



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:

“Investigar es ver lo que todo el mundo ha visto, y pensar lo que nadie más ha pensado”.

Albert Szent

RESUMEN

Dentro del marco del diagnóstico de la combustión, es interesante el análisis de la incertidumbre del poder calorífico en un motor de combustión interna alternativo. Con ello, se pretende conocer con mayor certeza la energía aprovechable de la cual se dispone en un proceso de combustión.

El objetivo de este trabajo es observar la influencia del fenómeno de la disociación sobre el poder calorífico en un motor de combustión interna alternativo. Para ello, a través de las herramientas teóricas Calmec y Chemkin se van a analizar tres tipos de reacciones. En primer lugar, una reacción desplazada a productos en un solo paso, la cual se utilizará como referencia para realizar las comparaciones con el resto de reacciones. En segundo lugar, una reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática y, por último, una reacción con disociación y composición a la temperatura de escape.

Se realizará de un estudio preliminar con el fin de demostrar la influencia de la presión y la temperatura en una reacción de combustión. Por otro lado, se efectuará un estudio aplicado a un caso real, suponiendo condiciones de baja y alta carga respectivamente, utilizando uno de los motores disponibles en el CMT Motores Térmicos.

Palabras Clave: Disociación. Poder calorífico. Reacción. MCIA.

RESUM

Dins del marc del diagnòstic de la combustió, és interessant l'anàlisi de la incertesa del poder calorífic en un motor de combustió interna alternatiu. Amb això, es pretén conèixer amb major certesa l'energia aprofitable de la qual es disposa en un procés de combustió.

L'objectiu d'aquest treball és observar la influència del fenomen de la dissociació sobre el poder calorífic en un motor de combustió interna alternatiu. Per a això, a través de les ferramentes teòriques Calmec i Chemkin es van a analitzar tres tipus de reaccions. En primer lloc, una reacció desplaçada a productes en un sol pas, la qual s'utilitzarà com a referència per a realitzar les comparacions amb la resta de reaccions. En segon lloc, una reacció amb dissociació i composició a la temperatura adiabàtica i, finalment, una reacció amb dissociació i composició a la temperatura de fuga.

Es realitzarà d'un estudi preliminar a fi de demostrar la influència de la pressió i la temperatura en una reacció de combustió. D'altra banda, s'efectuarà un estudi aplicat a un cas real, suposant condicions de baixa i alta càrrega respectivament, utilitzant un dels motors disponibles en el CMT Motors Tèrmics.

Paraules Clau: Dissociació. Poder calorífic. Reacció. MCIA.

ABSTRACT

Within the framework of the combustion diagnosis, it is interesting to analyze the uncertainty of the heating value in an alternative internal combustion engine. This work is aimed at clarifying with certainty the usable energy of which is disposed in a process of combustion.

The objective of this work is to observe the influence of the dissociation phenomenon on the heating value in an alternative internal combustion engine. For this, through the theoretical tools Calmec and three types of reactions will be analysed. First, a displaced reaction to products in a single step, which will be used as reference to make the comparisons with the other reactions. Secondly, a reaction with dissociation and composition at the adiabatic temperature and, finally, a reaction with dissociation and composition at the exhaust temperature.

A preliminary study will be made to demonstrate the influence of pressure and temperature on a combustion reaction. On the other hand, a study applied to a real case, assuming conditions of low and high load respectively, using one of the motors available in the CMT Motores Térmicos of the university.

Keywords: Dissociation. Heating value. Reaction. ICE

AGRADECIMIENTOS

Cinco años han pasado desde que empecé este pequeño recorrido por la ciencia y por fin llegué a mi primera meta. Esto no hubiese sido posible sin la ayuda de mucha gente.

En primer lugar, a mi familia por apoyarme en los buenos y malos momentos y ayudarme a alcanzar mis metas. Nunca podré agradecerlos lo suficiente. Gracias por ser ese pilar fundamental en mi vida.

Por otro lado, a esa pequeña familia de industriales que se ha ido formando a lo largo de estos años compartiendo risas, aprobados, suspensos y mucho más. Sin vosotros esto no hubiese sido tan llevadero.

Por último, agradecerles a Jaime y a Diego su apoyo continuo, su paciencia y su dedicación por enseñar. Dos grandes personas de las que puedes aprender constantemente.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	18
1.1. INTRODUCCIÓN	18
1.2. FENÓMENO DE LA DISOCIACIÓN	19
1.3. OBJETIVOS Y JUSTIFICACIONES	20
1.4. ESTRUCTURA DEL PROYECTO	21
2. HERRAMIENTAS TEÓRICAS Y EXPERIMENTALES	22
2.1. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL.....	22
2.1.1. MOTOR	22
2.2. HERRAMIENTAS TEÓRICAS.....	23
2.2.1. CALMEC	23
2.2.2. CHEMKIN	23
3. METODOLOGÍA DE ANÁLISIS	26
3.1. ASPECTOS GENERALES.....	26
3.2. REACCIÓN DE UN SOLO PASO DESPLAZADO A PRODUCTOS.....	27
3.3. REACCIÓN CON DISOCIACIÓN Y COMPOSICIÓN A LA TEMPERATURA ADIABÁTICA	28
3.4. REACCIÓN CON DISOCIACIÓN Y COMPOSICIÓN A LA TEMPERATURA DE ESCAPE	29
3.5. ESTUDIO DE DISTINTOS CASOS	31
3.5.1. ESTUDIO PARAMÉTRICO	31
3.5.2. ESTUDIO DE UN CICLO REAL	31
4. RESULTADOS	34
4.1. REACCIÓN DE UN SOLO PASO DESPLAZADO A PRODUCTOS	34
4.1.1. ESTUDIO PARAMÉTRICO	34
4.1.2. ESTUDIO DE UN CICLO REAL	35
4.2. REACCIÓN CON DISOCIACIÓN Y COMPOSICIÓN A LA TEMPERATURA ADIABÁTICA	39
4.2.1. ESTUDIO PARAMÉTRICO	39
4.2.2. ESTUDIO DE UN CICLO REAL	40
4.3. REACCIÓN CON DISOCIACIÓN Y COMPOSICIÓN A LA TEMPERATURA DE ESCAPE	46
4.3.1. ESTUDIO DE UN CICLO REAL	47
5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS	50
5.1. ANÁLISIS DEL TRABAJO Y CONCLUSIONES	50

5.2. TRABAJOS FUTUROS	50
6. BIBLIOGRAFÍA	52
7. PRESUPUESTO.....	54
7.1. INTRODUCCIÓN AL PRESUPUESTO.....	54
7.2. PRESUPUESTO MANO DE OBRA.....	54
7.3. PRESUPUESTO DE MATERIALES Y EQUIPOS	54
7.4. PRESUPUESTOS TOTALES DEL PROYECTO	55

LISTADO DE FIGURAS

Figura 1: Producción mundial de turismos	18
Figura 2: Venta de turismos por tipo de carburante	19
Figura 3: Efecto de la disociación	26
Figura 4: Reacción de un solo paso desplazado a productos.....	28
Figura 5: Reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática	28
Figura 6: Reacción con disociación y composición a la temperatura de escape.....	30
Figura 7: Comparación SD a distintas presiones de las entalpías de reactivos y productos	34
Figura 8.a: Presión del cilindro del ensayo a baja carga	36
Figura 8.b: Presión del cilindro del ensayo a alta carga.....	36
Figura 9.a: Temperatura sin quemar del ensayo a baja carga	36
Figura 9.b: Temperatura sin quemar del ensayo a alta carga.....	37
Figura 10: Entalpías de reactivos y productos de SD del ensayo a baja carga	37
Figura 11: Entalpías de reactivos y productos de SD del ensayo a alta carga	38
Figura 12: Entalpía de reacción caso SD del ensayo a baja carga	38
Figura 13: Entalpía de reacción caso SD del ensayo a alta carga	39
Figura 14: Comparación SD y DIS a distintas presiones de las entalpías de reactivos y productos	40
Figura 15: Fracciones molares del ensayo a baja carga	41
Figura 16: Fracciones molares del ensayo a alta carga.....	41
Figura 17: Evolución de la presión y temperatura sin quemar a lo largo del ciclo.....	42
Figura 18: Entalpías de reactivos y productos de DIS del ensayo a baja carga	43
Figura 19: Entalpías de reactivos y productos de DIS del ensayo a alta carga	43
Figura 20: Entalpía de los productos del caso DIS	44
Figura 21: Entalpía de reacción caso DIS del ensayo a baja carga	44
Figura 22: Entalpía de reacción caso DIS del ensayo a alta carga	45
Figura 23: Diferencia entre SD y DIS del ensayo a baja carga	45
Figura 24: Diferencia entre SD y DIS del ensayo a alta carga	46
Figura 25: Entalpías de reactivos y productos de ESC del ensayo a baja carga.....	48

Figura 26: Entalpías de reactivos y productos de ESC del ensayo a alta carga 48

Figura 27: Entalpía de reacción caso ESC del ensayo a baja carga..... 49

Figura 28: Entalpía de reacción caso ESC del ensayo a alta carga 49

LISTADO DE TABLAS

Tabla 1: Datos técnicos del motor	22
Tabla 2: Puntos de operación del motor	23
Tabla 3: Valores de temperatura y presión de escape	47
Tabla 4: Composición de productos obtenidos a la Tº de escape en un ensayo a baja carga	47
Tabla 5: Composición de productos obtenidos a la Tº de escape en un ensayo a alta carga	47
Tabla 6: Presupuesto mano de obra.....	54
Tabla 7: Presupuesto materiales y equipos	55
Tabla 8: Presupuesto de ejecución material.....	55
Tabla 9: Presupuesto total de ejecución	55
Tabla 10: Presupuesto base licitación	56

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1. Introducción

La automoción es un sector clave de la economía mundial, así como un pilar fundamental de la industria. La evolución del mercado mundial del automóvil en los últimos tiempos ha sido claramente ascendente, como se puede observar en la Figura 1, a pesar de haber sufrido una caída considerable durante los años 2008 y 2009, debido a la crisis financiera mundial.

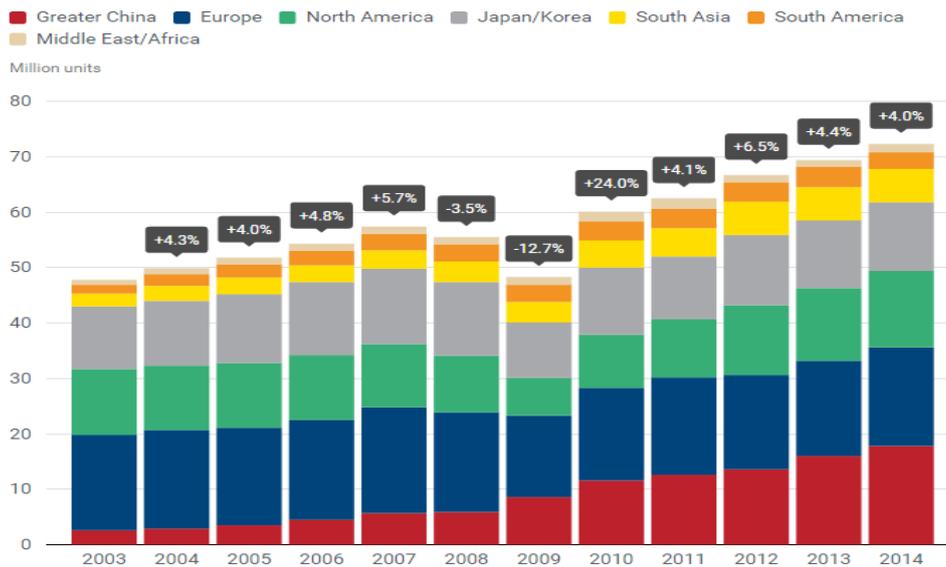


Figura 1: Producción mundial de turismos. (Fuente: ACEA)

La principal tendencia que se observa en los últimos años es el aumento de las ventas de coches de gasolina frente a los coches Diésel. Desde el sector automovilístico, según un artículo de Economía Digital [8], destacan dos factores muy importantes. El primero de ellos es la “mala imagen” que ha adquirido la tecnología Diésel, principalmente por el *dieseldgate* de la marca Volkswagen, pero también por la persecución que sufren en las grandes ciudades europeas, como Madrid y Barcelona, por el coto a la circulación de los coches Diésel. Dichos cotos se deben a la creciente preocupación que generan en la sociedad los elevados niveles de contaminación atmosférica presentes en los núcleos urbanos, principalmente fomentada por el excesivo uso del automóvil.

El otro factor importante es el económico, ya que hoy en día sigue siendo más barato comprarse un coche de gasolina y su consumo es cada vez menor. Sin embargo, el precio del carburante sigue siendo menor en el caso del combustible Diésel.

VENTA DE TURISMOS POR TIPO DE CARBURANTE

Cuota de mercado en España.

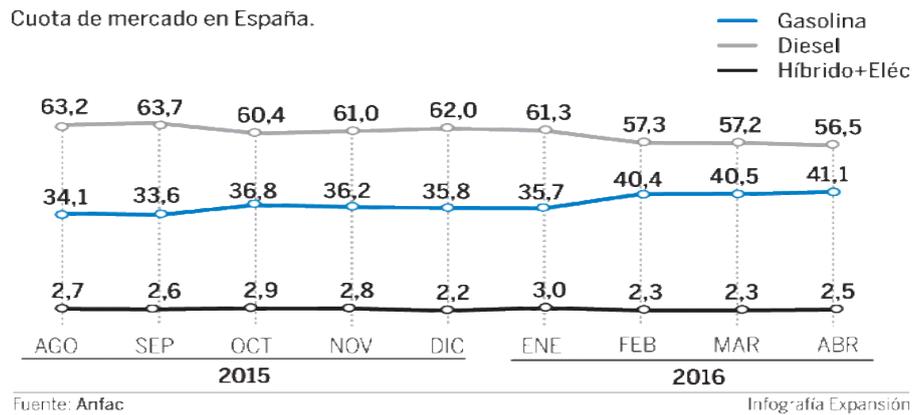


Figura 2: Venta de turismos por tipo de carburante (Fuente: Anfac)

Los vehículos de combustión son los principales generadores de óxido nitroso (NO₂) y metano (CH₄), los principales gases que provocan el efecto invernadero. Dichos gases retienen parte de la energía que se recibe del sol, elevando de esta manera la temperatura del planeta. Este efecto representa una gran amenaza para la vida humana por lo que queda justificado que la normativa frente a la contaminación sea cada vez más restrictiva.

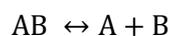
Por tanto, se hace necesario el continuo estudio e investigación del balance de energía de los motores de combustión interna, prestando especial atención a la cantidad exacta de energía disponible en cada ciclo de combustión del motor ya que un error en dicho valor afectaría a todos los términos calculados posteriormente. Todo esto con el fin de conseguir motores con mejores prestaciones, menor contaminación y menor consumo.

1.2. Fenómeno de la disociación

Cuando se habla del término disociación, en el campo de la química, se habla de un proceso generalizado en el cual compuestos complejos, sales u otras moléculas se ven separadas en moléculas de menor tamaño.

A menudo, se tiende a confundir los procesos de disociación, con los de ionización, donde en las reacciones químicas se producen iones debido a la transferencia de electrones, gracias a la gran diferencia de electronegatividad existente entre los elementos que se encuentran reaccionando.

En el proceso de disociación, se hace necesario el uso de una constante de equilibrio (K_c). Cuando se tratan disociaciones de tipo reversibles en equilibrio químico, se utiliza el esquema siguiente:



Para dicho equilibrio, la constante se representará como:

$$K_c = \frac{[A] \cdot [B]}{[AB]} \quad (1.1)$$

La constante de disociación para un equilibrio químico será el cociente de la multiplicación de las concentraciones de los productos, dividido por la concentración de los reactivos.

Se puede asegurar que un alto valor de K_c implica un desplazamiento del equilibrio hacia los productos y, por contra, un bajo valor de K_c implicaría un desplazamiento hacia los reactivos. Por ello, es importante definir el grado de disociación, en tanto por uno o en tanto por ciento de la siguiente forma:

$$\alpha = \frac{n_d}{n_o} \quad (1.2)$$

A partir de n_d , número de moles disociados, y de n_o , número de moles iniciales del compuesto a disociar, se puede calcular el grado de disociación, tal y como se muestra en la ecuación (1.2).

En el fenómeno de la disociación también se deben tener en cuenta otros conceptos como, las rupturas o fragmentaciones de moléculas, las cuales pueden ser de dos tipos: homolíticas o heterolíticas. Las rupturas homolíticas son propias de dos átomos que no tienen una gran diferencia en electronegatividad donde cada átomo "se lleva" un electrón de cada pareja de electrones de enlace. Las rupturas heterolíticas son propias de dos átomos cuya electronegatividad es diferente, donde el átomo electronegativo "se lleva" los dos electrones de enlace, dando lugar a iones.

1.3. Objetivos y justificaciones

Como ya se ha comentado en el resumen del presente trabajo, el objetivo principal de este trabajo es analizar la influencia de la disociación en el poder calorífico de un motor de combustión interna alternativo. Dentro de este objetivo principal, se pueden destacar los siguientes objetivos específicos:

- Observar la influencia de la presión y la temperatura en las reacciones a analizar posteriormente.
- Cuantificar la influencia de la disociación sobre el poder calorífico de una reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática con respecto a una reacción sin productos disociados.
- Cuantificar la influencia de la disociación sobre el poder calorífico de una reacción con disociación y composición a la temperatura de escape con respecto a una reacción sin productos disociados.
- Observar las diferencias en las entalpías de reacción, entre un ensayo a baja carga y un ensayo a alta carga de un motor Diésel en cada tipo de reacción.

Existen dos grandes motivos por los cuales se ha decidido estudiar y realizar este trabajo. En primer lugar, el Trabajo Fin de Grado es un requisito indispensable para la finalización del Grado en Ingeniería de Tecnologías Industriales, donde se demuestran los conocimientos adquiridos a lo largo de cuatro años de carrera.

En segundo lugar, la elección de este trabajo se debe a que, dentro del marco del diagnóstico de la combustión, es interesante el análisis de la incertidumbre del poder calorífico en un motor de combustión interna alternativo. Con ello, se pretende conocer con mayor precisión la energía aprovechable de la cual se dispone en un proceso de combustión.

1.4. Estructura del proyecto

A continuación, se realizará una breve introducción al contenido de cada uno de los capítulos posteriores que componen la estructura del presente trabajo.

Primero, se describe brevemente el motor utilizado, así como los puntos de operación obtenidos tras una serie de ensayos realizados en el laboratorio. Por otra parte, se describe la herramienta de diagnóstico Calmec, desarrollada por el Departamento de Motores Térmicos. Por último, se introduce la herramienta teórica Chemkin, una herramienta de software para resolver problemas complejos de reacciones químicas, tanto con cinética química como en equilibrio. En este caso, no se tiene en cuenta la parte de cinética ya que se consideran reacciones instantáneas. Mediante esta herramienta, se analizará la influencia de la disociación en el poder calorífico.

En el tercer capítulo, se procede a describir las tres reacciones químicas ensayadas: en primer lugar, se describe una reacción sin disociación; posteriormente, se procede a describir una reacción con disociación y evaluada con la composición correspondiente al punto de la temperatura adiabática; finalmente, se describe una reacción con disociación y composición a la temperatura de escape.

En el cuarto capítulo, se presentarán los resultados obtenidos en las diferentes reacciones tanto en el estudio preliminar como en el estudio de un ciclo real. En el estudio de un ciclo real, se diferenciará entre un ensayo a baja carga y otro a alta carga. A partir de dichos resultados, es posible obtener las conclusiones necesarias para poder alcanzar el objetivo principal del trabajo.

Posteriormente, se presentarán más específicamente las conclusiones extraídas del capítulo anterior, así como futuros trabajos con el objetivo de obtener mejores resultados y con mayor precisión.

Por último, se detallan las referencias bibliográficas utilizadas a lo largo de este documento, así como el presupuesto final.

CAPÍTULO 2. HERRAMIENTAS TEÓRICAS Y EXPERIMENTALES

2.1. Instalación experimental

En primer lugar, se describirá el motor utilizado proporcionando una ficha técnica con los parámetros más relevantes del mismo, así como sus puntos de operación.

2.1.1. Motor

El estudio se ha realizado en un motor Diesel HSDI cuyas características principales se detallan en la siguiente tabla.

Característica	Valor
Tipo de motor	4T
Tipo de combustible	Diésel
Número y disposición de los cilindros	4 en línea
Carrera	90.4 mm
Diámetro del pistón	82 mm
Relación de compresión	17.5: 1
Potencia máxima	110 KW @ 4000 rpm
Par máximo	315 Nm @ 2000 rpm
Inyección	Common Rail
Tipo de admisión	Sobrealimentado

Tabla 1: Datos técnicos del motor

Para conocer las características funcionales del motor utilizado, se realizó un estudio en distintos puntos de operación [2]. Debido a las múltiples referencias a dichos puntos a lo largo del presente trabajo, se ha decidido adoptar una nomenclatura abreviada. De esta forma, en primer lugar, se señala la velocidad de giro del motor expresada en revoluciones por minuto (rpm) y, a continuación, el valor de la presión media efectiva en freno (BMEP), en bares. Por tanto, para abreviar, los ensayos se nombrarán utilizando estos dos valores separados mediante una barra baja, quedando de la siguiente forma: velocidad del motor_ BMEP.

En la siguiente tabla se detallan las variables más significativas de cada punto de operación.

Velocidad del motor [rpm]	BMEP [bar]	Presión de alimentación [bar]	Gasto másico de aire [g/s]	EGR [%]	Presión de rail [bar]	Cantidad de combustible principal [mg/cc]
1500	8	1.33/1.38	29.8	0	750	23.5
2000	2	1.17/1.23	38.8	0	450	6.8
2000	20	2.28/2.67	72.23	0	1245	40.46
3000	14	1.93/2.16	88.5	0	1400	40.4

Tabla 2: Puntos de operación del motor

Cabe destacar que solamente se analizarán dos puntos de operación: 2000_2 y 2000_20. Se ha decidido analizar estos dos puntos porque, para poder observar con mayor precisión el efecto de la disociación sobre el poder calorífico, ambos ensayos deben ser sometidos a la misma velocidad del motor y distinta carga. En este caso, el punto 2000_2 gira a una velocidad de 2000 revoluciones por minuto y tiene una presión media efectiva de freno de 2 bares, lo que equivale a estar sometido a baja carga. Mientras que el punto 2000_20 gira a la misma velocidad, pero está sometido a alta carga.

2.2. Herramientas teóricas

En segundo lugar, se describirán las principales herramientas teóricas utilizadas como son Calmec y Chemkin.

2.2.1. Calmec

Calmec es una herramienta para el diagnóstico de la combustión desarrollada por el departamento de máquinas y motores térmicos de la universidad.

Este procedimiento consiste en medir la variable principal necesaria como es la presión en cámara además de la temperatura de admisión y los parámetros geométricos del motor, y con ellos calcular la ley de combustión para obtener los parámetros necesarios.

En lo que respecta a los resultados obtenidos por Calmec, los más importantes para este trabajo son:

- Presión y temperatura en cámara
- Fracción de calor liberado
- Balance de masas en cámara

2.2.2. Chemkin

Chemkin es una herramienta desarrollada por Reactor Design cuya finalidad es facilitar la formulación, solución e interpretación de problemas que involucran las reacciones químicas en el equilibrio.

El programa consiste en extraer de la *Thermodynamic Base*¹ información termodinámica de las especies involucradas en un mecanismo de reacción, proporcionando como resultado un fichero de datos que contiene toda la información necesaria (pesos atómicos y moleculares, rangos de temperatura, etc.) sobre los elementos, especies y reacciones consideradas en el mecanismo.

A continuación, mediante la aplicación EQUIL, se realiza el cálculo de la composición en equilibrio. Para que la aplicación realice las funciones requeridas es necesario un fichero de datos que contenga las concentraciones iniciales de los reactivos, así como una serie de palabras clave que especifican el tipo de cálculo a realizar. Las palabras clave que se han utilizado en este caso son las siguientes:

- HP: cálculo de la composición en equilibrio de una reacción a presión y entalpía constantes especificadas por el usuario.
- TP: cálculo de la composición en equilibrio de una reacción a presión y temperatura constantes.

Una vez realizado el cálculo, como ya se ha comentado, la aplicación proporciona un fichero de datos de salida con toda la información que se necesita. Los parámetros obtenidos más importantes son:

- Entalpías de reactivos y productos
- Temperatura y presión de la cámara
- Composición de los productos finales

¹ La *Thermodynamic Base* es una base de datos de la aplicación Chemkin que contiene ajustes polinómicos para los calores específicos, valores de entalpía estándar y valores de entropía estándar. La base de datos tiene esencialmente el mismo formato que el usado por el código original de equilibrio químico complejo de la NASA por Gordon y McBride. [1]

CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA DE ANÁLISIS

3.1. Aspectos generales

Se han considerado específicamente las siguientes reacciones para analizar porque: la primera de ellas (línea P), en la cual no se tiene en cuenta la disociación, se obtiene un mayor poder calorífico y, por tanto, se tomará como referencia para poder observar el efecto de la disociación sobre la energía de la cual se dispone, la cual está representada por el espacio existente entre la línea de reactivos (R) y la correspondiente línea de productos; la segunda (línea P'), una reacción con disociación donde se asume una composición a la temperatura adiabática, presenta el extremo opuesto del análisis, donde su poder calorífico es el menor de los considerados, y la tercera reacción (línea P'') constituye un caso intermedio entre ambos extremos para poder evaluar la incertidumbre del poder calorífico a la apertura de la válvula.

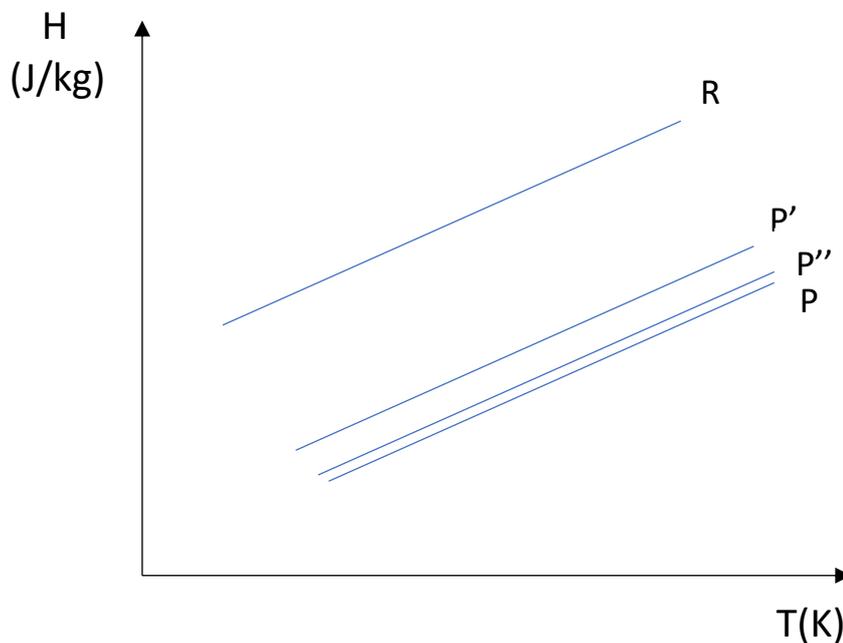
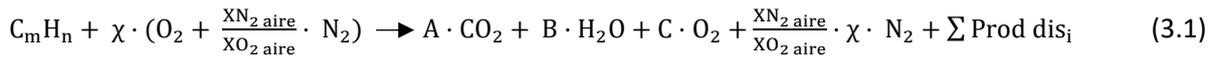


Figura 3: Efecto de la disociación

Por otra parte, cabe destacar que el tipo de combustible utilizado en el motor elegido es gasóleo, un hidrocarburo saturado también denominado Diésel. Su fórmula química común, $C_{12}H_{26}$, tiene un poder calorífico inferior de 43.1 MJ/kg, utilizado principalmente como combustible en motores.

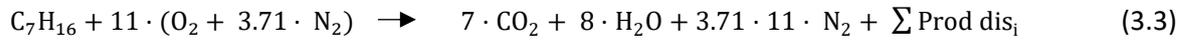
Debido a que el poder calorífico del gasóleo puede ir variando según su composición, se ha elegido el n-heptano, que es un isómero del heptano. Dicho hidrocarburo saturado (heptano) tiene una fórmula molecular de C_7H_{16} y un poder calorífico de 44.56 MJ/kg, muy similar al del gasóleo. Por tanto, el combustible que se utilizará para el análisis de todas las reacciones es el n-heptano.

La reacción que se pretende analizar es la combustión estequiométrica del n-heptano, cuya ecuación química es:



Donde:
$$\chi = m + \frac{n}{4} = 11 \quad (3.2)$$

Sustituyendo el n-heptano por su fórmula molecular, siendo m=7 y n=16, y sabiendo que la proporción del oxígeno en el aire es del 20.95% y la de nitrógeno es del 78.09%, se queda:



Para hallar las fracciones molares de los reactivos que se necesitan en los distintos casos de estudio descritos en el último apartado de este capítulo, se aplican las siguientes fórmulas:

$$X_{\text{fuel}} = \frac{1}{1 + \chi + \left(\frac{X N_2 \text{ aire}}{X O_2 \text{ aire}} \right) \cdot \chi} \quad (3.4)$$

$$X_{O_2} = \frac{\chi}{1 + \chi + \left(\frac{X N_2 \text{ aire}}{X O_2 \text{ aire}} \right) \cdot \chi} \quad (3.5)$$

$$X_{N_2} = \frac{\left(\frac{X N_2 \text{ aire}}{X O_2 \text{ aire}} \right) \cdot \chi}{1 + \chi + \left(\frac{X N_2 \text{ aire}}{X O_2 \text{ aire}} \right) \cdot \chi} \quad (3.6)$$

Sustituyendo los valores correspondientes en las ecuaciones anteriores, se obtiene:

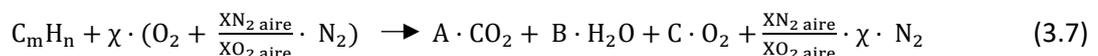
- $X_{\text{fuel}} = 0.0189$
- $X_{O_2} = 0.2081$
- $X_{N_2} = 0.7730$

Por último, cabe destacar un concepto muy importante en el presente trabajo, como es el poder calorífico. Tal como indica *R.Turns* [9], el poder calorífico es numéricamente igual al calor de reacción, pero con signo opuesto. El poder calorífico superior, es el calor de combustión calculado asumiendo que toda el agua de los productos se ha condensado. Este efecto libera la mayor cantidad de energía, de ahí la designación "superior". El poder calorífico inferior, corresponde al caso contrario, donde se asume que el agua de los productos no llega a condensar.

3.2. Reacción de un solo paso desplazado a productos.

La primera reacción para analizar es una combustión de un solo paso desplazada a productos o también denominada reacción elemental, tal como se puede observar en la Figura 1.

Esta reacción consiste en que todos los reactivos se convierten en productos en un único estado de transición sin considerar especies intermedias. Por tanto, la ecuación (3.1) se simplifica a:



Una de las características principales es que el número de moléculas que participan en la reacción es igual a la estequiometría total de la reacción y al orden de reacción.

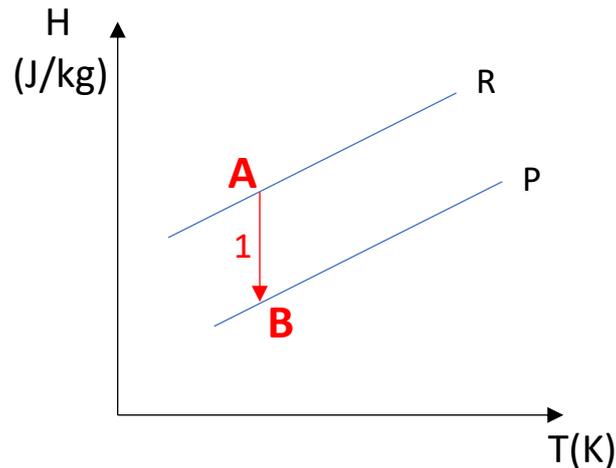


Figura 4: Reacción de un solo paso desplazada a productos

Tal y como se muestra en la Figura 4, el proceso parte de un punto A en el que, como reactivos, se tienen fuel, oxígeno y nitrógeno, como se ha descrito anteriormente. Dicho punto se encuentra a una cierta temperatura y presión. A partir del punto A , mediante un proceso isotermo, se llega a un segundo punto B , situado a la misma temperatura y presión que el punto A , del cual cobran especial interés las entalpías de los productos.

3.3. Reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática.

Esta reacción con disociación consiste en un proceso isotermo asumiendo que la composición de productos finales a temperatura adiabática tal como se indica en la Figura 5.

Dicha reacción se puede dividir en dos pasos:

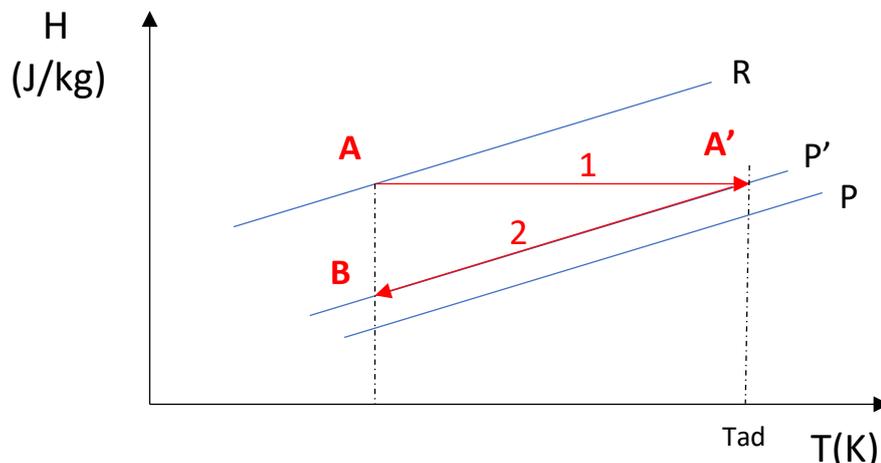


Figura 5: Reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática

PASO 1: Combustión adiabática

En este primer paso la reacción que se pretende analizar es la ya descrita en la ecuación (3.1). Partiendo de un punto A, que tiene como reactivos los calculados en el apartado anterior (fuel, oxígeno y nitrógeno) a una cierta temperatura y presión, se obtienen mediante un proceso a entalpía constante o adiabático hasta el punto A', unos productos finales a la temperatura adiabática. Dichos productos corresponden, en gran parte, a los disociados de la ecuación (3.1) pero también aparecen fracciones molares de CO₂ y N₂ en ellos.

PASO 2: Enfriamiento con composición "congelada"

En este segundo paso, se utilizarán como reactivos los productos obtenidos en el proceso adiabático descrito en el paso anterior (Punto A'). Mediante un proceso de enfriamiento, se llega a un punto B con las mismas condiciones de presión y temperatura que el punto A.

Cabe destacar que el punto B se encuentra en una curva P', distinta de la curva P, siendo esta última la correspondiente a los productos finales de la reacción desplazada en un solo paso. En la Figura 2 se observa que las líneas correspondientes a los reactivos y los productos (P y P') están dibujadas en forma de rectas y paralelas entre sí por simplificar el gráfico. Realmente, la progresión que deberían seguir dichas curvas no es lineal debido a que su pendiente, el calor específico, varía con la temperatura. Asimismo, el calor específico de cada curva no es el mismo ya que cada una tiene diferentes especies, por tanto, tampoco son paralelas.

El hecho de que el punto B se encuentra sobre la curva P', por encima de la curva P, se debe a la presencia de productos disociados. Asimismo, dicha curva P' se encuentra por encima de la curva P original demostrando así que, cuantos más productos disociados, menor es la entalpía de reacción, la cual se puede apreciar gráficamente como la separación entre las líneas de los reactivos y los productos correspondientes. Esto se debe a la existencia de productos disociados cuyo excesivo contenido energético impide a la propia reacción de combustión liberar toda la energía que, en condiciones sin disociación, sería capaz de liberar. Por tanto, la diferencia entre la entalpía de los reactivos y la entalpía de los productos es menor.

3.4. Reacción con disociación y composición a la temperatura de escape.

Por último, se repite el mismo procedimiento que en el apartado anterior, pero con la diferencia de que en esta reacción se asume una composición correspondiente a los productos de la reacción a la temperatura de escape.

Dicha reacción se puede dividir en dos pasos tal y como se observa en la Figura 6:

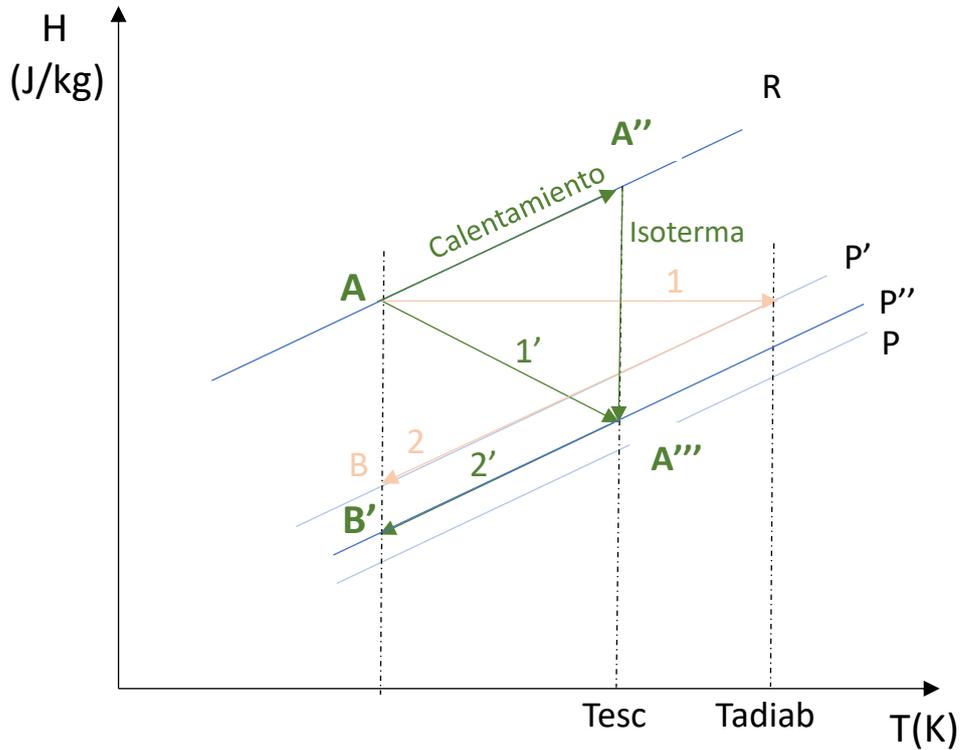


Figura 6: Reacción con disociación y composición a la temperatura de escape

PASO 1: Calentamiento hasta la temperatura de escape + Combustión isoterma

En primer lugar, la combustión que se pretende analizar es la ya descrita en la ecuación (3.1). A diferencia de lo descrito en el apartado anterior, las especies disociadas se tomarán a la temperatura de escape en lugar de la temperatura adiabática. Para ello, la primera reacción de combustión adiabática considerada en el Apartado 3.3 será, en este caso, una reacción de combustión hasta la temperatura de escape. Esta reacción se ha considerado por conveniencia, en dos partes.

Partiendo de un punto A , que tiene como reactivos las fracciones molares calculadas en el primer apartado (fuel, oxígeno y nitrógeno) a una cierta temperatura y presión, se calienta hasta alcanzar el punto A'' , correspondiente a la temperatura de escape de los reactivos. Posteriormente, mediante un proceso isoterma, se obtienen los productos finales a la temperatura de escape (punto A'''). Este proceso de calentamiento se ha realizado en dos etapas para simplificar el problema. Cabe destacar que, en el caso de la presente reacción, se tiene una temperatura y una presión de escape diferentes para cada ensayo.

PASO 2: Enfriamiento con composición “congelada”

Partiendo del punto A''', situado a la temperatura de escape y teniendo como reactivos los productos hallados en el paso 1, se realiza un proceso de enfriamiento hasta llegar al punto B', situado a la misma temperatura y presión que el punto A.

Nótese que el punto B' está situado sobre la recta P''. De la misma forma que en el apartado anterior, esta línea se encuentra por encima de la correspondiente a los productos sin disociación. No obstante, debido a la menor presencia de productos disociados respecto a la reacción anterior, esta última línea (P'') se encuentra más cercana a P.

3.5. Estudio de distintos casos

En este apartado se describen los dos tipos de estudio realizados para cada una de las reacciones anteriormente comentadas. Por un lado, se ha realizado un estudio preliminar con el fin de obtener una aproximación al valor del poder calorífico a esperar en el correspondiente ciclo real, así como comprobar la influencia de la presión y la temperatura durante el proceso. Por otro lado, se ha realizado el mismo estudio para cada una de las reacciones descritas, sometiéndolo a las condiciones de presión y temperatura propias de un ciclo real, con el fin de obtener los valores de poder calorífico finales y analizar las diferencias entre las distintas reacciones.

3.5.1. Estudio paramétrico

Para dicho estudio se han tenido en cuenta los siguientes valores de temperatura y presión:

- Temperatura: 298, 698, 1198 y 1298 grados Kelvin
- Presión: 1 y 201 bares

Para la temperatura, se han elegido cuatro puntos del mapa del motor escogido, teniendo en cuenta que el primero es un punto a temperatura ambiente y el último indica la temperatura máxima. Los otros dos valores son puntos intermedios escogidos de forma aleatoria.

En cuanto a la presión, se han escogido los valores especificados anteriormente de forma que, el primero, corresponde a la presión de admisión (presión ambiente), mientras que el segundo, corresponde a la presión máxima que puede alcanzar el motor.

A partir de estos dos parámetros y las fracciones molares de los reactivos, obtenemos toda la información necesaria para analizar los resultados.

3.5.2. Estudio de un ciclo real

Para realizar el estudio de un ciclo real, se ha llevado a cabo el mismo método que en el estudio preliminar anteriormente descrito utilizando, en este caso, los valores de temperatura sin quemar y

presión del cilindro instantáneos obtenidos con la herramienta Calmec a partir de los ensayos realizados en el motor Diesel utilizado.

Cabe destacar que se utiliza la temperatura sin quemar debido a que, son estos los valores de temperatura que se tienen inicialmente en la cámara de combustión y a la que teóricamente se encuentran los reactivos y, por tanto, suponen unas condiciones de referencia para el estudio de condiciones de partida.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS

4.1. Reacción de un solo paso desplazado a productos.

A través de la aplicación Chemkin, se calculan las entalpías de la reacción de un solo paso desplazado a productos tanto en el estudio preliminar como en un ciclo real. En el ciclo real, se calcularán tanto las del ensayo 2000_2 como las del ensayo 2000_20.

Cabe destacar que se utilizará la abreviatura “SD” para referirse a una reacción sin disociación con el fin de simplificar el texto y las gráficas.

4.1.1. Estudio paramétrico

A partir de los valores de temperatura y presión descritos en el Apartado 3.5.1 y las fracciones molares de los reactivos calculadas en el Apartado 3.1, se pueden comparar a distintas presiones las entalpías de los reactivos y productos como se muestra en la Figura 7. En dicha figura se representa con una línea azul la entalpía de los reactivos y con una línea amarilla la entalpía de los productos. Además, la línea naranja, correspondiente a la entalpía de los productos evaluada a una presión de 1 bar, y la línea gris, correspondiente a la entalpía de los productos evaluada a una presión de 201 bar, aparecen superpuestas con la línea amarilla.

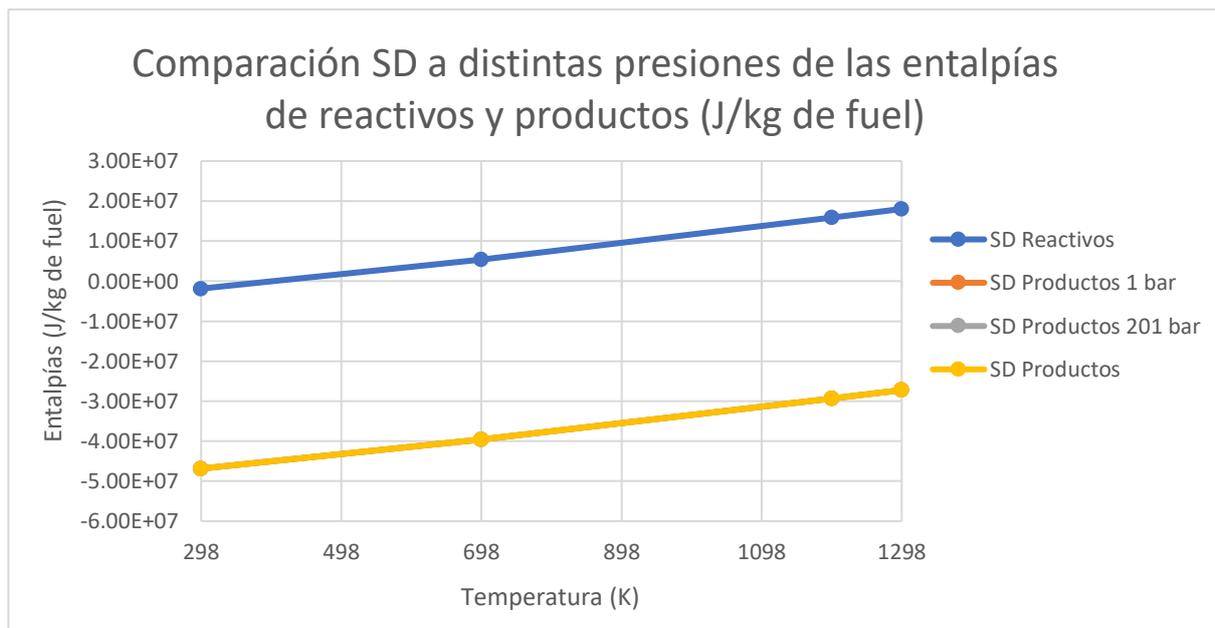


Figura 7: Comparación SD a distintas presiones de las entalpías de reactivos y productos

La Figura 7 muestra cómo, en función de la temperatura y la presión, varían los valores de entalpía tanto de los reactivos como de los productos. De dicha figura se puede extraer una serie de conclusiones que se describirán a continuación.

Por un lado, se observa que para una temperatura de 298 K la entalpía de los reactivos es negativa y cercana a cero. Esto se debe a que la entalpía de formación del oxígeno y nitrógeno es nula mientras que la del n-heptano es de -187800 J/mol ($-1.8861\text{e}6 \text{ J/kg}$ de fuel), valor que coincide con el del gráfico. Así pues, la entalpía de los productos a 298 K es de 46.09 MJ/kg de fuel, que coincide aproximadamente con la del fuel. Si se restan ambos valores, se obtiene la entalpía de reacción del fuel a temperatura y presión ambiente, es decir, su poder calorífico.

Se puede predecir, para los cambios de presión y temperatura, de forma cualitativa por el Principio de Le Chatelier [7], que dice lo siguiente: *“Si en un sistema en equilibrio se modifica alguno de los factores que influyen en el mismo (temperatura, presión o concentración), el sistema evoluciona de forma que se desplaza en el sentido que tienda a contrarrestar dicha variación”*.

En el caso de la temperatura, se observa que, conforme aumenta la temperatura aumenta la entalpía. Esto se debe a que, una temperatura elevada, fomenta la ruptura de enlaces moleculares en los reactivos por lo que, consecuentemente se obtiene una mayor liberación de energía. Esto se ve reflejado en los valores de entalpía.

En el caso de la presión, no afecta en el cálculo de las entalpías. Dicho parámetro influye solamente cuando en el equilibrio químico intervienen especies en estado gaseoso o disueltas y hay variación en el número de moles. Si aumenta la presión, el sistema se desplazará hacia donde exista menor número de moles para así contrarrestar el efecto de disminución de V , y viceversa. Por tanto, para saber el efecto de esta magnitud sólo hay que tener en cuenta la variación de moles gaseosos o disueltos que se produzca.

4.1.2. Estudio de un ciclo real

Para el cálculo de las entalpías en un ciclo real, como ya se ha descrito anteriormente, se utiliza:

- Temperatura sin quemar
- Presión del cilindro
- Fracciones molares de los reactivos

La temperatura sin quemar corresponde al estado previo de la reacción en cada ciclo del motor y se extrae de la herramienta Calmec como uno de los resultados que ofrece su diagnóstico. Por otro lado, la presión del cilindro es un dato medido anteriormente. A continuación, se muestran los gráficos de dichos parámetros en función del ángulo del ciclo, para ambos ensayos.

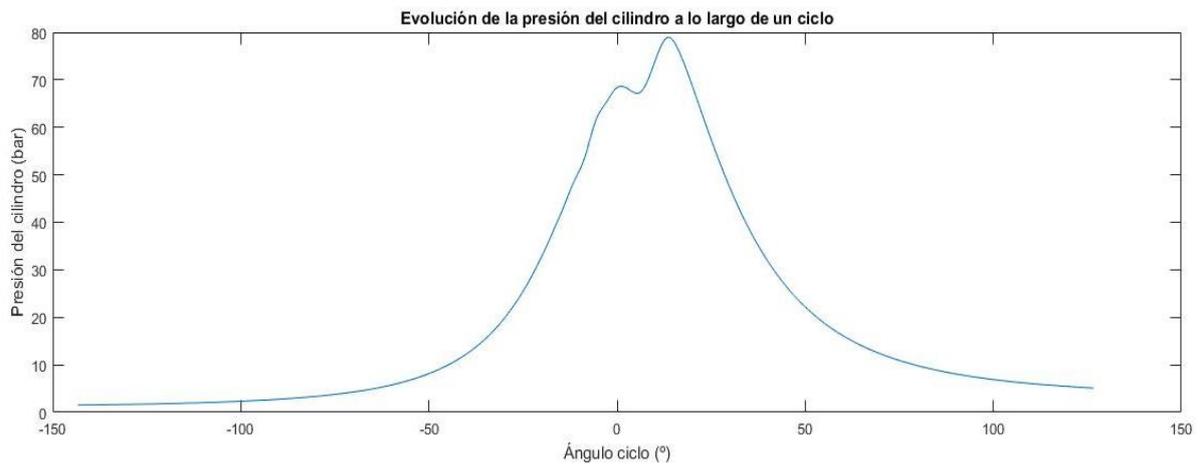


Figura 8.a: Presión del cilindro del ensayo a baja carga

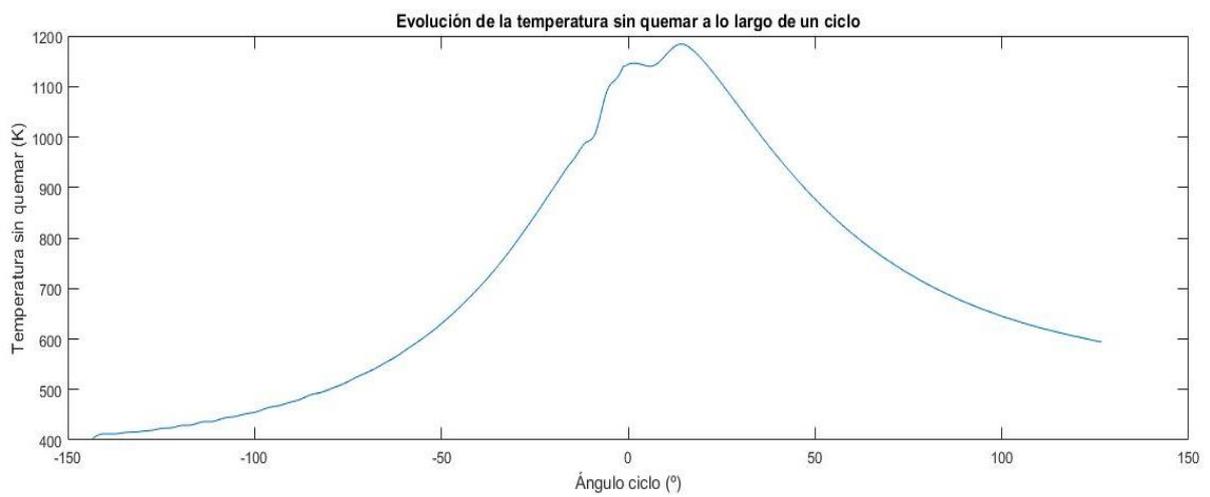


Figura 8.b: Presión del cilindro del ensayo a alta carga

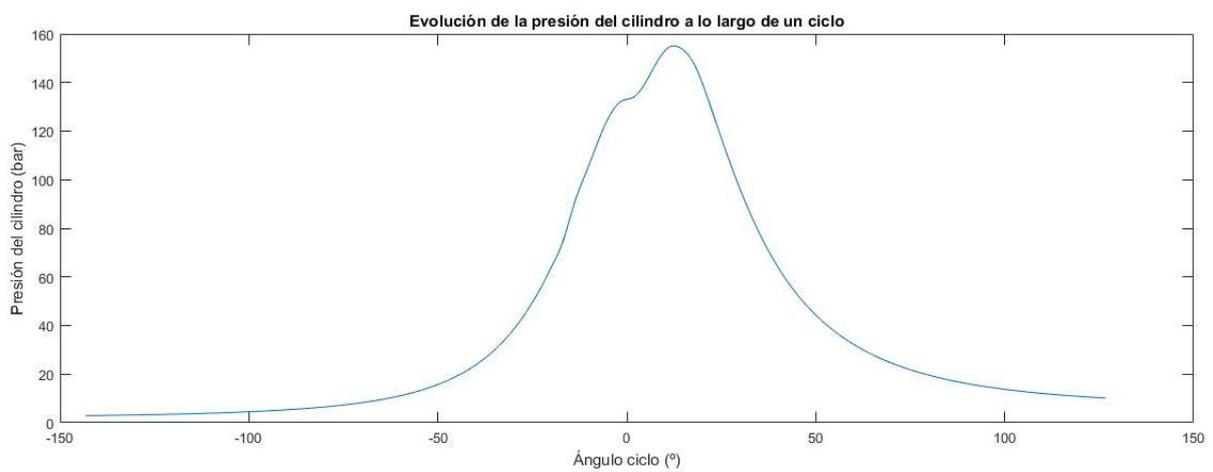


Figura 9.a: Temperatura sin quemar del ensayo a baja carga

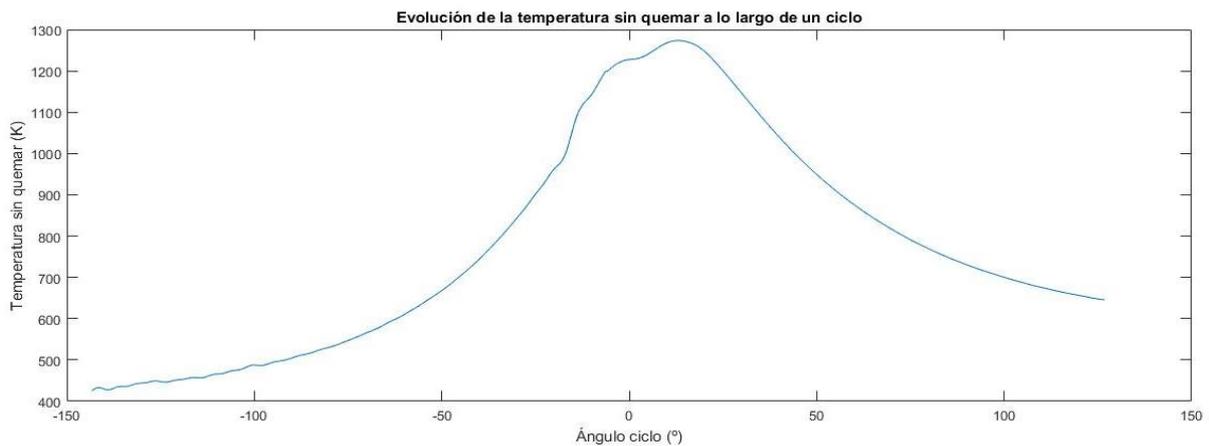


Figura 9.b: Temperatura sin quemar del ensayo a alta carga

Cabe destacar, que en las Figuras 8.a y 9.a, correspondiente al ensayo de baja carga la presión máxima alcanzada es de 80 bares mientras que la temperatura sin quemar máxima es de 1200 K. Sin embargo, en las Figuras 8.b y 9.b, se observa que, para un ensayo a alta carga, la presión máxima es de 160 bares aproximadamente y la temperatura sin quemar máxima alcanzada es de 1270 K.

En cuanto a las fracciones molares, calculadas anteriormente en el Apartado 3.1, son:

- $X_{\text{fuel}} = 0.0189$
- $X_{\text{O}_2} = 0.2081$
- $X_{\text{N}_2} = 0.7730$

A partir de estos tres parámetros, Chemkin calcula, para cada condición de presión y temperatura, las entalpías de los reactivos y productos. En los siguientes gráficos se muestran dichos valores de entalpía obtenidos para los ensayos de baja y alta carga, respectivamente.

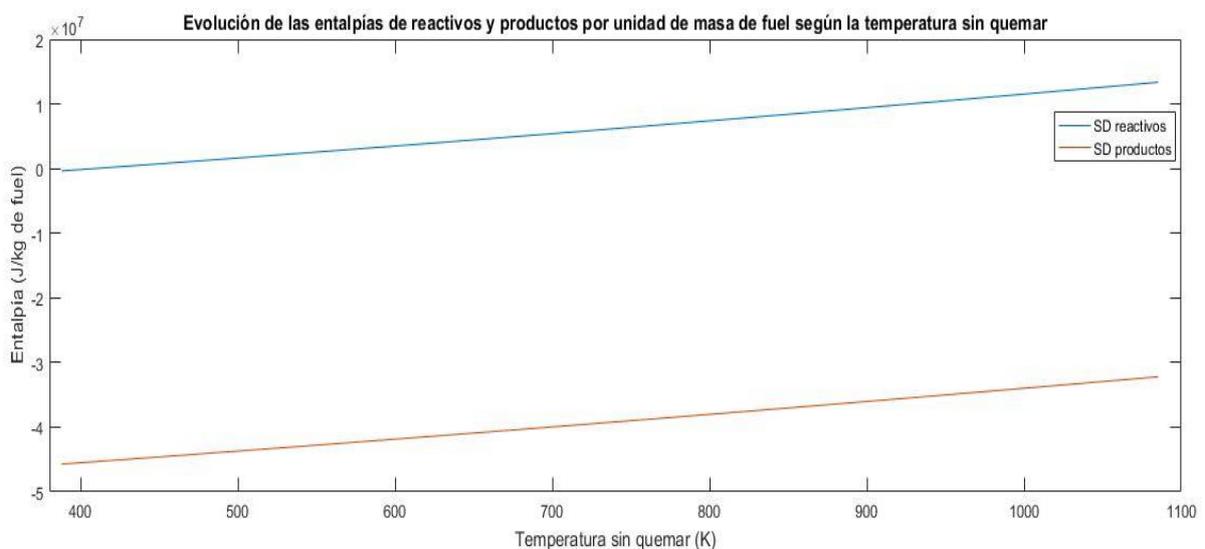


Figura 10: Entalpías de reactivos y productos de SD del ensayo a baja carga

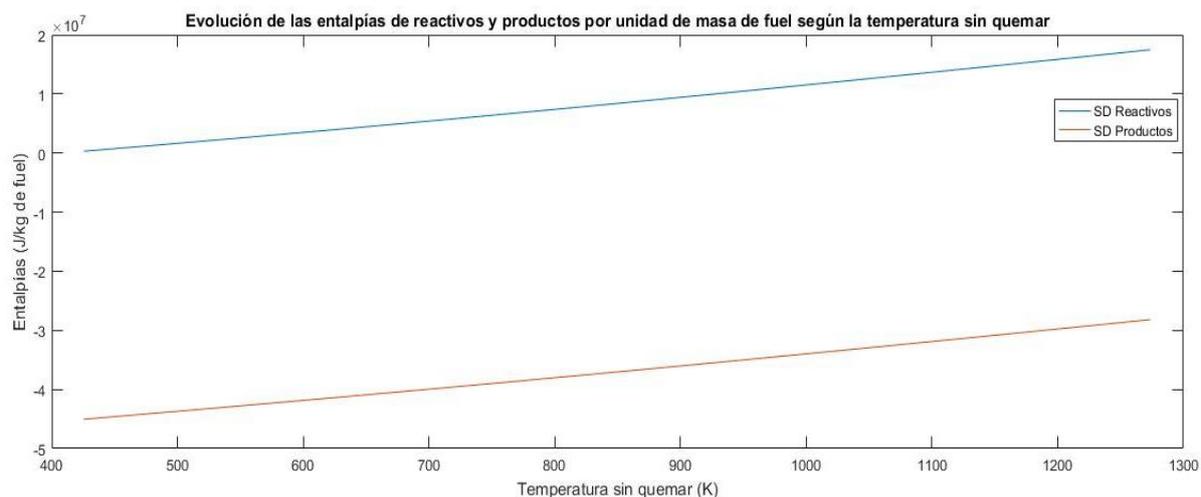


Figura 11: Entalpías de reactivos y productos de SD del ensayo a alta carga

Por último, se calcula la entalpía de reacción, en términos de propiedades extensivas, a lo largo de un ciclo para ambos ensayos, utilizando la siguiente fórmula extraída de [9]:

$$\Delta H_{\text{reacción}} = H_{\text{productos}} - H_{\text{reactivos}} \quad (4.1)$$

Este dato se usará en los siguientes apartados para poder comparar y observar la influencia de la disociación.

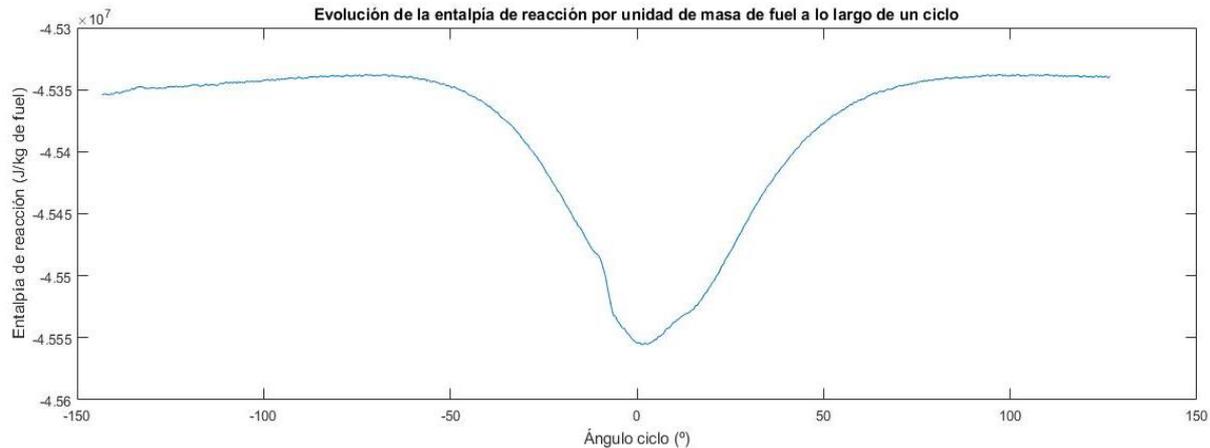


Figura 12: Entalpía de reacción caso SD del ensayo a baja carga

En la Figura 12 se muestra la entalpía de reacción obtenida a lo largo de un ciclo en el ensayo de baja carga. Dicha gráfica indica que apenas hay una variación del poder calorífico entre el cierre de la admisión y el punto de mayor temperatura sin quemar, concretamente, un 0.48%.

En la Figura 13 se observa la entalpía de reacción obtenida a lo largo de un ciclo en un ensayo a alta carga. En este caso, la variación del poder calorífico es de un 0.72 %, siendo igualmente muy pequeña. Esta ligera variación se debe a que la temperatura sin quemar máxima es mayor en este ensayo.



Figura 13: Entalpía de reacción caso SD del ensayo a alta carga

A continuación, se procede a justificar la forma de las Figuras 12 y 13. Partiendo del estado inicial del combustible, con valor correspondiente al poder calorífico del n-heptano, se observa que se produce un aumento del calor de reacción en el proceso de compresión debido al efecto que produce la temperatura en la cámara de combustión, el cual se ha descrito anteriormente.

4.2. Reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática.

De la misma forma que en el apartado anterior, se procede a calcular las entalpías de la reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática tanto en el estudio preliminar como en un ciclo real (ensayo 2000_2 y 2000_20).

Una vez calculadas, se hará una comparación entre dicha reacción y la reacción sin disociación anteriormente analizada. Así, mediante un gráfico comparativo se podrán apreciar y cuantificar las diferencias entre ambas reacciones, destacando la influencia de los productos disociados a distintas presiones y temperaturas.

Cabe destacar que se utilizará la abreviatura “DIS” para referirse a una reacción con disociación y composición a la temperatura adiabática con el fin de simplificar el texto y las gráficas.

4.2.1. Estudio paramétrico

Para el siguiente estudio se han tenido en cuenta los mismos valores de temperatura, reactivos y presión que en la primera reacción analizada. Con dichos valores se obtienen las entalpías de los

reactivos y productos en función de la temperatura sin quemar y a distintas presiones, tal como se observa en la Figura 14.

Como se puede observar en dicha figura, los reactivos son los mismos tanto en la reacción disociada como en la no disociada. Por otra parte, como cabe esperar, las líneas de los productos disociados a distinta presión están por encima de la línea de productos sin disociar.

Nótese que la entalpía de los productos varía según la presión y la temperatura. Se demuestra que, conforme aumenta la temperatura de reacción existe una mayor discrepancia entre los correspondientes productos debido a la disociación.

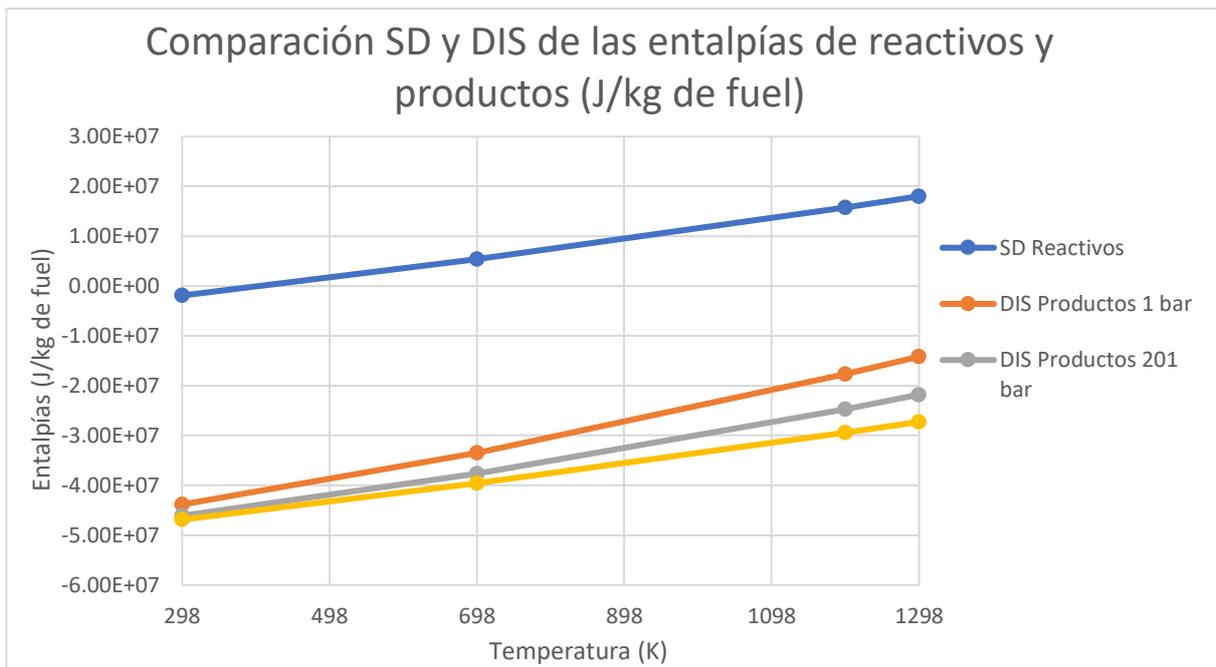


Figura 14: Comparación SD y DIS a distintas presiones de las entalpías de reactivos y productos

Por último, se observa que, a mayor presión, más cercana está la línea DIS a la línea SD ya que en el equilibrio químico se ve afectada la composición química de cada una de las especies presentes. Por eso, al aumentar la presión, el sistema se desplaza hacia los productos obtenidos de una reacción sin disociación, ya que es donde existe menor número de moles.

4.2.2. Estudio de un ciclo real

Como ya se ha comentado anteriormente, esta reacción se puede dividir en dos pasos.

El primer paso consiste en una combustión adiabática. Para realizar el cálculo a través de Chemkin, se requiere de los valores presión y temperatura mostrados en las Figuras 8 y 9, respectivamente, además de los reactivos fuel, oxígeno y nitrógeno. Con ello, se obtienen todos los elementos de productos disociados y parámetros necesarios para el análisis.

Para llevar a cabo el segundo paso de la reacción, es decir, el enfriamiento con composición congelada, son necesarios los valores de temperatura y presión utilizados en el primer paso y las composiciones de los productos a temperatura adiabática obtenidos en el mismo.

En las Figuras 15 y 16 se observa la evolución de las fracciones molares de los productos disociados a lo largo de un ciclo para los ensayos de baja y alta carga. Se puede apreciar que las fracciones molares de CO, OH y H₂ son las predominantes a lo largo del ciclo en ambos ensayos, mientras que el NC₇H₁₆ (fuel) y O₂CHO son prácticamente nulas.

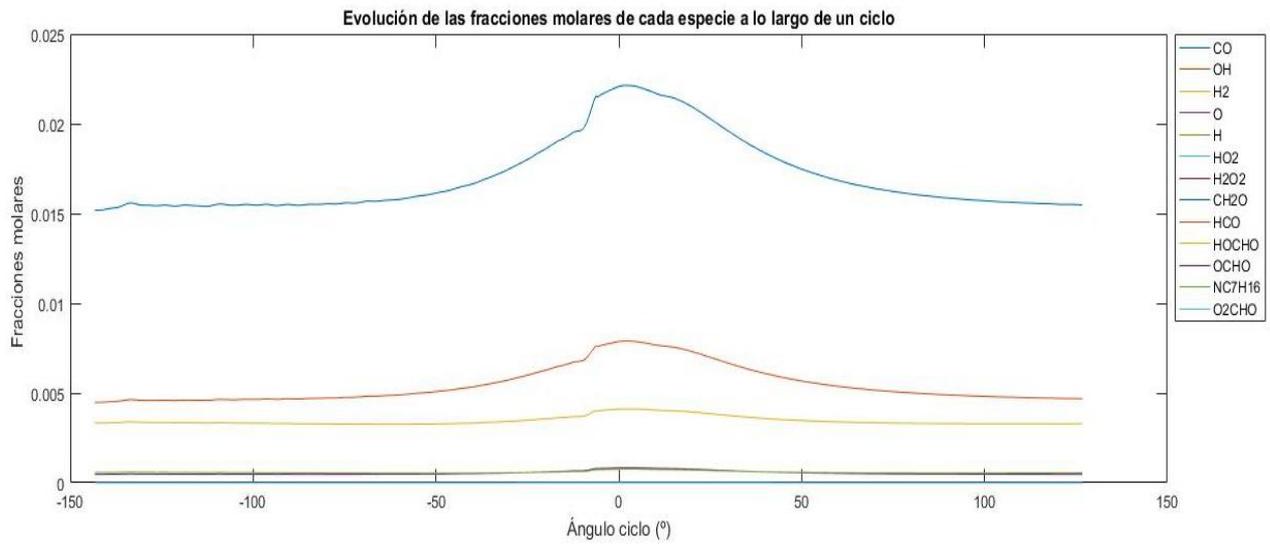


Figura 15: Fracciones molares del ensayo a baja carga

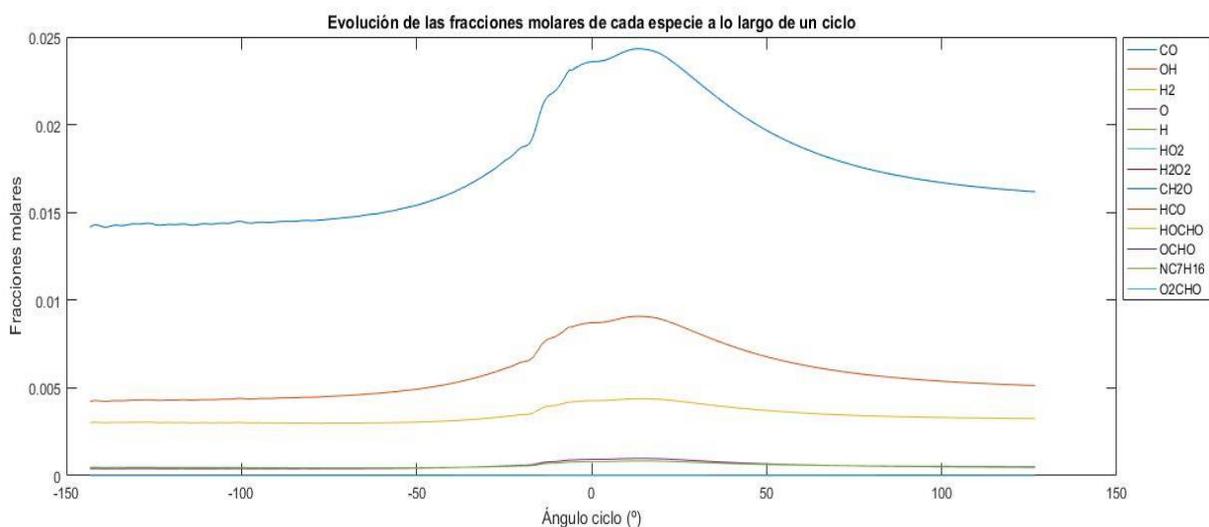


Figura 16: Fracciones molares del ensayo a alta carga

Nótese que las fracciones molares obtenidos del primer paso son mayores en la expansión que en la compresión. Esto es debido a que, en un ciclo, para una misma temperatura sin quemar se tienen dos puntos a distintas presiones. Como se observa en la Figura 17, el punto A y B están situados a la misma temperatura, pero tienen distinta presión. El punto A está situado a mayor presión, por tanto, hay menos disociación que en el punto B.

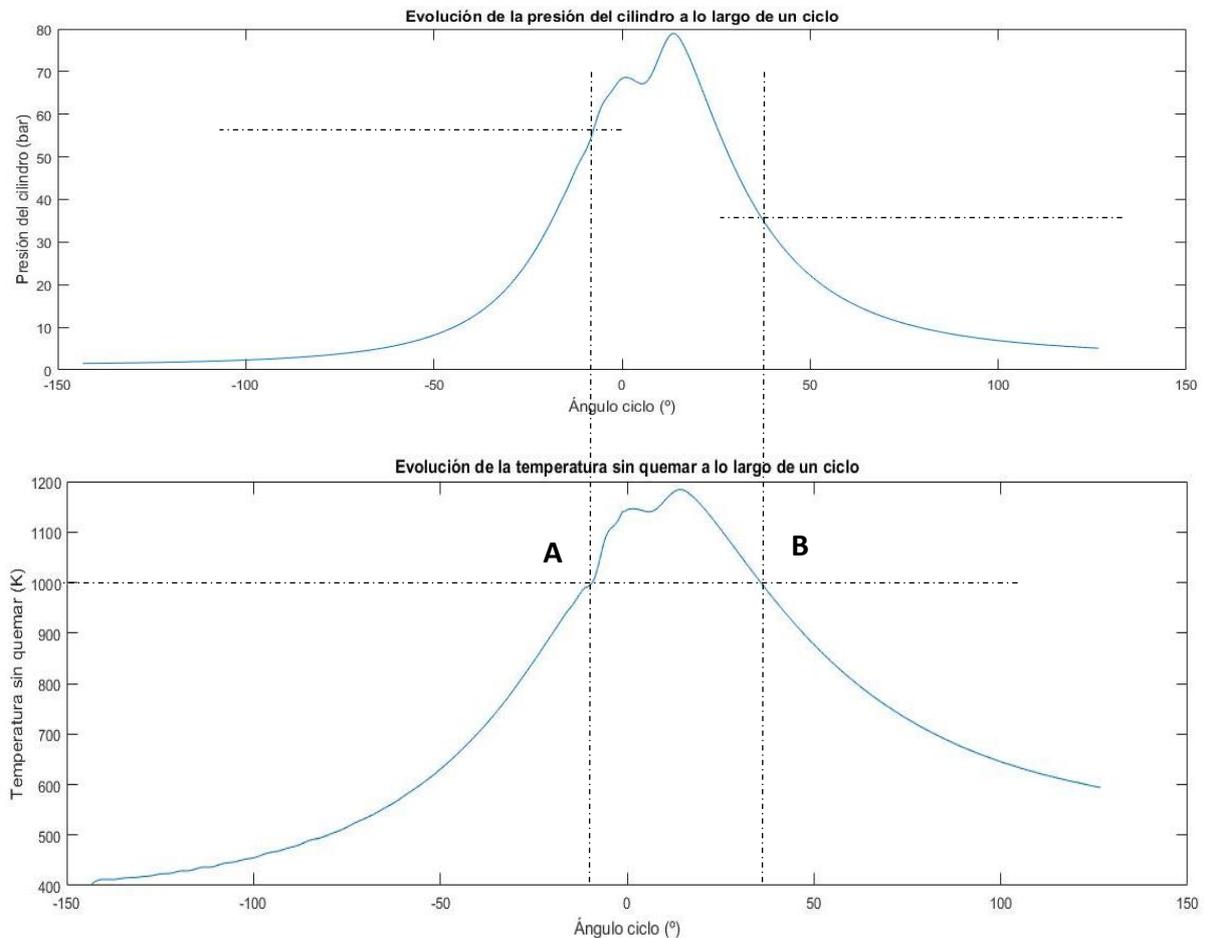


Figura 17: Evolución de la presión y temperatura sin quemar a lo largo del ciclo

Una vez finalizado ambos pasos se calculan las entalpías de los reactivos y productos. En las Figuras 15 y 16 se observan dichas entalpías para el ensayo de baja carga y de alta carga, respectivamente.

Dicha Figura 17 también se utilizará para justificar la aparición de un comportamiento inesperado en las entalpías de productos de las Figuras 18 y 19.

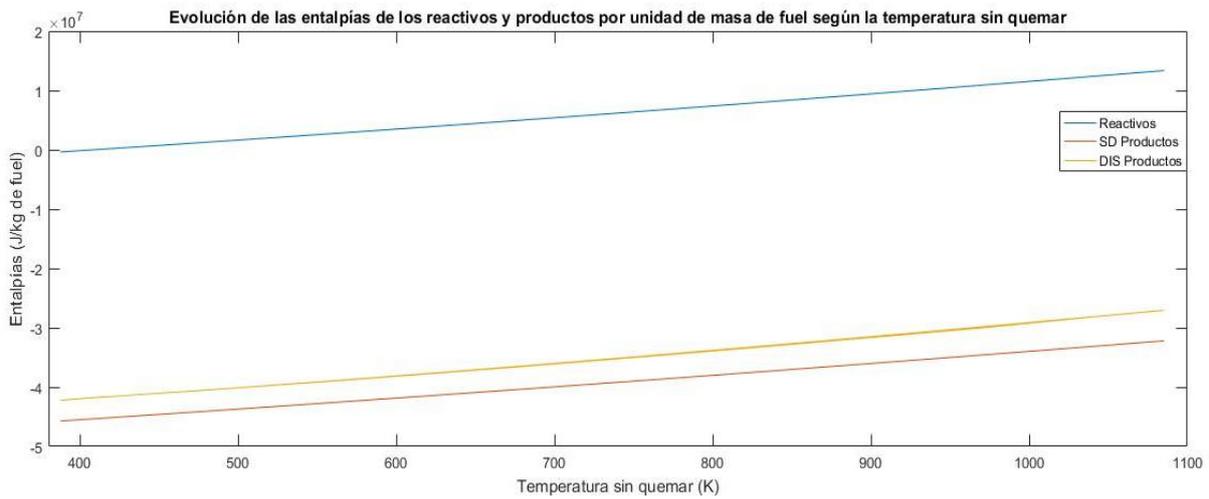


Figura 18: Entalpías de reactivos y productos de DIS del ensayo a baja carga

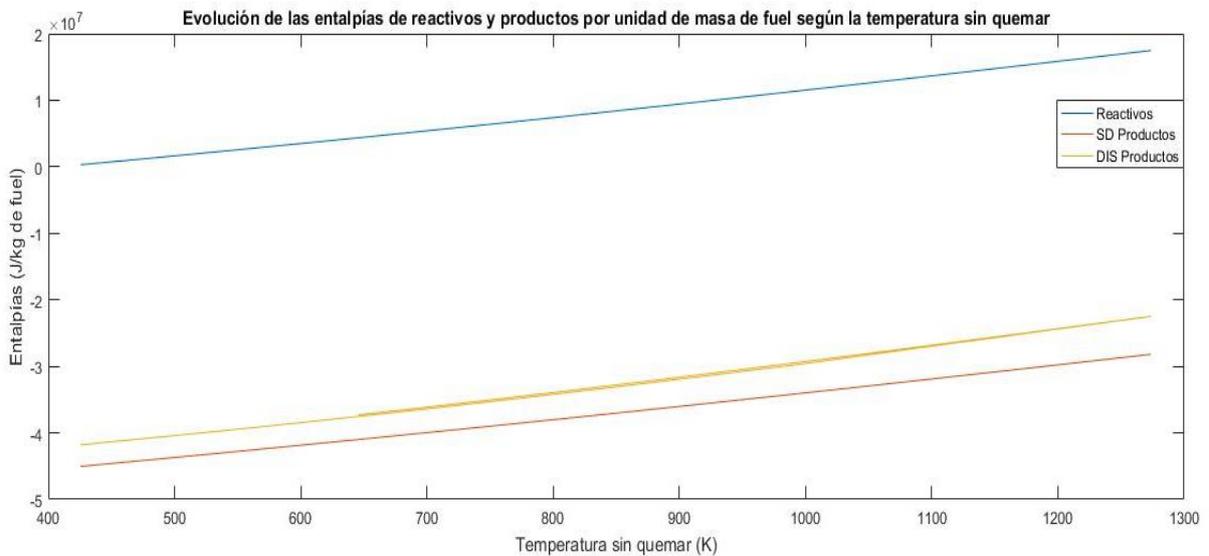


Figura 19: Entalpías de reactivos y productos de DIS del ensayo a alta carga

Si se hace una pequeña ampliación, como se observa en la Figura 20, en las entalpías de los productos de cada ensayo se puede observar un comportamiento inesperado. Esto sucede por el mismo motivo comentado anteriormente: dos puntos distintos situados en distintos ángulos y a una misma temperatura, se observa que el punto situado en la etapa de compresión tiene mayor presión, por tanto, menos disociación. Como ya se ha comentado anteriormente en el Apartado 3.1, en una reacción con menor disociación se obtiene una entalpía de reacción mayor.

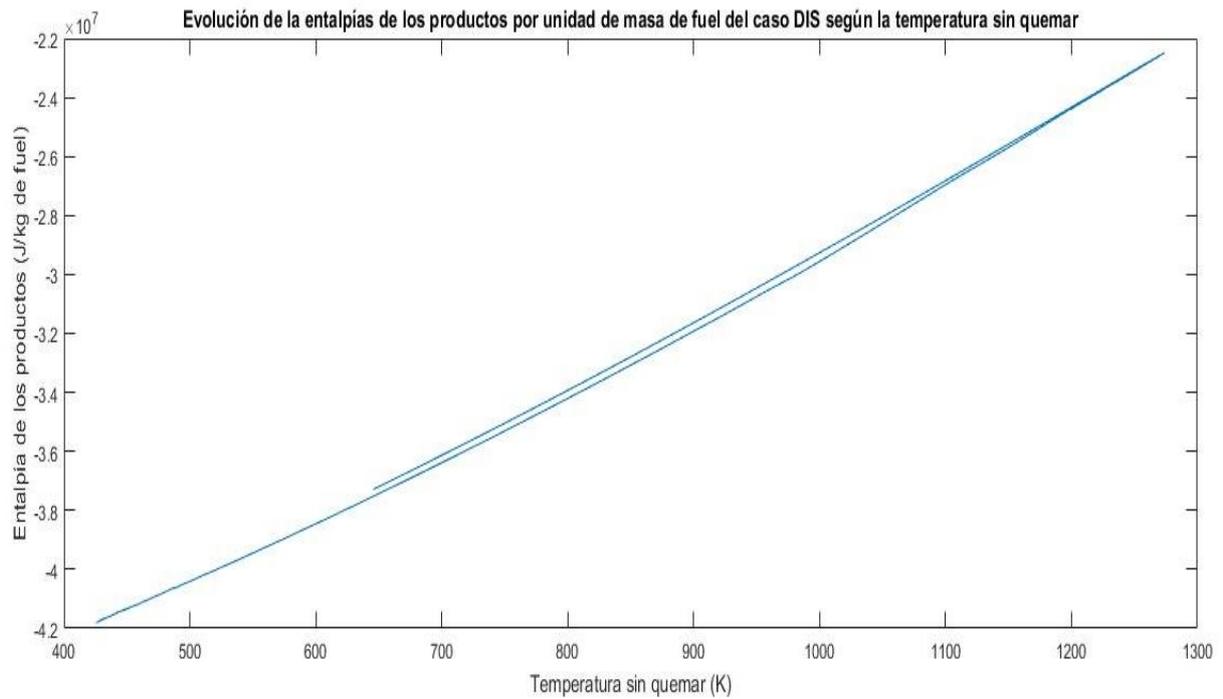


Figura 20: Entalpía de los productos del caso DIS

Una vez halladas dichas entalpías, se calculan las entalpías de reacción de cada ensayo mediante la fórmula (4.1).

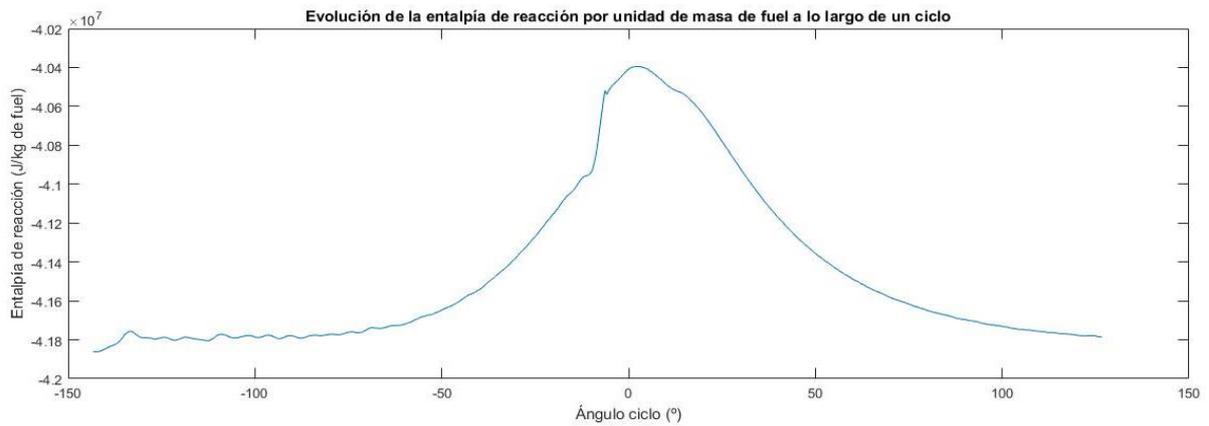


Figura 21: Entalpía de reacción caso DIS del ensayo a baja carga

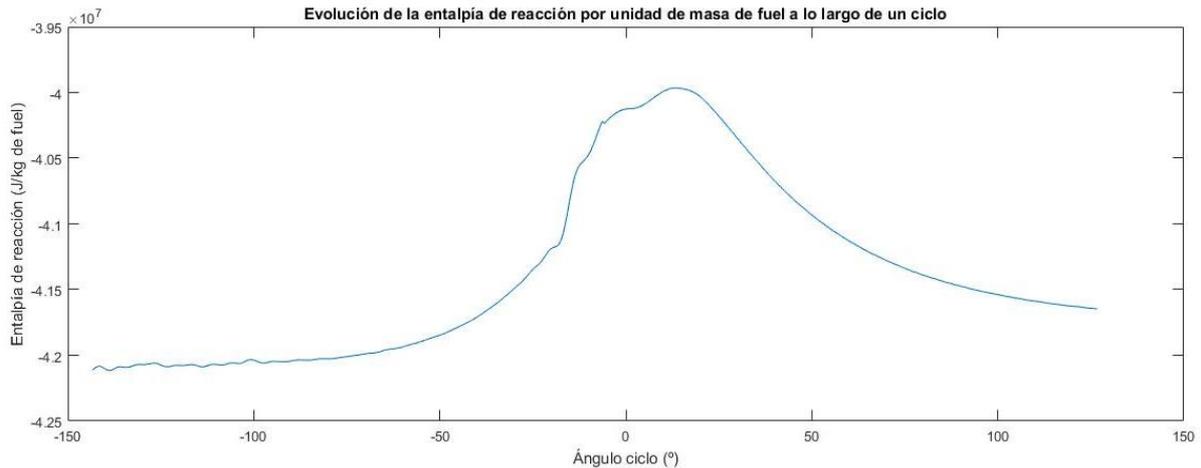


Figura 22: Entalpía de reacción caso DIS del ensayo a alta carga

Se observa que en la Figura 21, correspondiente al ensayo de baja carga, la variación del poder calorífico es de un 3.62% mientras que en la Figura 22, correspondiente al ensayo de alta carga, es de un 5.37%. La diferencia principal entre ambas variaciones se debe al efecto combinado de la temperatura sin quemar y la presión utilizadas en cada ensayo.

La forma correspondiente a las Figuras 21 y 22, a diferencia de la mostrada en las Figuras 12 y 13, refleja una disminución en el valor absoluto de la entalpía de reacción a lo largo de un ciclo. Esto se debe al calor de reacción que impide a la propia reacción de combustión liberar toda la energía que en condiciones sin disociación sería capaz de liberar.

Si se comparan las entalpías de reacción de ambos ensayos con el caso de la reacción sin disociación, y cuantificando dicha diferencia, se observa la influencia de la disociación a lo largo de un ciclo, concretamente de una composición a la temperatura adiabática tal como se muestra en las Figuras 23 y 24.

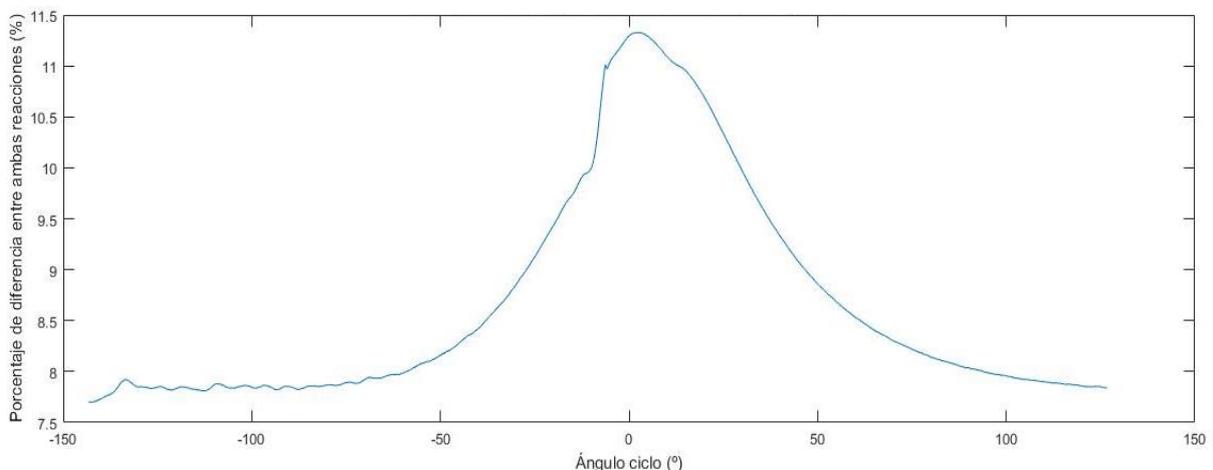


Figura 23: Diferencia entre SD y DIS del ensayo a baja carga

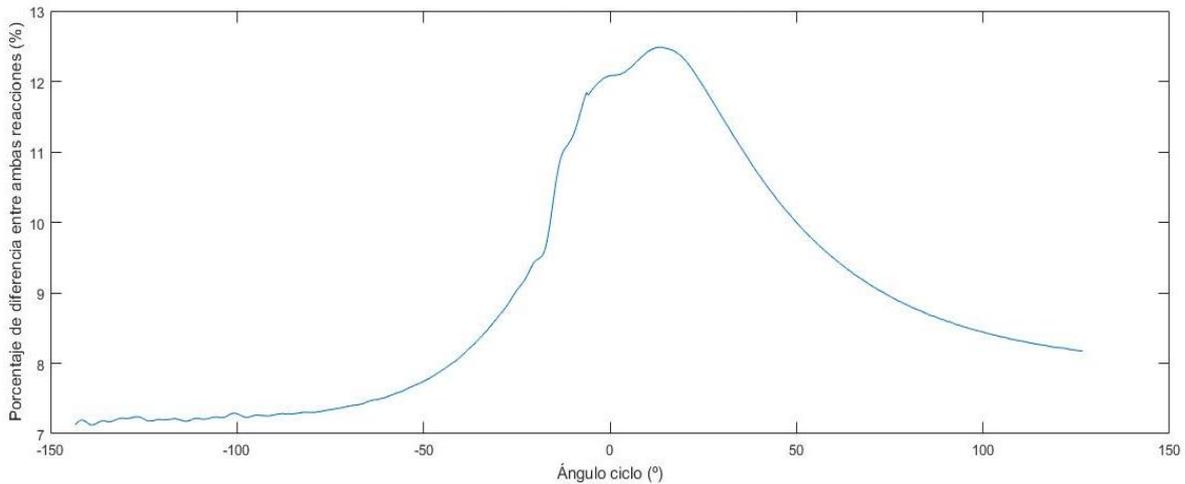


Figura 24: Diferencia entre SD y DIS del ensayo a alta carga

En el ensayo de baja carga, se observa una diferencia mínima del 7.7% y una máxima de 11.33%. Mientras que, en el ensayo de alta carga, correspondiente a la Figura 24, se muestra una diferencia mínima del 7.17% y una máxima del 12.48%.

Se puede concluir, que en el ensayo a alta carga la influencia de la disociación es mayor debido a que la temperatura sin quemar máxima es mayor que en el ensayo de baja carga. Esto conlleva que la temperatura adiabática sea mayor y, por tanto, que haya más disociación.

4.3. Reacción con disociación y composición a la temperatura de escape.

Por último, siguiendo el mismo método que en la reacción anterior, se procede a calcular las entalpías de la reacción con disociación y composición a la temperatura de escape.

Una vez calculadas, se hará una comparación entre dicha reacción y la reacción sin disociación anteriormente analizada para poder observar la diferencia entre ambas y ver el efecto de la disociación.

En este apartado no se ha realizado un estudio preliminar concreto ya que dicho estudio es idéntico al ya realizado en la reacción anterior. Además, el punto correspondiente a la temperatura de escape para esta reacción se encuentra dentro del rango de temperaturas considerado en el caso anterior (Figura 11), por lo que su explicación sería redundante.

Cabe destacar que se utilizará la abreviatura “ESC” para referirse a una reacción con disociación y composición a la temperatura de escape con el fin de simplificar el texto y las gráficas.

4.3.1. Estudio de un ciclo real

El siguiente estudio se puede dividir en dos pasos.

En primer lugar, partiendo de un estado inicial al igual que en las reacciones anteriores, se produce un calentamiento hasta el punto correspondiente al escape.

En dicho punto, se conocen la temperatura de escape y la presión de escape para los ensayos a baja y alta carga, como se muestra en la siguiente tabla.

	Temperatura de escape (K)	Presión de escape (atm)
Ensayo a baja carga (2000_2)	717.08	2.842
Ensayo a alta carga (2000_20)	1339.68	10.035

Tabla 3: Valores de temperatura y presión de escape

Una vez hallados los valores de la Tabla 3, se produce una combustión isoterma a partir de los reactivos anteriormente comentados (fuel, oxígeno y nitrógeno) en las condiciones del punto de escape. Así, se obtiene una serie de productos disociados que son de gran utilidad para el siguiente paso.

Productos disociados	Fracción molar
H ₂	1.7067e-06
O ₂	1.245e-21
H ₂ O	0.14322
N ₂	0.7315
CO	1.8592e-07
CO ₂	0.12532

Tabla 4: Composición de productos obtenidos a T^a de escape en un ensayo a baja carga

Productos disociados	Fracción molar
H	1.258e-09
H ₂	3.8494e-06
O	2.212e-10
O ₂	3.9948e-06
OH	8.7887e-07
H ₂ O	0.14322
N ₂	0.73145
HO ₂	3.3607e-11
H ₂ O ₂	6.441e-11
CO	6.4719e-06
CO ₂	0.12531
HOCHO	4.4396e-12

Tabla 5: Composición de productos obtenidos a T^a de escape en un ensayo a alta carga

Como se puede observar en las Tablas 4 y 5, predominan las fracciones molares de H₂O, N₂, y CO₂ en ambos ensayos. La predominancia de dichos elementos se constata por el hecho de que, en toda reacción de combustión, se obtienen como productos al menos H₂O, N₂ y CO₂. Se puede observar en la ecuación (3.1). Además, cabe destacar que las fracciones molares de los productos disociados son muy pequeños en estas condiciones.

Para llevar a cabo el segundo paso de la reacción, se utiliza: temperatura sin quemar, presión del cilindro y las fracciones molares de los productos hallados en el primer paso. Con ello, se obtienen las entalpías de reactivos y productos que se muestran en las Figuras 25 y 26.

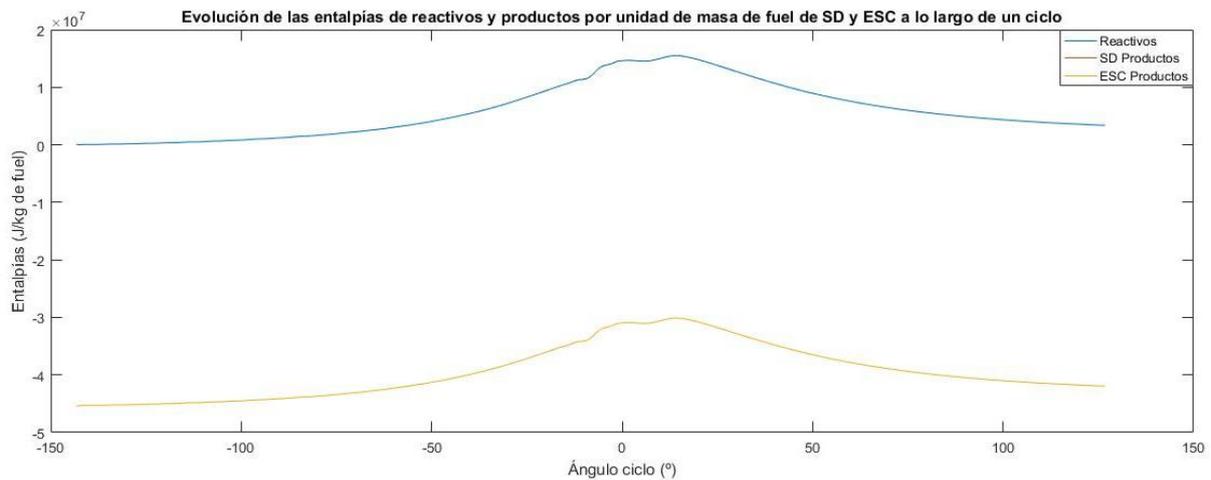


Figura 25: Entalpías de reactivos y productos de ESC del ensayo a baja carga

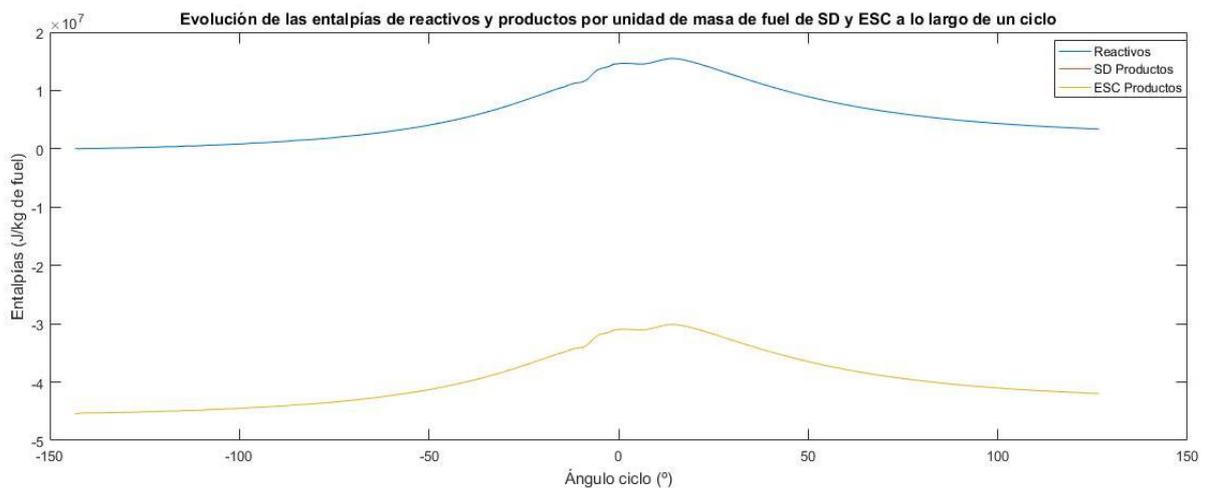


Figura 26: Entalpías de reactivos y productos de ESC del ensayo a alta carga

Como cabe esperar, dada la poca diferencia existente entre los productos de una reacción sin disociación y la reacción que se está analizando en este apartado, las entalpías de reacción son muy similares, tal y como se observa en las siguientes figuras.

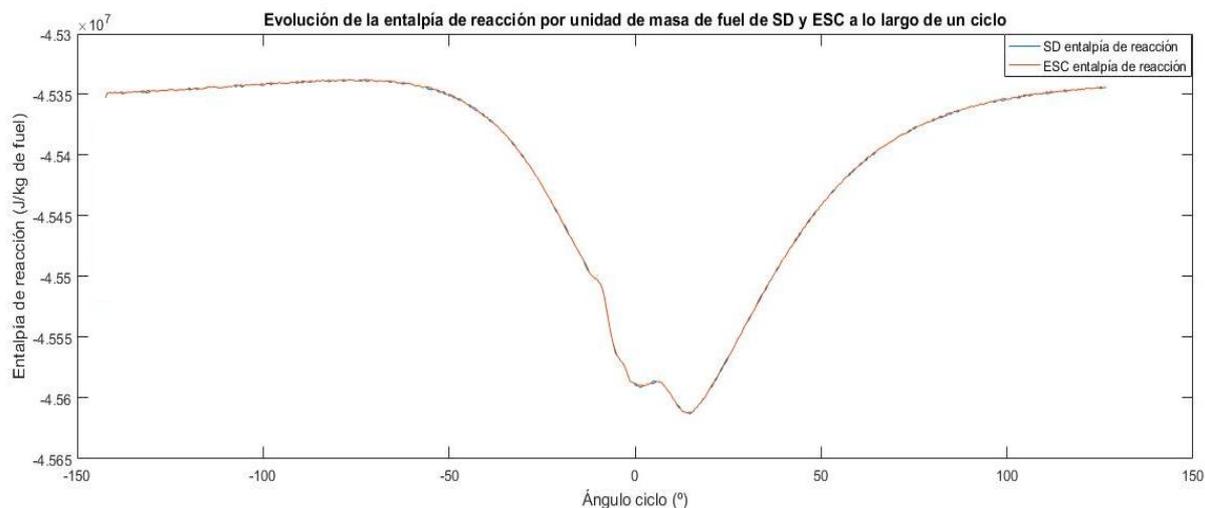


Figura 27: Entalpía de reacción caso ESC del ensayo a baja carga

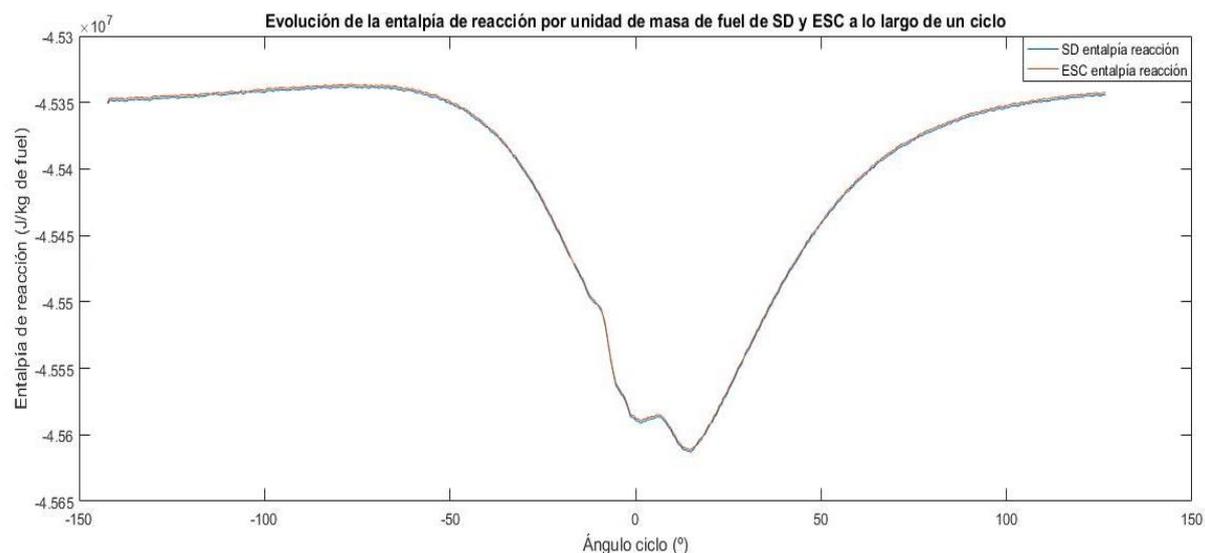


Figura 28: Entalpía de reacción caso ESC del ensayo a alta carga

Tal y como se observa, ambas figuras son muy similares. Cabe destacar que, partiendo de los mismos reactivos que en las reacciones anteriores, las entalpías de los productos ESC son muy similares a las obtenidas en la reacción sin disociación (SD). Esto se debe a la baja disociación presente en el proceso realizado a la temperatura de escape. Cuantificando esa diferencia entre ambas, se observa que es tan solo de un 0.0035%.

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

5.1. Análisis del trabajo y conclusiones

Durante todo el trabajo presente se han ido comentando las conclusiones extraídas con ayuda de los gráficos obtenidos en cada apartado. No obstante, en este apartado se procede a hacer un resumen:

- La variación del calor de reacción en una reacción de un solo paso desplazada a productos a lo largo de un ciclo es del 0.48% en el ensayo de baja carga y del 0.72% en el ensayo de alta carga.
- Teniendo en cuenta la disociación y asumiendo que se utilizan como productos los obtenidos a partir de una combustión adiabática, la diferencia a lo largo de un ciclo es entre un 3.62% para el ensayo de baja carga y de un 5.37% para el ensayo de alta carga.
- Si en lugar de tomar como productos de la reacción los obtenidos en un proceso adiabático, se utilizan los obtenidos a las condiciones de escape, la diferencia a lo largo de un ciclo para un ensayo a baja y alta carga es de un 0.0035%.
- Comparando el primer y segundo punto, se obtienen diferencias en el calor de reacción entre 7.7% y un 11.33% para el ensayo de baja carga, y entre un 7.17% y un 12.48% para el ensayo a alta carga. Sin embargo, si se comparan el primero y el tercero, la diferencia es despreciable.

5.2. Trabajos futuros

Como posibles trabajos futuros, resultaría interesante realizar los mismos ensayos que los llevados en este proyecto utilizando gasolina como combustible para poder evaluar las diferencias entre ambos hidrocarburos. Asimismo, resultaría también interesante repetir este mismo proyecto utilizando el software CFD mediante el cual podrían obtener resultados espaciales y temporales.

CAPÍTULO 6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] 'Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics,' R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller, *Sandia Report*, SAND89-8009B (1995).
- [2] 'Evaluation of swirl effect on the Global Energy Balance of a HSDI Diesel engine', Jesús Benajes, Pablo Olmeda, Jaime Martín, Diego Blanco-Cavero and Alok Warey, *Article*, CMT-Motores Térmicos, Universitat Politècnica de València (2017).
- [3] 'Modelado de la formación y emisión de contaminantes en sistemas de combustión', Juan José Hernández Adrover, *Tesis doctoral* (2001).
- [4] 'Estequiometría: Ecuaciones químicas', [En línea], Departamento de Química Orgánica en la Universidad de Valladolid, <http://www.eis.uva.es/~qgintro/esteq/esteq.html> .
- [5] 'Equilibrio químico', [En línea], Instituto Nacional de Tecnologías Educativas y de Formación del Profesorado, http://fresno.pntic.mec.es/~fgutie6/quimica2/ArchivosHTML/Teo_2_princ.htm .
- [6] 'Química: Disociación', [En línea], Facultad de Ciencias Médicas en la Universidad de Guayaquil http://quimicacursodenivelacion.blogspot.com.es/p/blog-page_18.html .
- [7] 'Equilibrio químico: Guía para principiantes', [En línea], McGraw-Hill Education, *Recursos Educativos* <http://assets.mheducation.es/bcv/guide/capitulo/8448157133.pdf> .
- [8] 'Sorpaso histórico de los coches de gasolina a los Diésel', [En línea], *Economía Digital*, <https://www.economiadigital.es/directivos-y-empresas/ventas-coches-gasolina>
- [9] 'An introduction to combustion', Stephen R. Turns, *Propulsion Engineering Research Center and Department of Mechanical and Nuclear Engineering*, Mc Graw Hill (2000).

CAPÍTULO 7. PRESUPUESTO

7.1. Introducción al presupuesto

En este capítulo se va a realizar el análisis de los costes de estudio con el fin de analizar el comportamiento del poder calorífico en un motor Diesel ante la disociación.

Para el cálculo del presupuesto se han considerado, por una parte, los costes asociados a la mano de obra necesaria para realizar el proyecto y, por otra parte, el coste derivado del software utilizado.

Cabe destacar que en este presupuesto no se tiene en cuenta los costes relativos a las salas de ensayo puesto que ya se consideran amortizados por el departamento. Por tanto, los costes directos complementarios como el suministro de combustible, seguridad, etc. no se verán incluidos.

7.2. Presupuesto mano de obra

Para la elaboración del presupuesto de la mano de obra se ha supuesto el trabajo de una Ingeniera Industrial, cuyos honorarios se han estimado en 18 €/h. Este valor se ha estimado en base al sueldo medio de un Ingeniero Industrial recién graduado en la actualidad. Para el sueldo del supervisor, el encargado de obtener los datos experimentales, supervisar y orientar al alumno, se ha tenido en cuenta un sueldo de Ingeniero Industrial Senior, cuyos honorarios se han estimado en 50 €/h. Por último, como director de proyecto un Ingeniero Industrial y Doctorado por la Universidad Politécnica de Valencia, se ha estimado un sueldo de 100 €/h. Por tanto, el cuadro de mano de obra queda:

Código	Ud.	Descripción	Precio	Rdto.	Total
MO.II	h	Ingeniera Industrial	18 €	300	5400 €
MO.SUP	h	Ingeniero Industrial Senior	50 €	50	2500 €
MO.DIR	h	Doctor Ingeniero Industrial	100 €	20	2000 €
Precio total					9900 €

Tabla 6: Presupuesto mano de obra

7.3. Presupuesto de materiales y equipos

En cuanto a materiales y equipos, se han utilizado principalmente dos softwares, uno de los cuales, Calmec, tiene un coste de 0 euros. Esto se debe a que es una herramienta propia del CMT Motores Térmicos por lo que no ha supuesto ningún coste. Sin embargo, la herramienta Chemkin

supone un coste de 5500 € al año. Por otra parte, se ha estimado que el ordenador portátil tiene un rendimiento igual a la unidad ya que se ha considerado totalmente amortizado. Por lo tanto, el cuadro de materiales y equipos queda:

Código	Ud.	Descripción	Precio	Rdto.	Total
MME.CAL	h	Software Calmec	0 €	1	0 €
MME.CHE	h	Software Chemkin	0.628 €	240	150.72 €
MME.MAT	h	Software matemático Matlab R2016b	0.57 €	240	136.8 €
MME.OFF	h	Licencia educacional Microsoft Office proporcionada por la UPV	0 €	1	0 €
MME.ORD	u	Ordenador portátil Packard Bell	572 €	1	572 €
Precio total					859.52 €

Tabla 7: Presupuesto materiales y equipos

7.4. Presupuestos totales del proyecto

En último lugar, se presentan los presupuestos de ejecución material, el presupuesto total de ejecución del proyecto y su presupuesto base de licitación.

Descripción	Precio
Total de mano de obra	9900 €
Total de materiales y equipos	859.52 €
Costes indirectos (1%)	107.59 €
Presupuesto de ejecución material	10867.11 €

Tabla 8: Presupuesto de ejecución material

Descripción	Precio
Presupuesto de ejecución material	10867.11 €
Beneficio industrial (6%)	652.03 €
Gastos generales (12%)	1304.06 €
Presupuesto total de ejecución	12823.19 €

Tabla 9: Presupuesto total de ejecución

Descripción	Precio
Presupuesto total de ejecución	12823.19 €
IVA (21%)	2692.87 €
Presupuesto base licitación	15516.06 €

Tabla 10: Presupuesto base licitación

Por tanto, el presupuesto final del proyecto es de QUINCE MIL QUINIENTOS DIECISÉIS EUROS CON SEIS CÉNTIMOS.