste de mano de obra

1.3 Coste total del presupuesto

1.1 Introducción

El siguiente documento contiene el presupuesto del proyecto, en el cual se contabilizarán todos los costes que ha supuesto el desarrollo del mismo.

A consecuencia de que el proyecto comprende tareas de ámbito teórico, se dispondrá del presupuesto de ejecución donde se desglosarán los costes que suponen la mano de obra, el material de oficina y las licencias de software.

1.2 Presupuesto

El presupuesto cuantificará los gastos asociados las tareas llevadas a cabo en el proyecto, como son el análisis de información, el desarrollo de herramientas informáticas y la simulación de los ensayos de autoencendido. Por tanto, los costes a evaluar serán los siguientes:

- Coste de material y amortización de equipos informáticos.
- Coste de mano de obra.

1.2.1 Coste del material adquirido y amortización de equipos informáticos

El material empleado tanto por el ingeniero superior Sénior como por el ingeniero superior Junior está formado por dos ordenadores iguales, los cuales se denominaran PC 1 y PC 2, cuyas características son: Intel Core 2 Duo de 2.33GHz cada procesador y 2 GB de memoria RAM. (Microsoft Windows 10).

El precio de adquisición de estos ordenadores no se tendrá en cuenta el presupuesto, ya que se habían comprado con anterioridad. Por tanto, solo se tendrá en cuenta los gastos debido a su amortización. Además, son necesarias las licencias de: Windows 10, Microsoft Office 2007, CHEMKIN PRO y Matlab R2013a.

El precio unitario de los ordenadores se medirá según el coste de amortización cuyo periodo se fija en 5 años. Por tanto, considerando que el precio de adquisición es de 850 €, se establece un precio unitario aproximando de 0.1 €/h en los cuales se incluye también los gastos de mantenimiento.

El precio unitario del software se medirá según el precio de las licencias. No obstante, dado que la universidad otorga licencias de Windows 10, Microsoft Office 2007 y Matlab R2013a, no se tendrán en cuenta en el coste. Por tanto, solo habrá que tener en cuenta el coste de la licencia de CHEMKIN, que asciende a 2500 €.

También habrá que añadir material de papelería, como pueden ser: cuadernos, bolígrafos, carpetas, etc. el cual se cuantificará su coste mediante un precio único que incluya todo este material.

Ud.	Concepto	Precio unitario	Cantidad	Precio total
1.1	PC 1	0.1 €/h	1540 h	1,540 €
1.2	PC 2	0.1 €/h	190 h	190 €
1.3	Licencia CHEMKIN	2500€/ud.	2 ud.	5,000 €
1.4	Material papelería	60 €	1	60 €
			TOTAL	6,790 €

1.2.2 Coste de mano de obra

El personal requerido para llevar a cabo esta parte del proyecto constará de los ingenieros superiores Sénior y Junior.

Ud.	Concepto	Precio unitario	Cantidad	Precio total
2.1	Ingeniero Sénior Superior	60€/h	740	44,400 €
2.2	Ingeniero Junior Superior	30€/h	990	29,700 €
			TOTAL	74,100 €

1.3 Coste total del presupuesto

A continuación, se presenta el presupuesto global del proyecto de ejecución al cual se le ha aplicado el impuesto sobre el valor añadido (IVA) establecido en un 21%.

Ud.	Concepto	Precio total
1	Coste de material	6,790 €
2	Coste de mano de obra	74,100 €
	TOTAL (sin IVA)	80,890 €
	IVA (21%)	16,986.90 €
	TOTAL	97,876.90 €

El presupuesto de ejecución asciende a la cantidad de #NOVENTA Y SIETE MIL OCHOCIENTOS SETENTA Y SEIS CON NOVENTA CÉNTIMOS DE EURO#.