

## Análisis y modelado de motores tipo HCCI usando biocombustibles

### Analysis and modeling of HCCI type engines using biofuels

PRINCE-AVELINO, Juan C†\*, OVANDO-CHACÓN, Guillermo y RODRÍGUEZ-LEÓN, Abelardo

*Instituto Tecnológico de Veracruz, M. A. de Quevedo 2779, Veracruz, Ver., C.P. 91857, México*

ID 1<sup>er</sup> Autor: Juan C., Prince-Avelino/ ORC ID: 0000-0002-1056-2272, CVU CONACYT ID: 9650

ID 1<sup>er</sup> Coautor: Guillermo, Ovando-Chacón / ORC ID: 0000-0003-2441-3021, CVU CONACYT ID: 43814

ID 2<sup>do</sup> Coautor: Abelardo, Rodríguez-León / ORC ID: 0000-0002-2179-4837, CVU CONACYT ID: 222277

Recibido Octubre 7, 2018; Aceptado Diciembre 3, 2018

#### Resumen

En el presente trabajo de investigación se describe la importancia del motor de combustión interna de carga homogénea encendida por compresión (HCCI), así como su eficiencia energética asociada a una menor generación de contaminantes. Se presenta su modelado y simulación numérica para el proceso de ignición de mezclas de biocombustibles con aire. Uno de los objetivos de esta investigación radica en aplicar mecanismos de reacción reducidos de estas mezclas de combustibles para posteriormente probar su efectividad al implementarlos en un software basado en el método de los elementos finitos. El uso de mecanismos reducidos en lugar de mecanismos detallados de los combustibles permitirá que futuras simulaciones más complejas de motores tipo HCCI se puedan realizar sin requerir equipos de cómputo tan sofisticados. Para el modelo numérico, las ecuaciones de masa y energía con generación de calor debido a la ignición fueron incluidas. Los resultados de la simulación muestran que la auto-ignición de la mezcla depende de su temperatura de entrada a la cámara de combustión. Objetivos: Obtener mecanismo reducido de biocombustible para su uso en modelado de motores. Metodología: Análisis Computacional Contribución: Energía sustentable

#### Motores HCCI, Eficiencia energética, Disminución de Contaminantes

#### Abstract

This research paper describes the importance of the internal combustion engine of homogeneous charge ignited by compression (HCCI), its energy efficiency associated with a lower generation of pollutants, as well as its modeling and numerical simulation for the process of ignition of mixtures of propanol / air and n-butanol / air. One of the objectives of this research is to apply reduced reaction mechanisms of these fuel mixtures to later test their effectiveness by implementing them in software based on the finite element method. The use of reduced mechanisms instead of detailed fuel mechanisms will allow future more complex simulations of HCCI-type engines to be carried out without requiring such sophisticated computer equipment. For the numerical model, mass and energy equations with heat generation due to ignition were included. The results of the simulation show that the auto-ignition of the mixture depends on its temperature of entrance to the combustion chamber. Objectives: Obtain a reduced mechanism for biofuel for its use on engine modeling. Methodology: Computational analysis Contribution: Sustainable energy

#### HCCI engines, energy efficiency, pollution control

**Citación:** PRINCE-AVELINO, Juan C, OVANDO-CHACÓN, Guillermo y RODRÍGUEZ-LEÓN, Abelardo. Análisis y modelado de motores tipo HCCI usando biocombustibles. Revista de Sistemas Experimentales 2018, 5-17: 26-35

\*Correspondencia al Autor (Correo electrónico: cpa@itver.edu.mx)

†Investigador contribuyendo como primer autor.

## Introducción

Los motores de combustión interna son las principales fuentes de energía en vehículos de transporte, barcos marinos, equipos de construcción y maquinarias agrícolas, entre otros. Estos motores consumen grandes cantidades de combustible para producir energía y emiten gases venenosos o dañinos, que incluyen CO, hidrocarburos no quemados (HC), óxidos de nitrógeno (NOx), partículas de hollín (PM) y CO<sub>2</sub> [1].

En las últimas dos décadas, investigaciones a nivel mundial en las industrias del motor y del automóvil se han dedicado a encontrar una mayor eficiencia del combustible y menores emisiones, así como el desarrollo de combustibles alternativos renovables debido a la cantidad finita de combustibles fósiles. Las tecnologías de reducción de emisiones han mejorado los índices de contaminantes, pero el gasto de combustible no ha sido más económico. Como resultado, la eficiencia térmica de motores no ha mejorado significativamente a pesar de los rápidos avances de la industria automotriz y los campos de ingeniería de fabricación. Esta situación agrava la escasez de combustibles para vehículos y aumenta las emisiones de gases de efecto invernadero.

Entonces, la mejora de la utilización de la energía que minimiza todos los tipos de contaminantes se ha convertido en un objetivo clave científico en el campo de los motores de combustión interna [1]. Además, debido a las crecientes preocupaciones sobre el efecto invernadero en los últimos años, varios gobiernos y organizaciones han introducido estándares legislativos imperativos de economía de combustible.

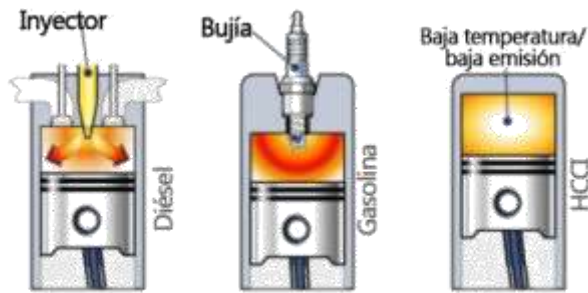
Algunos investigadores han indicado que el ahorro de combustible de los motores de pistón tradicionales tiene el potencial para una mejora adicional en un 25% o más (mientras que reduce las emisiones dañinas a aproximadamente cero), mediante la innovación con tecnología avanzada de combustión.

Los investigadores han prestado gran atención a los modos de combustión avanzada. Entre éstos, el motor de ignición por compresión de carga homogénea (HCCI, por sus siglas en inglés: Homogeneous Charge Compression Ignition) [2], y los modos de combustión de baja temperatura se presentan como posibilidades para el uso en motores de encendido por compresión. Debido a sus emisiones extremadamente bajas de NOx y hollín, así como a su eficiencia térmica relativamente alta, estos ejemplos se reconocen comúnmente como modos de combustión de próxima generación separados de los modos de combustión de encendido por chispa (SI) y de encendido por compresión por inyección directa (DICI). El concepto inicial de la combustión HCCI se basa en una combinación de las ventajas de los motores SI y DICI, evitando al mismo tiempo sus desventajas. De los primeros utilizan el tipo de mezcla del combustible, y de los segundos, el tipo de encendido. Son una alternativa a los motores convencionales, particularmente cuando en los motores diesel no se logran mezclas homogéneas en detrimento del proceso de combustión. Los motores HCCI utilizan combustibles flexibles y pueden funcionar con bajo grado de combustible siempre y cuando se llegue al punto de ignición del combustible, lográndose temperaturas más bajas para disminuir la generación de contaminantes del tipo NOx [2].

Este modo de combustión funciona con una mezcla mixta más diluida, pero que se enciende automáticamente cerca del PMS (punto muerto superior) por compresión del pistón. La formación de PM y NOx se minimiza controlando tanto la temperatura global como la temperatura local en el cilindro.

Como ya se indicó, el principal objetivo de la combustión HCCI es la combinación de las ventajas de los motores SI y DICI y la prevención de desventajas [3]. Un motor convencional de SI emplea un combustible homogéneo/aire que se mezcla en el orificio de admisión y luego se somete a compresión por inducción. La carga del motor se controla al ajustar la mezcla de combustible/aire y se enciende por descarga de chispa. Eso presenta emisiones extremadamente bajas de hollín.

En contraste, un motor DICI tradicional emplea una mezcla heterogénea de combustible/aire. Se inyecta combustible en la cámara de combustión cerca del PMS, que luego se enciende automáticamente después de un corto tiempo de atraso. Por lo tanto, hay menos pérdida de bombeo, y la alta relación de compresión genera una mayor eficiencia energética; sin embargo, las desventajas de este método son los altos niveles de NOx y Hollín y la relación de compensación.



**Figura 1** Ilustración del proceso de combustión dentro de un motor HCCI

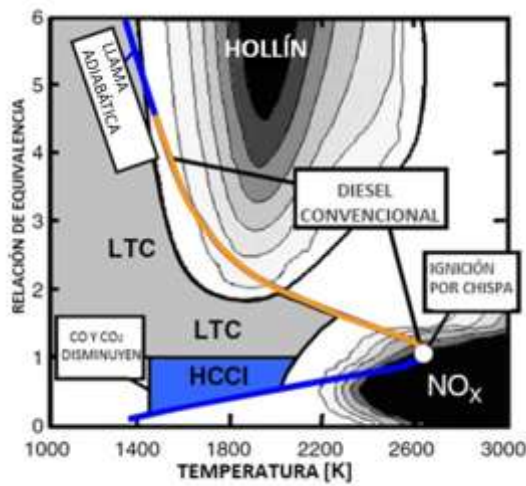
Fuente: *Elaboración Propia*

La combustión HCCI (Fig. 1) se logra controlando la temperatura, presión y composición de la mezcla homogénea de aire/mezcla de combustible para que se autoencienda en múltiples puntos y posteriormente reaccione homogéneamente a medida que es comprimido por el movimiento hacia arriba del pistón. Para una combustión limpia de HCCI, la reacción de liberación de calor es distribuida por toda la cámara de combustión sin propagación de llama y por las zonas de alta temperatura o zonas ricas en combustible. Dando como resultado, una mezcla uniforme y un promedio de baja producción de NOx y PM [2]. En este modo de combustión, la temperatura de la mezcla es el parámetro más importante, y desempeña un papel significativo, determinando las características de combustión y las emisiones por muchas razones. En primer lugar, la reacción química de alta temperatura o auto ignición ocurre solo si la temperatura de la mezcla excede la auto ignición límite. Segundo, idealmente la temperatura máxima de combustión debe superar los 1500°K para garantizar la Oxidación de CO a CO<sub>2</sub>. Por último, la temperatura máxima se mantenga inferior a la temperatura crítica para la formación de NOx.

Como se muestra en la Fig. 1 se crea una mezcla de combustible-aire premezclada en el interior del cilindro que es pobre en combustible, es decir, diluido por exceso de aire, o diluido con gases de escape [3]. La ignición automática de la mezcla ocurre en múltiples puntos calientes, o núcleos de encendido, y el proceso de combustión se produce como una reacción distribuida a baja temperatura, en lugar de como una llama propagándose.

No existe un mecanismo de control de encendido directo en motores HCCI como la chispa en un motor SI o el tiempo de inyección de combustible en un motor de CI y, por lo tanto, la combustión a baja temperatura controla la ignición y tiene una fuerte influencia en la estabilidad del motor. Estrategias de control basadas en la recirculación de gases de escape (EGR), estratificación de combustible y temperatura dentro del cilindro, y otras técnicas están siendo empleadas, el conocimiento adicional de la química de combustión a baja temperatura de los posibles combustibles HCCI, incluidos los biocombustibles, son necesarios para el modelado y diseño de estos dispositivos.

La característica más destacada de los nuevos modos de combustión, como el motor de carga homogénea encendido por compresión (HCCI), y la combustión a baja temperatura (LTC) mostrada en la Fig. 2, es la exigencia de crear una mezcla homogénea o controlable para una mezcla estratificada antes de la ignición [4]. Para ello, se emplea una mezcla de combustible-aire pobre y/o un nivel controlable de recirculación de gases de escape (EGR). La mezcla se somete a un autoencendido controlado cerca de la posición de punto muerto superior (PMS) debido al efecto de compresión del movimiento ascendente del pistón. Cabe señalar que el proceso de combustión carece de un método directo para el control del tiempo de encendido y la velocidad de combustión, que en su lugar son controlados principalmente por la cinética química y, en menor medida, por la turbulencia y la mezcla. Debido a los impactos significativos de las propiedades físico-químicas del combustible en el proceso de ignición y combustión, la fabricación y el procesamiento del combustible se ha convertido en el enfoque más común para el control de la velocidad de combustión y de estimulación del encendido en tales modos de combustión avanzados.



**Figura 2** Diferentes modos de combustión en un diagrama  $\phi$ -T

Fuente: [2] Bergthorson, J. M., & Thomson, M. J. (2015). A review of the combustion and emissions properties of advanced transportation biofuels and their impact on existing and future engines. *Renewable and sustainable energy reviews*, 42, 1393-1417

La combustión HCCI también da como resultado temperaturas de combustión más bajas, lo que reduce las pérdidas de calor en las paredes del cilindro del motor y, por lo tanto, mejora la eficiencia del motor y el kilometraje del vehículo [5]. Una limitación al rendimiento del motor HCCI es el hecho de que la combustión se vuelve inestable bajo condiciones de alta carga, debido a la rápida subida de la presión, que resulta en ruido del motor, golpes y daños potenciales al motor, además que la auto-ignición es difícil de controlar bajo condiciones de baja carga debido a bajas concentraciones de combustible. Una solución para el funcionamiento en condiciones de baja carga, por ejemplo, ralentí del motor, consiste en crear una carga estratificada dentro del cilindro mediante inyección directa para mantener una relación combustible/aire suficiente cerca a la chispa para permitir el encendido. A altas cargas, la dilución de la mezcla de combustible-aire con gases de escape adicionales, ya sea empleando una recirculación de gases de escape externa (EGR) o una distribución variable de válvulas para atrapar el escape dentro del cilindro antes de que el aire sea ingerido, puede limitar la velocidad de liberación de calor y el aumento de la presión para evitar que el motor golpee [6]. Una comparación del motor HCCI con respecto a los motores de gasolina y diésel se encuentra en la Tabla 1.

|   | Motor gasolina inyección indirecta       | Motor Diésel   | Motor HCCI              |
|---|--|--|-------------------------|
| Lugar de formación de la mezcla           | Conducto de admisión                     | Cámara de combustión o en la pre-cámara  | Conducto de admisión    |
| Distribución de la mezcla en el cilindro: | Homogénea                                | Estratificada: rica en torno al punto de inyección, pobre en el resto de la cámara | Homogénea               |
| Proporción de la mezcla:                  | Estequiométrica ( $\phi = 1$ )           | Pobre ( $\phi < 1$ )   | Pobre ( $\phi < 1$ )    |
| Regulación de la carga                    | Cantidad de mezcla (válvula de mariposa) | Cantidad de combustible  | Cantidad de combustible |
| Tipo de Encendido                         | Chispa                                   | Auto-ignición  | Auto-ignición           |
| Presión de inyección                      | Baja                                     | Muy alta   | Baja                    |
| Relación de compresión                    | Entre 8-12 a 1                           | Entre 17-23 a 1  | Entre 20-30 a 1         |

**Tabla 1** Comparación de los modos de combustión tradicionales con la combustión HCCI

Fuente: Elaboración Propia

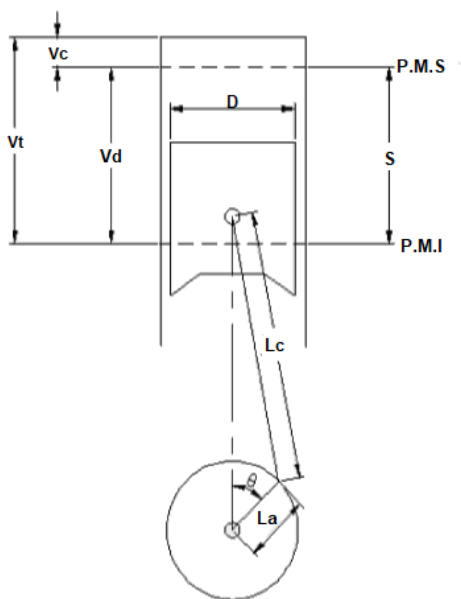
Los estudios de mezclas de bio-combustibles y gasolina en un motor HCCI mostraron que podría tener un fuerte efecto sobre las velocidades de liberación de calor y el tiempo de combustión de la mezcla [6]. También es posible conseguir el control de la ignición en motores HCCI mediante la utilización de dos impulsos de inyección de combustible en el cilindro: la primera inyección está al final de la carrera de escape para reformar el combustible en intermedios reactivos utilizando una llama de combustión a baja temperatura, mientras que el segundo evento de inyección de combustible es durante la carrera de admisión o de compresión.

Parece que un combustible óptimo para un buen funcionamiento de motores HCCI tendría propiedades de auto-ignición entre la de la gasolina y los bio-combustibles [7-8]. Los biocombustibles oxigenados podrían desempeñar un papel como aditivos de control de la ignición. Estos combustibles tendrían que ser de reacciones de oligomerización para controlar la ramificación del combustible, y por lo tanto las propiedades de ignición del combustible. Estos motores de combustión a baja temperatura (HCCI) al usar bio-combustibles han demostrado mejoras en la eficiencia del combustible de aproximadamente un 20% respecto a los motores Diesel y un 40-50% respecto a los motores convencionales de gasolina SI, lo que garantiza nuevos esfuerzos para mejorar el motor de combustión interna como esta tecnología de nueva generación y con el uso de combustibles sustentables [9-12].

### Modelado del motor HCCI

#### Cilindro de combustión, geometría y ecuaciones cinemáticas

El modelo físico representa a un cilindro de combustión con una mezcla homogénea de volumen variable. La Fig. 3 muestra el esquema del cilindro del motor y señala los parámetros relevantes para el cálculo instantáneo del volumen del cilindro.



**Figura 3** Esquema del cilindro de combustión que puede ser expresado como una función del tiempo  
Fuente: *Elaboración Propia*

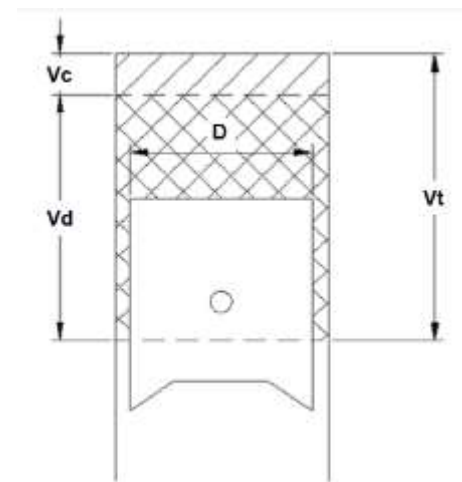
Como lo indica la Fig. 3 los principales parámetros geométricos  $\theta$ ,  $La$  y  $D$ , son el ángulo de la manivela, la longitud del brazo de la manivela y el diámetro del cilindro, respectivamente. Para este cilindro, la relación de compresión se expresa como

$$RC = \frac{Vol.Max.Cilindro}{Vol.Mín.Cilindro} = \frac{V_d + V_c}{V_c} = \frac{V_t}{V_c} \quad (1)$$

En términos de  $RC$  y  $R = Lc/La$ , la relación entre la longitud de la barra conectora y el radio de la manivela, se puede deducir que el cambio del volumen es una función del tiempo descrita por

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

Aquí,  $V$  es el volumen total del cilindro,  $V_c$  el volumen de la cámara de combustión, y  $\theta = 2\pi Nt/60$  es el ángulo de la manivela como una función del tiempo.  $N$  es la velocidad del motor en revoluciones por minuto (rpm) y  $t$  es el tiempo.  $V_d$  es el volumen desalojado por el pistón, también llamado cilindrada, generado por el pistón en su movimiento alternativo desde el Punto Máximo Superior (PMS) hasta el Punto Mínimo Inferior (PMI), durante un ciclo, y se determina como  $V_d = \pi D^2 S/4$ . La Fig. 4 muestra los volúmenes utilizados en las ecuaciones anteriores.



**Figura 4** Volúmenes en el cilindro función de la posición del pistón.

Fuente: *Elaboración Propia*

## Ecuaciones de conservación de masa y energía

Un modelo matemático de un motor que simule todos y cada uno de los fenómenos físicos que suceden en el ciclo de funcionamiento de un motor de combustión interna es muy complejo. Existen en la literatura varios estudios teóricos, que describen las ecuaciones más importantes que gobiernan parcial o totalmente el fenómeno de la formación de la mezcla. Estos modelos utilizados responden a simplificaciones en mayor o menor grado, consecuencia de aplicar unas hipótesis. Para el presente estudio, se consideran ecuaciones de conservación de masa y energía para un sistema homogéneo, que puede ser considerado zero-dimensional. El modelo describe las condiciones volumen-temperatura bajo las cuales la mezcla combustible/aire alcanza un proceso de auto-ignición. Las ecuaciones

$$\frac{d(V_c C_i)}{dt} = V_c R_i \quad (3)$$

$$V_c \sum_i C_i c_{p,i} \frac{dT}{dt} = Q + V_c \frac{dp}{dt} \quad (4)$$

Son las ecuaciones de conservación de masa y energía para una mezcla homogénea, respectivamente.  $C_i$  es la concentración de las especies ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ),  $R_i$  la velocidad de la reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ ),  $c_{p,i}$  Es la capacidad calorífica molar a presión constante de las especies ( $\text{J}/\text{mol}\cdot\text{K}$ ),  $T$  es la temperatura (K),  $p$  es la presión (Pa). En la Ec. (4),  $Q$  es el calor debido a la reacción química ( $\text{J}/\text{s}$ ) es

$$Q = -V_c \sum_j H_j r_j \quad (5)$$

Aquí  $H_j$  es la entalpía de reacción ( $\text{J}/\text{mol}\cdot\text{K}$ ),  $r_j$  es la velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ ).

Para completar el modelo matemático es necesario definir las condiciones iniciales: la mezcla aire/combustible de entrada al motor y correspondientes presión y temperatura de entrada son las condiciones iniciales. En este modelo se utilizarán modelos químicos reducidos de los bio-combustibles n-propanol [13] y n-butanol [14] con aire.

La composición del aire es de 21% de oxígeno y 79% de nitrógeno y, se emplea la relación estequiométrica aire-combustible  $(A/F)_{\text{stoic}} = m_{\text{air}}/m_{\text{fuel}}$ , así como la relación de equivalencia aire-combustible  $\phi = (A/F)_{\text{stoic}}/(A/F)_{\text{real}}$ .

Como ya se indicó, se usaron modelos reducidos de reacciones del n-propanol y del n-butanol, recientemente desarrollados [13-14], que garantizan su aplicación en códigos de CFD, y probados para diferentes datos experimentales de ignición y flamas [17-20]. Para post-proceso de los resultados se emplearon las fracciones molares ( $X_i$ ), estando relacionadas con las concentraciones como como  $C_i = \rho X_i/W_i$  y, donde  $W$  es el peso molecular.

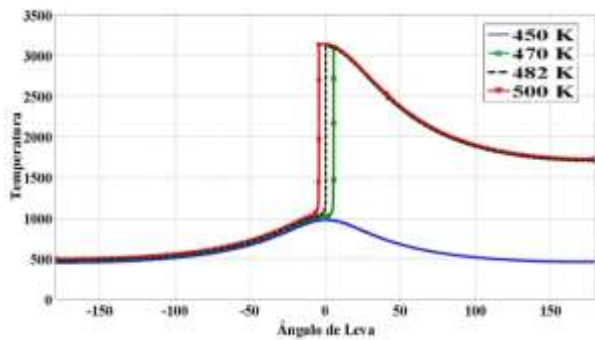
## Procedimiento computacional y resultados

Las ecuaciones (1-4) junto con el mecanismo reducido de n-propanol [13] y n-butanol [14] se implementaron en COMSOL Multiphysics [21], que es un software basado en el método de los elementos finitos (FEM). Este código abarca varios campos de la física como la transferencia de calor, mecánica de fluidos, electromagnetismo y mecánica estructural, resolviendo ecuaciones diferenciales parciales. COMSOL junto con sus librerías, trabaja en conjunto con otros módulos de especialización como COMSOL Script y COMSOL Reaction Engineering Lab. Este último se utilizó para la simulación del motor de combustión tipo HCCI junto con las librerías en formato CHEMKIN del n-propanol y n-butanol. El modelo empleado, zero-dimesional de las Ecs. (3)-(4), se resuelven junto con la ecuaciones cinemáticas del pistón (1)-(2) para acoplar el proceso de combustión al ciclo del motor HCCI. Las especificaciones del motor usadas en el modelo son se muestran en la Tabla 2.

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

**Tabla 2** Especificaciones del motor HCCI en la simulación

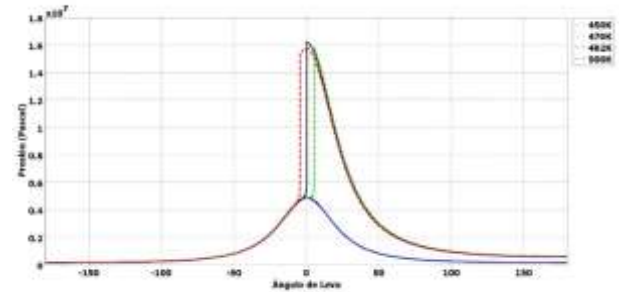
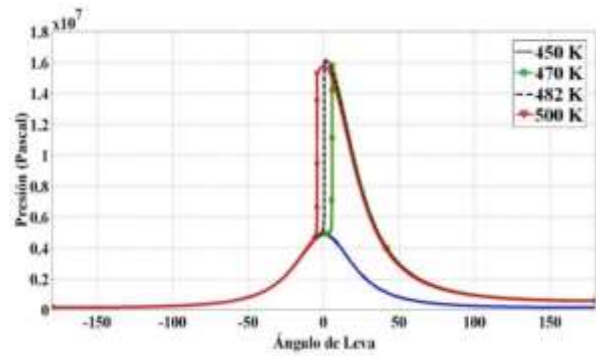
Fuente: Elaboración propia.



**Gráfico 1** Tiempo de ignición del n-propanol para diferentes temperaturas de inicio

Fuente: Elaboración Propia

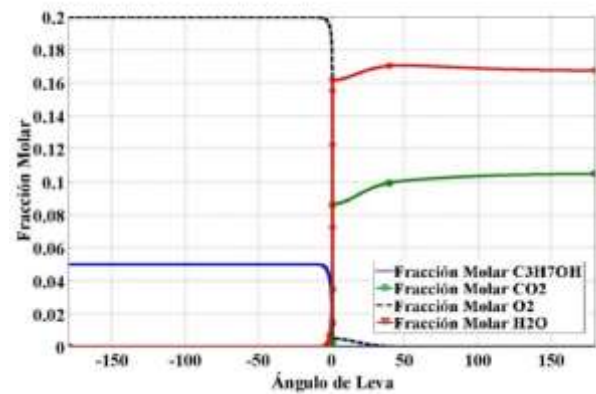
La Gráfica 1 muestra el comportamiento de la temperatura dentro del cilindro del motor en función del ángulo del cigüeñal para diferentes temperaturas de entrada de la mezcla aire/n-propanol al cilindro. Se observa que, para una temperatura de entrada de la mezcla de 450 K, la ignición no ocurre, ya que no se alcanza una temperatura para la auto-ignición. Para una temperatura de entrada de 470 K la ignición ocurre después del PMS, mientras que, para una temperatura de 500 K, la ignición ocurre antes del PMS. Estas condiciones no son deseables en un motor y muestra la importancia de la química de combustión en estos motores. Se encontró que la temperatura óptima de entrada de los reactantes es de 482 K, ocurriendo la auto-ignición exactamente en el PMS. La Gráfica 2 muestra el desarrollo de la presión en función del ángulo de la leva para temperaturas de 450 K, 470 K, 482 K y 500 K.



**Gráfico 2** Presión vs ángulo de leva para diferentes temperaturas de inicio en mezcla aire/n-propanol

Fuente: Elaboración Propia

En la Gráfica 3 se observan las fracciones molares de las principales especies químicas de una combustión en función del tiempo para la temperatura óptima de 482 K, donde se observa el consumo del bio-combustible n-propanol y del oxígeno del aire, mientras que el vapor de agua y el bióxido de carbono son formados a partir del tiempo de la auto-ignición.

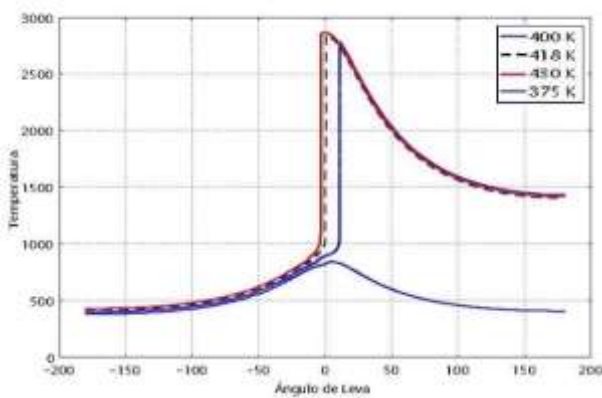


**Gráfico 3** Fracciones molares del n-propanol (C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH), O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub> para una temperatura de inicio de 482 K

Fuente: Elaboración Propia

La Gráfica 4 muestra el comportamiento de la temperatura dentro del cilindro del motor en función del ángulo del cigüeñal para diferentes temperaturas de entrada al cilindro de una mezcla de aire/n-butanol.

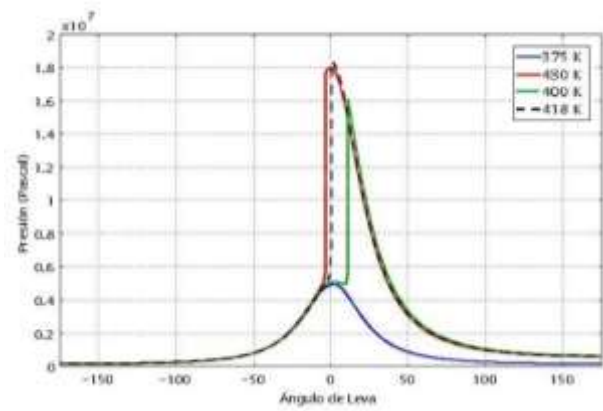
El mecanismo de combustión utilizado ha sido recientemente desarrollado [14] y validado para diferentes condiciones de procesos de combustión, incluyendo ignición a bajas temperaturas ( $T < 1000$  K). Se encontró que la temperatura óptima de entrada de los reactantes es de 418 K, ocurriendo la auto-ignición exactamente en el PMS. En la Gráfica 4 se observan las fracciones molares de las principales especies químicas de una combustión en función del tiempo para la temperatura óptima de 420 K, donde se observa el consumo del bio-combustible n-butanol y del oxígeno del aire, mientras que el vapor de agua y el bióxido de carbono son formados a partir del tiempo de la auto-ignición.



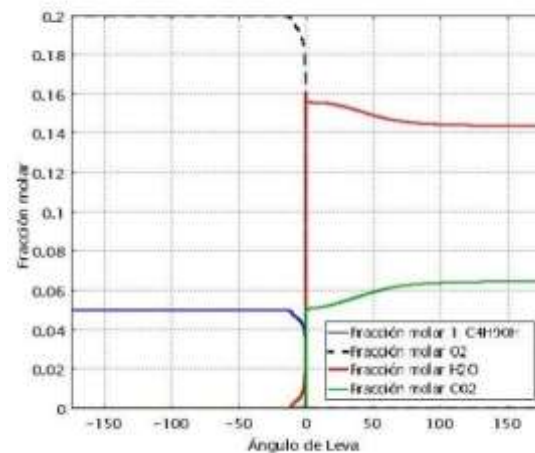
**Gráfico 4** Tiempo de ignición del n-butanol para diferentes temperaturas de inicio  
Fuente: Elaboración Propia

La Gráfica 5 muestra el desarrollo de la presión para la mezcla n-butanol/aire en función del ángulo de la leva para temperaturas de 450 K, 470 K, 482 K y 500 K.

En la Gráfica 6 se observan las fracciones molares de las principales especies químicas de una combustión en función del tiempo para la temperatura óptima de 482 K, donde se observa el consumo del bio-combustible n-butanol y del oxígeno del aire, mientras que el vapor de agua y el bióxido de carbono son formados a partir del tiempo de la auto-ignición.



**Gráfico 5** Presión vs ángulo de leva para diferentes temperaturas de inicio en mezcla aire/n-butanol  
Fuente: Elaboración Propia



**Gráfico 6** Fracciones molares del n-butanol ( $C_4H_9OH$ ),  $O_2$ ,  $H_2O$  y  $CO_2$  para una temperatura de inicio de 482 K  
Fuente: Elaboración Propia

## Conclusiones

Este trabajo permitió realizar una buena aproximación al estudio del desempeño de un motor HCCI operado con mezclas de aire con n-propanol y n-butanol. Haciendo uso del programa COMSOL Multiphysics, se considera la cinemática del pistón dentro de la cámara de combustión y el mecanismo de reacciones químicas de los bio-combustibles n-propanol y n-butanol. A la vez el estudio es simplificado en cuanto se consideró la combustión del n-propanol y n-butanol con mecanismos reducidos, con lo cual se pudo estudiar el efecto real de las reacciones intermediarias sobre la combustión de la mezcla del aire con n-propanol y n-butanol y la influencia de la temperatura de entrada de la mezcla en la auto-ignición.



El modelo implementado permite estudiar el efecto de la temperatura inicial de la mezcla, la relación de compresión y la relación de equivalencia, para un motor HCCI operado con n-propanol y n-butanol.

### Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo otorgado por el Tecnológico Nacional de México y el CONACYT para el desarrollo de esta investigación. Se agradece también a Rigel Barreto por su colaboración en las gráficas.

### Referencias

- Reitz, R. D. (2013). Directions in internal combustion engine research. *Combustion and Flame*, 1(160), 1-8.
- Bergthorson, J. M., & Thomson, M. J. (2015). A review of the combustion and emissions properties of advanced transportation biofuels and their impact on existing and future engines. *Renewable and sustainable energy reviews*, 42, 1393-1417.
- Yao, M., Zheng, Z., & Liu, H. (2009). Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(5), 398-437.
- Saxena S and Bedoya ID. (2013). Fundamental phenomena affecting low temperature combustion and HCCI engines, high load limits and strategies for extending these limits. *Progress in Energy & Combustion Science* 39:457-488.
- Komninos, N. P., & Rakopoulos, C. D. (2016). Heat transfer in hcci phenomenological simulation models: A review. *Applied Energy*, 181, 179-209.
- Gan, S., Ng, H. K., & Pang, K. M. (2011). Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion: implementation and effects on pollutants in direct injection diesel engines. *Applied Energy*, 88(3), 559-567.
- Martínez-Frías J., Aceves S. M., Flowers D.L. (2007). Improving ethanol live cycle energy efficiencies by direct utilization of wet ethanol in HCCI engines. *ASME: Journal of Energy Resources Technology*, pp. 332-337.
- Yalmaz N., Donaldson A. B. (2007). Modeling of chemical processes in a diesel engine with alcohol fuels. *Journal of Energy Resources Technology*, ASME, Vol. 129, 355-359.
- Maigaard P., Mauss F., Kraft M. (2000). Homogeneous charge compression ignition engine: A simulation study on the effects of inhomogeneities. Paper No. 2000-ICE-275. ICE-Vol. 34-2, 2000 Spring Technical ASME Conference, pp. 63-70.
- Flowers D., Smith J. R., Dibble R. (2002). Thermal charge conditioning for optimal HCCI engine operation. *Journal of Energy Resources Technology*, 124, 67-75
- Liu R., Zhang C. (2004). A numerical study of NOx reduction for a DI diesel engine with complex geometry. *Journal of Energy Resources Technology*, ASME, 126, 13-20.
- Shrestha S.O., Karim G. A. (2006). The operational mixture limits in engines fueled with alternative gaseous fuels. *Journal Of Energy Resources Technology*, ASME, 128, 223-228.
- Prince, J. C., Ovando, G. E., Rodríguez, A. Mecanismo reducido para la combustión del n-propanol y del propnal. Manuscrito en preparación para ser enviado a la Revista Mexicana de Ingeniería Química.
- M. Díaz. Proceso de ignición de hidrocarburos y biocombustibles a bajas temperaturas, estudio numérico y analítico. (2018). Tesis doctoral, Facultad de Ingeniería, UNAM, México.
- Prince, J. C., Williams, F. A. (2012). Short chemical-kinetic mechanisms for low-temperature ignition of propane and ethane, *Combust. Flame*, 159, 2336-2344.
- Prince, J. C., Williams, F. A., Ovando, G. E. (2015). A short mechanism for the low-temperature ignition of n-heptane at high pressures. *Fuel*, 149, 138-142.

Johnson, M. V., Goldsborough, S. S., Serinyel, Z., O'Toole, P., Larkin, E., O'Malley, G., & Curran, H. J. (2009). A shock tube study of n- and iso-propanol ignition. *Energy & Fuels*, 23(12), 5886-5898.

Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A. P., & Law, C. K. (2012). Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(4), 468-501.

Veloo, P. S., & Egolfopoulos, F. N. (2011). Studies of n-propanol, iso-propanol, and propane flames. *Combustion and Flame*, 158(3), 501-510.

Gong, J., Zhang, S., Cheng, Y., Huang, Z., Tang, C., & Zhang, J. (2015). A comparative study of n-propanol, propanal, acetone, and propane combustion in laminar flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1), 795-801.

COMSOL Multiphysics® software.