

UNIVERSIDAD TÉCNICA DE AMBATO



FACULTAD DE INGENIERÍA EN SISTEMAS, ELECTRÓNICA E INDUSTRIAL

MAESTRÍA EN FÍSICA APLICADA, MENCIÓN FÍSICA COMPUTACIONAL

Tema: “MODELO PARAMÉTRICO QUE REPRESENTA LA GENERACIÓN DE GOMAS EN UN INYECTOR DE MOTOR DE CUATRO TIEMPOS ALIMENTADO POR GASOLINA EXTRA Y ECO PAÍS”

Trabajo de titulación previo a la obtención del grado académico de
Magíster en Física Aplicada Mención Física Computacional
Modalidad de titulación proyecto de desarrollo

Autor: Ing. Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez.

Director: Ing. Víctor Hugo Hidalgo Díaz, PhD.

Ambato-Ecuador

2022

APROBACIÓN DEL TRABAJO DE TITULACIÓN

A la unidad académica de titulación de la Facultad de Ingeniería en Sistemas, Electrónica e Industrial.

El Tribunal receptor del Trabajo de Titulación presidido por Ingeniera. Elsa Pilar Urrutia Urrutia Magister., e integrado por los señores: Ingeniero Fabián Rodrigo Salazar Escobar PhD. y el Ingeniero José Luis Gavidia García Magister, designados por la Unidad de Titulación de la Universidad Técnica de Ambato, para receptor el Trabajo de Titulación con el tema: “MODELO PARAMÉTRICO QUE REPRESENTA LA GENERACIÓN DE GOMAS EN UN INYECTOR DE MOTOR DE CUATRO TIEMPOS ALIMENTADO POR GASOLINA EXTRA Y ECO PAÍS”, elaborado y presentado por Ingeniero Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez, para optar por el Grado Académico de Magister en Física Aplicada mención Física Computacional; una vez escuchada la defensa oral del Trabajo de Titulación el Tribunal aprueba y remite el trabajo para uso y custodia en las bibliotecas de la Universidad Técnica de Ambato.

Ing. Elsa Pilar Urrutia Urrutia, Mg.
Presidente y Miembro del Tribunal de Defensa

Ing. Fabián Rodrigo Salazar Escobar, PhD.
Miembro del Tribunal de Defensa

Ing. José Luis Gavidia García, Mg.
Miembro del Tribunal de Defensa

AUTORÍA DEL TRABAJO DE TITULACIÓN

La responsabilidad de las opiniones, comentarios y críticas emitidas en el trabajo de titulación presentado con el tema: “MODELO PARAMÉTRICO QUE REPRESENTA LA GENERACIÓN DE GOMAS EN UN INYECTOR DE MOTOR DE CUATRO TIEMPOS ALIMENTADO POR GASOLINA EXTRA Y ECO PAÍS”., le corresponde exclusivamente a: Ingeniero Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez, autor bajo la dirección del Ingeniero Víctor Hugo Hidalgo Díaz PhD., director del trabajo de titulación; y el patrimonio intelectual pertenece a la Universidad Técnica de Ambato.

Ing. Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez.
AUTOR

Ing. Víctor Hugo Hidalgo Díaz, PhD.
DIRECTOR

DERECHOS DE AUTOR

Autorizo a la Universidad Técnica de Ambato, para que el Trabajo de titulación, sirva como un documento disponible para su lectura, consulta y procesos de investigación, según las normas de la Institución.

Cedo los Derechos de mi trabajo, con fines de difusión pública, además apruebo la reproducción de este, dentro de las regulaciones de la Universidad Técnica de Ambato

Ing. Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez
1707597835

INDICE GENERAL

Contenido

PORTADA.....	i
APROBACIÓN DEL TRABAJO DE TITULACIÓN.....	ii
AUTORÍA DEL TRABAJO DE TITULACIÓN.....	iii
DERECHOS DE AUTOR.....	iv
INDICE DE TABLAS.....	viii
INDICE DE FIGURAS.....	ix
AGRADECIMIENTO.....	xii
RESUMEN EJECUTIVO.....	xiii
EXECUTIVE SUMMARY.....	xiv
CAPITULO I.....	1
EL PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN.....	1
1.1 INTRODUCCIÓN.....	1
1.2 JUSTIFICACIÓN.....	1
1.3 OBJETIVOS.....	2
1.3.1 Objetivo General.....	2
1.3.2 Objetivos específicos.....	2
CAPITULO II.....	3
ANTECEDENTES INVESTIGATIVOS.....	3
2.1 ESTADO DEL ARTE.....	3
2.2 MARCO TEÓRICO.....	5
2.2.1 Ciclo termodinámico de un motor de combustión interna.....	5
2.2.2 Combustibles y tipos.....	5
2.2.3 Características de los modelos de combustión.....	6
2.2.4 Función de vaporización de combustible.....	9
2.2.5 Inyector.....	9
2.2.6 Mecanismos de formación de gomas.....	10
2.2.7 Modelo numérico de motor.....	11
CAPITULO III.....	12

MARCO METODOLÓGICO	12
3.1 Ubicación	12
3.2 Equipos y materiales	12
3.2.1 Programa de simulación Ansys	12
3.2.2 Lenguaje de programación Python	19
3.3 Tipo de investigación	20
3.4 Prueba de hipótesis-pregunta científica-idea a defender.....	21
3.4.1 Variable explicativa	21
3.4.2 Variable respuesta.....	21
3.4.3 Pregunta de investigación.....	22
3.4.4 Diseño experimental	22
3.4.5 Prueba de hipótesis	22
3.5 Recolección de información.....	23
3.5.1 Datos del modelo del motor.....	23
3.5.2 Datos del modelo de evaporación del combustible e intervalo de estudio	23
3.5.3 Datos del mecanismo de formación de gomas	24
3.5.4 Estructura del modelo cinético de formación de gomas.....	25
3.6 Procesamiento de la información y análisis estadístico	26
3.6.1 Listado secuencial.....	27
3.7 Variable respuesta o resultados alcanzados	27
CAPITULO IV.....	29
RESULTADOS Y DISCUSIÓN	29
4.1 Resultados de la simulación del MCI.....	29
4.1.1 Caracterización del motor y geometría.....	29
4.1.2 Características del mallado del motor	30
4.1.3 Modelos y coeficientes de la combustión.....	30
4.1.4 Condiciones de contorno e iniciales	31

4.1.5	Tipos de combustibles especies y reacciones	31
4.1.6	Diagrama de presión vs, CAD.....	32
4.1.7	Diagrama de temperatura vs. CAD.....	33
4.1.8	Diagrama de NO ₂ vs. CAD.....	34
4.1.9	Diagrama de NO vs. CAD.....	35
4.2	Interacción gota gases de combustión.....	36
4.2.1	Temperatura de evaporación del combustible y temperatura de la punta del inyector. 36	
4.3	Velocidades de reacción para la formación de gomas	37
4.3.1	Concentración de gomas.....	38
4.3.2	Análisis de la razón de formación de gomas	39
4.4	Concentración de gomas por ciclo	40
4.5	Análisis de varianza	41
	CAPITULO V	42
	CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES, BIBLIOGRAFÍA Y ANEXOS.....	42
5.1	CONCLUSIONES	42
5.2	RECOMENDACIONES	44
5.3	BIBLIOGRAFÍA	44
5.4	ANEXOS	47

INDICE DE TABLAS

Tabla 1 La tabla indica los pasos a seguir en el proceso de simulación del MCI, del paso uno al paso tres, preprocesamiento, del cuatro al seis, procesamiento y preprocesamiento en el paso siete. Fuente: investigador	13
Tabla 2: Parámetros generales (ICE). Fuente: investigador	13
Tabla 3 Parámetros generales de celda y válvulas. Fuente: investigador.....	18
Tabla 4 Parámetros de motor. Fuente: investigador	18
Tabla 5 Diseño experimental de dos factores, dos niveles variando tipo de combustible (extra y ecopa'is) y temperatura (T=150°C y T=190° C). Fuente: investigador	22
Tabla 6 Valores iniciales para la simulación de motor. Fuente:investigador.....	23
Tabla 7 Propiedades de los combustibles Extra (Isooctano) y Ecopaís (E5) requeridos para generar la curva de evaporación. Fuente:investigador	24
Tabla 8 Se observa, las variables independientes y la variable respuesta o dependiente, consideradas en el estudio. Fuente:investigador.....	28
Tabla 9 Parámetros de motor simulado. Fuente:investigador.....	30
Tabla 10 Características del mallado. Fuente:investigador.....	30
Tabla 11 La tabla indica los principales parámetros involucrados en la combustión. Fuente:investigador	31
Tabla 12 Condiciones de contorno e iniciales. Fuente:investigador.....	31
Tabla 13 Características de los Combustibles. Fuente:investigador	32
Tabla 14 Intervalos de formación de gomas. Fuente:investigador.....	37
Tabla 15 Velocidades de reacción iniciales y totales a T= 150°C y T= 190°C. Fuente: investigador.	38
Tabla 16 Concentración de gomas [μ M/ciclo]. Fuente: investigador.....	41
Tabla 17 Análisis de varianza. Fuente:investigador.....	41

INDICE DE FIGURAS

Figura 1 Ciclo Otto, que empieza con un proceso adiabático de compresión, proceso isocórico de combustión, proceso adiabático de expansión y un proceso isocórico de escape y rechazo de energía. Fuente: investigador.....	5
Figura 2 Áreas del conocimiento involucradas en el proceso de combustión. Reacciones químicas, balance de energía, fenómenos de transporte de masa, transferencia de calor y fenómenos de turbulencia. Fuente: investigador.	6
Figura 3 Elementos principales de un inyector de gasolina, la zona de cierre de la válvula da origen a fugas de combustible equivalente a gotas de aproximadamente 100µm de diámetro. Fuente: investigador.	10
Figura 4: Imagen izquierda, indica el ducto de entrada de aire. La imagen de la derecha muestra la válvula de admisión con su guía. Fuente: Ansys.	14
Figura 5 Imagen izquierda, cabezote con los asientos de válvula de admisión y escape. Derecha muestra el inyector con los conos de pulverización de combustible. Fuente: Ansys.	14
Figura 6 En el punto muerto superior del ciclo, aparece el pistón elemento móvil en verde , el cilindro elemento fijo en violeta y en gris el cabezote, formando la cámara de combustión. Fuente: Ansys.	15
Figura 7 Imagen izquierda, indica el mallado de la entrada de aire a lo largo del ducto. Derecha Malla de la válvula de admisión. Fuente: Ansys.....	16
Figura 8 Imagen izquierda, Malla del cabezote con sus asientos de válvula de admisión y escape. En la imagen derecha la malla del pistón. Fuente: Ansys.....	16
Figura 9 Imagen izquierda, malla de la válvula de escape. Derecha malla de la salida de gases. Fuente: Ansys.	17
Figura 10 La figura presenta el dominio de estudio, sobre el que se desarrollan los métodos de volúmenes finitos para la simulación. Fuente: Ansys.....	17
Figura 11 Resultado de la simulación, la figura derecha presenta el campo de presiones en la cámara para un instante de tiempo, la figura izquierda permite visualizar el spray	

que sale del inyector al interior de la cámara para otro instante de tiempo. Fuente: Ansys.	19
Figura 12 Tasa de formación de gomas por ciclo en[mM/ciclo]. Fuente: investigador.	20
Figura 13 Fenómeno de estudio, la figura indica la línea de tiempo de formación de gomas, desde CAD ₀ en donde aparece la gota y se establece el intervalo de reacción en la curva de evaporación del combustible hasta CAD _f , donde aparece la goma en el inyector. Fuente: investigador.	21
Figura 14 Imagen izquierda, presión en [MPa] vs CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, presión [MPa] vs CAD para combustible ECO. Fuente: investigador.	32
Figura 15 Imagen izquierda, presión [MPa] vs CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de presión de combustible eco respecto a extra. En fracción unitaria adimensional. Fuente: investigador.....	33
Figura 16 Imagen izquierda, Temperatura vs. CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, Temperatura vs. CAD para combustible ECO. Fuente: investigador.	33
Figura 17: Imagen izquierda, Temperatura vs. CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de temperatura de combustible extra respecto de la eco. Fuente: investigador.....	34
Figura 18 Imagen izquierda, concentración de NO ₂ [mM] vs. CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, concentración de NO ₂ [mM] vs. CAD para combustible Eco. Fuente: investigador.....	34
Figura 19 Imagen izquierda, concentración de NO ₂ [mM] vs. CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de concentración δ NO ₂ de combustible eco respecto a extra. Fuente: investigador.	35
Figura 20 Imagen izquierda, concentración de NO [mM] vs CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, concentración de NO [mM] vs. CAD para combustible ECO. Fuente: investigador.....	35

Figura 21 Imagen izquierda, concentración NO[mM] vs. CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de concentración adimensional para δ NO de combustible eco respecto a extra. Fuente: investigador.....	36
Figura 22 Tebullición y Tinyector A)Extra a T=150 oC, B)Extra a T=190 oC, C)Eco a T=150 oC, D) Eco a T=190 oC. Fuente: investigador.	37
Figura 23 : Velocidad inicial y final de reacción en [mM/s] para cada tratamiento A)Extra a T=150 oC, B)Extra a T=190 oC, C)Eco a T=150 oC, D) Eco a T=190 oC. Fuente: investigador.	38
Figura 24 Concentración final de gomas A)Extra a T=150 oC, B)Extra a T=190 oC, C)Eco a T=150 oC, D) Eco a T=190 oC. Fuente: investigador.	39
Figura 25 Concentración final de gomas A)Extra a T=150 oC, B)Extra a T=190 oC, C)Eco a T=150 oC, D) Eco a T=190 oC. Fuente: investigador.....	39
Figura 26 Concentración de gomas A)Extra a T=150 oC y Eco a T=150 oCB)Extra a T=190 oC y Eco a T=190 oC. Fuente: investigador.	40
Figura 27 DELTA DE GOMAS A)Extra a T=150 oC y Eco a T=150 oC B)Extra a T=190 oC y Eco a T=190 oC. Fuente: investigador.	40

AGRADECIMIENTO

Agradezco al oscilador universal y a todas las personas con las que he interactuado para lograr una pequeña comprensión del fenómeno.

UNIVERSIDAD TÉCNICA DE AMBATO
FACULTAD DE INGENIERÍA EN SISTEMAS,
ELECTRÓNICA E INDUSTRIAL
MAESTRÍA EN FÍSICA APLICADA, MENCIÓN FÍSICA COMPUTACIONAL

TEMA: MODELO PARAMÉTRICO QUE REPRESENTA LA GENERACIÓN DE GOMAS EN UN INYECTOR DE MOTOR DE CUATRO TIEMPOS ALIMENTADO POR GASOLINA EXTRA Y ECO PAÍS

AUTOR: Ing. Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: Energías Renovables y Desarrollo Sostenible

DIRECTOR: Ing. Victor Hugo Hidalgo Díaz, PhD.

FECHA: 23 de junio 2022

RESUMEN EJECUTIVO

Este trabajo de investigación, cuantifica la formación de gomas en el inyector de un motor de gasolina. El modelo basado en las leyes la cinética química, necesita de las curvas de presión, temperatura, temperatura del inyector, concentración de óxido de nitrógeno, concentración de monóxido de nitrógeno y la fuga de combustible, respecto al ángulo de giro del cigüeñal para un ciclo del motor, obtenidos mediante simulación del motor utilizando el programa Ansys y valores estimados mediante revisión bibliográfica. La cinética química se implementa en el lenguaje de programación Python. El análisis se aplica con diseño experimental de 2^2 , en el que se varía el combustible (extra y ecopaís) y la temperatura del inyector ($T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$). Los resultados indican que la formación de gomas es $0.105\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ para (Extra y $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$), $0.096\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ para (Ecopaís y $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$), $0.04\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ para (Extra y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$), y finalmente $0.038\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ para (Ecopaís y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$). La formación de gomas es mayor para el combustible extra que para ecopaís, independientemente de la temperatura del inyector. Los resultados del análisis de varianza, el estadístico $F=308$ mayor que $F\text{ crítico}=161$, permiten concluir que la temperatura es el factor influyente en la formación de gomas y que además, la formación de estas, es inversamente proporcional a la temperatura del inyector, sin ser afectado por el tipo de combustible.

Palabras clave: Gomas en combustibles, cinética química, simulación, motor a gasolina, inyector.

UNIVERSIDAD TÉCNICA DE AMBATO
FACULTAD DE INGENIERÍA EN SISTEMAS,
ELECTRÓNICA E INDUSTRIAL
MAESTRÍA EN FÍSICA APLICADA, MENCIÓN FÍSICA COMPUTACIONAL

THEME: PARAMETRIC MODEL THAT REPRESENTS THE GENERATION OF RUBBERS ON A FUELED FOUR-STROKE ENGINE INJECTOR FOR EXTRA GASOLINE AND ECOPAÍS.

AUTHOR: Ing. Sivananda Salmanazar Delgado Rodriguez

LINE OF RESERACH: Renewable Energies and sustainable development.

DIRECTED BY: Ing. Victor Hugo Hidalgo Díaz, PhD.

Date: June 23rd, 2022

EXECUTIVE SUMMARY

This research work quantifies the formation of gums in the injector of a gasoline engine. The model, based on the chemical kinetics' laws, needs pressure curves, temperature, injector temperature, nitrogen oxide concentration, nitrogen monoxide concentration and fuel leakage, with reference to the rotation angle of the crankshaft for an engine cycle, obtained through the engine simulation using Ansys program and the values estimated by literature review. Chemical kinetics is implemented by using a Python code. The analysis is applied with an experimental design of 2^2 , in which the fuel (Extra and Ecopaís) and the injector temperature ($T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$) are varied. The results revealed that the formation of gums is $0.105\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ for (Extra y $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$), $0.096\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ for (Ecopaís y $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$), $0.04\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ for (Extra y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$), and $0.038\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$ for (Ecopaís y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$). Formation of gums is greater for Extra fuel than for Ecopaís one, regardless of the temperature of the injector. The variance analysis, the F-statistic=308 higher than the F Critical=161, allows to conclude that temperature is the influential factor in the formation of gums and, their formation is inversely proportional to the injector temperature, without being affected by the type of fuel.

Keywords: Gums in fuels, chemical kinetics, simulation, gasoline engine, injector

CAPITULO I

EL PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN

1.1 INTRODUCCIÓN

En el contexto mundial se plantea la necesidad de cambiar paradigmas que se encaminen en disminuir el efecto invernadero, en ese sentido se promueve la generación de nuevos combustibles que reduzcan el impacto ambiental y que puedan ser usados por los automotores [1]. Es así como surgen los biocombustibles (mezcla de gasolina y alcohol) que presentan las siguientes ventajas: disminución de la emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero, además tiene un componente de recurso renovable que contribuye a la independencia energética. Sin embargo, éste cambio en el uso de combustibles trae consigo efectos en el proceso de oxidación de la gasolina, que se manifiesta en la generación de gomas [2], que afectan los sistemas de inyección y alteran el consumo de combustible y la eficiencia del motor [3]. Por este motivo, se plantea un estudio comparativo de la generación de gomas en los inyectores de un automotor alimentado por un combustible estándar y un biocombustible.

1.2 JUSTIFICACIÓN

Al 2018 a nivel nacional se registran 2.4 millones de automotores matriculados, de los cuales el 31.2% son automóviles [4] de tal forma se requiere entender el proceso de generación de gomas en los sistemas de inyección de los autos que utilizan gasolina extra y ecopaís, esto permitirá aclarar en qué medida este fenómeno repercute en la eficiencia del motor, consumo y gastos de mantenimiento.

Por tanto, el estudio abarcará: la determinación de las condiciones y parámetros que favorecen la generación de gomas al alimentar un motor de combustión interna con gasolina extra y con ecopaís [5],[6], el análisis abarca motor, inyector y cámara de combustión, para determinar así en que parte del ciclo aparecen las condiciones favorables para la formación de gomas [7].

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo General

Estructurar un modelo paramétrico que represente la generación de gomas en un inyector de motor de cuatro tiempos alimentado por gasolina extra y ecopaís.

1.3.2 Objetivos específicos

- Revisar el estado del arte en relación con los principales parámetros de funcionamiento en condiciones normales de un inyector en la cámara de combustión.
- Determinar los parámetros que permiten la formación de gomas en los inyectores al alimentar el motor con gasolina extra o eco país.
- Desarrollar un modelo de generación de gomas en función de los resultados obtenidos del estudio paramétrico.
- Comparar los resultados obtenidos respecto a la generación de gomas al alimentar el motor con gasolina extra y eco país.

CAPITULO II

ANTECEDENTES INVESTIGATIVOS

2.1 ESTADO DEL ARTE

El punto de partida de esta búsqueda será la gasolina, que es una mezcla de hidrocarburos obtenidos por destilación del petróleo utilizada como combustible, disolvente entre varios usos y que debe cumplir con ciertas especificaciones como índice de octano [2]. En tanto que un biocombustible es una mezcla de hidrocarburo con etanol en un cierto porcentaje conocido como E0 hidrocarburo estándar y EX, siendo X el % de etanol anhidro [8]. Las olefinas, uno de los componentes de estos combustibles en estado líquido, entran en un proceso de oxidación que da origen a la formación de materia con mayor peso molecular e insolubles, llamadas gomas, y que al unirse aparecen en forma visible como depósitos que son perjudiciales tanto para los contenedores de gasolina como para los sistemas de inyección de los motores.

Los mecanismos de formación de estas gomas en un inicio se han realizado de forma experimental en laboratorio mediante la creación de una matriz de transformación, de la que se extrae las primeras curvas de los factores que promueven la generación de gomas [9]. Estos estudios reciben el nombre de estáticos. La caracterización de las gomas, (C_nH_{2n}) así como los factores que aceleran la formación, se estudian mediante reacciones de polimerización y se validan por experimentación [[6]. En la actualidad se busca establecer modelos estadísticos que describan la formación de gomas tanto de gasolina estándar como de gasolina con etanol anhidro en varios porcentajes de mezcla, considerando los parámetros de calidad de la gasolina, tipo de estructura y no de la matriz química [10].

Otra fuente de estudio de las gomas se realiza mediante microscopía electrónica (SEM), que muestra que los depósitos en el inyector se encuentran constituidos en su mayor parte por carbono y oxígeno (CO) en forma esférica y con diámetros que varían entre los 60 y 100 μm como lo demuestra el estudio [11]. Mediante técnicas de simulación molecular con teoría funcional de densidad (DFT) se obtiene datos termodinámicos y cinéticos de las reacciones en cadena de los radicales CH que generan depósitos, que son validados con microscopía electrónica [12]. La formación de depósitos en el inyector afecta el consumo y eficiencia del funcionamiento del motor. Para comprender este fenómeno, se plantean análisis de crecimiento de los depósitos con base en las observaciones

microtomográficas de rayos x, en la que aparecen afectaciones en la rugosidad del material y el inicio de fenómenos de cavitación [13].

El desarrollo de modelos dinámicos de formación de gomas, referidos en [8],[14], se centra en la búsqueda de una tasa de formación de depósitos por ciclo de combustión de un motor de combustión interna de inyección directa encendido por chispa (MSDI). Estos modelos se encuentran apoyados principalmente por análisis numéricos que comprende: modelo de motor de combustión interna de inyección y encendido por chispa, modelo de cinética química de formación y deposición de gomas. Uno de los más recientes modelos dinámicos de formación de gomas es el de adsorción y precipitación, que plantea el uso de un modelo de motor, un mecanismo de formación de depósitos que comprende iniciación, oxidación, propagación y formación, utilizando la ecuación de Arrhenius. El modelo de adsorción y precipitación se aplica en la superficie del inyector y finalmente un modelo de afectación del caudal debido a la tasa de deposición [15].

La simulación de un motor de combustión interna encendido por chispa es un tema de amplio estudio, dentro de los programas utilizados para el modelamiento y simulación de (MCI), aplicados se tiene: software ANSYS FLUENT, GT-POWER, SRM Engine Suite. utilizados en [16], [17], [18], [19], [20] y Software libre Open source con licencia GNU, OpenFoam, Cantera de Python utilizado en [21], [22], [23]]. Todos excepto Cantera utiliza la técnica numérica de volúmenes finitos. La estructura de simulación es la misma: preprocesamiento que comprende la geometría y el mallado dinámico, procesamiento que especifica la técnica numérica y modelos utilizados para combustión que engloba: balance de masa, conservación de especies, conservación del momento, conservación de energía, criterios de turbulencia, velocidad de llama y reacciones químicas con ecuación de Arrhenius. y postprocesamiento para visualización de los resultados.

Respecto de los biocombustibles, en[24], se describe las propiedades fisicoquímicas, los pro y los contra del uso de biocombustibles en varias relaciones E0, E10, E20, además en [17], se plantea un modelo termodinámico y de fluidos de un motor de combustión interna (MCI) modificado para varios combustibles, mostrando que la temperatura de la cámara de combustión eleva su temperatura con el uso de biocombustibles, reduciendo las emisiones de monóxido de carbono (CO) e incrementando hasta en un 15% las emisiones de óxidos de nitrógeno (NOx).

2.2 MARCO TEÓRICO

El estudio de formación de gomas requiere de la siguiente base teórica: ciclo termodinámico de un motor de combustión interna encendido por chispa (ciclo Otto) que describe la transformación de energía química en trabajo mecánico. Especial atención despierta el proceso de combustión por su complejidad al depender de muchas variables de las cuales se presta atención al tipo de combustible en su composición y curvas de evaporación. También es necesario conocer el funcionamiento del inyector, ya que en este elemento se presenta la formación de gomas. Además, reacciones químicas involucradas en el proceso de polimerización de gomas. de evaporación del combustible de los siguientes aspectos

2.2.1 Ciclo termodinámico de un motor de combustión interna.

Es un conjunto de procesos termodinámicos que permiten obtener trabajo útil entre un potencial térmico alto y bajo. El ciclo OTTO, se caracteriza por tener combustión isocórica, expansión adiabática, rechazo de energía isocórica y compresión adiabática, como se muestra en la Figura 1.

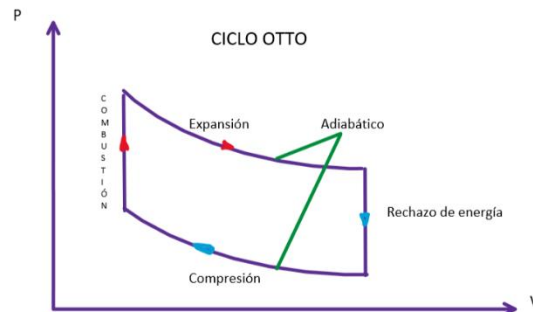


Figura 1 Ciclo Otto, que empieza con un proceso adiabático de compresión, proceso isocórico de combustión, proceso adiabático de expansión y un proceso isocórico de escape y rechazo de energía. Fuente: investigador.

2.2.2 Combustibles y tipos

Gasolina.- Combustible que utilizan vehículos de transporte con motores de combustión interna, cuya principal característica es el número de octanos, el mismo que determina su calidad [25].

Octanaje.- Se trata de un índice que indica la capacidad que tiene un combustible de auto inflamarse en el proceso de compresión en la cámara de un motor.

El estudio de la combustión se apoya en el conocimiento de:

- Principio de conservación de masa:

{ masa que sale } – { masa que entra } =
 { variación de masa dentro del sistema }

$$\sum_{entra} \dot{m} = \sum_{sale} \dot{m} = \int_{VC} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV, \quad (1)$$

de donde, \dot{m} es flujo másico, ρ es la densidad del fluido. En las ecuaciones (2), (7) y (9) permiten deducir la ecuación de la continuidad (5).

$$\int_{VC} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{SC} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = 0 \quad (2)$$

Aplicando el teorema de la divergencia

$$\int_V \nabla \cdot G dV = \oint_A G \cdot n dA \quad (3)$$

se tiene que

$$\begin{aligned} \int_{VC} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{VC} \nabla \cdot (\rho \cdot u) dV &= 0 \\ \int_{VC} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot u) \right] dV &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

por tanto se llega a la ecuación de la continuidad.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = 0 \quad (5)$$

Siendo, ρ la densidad del fluido, \vec{u} la velocidad del fluido.

- Conservación de la cantidad de movimiento:

{ Δ impulso entra} - { Δ impulso sale} + { Σ fuerzas} = { Δ impulso del sistema}

$$\sum_{sale} \beta \cdot \dot{m} \vec{u} - \sum_{entra} \beta \cdot \dot{m} \vec{u} + \int_{VC} \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} dV = \sum \vec{F}_{neta} \quad (6)$$

Aplicando el teorema de la divergencia presentado en la (9)

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u} \cdot \vec{u}) dV = \oint_A (\rho \cdot \vec{u}) \cdot \vec{n} dA \quad (7)$$

se tiene,

$$\int_{VC} \left[\frac{\partial \rho \cdot \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u} \cdot \vec{u}) - \rho \cdot g - \nabla \cdot \sigma_{ij} \right] dV = 0 \quad (8)$$

σ_{ij} es el tensor de esfuerzo, se llega a la ecuación de momentum lineal conocida como ecuación de Cauchy.

$$\frac{\partial \rho \cdot \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u} \cdot \vec{u}) = \rho \cdot g + \nabla \cdot \sigma_{ij} \quad (9)$$

• Conservación de la energía:

{ δ energía entra}- { δ energía sale}+{calor}-{trabajo}={ δ energía interna del sistema}

$$\frac{dE_{sist}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{VC} e \rho \cdot dV + \int_A e \cdot \rho \cdot (\vec{u} \cdot \vec{n}) dA \quad (10)$$

donde E es la energía total, e energía por unidad de masa, la cual es la suma de la energía interna U , energía cinética ec , energía potencial ep y energía química eq.

$$\dot{Q}_{neto} + \dot{W}_{neto} = \frac{dE_{sist}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{VC} e \rho \cdot dV + \int_A \left(\frac{P}{\rho} + e \right) \cdot \rho \cdot (\vec{u} \cdot \vec{n}) dA \quad (11)$$

\dot{Q} es el flujo de calor neto, \dot{w} , potencia neta , P presión, ρ densidad.

• Transferencia de calor por conducción:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = K \cdot A \cdot \frac{dT}{dx} \quad (12)$$

En donde, Q es la energía térmica, K es la constante de conductividad, A es el área de incidencia y $\frac{dT}{dx}$ es la gradiente de la temperatura.

• Balance de especies

A partir de la reacción, lado izquierdo, reactantes, derecho, productos.

$$\sum_{i=1}^N x'_i M' i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N y'_i M'' i \quad (13)$$

x'_i, y'_i coeficientes estequiométricos de la reacción, reactantes y productos.

$M' i, M'' i$ concentración molar de reactantes y productos.

donde el equilibrio químico se encuentra dado por

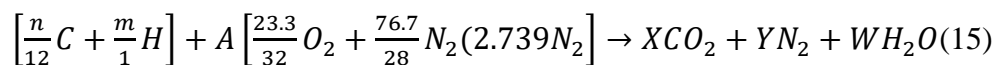
$$\sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial H}{\partial N_i} \right] (y'_i - x'_i) = 0 \quad (14)$$

H es la entalpía de cada componente,

N_i es la concentración molar del componente.

x'_i, y'_i coeficientes estequiométricos de la reacción, reactantes y productos.

• Relación estequiométrica general para la combustión de la gasolina:



En la que, C es Carbono, H Hidrógeno, O Oxígeno, N Nitrógeno, CO₂ Dióxido de carbono, H₂O agua.

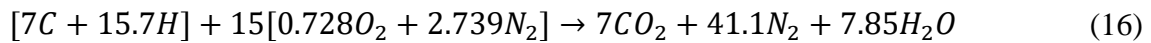
A es la relación de aire combustible.

n es el % de Carbono en el combustible.

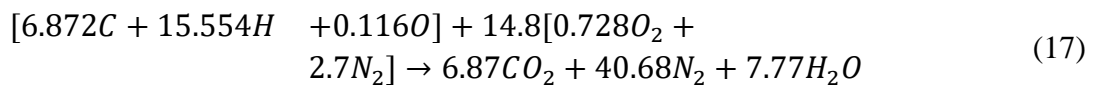
m es el % de Hidrógeno en el combustible.

X,Y,W son los números de moles de los productos.

• Para combustible extra es:



• Para gasolina Ecopaís es:



2.2.4 Función de vaporización de combustible

Para determinar las condiciones de formación de gomas es necesario conocer la curva de punto de ebullición del combustible que se determina usando la ecuación de Clausius Clapeyron ??

$$T_b = T_{bo} \left(1 - \frac{RT_{bo}}{\lambda_b} \ln \frac{P}{P_o} \right)^{-1} \quad (18)$$

Donde T_b es la temperatura de ebullición del combustible.

T_{bo} es la temperatura de ebullición del combustible a presión estándar.

R es la constante universal de los gases

λ_b es el calor de vaporización del combustible [15].

P presión

P_o presión estándar

2.2.5 Inyector

Es el elemento que permite el ingreso de combustible pulverizado a la cámara de combustión que trabaja con presiones entre (10 - 40) MPa y periodos entre(1-6)ms [27], para motores de combustión interna encendidos por chispa. Al tener frecuencias de trabajo elevadas, este elemento se encuentra expuesto a fallas en el cierre de la válvula

que se traduce en fugas de combustible y que se estima en promedio sean equivalentes a una gota de diámetro de $100\mu\text{m}$ [15]. Como se muestra en la Figura 3

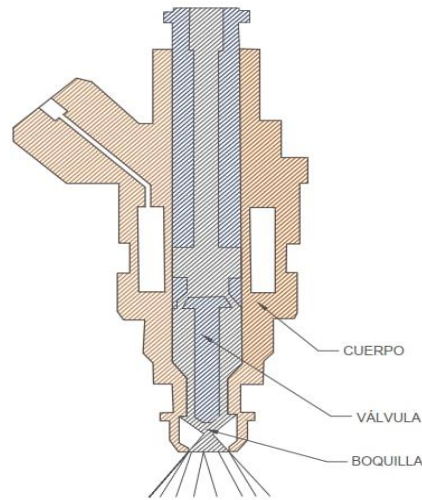
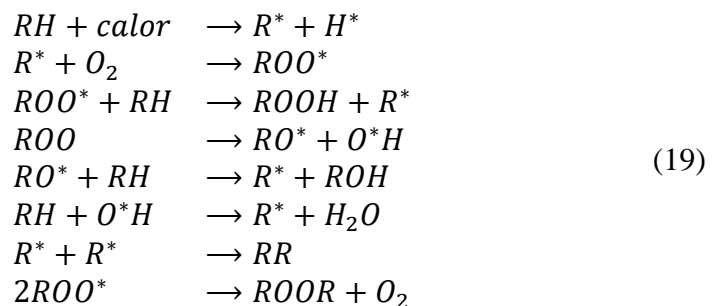


Figura 3 Elementos principales de un inyector de gasolina, la zona de cierre de la válvula da origen a fugas de combustible equivalente a gotas de aproximadamente $100\mu\text{m}$ de diámetro. Fuente: investigador.

2.2.6 Mecanismos de formación de gomas

Los combustibles resultan de la combinación de hidrocarburos, algunos de sus componentes se oxidan y dan paso a la formación de polímeros que se ramifican formando compuestos de mayor peso molecular llamados gomas. Se producen en ambientes de formación que pueden ser en aire y en gases de combustión. La química de reacción se describe a continuación:

- Formación de goma en aire:

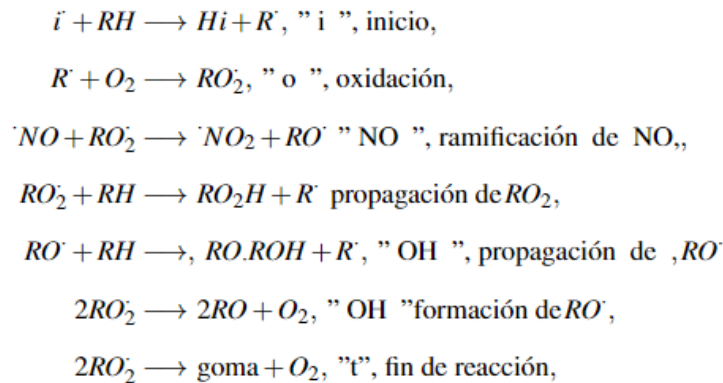


RH representa la molécula de hidrocarburo.

R es la cadena de hidrocarburos junto con el hidrógeno.

R^* , H^* son radicales libres. ROOR cadenas largas llamadas gomas.

- Formación de goma en gases de combustión: }



i corresponde a los iniciadores que pueden ser NO, NO₂,
 RH representa el enlace C-H del combustible.
 R' radical de inicio de reacción.
 RO₂' radical de oxidación.
 RO' radical que da paso a la formación de gomas

2.2.7 Modelo numérico de motor

Existen varios tipos de modelos de combustión para motores de combustión interna (MCI), pero de forma general se toman en cuenta las siguientes características:

- Tipo de motor a simular.
 - Tipo de combustible.
 - Cinética de las reacciones químicas.
 - Número de especies y reacciones químicas.
 - Modelos de turbulencia [8].
- 2 Los modelos de turbulencia pueden ser:
 - 3 Reynolds Average Navier Stokes (RANS), considera a la turbulencia basándose en la desviación del flujo promedio en la misma fase, espacio e instante de tiempo.
 - 4 Large Eddy Simulation (LES) toma las variaciones de flujo con base en un promedio local, es decir, captura la dinámica a gran escala y resuelve los de pequeña escala.
 - 5 Direct Numerical Simulation (DNS), resuelve las ecuaciones de conservación sin considerar promedios, se requiere un alto poder computacional [8].

CAPITULO III

MARCO METODOLÓGICO

3.1 Ubicación

La investigación se realiza sobre el modelo de auto KIA Picanto 1.0 DPi, motor de cuatro tiempos con sistema de inyección electrónica directa encendido por chispa, de 998 cm^3 , potencia de 51 kW, 920 kg de masa y capacidad para cinco pasajeros. El vehículo puede ser alimentado por gasolina estándar(E0) o ecopaís (E5: 5 % etanol). Para este estudio, la unidad de análisis es la interacción entre la cámara de combustión y el inyector como elemento principal del sistema de inyección. El funcionamiento del motor será simulado numéricamente para un ciclo completo 720° en el software Ansys.

3.2 Equipos y materiales

- Computador personal.
- Bases de datos digitales (WoS, Scopus, Google Académico)
- Software Ansys para simulación del motor.
- Software Python para simulación de formación de gomas.
- Software Overleaf para elaboración de documento.

3.2.1 Programa de simulación Ansys

Ansys es un programa que facilita la simulación en el campo estructural, fluido dinámica y sistemas multifísicos como los de un motor de combustión interna, encendido por chispa requerido para el estudio de gomas. Ansys, al igual que cualquier otro programa de simulación, se compone de tres bloques, pre proceso que integra conocimiento del fenómeno, construcción de la geometría y mallado del dominio de estudio. El segundo bloque de procesamiento o solución, agrupa, el escoger los tipos de solucionadores y técnicas necesarios para resolver el modelo matemático del fenómeno, fijar del dominio de estudio, las condiciones iniciales y de contorno y además se establecen los parámetros del solucionador. Finalmente, se tiene el postproceso, que se encarga de la visualización y manejo de la data generada por el solucionador. Ansys, utiliza la técnica de volúmenes finitos (FV), posee gran variedad de solucionadores y

procesamiento en paralelo en el solucionador. Para el caso de estudio se utilizó el solucionador IC Engine (Forte) que tiene la siguiente estructura. Pre proceso, pasos uno, dos y tres. Proceso, pasos cuatro, cinco y seis. Postproceso paso siete, como se indica en la Tabla 1

Pasos	Acción
1	Parámetros generales del motor
2	Geometría
3	Mallado
4	Condiciones iniciales y de contorno
5	Parámetros de simulación
6	Solucionador
7	Resultados

Tabla 1 La tabla indica los pasos a seguir en el proceso de simulación del MCI, del paso uno al paso tres, preprocesamiento, del cuatro al seis, procesamiento y preprocesamiento en el paso siete. Fuente: investigador

El primer paso es establecer características generales del motor como: simulación de combustión, ciclo completo, longitud de biela y radio de cigüeñal, tolerancia de ajuste entre las partes, sistema de admisión y escape de gases controlado por las válvulas como muestra la Tabla 2. Esta información permite crear la función armónica de la cinemática del motor.

Parámetro	Tipo
Tipo de simulación	Combustión
Tipo de solución	Motor completo
Longitud de biela	144.5 mm
Radio de cigüeñal	45.0 mm
Ajuste	0.5 mm
Válvula	Admisión y Escape

Tabla 2: Parámetros generales (ICE). Fuente: investigador

Geometría del motor

En este paso se elabora la geometría de cada una de las piezas del motor agrupadas en los siguientes conjuntos.

Sistema de Admisión.

El sistema de admisión, se compone del ducto de ingreso de aire, guía de válvula y la válvula de admisión. Este sistema se encuentra acoplado al cabezote del motor como se muestra en la Figura 4

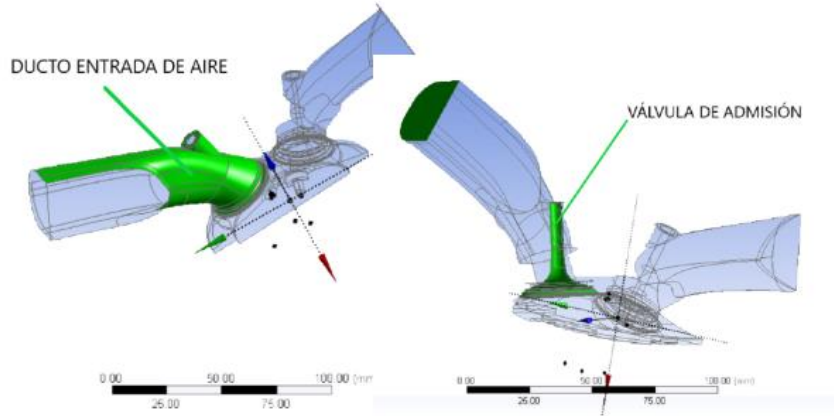


Figura 4: Imagen izquierda, indica el ducto de entrada de aire. La imagen de la derecha muestra la válvula de admisión con su guía. Fuente: Ansys.

Cámara de combustión.

La cámara de combustión se compone de cabezote, inyector y pistón. En el cabezote se acoplan los sistemas de admisión de aire y de escape de gases de combustión. Los asientos de válvula de admisión y de escape. Como se indica en la Figura 5.

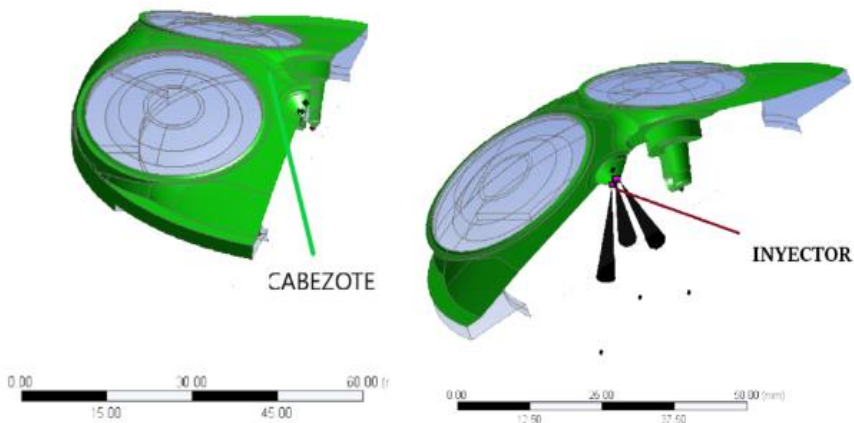


Figura 5 Imagen izquierda, cabezote con los asientos de válvula de admisión y escape. Derecha muestra el inyector con los conos de pulverización de combustible. Fuente: Ansys.

El pistón es un elemento móvil que se desplaza en forma lineal y armónica a lo largo del cilindro, dando lugar al cierre de la cámara de combustión que tiene un punto muerto superior y un punto muerto inferior. La Figura 6 muestra en verde, al pistón en el punto muerto superior, en violeta el cilindro sobre el cual se desliza el pistón y en gris el cabezote, este espacio forma la cámara de combustión.

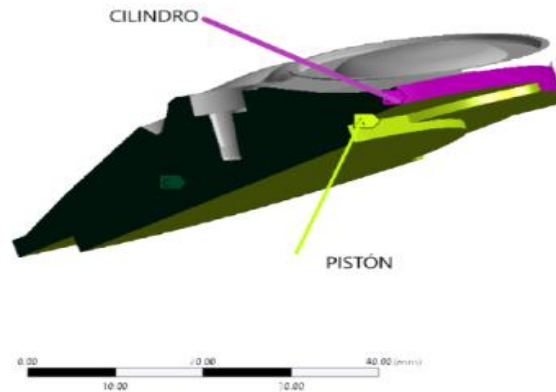


Figura 6 En el punto muerto superior del ciclo, aparece el pistón elemento móvil en verde , el cilindro elemento fijo en violeta y en gris el cabezote, formando la cámara de combustión. Fuente: Ansys.

Sistema de gases de escape

Posteriormente, al proceso de expansión, el sistema de gases de escape acciona la válvula que se desliza en la guía y da paso a la salida de los gases de combustión por el ducto. De igual manera que el sistema de admisión, se encuentra acoplado al cabezote, como se indica en la Figura 4.

Mallado

La acción de mallar permite construir la partición del espacio de estudio en los conjuntos de geometría indicados en el apartado anterior. El mallado es un paso sensible del cual depende en gran medida la convergencia de la solución, es conveniente evitar aristas pronunciadas que generan puntos de divergencia en la solución.

Mallado del sistema de admisión

El sistema de admisión se compone del ingreso de aire y la válvula de admisión. Como se muestra en la Figura 7, el mallado es más fino en los contornos de acople con el cabezote., la válvula en su asiento requiere mallado más fino.

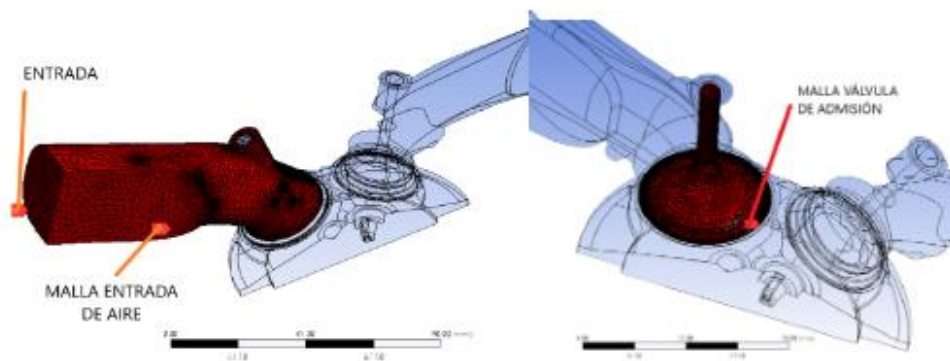


Figura 7 Imagen izquierda, indica el mallado de la entrada de aire a lo largo del ducto. Derecha Malla de la válvula de admisión. Fuente: Ansys.

Mallado de la cámara de combustión

El mallado de la cámara es mucho más fino en los contornos de acople con las válvulas, ducto y en la zona de chispa, con la finalidad de tener mejor información del proceso de combustión. El pistón mantiene un mallado más estructurado y uniforme, como se muestra en la Figura 8

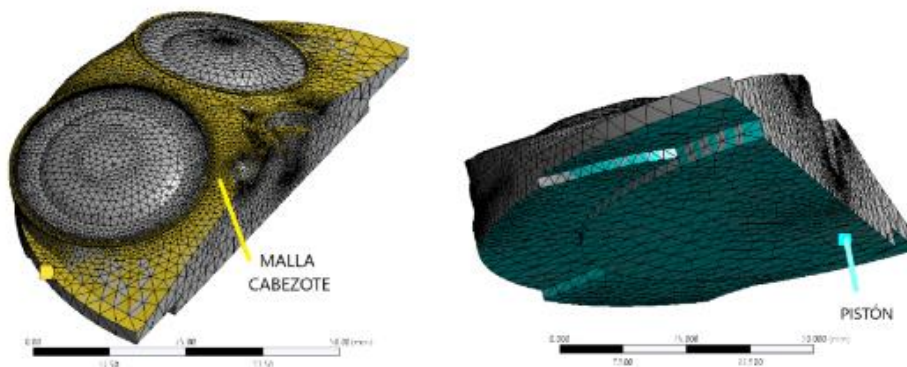


Figura 8 Imagen izquierda, Malla del cabezote con sus asientos de válvula de admisión y escape. En la imagen derecha la malla del pistón. Fuente: Ansys.

Mallado del sistema de gases de escape

El sistema de gases de escape se compone de la válvula de escape y la salida de los gases de combustión, el acoplamiento entre las mallas facilita la solución numérica como se indica en la Figura 9.

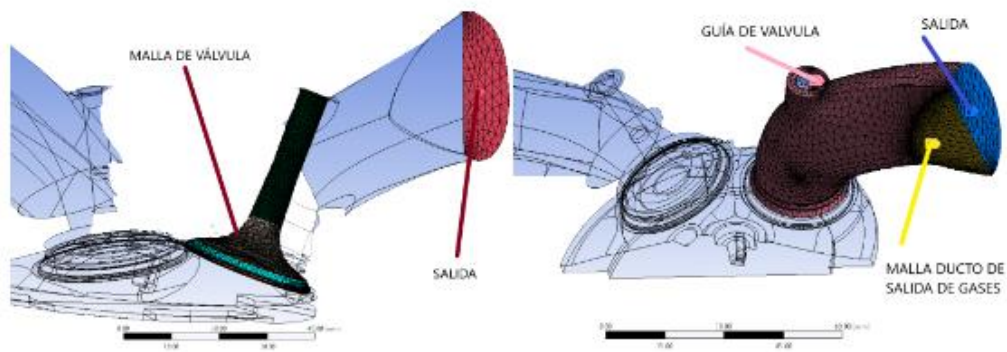


Figura 9 Imagen izquierda, malla de la válvula de escape. Derecha malla de la salida de gases. Fuente: Ansys.

Malla Total

En la Figura 10. Se indica el mallado del fluido de trabajo que constituye el dominio de estudio en su totalidad sobre el que se aplican los métodos numéricos de volúmenes finitos en un sistema de malla dinámica para la simulación del motor.

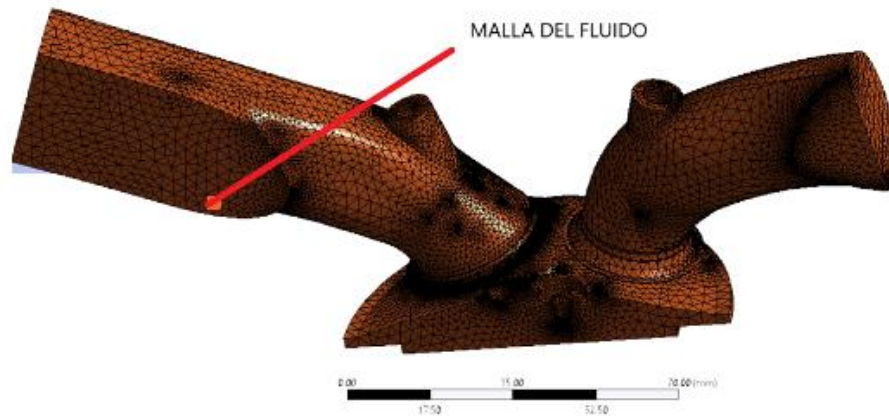


Figura 10 La figura presenta el dominio de estudio, sobre el que se desarrollan los métodos de volúmenes finitos para la simulación. Fuente: Ansys.

Parámetros generales de solución

Se establece el tamaño y la forma global de la celda, que puede ser hexaédrica, tetraédrica o prismática, y los intervalos de apertura y cierre de las válvulas de admisión y escape

necesarios para establecer los procesos del ciclo termodinámico a simular. La Tabla 3 muestra los valores considerados.

Parámetro	Tipo
Tamaño global de malla	3mm
Inicio de apertura de válvula admisión	329.6 °
Final de cierre de válvula de escape	526.4 °

Tabla 3 Parámetros generales de celda y válvulas. Fuente: investigador

Parámetros de simulación

Paso seguido se establecen los parámetros de simulación que comprende: modelos de combustión que especifica en número de especies y reacciones, modelos de turbulencia que puede ser RANS o LES, modelos de flama de frente uniforme o variado, condiciones de frontera, condiciones iniciales, control de simulación, control de salida y ejecución de la simulación. A continuación se indican los parámetros más relevantes referentes a la simulación del motor. Ver Tabla 4.

Parámetro	unidad
Diámetro	mm
Carrera	mm
Espacio muerto	mm
Radio de cigüeñal	mm
Longitud de biela	mm
Volumen muerto	cm ³
Volumen máximo	cm ³
Relación de compresión	r
Revoluciones del motor	rpm
Presión de admisión	bar
Temperatura inicial de cámara	K
Tipo de combustible	E0, E5
ángulo de chispa	grados
Revoluciones del motor	rpm

Tabla 4 Parámetros de motor. Fuente: investigador

Postprocesamiento de datos de la simulación

La simulación constituye una experimentación numérica de un fenómeno físico, es una alternativa válida y paralela a la experimentación, con bajos costo y permite la visualización del fenómeno en instantes de tiempo del orden de los microsegundos. así también arroja diagramas funcionales de la las variables involucradas. Para el caso de estudio se busca información de presión [MPa], temperatura promedio de la cámara de combustión [K], concentraciones de los NOx de los gases de combustión[mM] en función del ángulo de giro (CAD $^{\circ}$), así como la visualización del fenómeno. En la Figura 11, se indica la distribución de presión en la cámara para un instante de tiempo y el spray de combustible que sale del inyector,

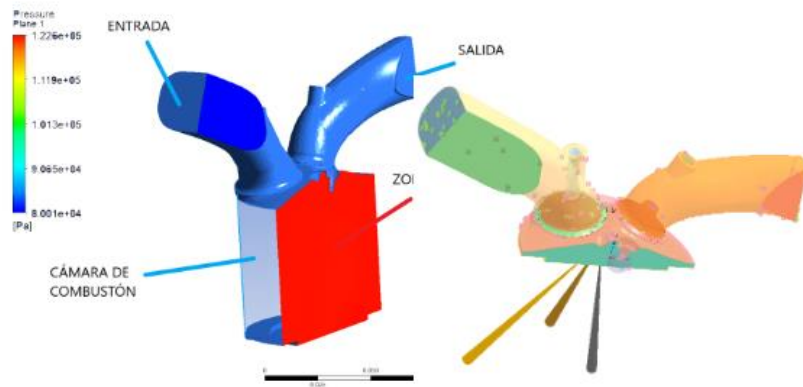


Figura 11 Resultado de la simulación, la figura derecha presenta el campo de presiones en la cámara para un instante de tiempo, la figura izquierda permite visualizar el spray que sale del inyector al interior de la cámara para otro instante de tiempo. Fuente: Ansys.

3.2.2 Lenguaje de programación Python

Python es un lenguaje de programación de alto nivel, interpretado, multiplataforma, de código abierto que cuenta con muchas librerías de apoyo como: matplotlib (graficar), pandas (manejo de datas), numpy (matemática y a.Lineal), statistics (estadística), etc. Con estos insumos se desarrolla un código que teniendo como datos de entrada la presión [MPa], temperatura [K], concentración de NO₂[mM] y concentración de NO [mM] en función el ángulo de giro [$^{\circ}$], procede a calcular la formación de gomas por ciclo, en ambiente de cámara de combustión mediante el empleo de la cinética química apoyada en la formulación de Arrhenius, Figura 12. El funcionamiento del código fue validado con respecto de la data obtenida en [15].

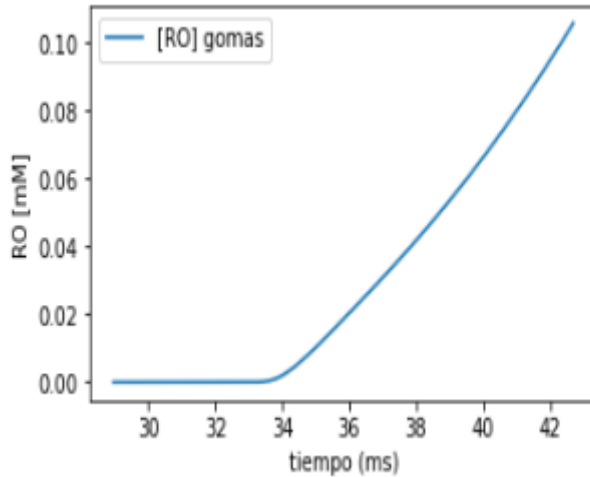


Figura 12 Tasa de formación de gomas por ciclo en[mM/ciclo]. Fuente: investigador.

3.3 Tipo de investigación

El presente trabajo es una investigación de carácter cuantitativo que busca determinar la cantidad de goma que se genera por ciclo de trabajo de un motor, alimentado por gasolina estándar y ecopaís. De la revisión documental se puede identificar que una vez obtenida la simulación, se extraen las curvas de presión y temperatura en función del ángulo que aparece en color naranja en la figura, siguiente tarea es conocer la curva de evaporación del combustible línea azul, de acuerdo con la ecuación (18) y datos de presión vs ángulo generados de la simulación. A continuación, se interseca la curva de evaporación con la función constante de la temperatura de la punta del inyector que aparece en color verde, de allí se desprenden dos puntos cuya componente en el eje temporal CAD_o , indica el instante de inicio de la reacción que se produce por la interacción del remanente de combustible en el cierre de la válvula del inyector, con los gases de combustión (NO_x) dentro de la cámara de combustión, visualizada en la Figura como "zona de goteo y reacción", el análisis de generación de gomas se efectúa con referencia en la ecuación (20), gracias a que se dispone de los valores las concentraciones de los gases de combustión arrojados por la simulación. El intervalo finaliza en CAD_f , es de esperar que con el tiempo las gomas afectan el desempeño del inyector. En la Figura 13 se presenta un esquema del fenómeno de estudio.

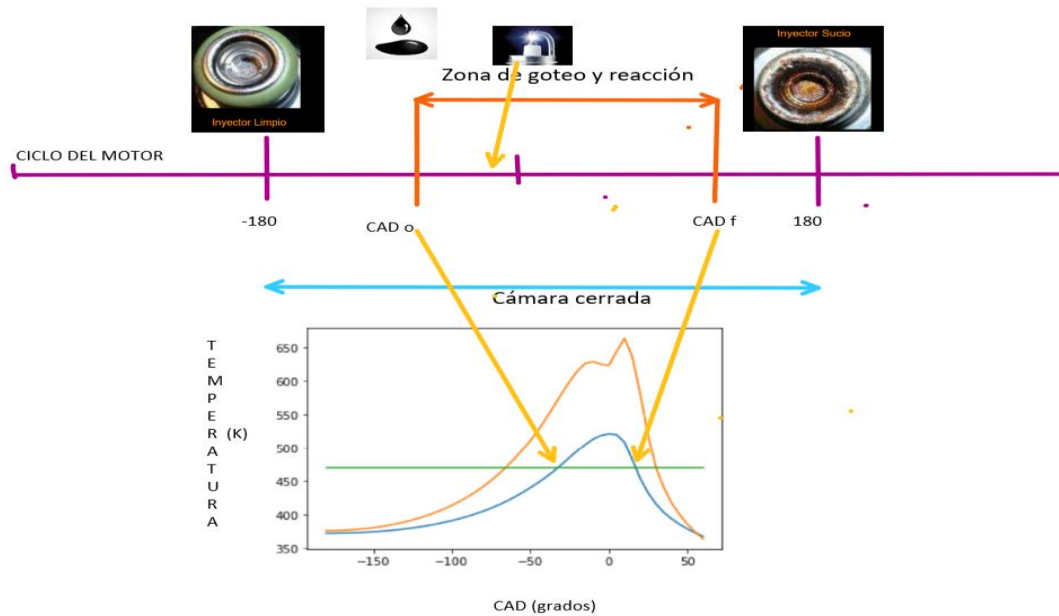


Figura 13 Fenómeno de estudio, la figura indica la línea de tiempo de formación de gomas, desde CAD_o en donde aparece la gota y se establece el intervalo de reacción en la curva de evaporación del combustible hasta CAD_f , donde aparece la goma en el inyector. Fuente: investigador.

3.4 Prueba de hipótesis-pregunta científica-idea a defender

En esta sección se identifican las variables independientes y dependientes sobre las cuales se realiza el estudio, tanto desde el punto de vista cuantitativo y correlacional, con la finalidad de encontrar relaciones y respuestas a las preguntas de investigación e hipótesis.

3.4.1 Variable explicativa

Es propósito de esta investigación es buscar la dependencia o no del tipo de combustible en la formación de gomas. Por consiguiente, el combustible se toma como la primera variable independiente a considerar. Además, es de interés observar en qué medida la temperatura de punta del inyector afecta a la formación de residuos, por tanto, la temperatura y tipo de combustible se consideran ahora como variables independientes. Es prudente indicar que el factor de la fuga de combustible en el inyector se asume como constante.

3.4.2 Variable respuesta

Estableciendo la cámara de combustión como el sistema de análisis en el que participan el tipo de combustible, temperatura del inyector y el intervalo de tiempo en el que producen las reacciones químicas de polimerización, se busca cuantificar la formación de

gomas por ciclo del motor. En tal virtud, la concentración de gomas por ciclo, se convierte en la variable dependiente.

3.4.3 Pregunta de investigación

¿El gradiente de temperaturas en la punta del inyector produce distintas tasas de formación de gomas?

¿La gasolina extra y ecopaís generan diferentes velocidades de reacción y tasas de formación de gomas?

3.4.4 Diseño experimental

Para este propósito se plantea un diseño experimental 2^2 tomando dos factores combustibles y temperatura de la punta del inyector en dos niveles cada uno: extra y ecopaís para el factor combustible. $T=150^{\circ}C$ y $T=190^{\circ}C$ para la temperatura, como se visualiza en la Tabla 5.

Tratamiento	Combustible	T inyector ($^{\circ}C$)
1	EXTRA	150
2	EXTRA	190
3	ECO	150
4	ECO	190

Tabla 5 Diseño experimental de dos factores, dos niveles variando tipo de combustible (extra y ecopaís) y temperatura ($T=150^{\circ}C$ y $T=190^{\circ}C$). Fuente: investigador

3.4.5 Prueba de hipótesis

Un análisis correlacional mediante la prueba anova, aplicada al diseño experimental de 2 factores y 2 niveles, busca responder las hipótesis planteadas respecto a los parámetros combustibles, temperatura y la tasa máxima de formación de gomas por ciclo.

Respecto del combustible, se plantea las siguientes hipótesis:

H_0 : El promedio de la tasa máxima de formación de gomas entre combustible extra y ecopaís es igual.

H_1 : La tasa máxima promedio del combustible extra difiere de la tasa máxima promedio del combustible ecopaís.

Las hipótesis respecto al parámetro temperatura son:

Ho: El promedio de la tasa máxima de formación de gomas entre $T=150^{\circ}\text{C}$ y $T=190^{\circ}$ es igual.

H1: La tasa máxima promedio a $T=150^{\circ}\text{C}$ difiere de la tasa máxima promedio a $T=190^{\circ}$.

3.5 Recolección de información

3.5.1 Datos del modelo del motor

Para el desarrollo de la simulación del motor se fijan varios parámetros, los más relevantes son mostrados en la Tabla 6 correspondiente a modelamiento multifísico, GDI de Ansys, la cual es ajustada para combustible extra E0 (isooctano) y ecopaís E5 (95% de isooctano y 5% de etanol).

Parámetro	unidad	valor
Diámetro	mm	90
Carrera	mm	14.47
Volumen muerto	cm^3	498.7
Relación de compresión	rc	1:10.32
Revoluciones del motor	rpm	2000
Presión de admisión	bar	1.0
Tipo de combustible		E0,E5
Ángulo de chispa	grados	705

Tabla 6 Valores iniciales para la simulación de motor. Fuente:investigador

De la simulación del motor se obtienen:

Curvas Presión [MPa] vs. ángulo (CAD $^{\circ}$) para gasolina EXTRA y ECO.

Curvas Temperatura [K] vs. ángulo (CAD $^{\circ}$) para gasolina EXTRA y ECO.

Curvas de Concentración [NO₂ (mM)] vs. ángulo (CAD $^{\circ}$) para gasolina EXTRA y ECO.

Curvas de Concentración [NO (mM)] vs. ángulo (CAD $^{\circ}$) para gasolina EXTRA y ECO.

3.5.2 Datos del modelo de evaporación del combustible e intervalo de estudio

El siguiente paso es generar las curvas de temperatura de ebullición[K] con la ecuación 18, las propiedades para los combustibles Extra (E0) y Ecopaís (E5) se indican en la Tabla 7, la ecuación es implementada mediante código en Python. A continuación se establece el intervalo de análisis de formación de gomas, al intersecar la función de evaporación de combustible con la función constante de temperatura media de la punta del inyector, de

los dos puntos encontrados es de interés el dominio temporal, que permite relacionar las concentraciones del remanente del combustible y los gases de combustión involucrados en la reacción química. De las referencias se conoce que la temperatura de la punta del inyector oscila entre [150 -190] °C.[28] , [15]

Parámetro	iso-octano	E5
$\dot{m} \text{ kg s}^{-1}$	30	30
P_0 (kPa)	101.3	101.3
T_{b0} (K)	498	490
R kJ/(molK)	8.314	8.314
λ_b (kJ/ mol)	31	28

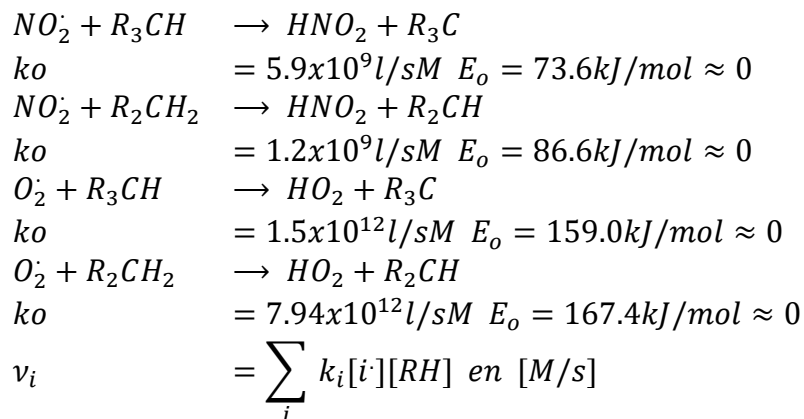
Tabla 7 Propiedades de los combustibles Extra (Isooctano) y Ecopais (E5) requeridos para generar la curva de evaporación. Fuente:investigador

3.5.3 Datos del mecanismo de formación de gomas

El proceso de formación de gomas se realiza utilizando criterios de cinética química y desarrollando un programa en Python a partir de los datos obtenidos en la simulación del motor.

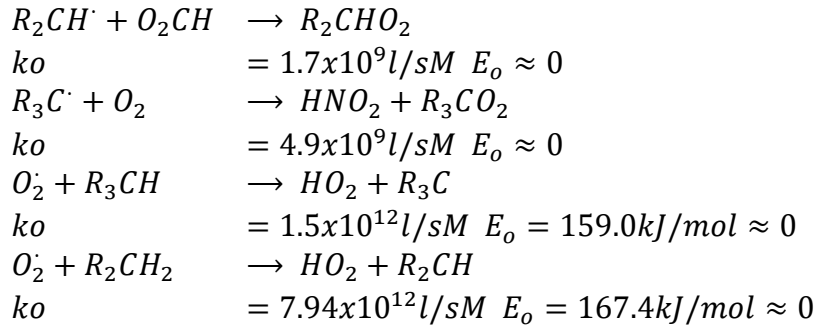
Inicio

La etapa de inicio comprende las reacciones entre los radicales formados por la alta temperatura de los gases de combustión, entre los que destacan el radical del dióxido de nitrógeno (NO_2) y radical oxígeno (O_2) por tener alta concentración y reactividad, con el remanente de combustible R_3CH y R_2CH_2 depositado en la punta del inyector. Formando un intermedio reactivo compuesto por R_3C y R_2CH



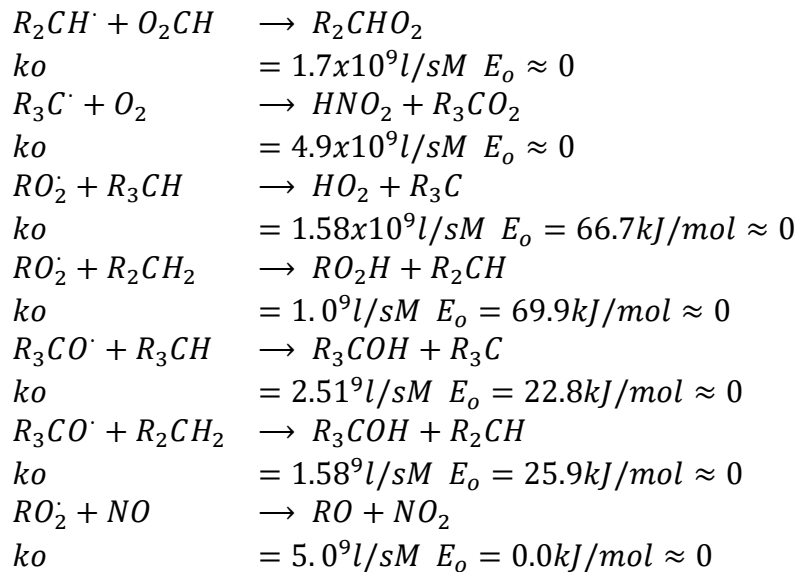
Oxidación

En esta etapa intermedia, el medio reactivo vuelve a reaccionar con el oxígeno reactivo y se produce otro medio reactivo, empezando a formar cadenas de polímeros hasta que las condiciones térmicas terminan con la reacción. Esta etapa se caracteriza por ser muy rápida y estable.



Propagación

En esta fase se agotan los medios reactivos y se producen reacciones que destruyen los medios reactivos y finalizan la reacción quedando fijas las cadenas de polímeros formados RO llamadas gomas.



3.5.4 Estructura del modelo cinético de formación de gomas

Ahora, considerando las velocidades de reacción, las concentraciones resultantes de cada reacción, se determina la velocidad total de reacción y la tasa de generación de gomas por ciclo. Que se encuentra sustentado por las siguientes ecuaciones de la cinética química.

$$v_i = \sum_i k_i [i] [RH].$$

v_i velocidad de reacción inicial en [M/s], k_i constante de velocidad y [RH] concentración de reactantes, en la que participan:

$$v_{NO_2} = k_{NO_2}[RO_2][NO_2]$$

v_{iNO_2} velocidad de reacción inicial del NO_2 en [M/s]

$$v_o = \sum_i k_{oi}[R][O_2].$$

v_o velocidad de reacción por oxidación en [M/s]

$$v_a = \sum_i k_{ai}[RO_2][RH].$$

$$v_{aOH} = \sum_i k_{aOH_i}[RO\cdot][RH].$$

v_a y v_{aOH} son velocidades de reacción por propagación en [M/s]

La tasa de producción total de formación de gomas v_t expresada en [M/s], está dada por;

$$v_t = v_i + v_{iNO_2} + v_a + v_{aOH} - v_o,$$

Por tanto, la tasa formación de la película de goma será:

$$\frac{d[RO_2]}{dt} = v_t$$

de donde, el modelo de formación de gomas queda expresado por:

$$[RO_2] = \int_{t_0}^t v_t dt$$

donde $[RO_2]$ es la concentración de gomas por ciclo expresada en [mM/ciclo].

3.6 Procesamiento de la información y análisis estadístico

A continuación mediante un listado secuencial de pasos, se describe la adquisición de datos, procesamiento de los mismos para determinar la formación de gomas en un ciclo del motor de combustión interna (MCI).

3.6.1 Listado secuencial

- Desarrollo de la simulación de MCI.

Características del motor real y simulado

Geometría.

Mallado.

-Condiciones de contorno e iniciales.

Parámetros de simulación.

- Caracterizar tipo de combustible EXTRA.

- Número de especies.

- Número de reacciones.

- Parámetros de transporte.

- Parámetros de turbulencia.

- Interacción gota de combustible - gases.

- Diagrama de presión vs. CAD.

- Diagrama T vs. CAD.

- Definir relación entre Temperatura de punta de inyector vs. CAD.

- Obtención diagrama de vaporización de combustible T_{vap} vs. CAD.

- Obtener la zona de formación de goma en T_{vap} vs. CAD.

- Análisis cinético químico de la formación de gomas.

- Obtención de diagramas de velocidad de reacción vs. CAD.

- Obtención de diagramas de concentración vs. CAD.

- Obtención de la razón de formación de gomas.

3.7 Variable respuesta o resultados alcanzados

El resultado se centra en encontrar la tasa de formación de gomas por ciclo de funcionamiento del motor, examinando el desempeño del motor con dos factores, y en dos niveles, combustible extra y combustible ecopaís a $T = 150^{\circ}C$ y $T = 190^{\circ}C$ respectivamente, como muestra la Tabla 8. Es necesario indicar que existen otros factores

como tamaño de gota en la fuga de combustible, consumo de combustible, instante de encendido de la mezcla y parámetros del motor que permanecen constantes.

Variables independientes	Variable dependiente
Combustible Extra	Concentración de gomas
Combustible ECO	
Temperatura del inyector a $T= 150^{\circ}C$	
Temperatura del inyector a $T= 190^{\circ}C$	

Tabla 8 Se observa, las variables independientes y la variable respuesta o dependiente, consideradas en el estudio. Fuente:investigador

CAPITULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este apartado inicialmente se muestran los datos requeridos para ejecutar la simulación del motor de combustión interna (MCI) en el programa ansys, a continuación se indican los resultados de la simulación que consta de diagramas, presión en [MPa], temperatura en grados kelvin [K], concentraciones de dióxido de nitrógeno NO_2 , monóxido de nitrógeno NO en [mM] de los gases de combustión, respecto del ángulo de giro del cigüeñal (CAD) en grados[$^\circ$], estos resultados son comparados por el tipo de combustible. Paso seguido se visualiza la curva de evaporación de cada combustible intersecada con la temperatura de la punta del inyector para la determinación del intervalo de tiempo en el que produce la reacción de polimerización. En la parte final del apartado se obtiene los resultados de la formación de gomas en [uM/ciclo] y resultados del análisis de varianza (anova).

4.1 Resultados de la simulación del MCI

Aquí se describe de forma sucinta y secuencial los parámetros de la simulación del MCI en Ansys, en la etapa de pre proceso apartados (4.1.1 y 4.1.2), proceso del (4.1.3al 4.1.5) y postproceso del (4.1.6 al 4.1.9), es necesario indicar en esta última fase se usó la data generada en Ansys y se graficó, presión, temperatura y concentraciones vs. CAD en Python

4.1.1 Caracterización del motor y geometría

El desarrollo de la simulación en Ansys, requirió considerar las dimensiones de un MCI que se encuentra validado por la biblioteca del simulador y que usan otros simuladores como es el KIVA [15] [[22], y corresponde al motor de un automóvil KIA Picanto de 988cm^3 . Es importante indicar que se aprovecha el criterio de simetría para obtener un menor costo computacional. Las principales características escogidas se indican en la Tabla 9.

La geometría obtenida necesaria constituye la frontera de estudio. Los detalles de la geometría se muestran en él [ANEXO B].

Parámetro	unidad	Valor
Diámetro	mm	90.4
Carrera	mm	14.5
Espacio muerto	mm	4.9
Radio de cigueñal	mm	7.25
Longitud de biela	mm	20.4
Volumen muerto	cm ³	30.3
Volumen máximo	cm ³	140.4
Relación de compresión	rc	1:10.3
Revoluciones del motor	rpm	2000
Presión de admisión	bar	0.73
Temperatura inicial de cámara	K	313
Tipo de combustible EXTRA	octanos	82
Tipo de combustible ECO	octanos	85
ángulo de chispa	grados	702

Tabla 9 Parámetros de motor simulado. Fuente:investigador

4.1.2 Características del mallado del motor

El mallado es una de las fases del preprocesamiento en la simulación donde se establece el dominio de estudio del motor de combustión de acuerdo a la Tabla 10

Características de malla	Valor
Tipo de malla	hexaédrica
Número de nodos	82366
Número de celdas	414369
Tamaño medio del elemento	2.79mm
Ω (Nc/Nn)	5.03
Tamaño mínimo del elemento	0.115mm
Radio de acuerdo	0.233mm
Tipo de malla	Dinámica e híbrida

Tabla 10 Características del mallado. Fuente:investigador

4.1.3 Modelos y coeficientes de la combustión

Entre los parámetros requeridos en la parte química se encuentran, tipo de combustible, modelo de transporte, modelo de turbulencia, tiempo de acción del inyector, instante de encendido de la chispa, coeficiente de propagación de llama, que se indican en la Tabla 11.

Tipo de Modelo	Característica
Químico	Combustible Extra
Transporte	Difusión
Turbulencia	RANS k-epsilon
Inyector	Inyector solido por 14 grados
Chispa	coeficiente de propagación 0.5
Radio de acuerdo	0.233mm
Tipo de malla	Dinámica e híbrida

Tabla 11 La tabla indica los principales parámetros involucrados en la combustión. Fuente:investigador

4.1.4 Condiciones de contorno e iniciales

El dominio de estudio comprende once bloques a los que se asigna las condiciones de entrada, salida y borde. Las condiciones iniciales de velocidad, temperatura, composición del aire y presión, corresponde a las condiciones normales. Ver Tabla 12.

Condiciones de contorno	
11 dominios	pared, entrada, salida
Condiciones iniciales	
Aire	0.79N2 y 0.21 O2
velocidad	0,0,0 m/s
Temperatura	1070 K
Presión	1.0 bar
Turbulencia	10000cm2/s

Tabla 12 Condiciones de contorno e iniciales. Fuente:investigador

4.1.5 Tipos de combustibles especies y reacciones

Los combustibles considerados son gasolina extra equivalente al isooctano con 49 especies y 8080 reacciones. La gasolina ECO(95 % de isooctano con 5% de etanol) compuesto por 171 especies y 30863 reacciones. Las reacciones se evalúan bajo la ley de Arrhenius, ecuación 1. Ver tabla 13.

$$K(T) = A. e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

K(T) es la constante de velocidad [colisiones/s]

A es factor de frecuencia de choques[colisiones/s]

E_a es la energía de activación de la reacción [kJ/mol]

R Constante Universal de los gases [kJ/mol K]

T temperatura [K]

Además, dentro de la simulación se mantiene constante la tasa de ingreso de combustible, tiempo de inyección de 14 grados a partir de los 720 grados del dominio del ciclo, la presión de inyección y coeficientes de turbulencia.

Característica	EXTRA	ECO
Especies	49	171
Número de reacciones	8080	30863
flujo de combustible	9E-3g/ciclo	9E-3g/ciclo
Intervalo de inyección	14°	14°
Temperatura	400K	400K
Presión	10 bar	10 bar
Turbulencia	10000cm2/s	10000cm2/s

Tabla 13 Características de los Combustibles. Fuente:investigador

4.1.6 Diagrama de presión vs, CAD

Los diagramas de presión vs ángulo de giro del cigüeña (CAD), producto de la simulación, corresponden en su forma al fenómeno físico, con presión máxima en la cámara de 4.87 [MPa] para la gasolina Extra y 4,77 [MPa] para la gasolina ECO coherente con los resultados obtenidos en [15]. Los diagramas se encuentran centrados, ya que el punto de inyección e ignición es el mismo para ambas simulaciones. Ver Figura 14.

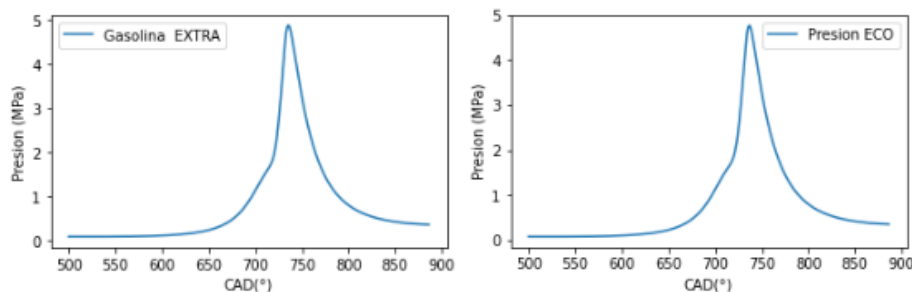


Figura 14 Imagen izquierda, presión en [MPa] vs CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, presión [MPa] vs CAD para combustible ECO. Fuente: investigador.

Superponiendo los diagramas en la Figura 15, se visualiza la diferencia entre ambos diagramas. Al realizar el proceso de normalización de la variable dependiente respecto de la gasolina extra, muestra una desviación creciente y decreciente, alcanzando un 8.0% en la zona de máxima compresión y un cambio del 1.0% a favor de la gasolina eco en la zona expansión, manteniendo la misma relación de compresión para ambos.

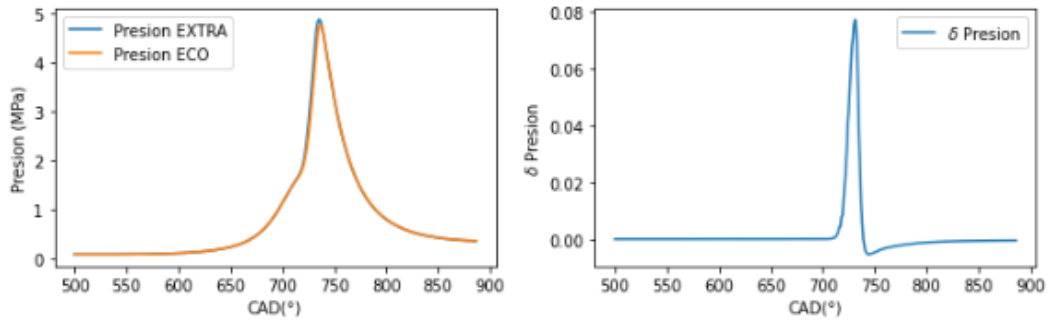


Figura 15 Imagen izquierda, presión [MPa] vs CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de presión de combustible eco respecto a extra. En fracción unitaria adimensional. Fuente: investigador.

4.1.7 Diagrama de temperatura vs. CAD

Los diagramas de temperatura vs ángulo de giro del cigüeñal (CAD) en la Figura 16 resultado de la simulación corresponden en su forma al fenómeno físico, con temperatura máxima 2724 K en la cámara para la gasolina Extra y 2729 K para la gasolina ECO coherente con los resultados obtenidos en [15]. Los diagramas se encuentran centrados.

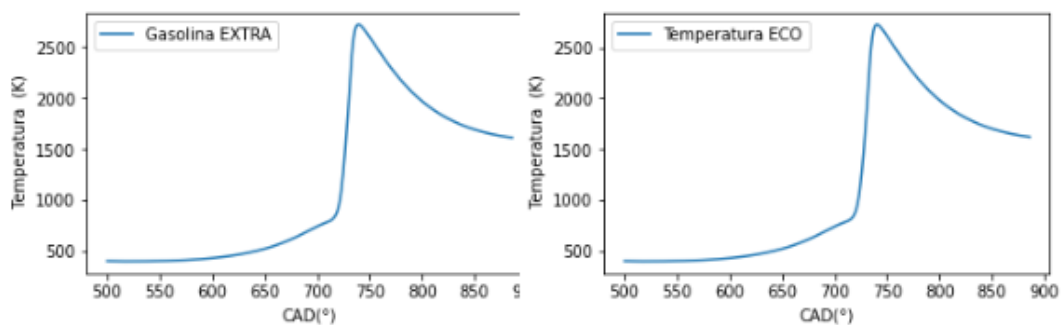


Figura 16 Imagen izquierda, Temperatura vs. CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, Temperatura vs. CAD para combustible ECO. Fuente: investigador.

Superponiendo los diagramas en la Figura 17 se visualiza la diferencia entre ambos. Al realizar el proceso de normalización de la variable dependiente respecto de la gasolina eco, muestra una desviación creciente y decreciente, alcanzando un 6% en la zona de máxima compresión y un cambio del 1% a favor de la gasolina extra en la zona expansión, manteniendo la misma relación de compresión para ambos.

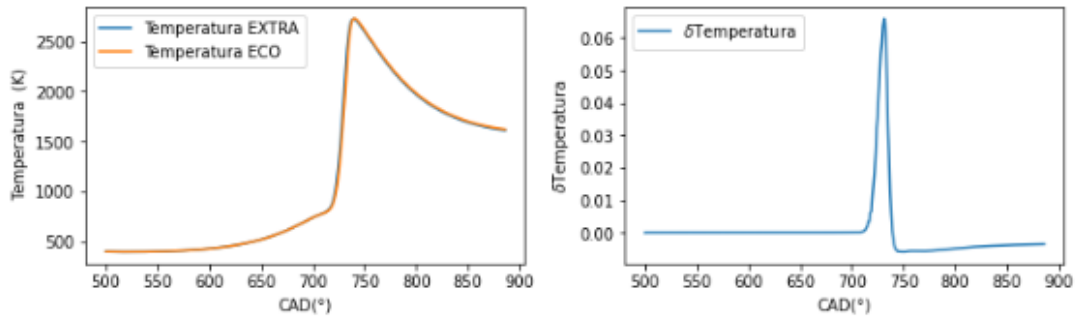


Figura 17: Imagen izquierda, Temperatura vs. CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de temperatura de combustible extra respecto de la eco. Fuente: investigador.

4.1.8 Diagrama de NO₂ vs. CAD

Los diagramas de concentración del dióxido de nitrógeno NO₂[mM] vs ángulo de giro del cigüeñal (CAD) mostrados en la Figura 18, obtenido de la simulación, reproducen en la forma y en orden de magnitud al fenómeno físico obtenido en [8], [15], con una concentración máxima de 0.00459 [mM] para la gasolina Extra y 0.00496[mM] para la gasolina ECO.

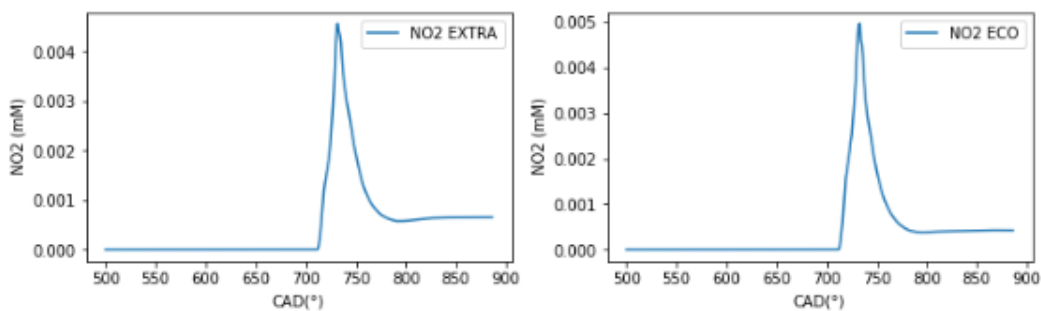


Figura 18 Imagen izquierda, concentración de NO₂[mM] vs. CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, concentración de NO₂[mM] vs. CAD para combustible Eco. Fuente: investigador.

La superposición de los diagramas de concentración de NO₂ en la Figura 19, describe ambos diagramas mantienen el mismo comportamiento con ligeras diferencias en la cresta a favor de la gasolina eco y que en la parte estable a partir de los 770 °. La concentración es mayor para la gasolina extra. El diagrama normalizado de la variable concentración NO₂ resulta ser fluctuante y a favor de la gasolina eco con un valor máximo 12.5% para luego cambiar dicho comportamiento a favor de la gasolina extra con un 4%.

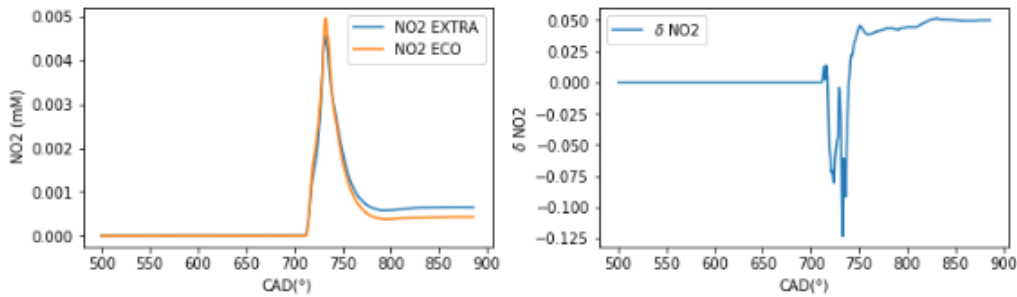


Figura 19 Imagen izquierda, concentración de NO₂[mM] vs. CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de concentración δ NO₂ de combustible eco respecto a extra. Fuente: investigador.

4.1.9 Diagrama de NO vs. CAD

Los diagramas de concentración de monóxido de nitrógeno NO[mM] vs ángulo de giro del cigüeñal (CAD) mostrados en la Figura 20, arrojado de la simulación, reproducen en la forma y en orden de magnitud al fenómeno físico obtenido en [15], con una concentración máxima de 0.383 [mM] para la gasolina Extra y 0.379[mM] para la gasolina ECO.

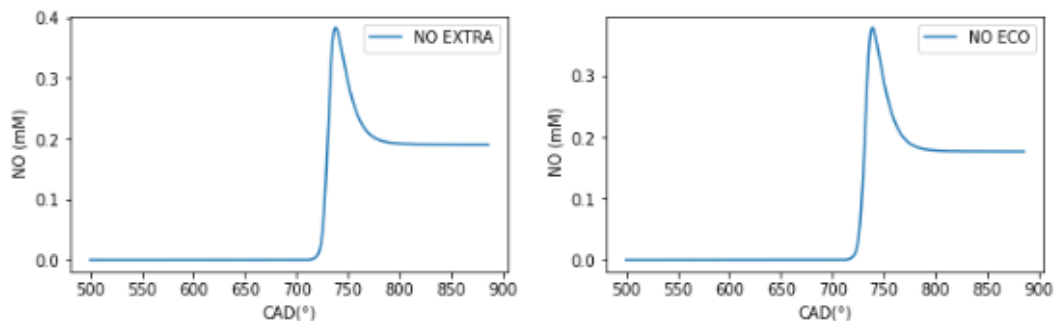


Figura 20 Imagen izquierda, concentración de NO [mM] vs CAD para combustible Extra, mientras que en la imagen derecha, concentración de NO [mM] vs. CAD para combustible ECO. Fuente: investigador.

La superposición de los diagramas de concentración de NO de la Figura 21, muestra que ambos diagramas mantienen el mismo comportamiento con ligeras diferencias en la cresta a favor de la gasolina eco y que en la parte estable a partir de los 770 °. La concentración es mayor para la gasolina extra. El diagrama normalizado de la variable concentración NO resulta ser pulsante y a favor de la gasolina extra en casi todo el intervalo con un valor máximo 12% para luego cambiar dicho comportamiento a favor de la gasolina eco menor al 1% alrededor de los 740 °.

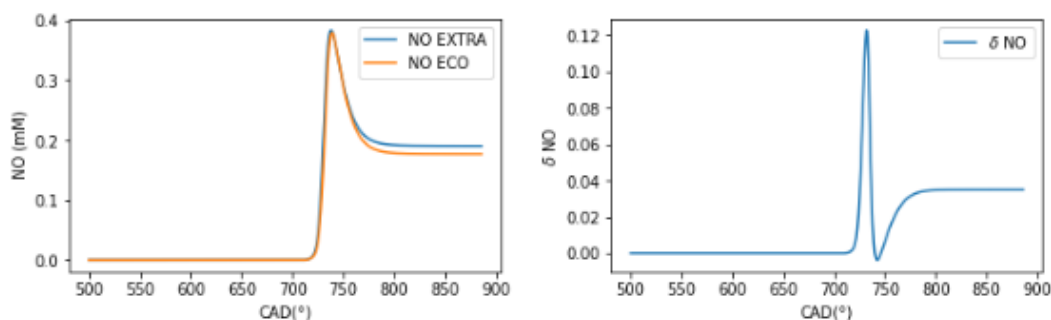


Figura 21 Imagen izquierda, concentración NO[mM] vs. CAD para combustible Extra y Eco, mientras que en la imagen derecha, la desviación de concentración adimensional para δ NO de combustible eco respecto a extra. Fuente: investigador.

4.2 Interacción gota gases de combustión

A partir de los diagramas de presión vs. CAD propio para cada combustible, se obtiene la curva de evaporación del combustible, la que se interseca con la recta de temperatura de la punta del inyector, de allí se desprende el intervalo de cambio de fase y de reacción de formación de gomas, descrito en 3.5.2. Los siguientes resultados cuantifican el proceso y permiten establecer diferencias.

4.2.1 Temperatura de evaporación del combustible y temperatura de la punta del inyector.

Los resultados obtenidos de la simulación posteriormente son procesados en un programa desarrollado en python [ANEXO A] con base en el modelo planteado en [15].

Primeramente, se obtienen los diagramas de evaporación del combustible mediante la ecuación [18] y se interseca con las funciones constantes de temperatura del inyector 150 °C y 190 °C como se indica en el apartado [3.5.2]. Y se visualizan en la Figura 22.

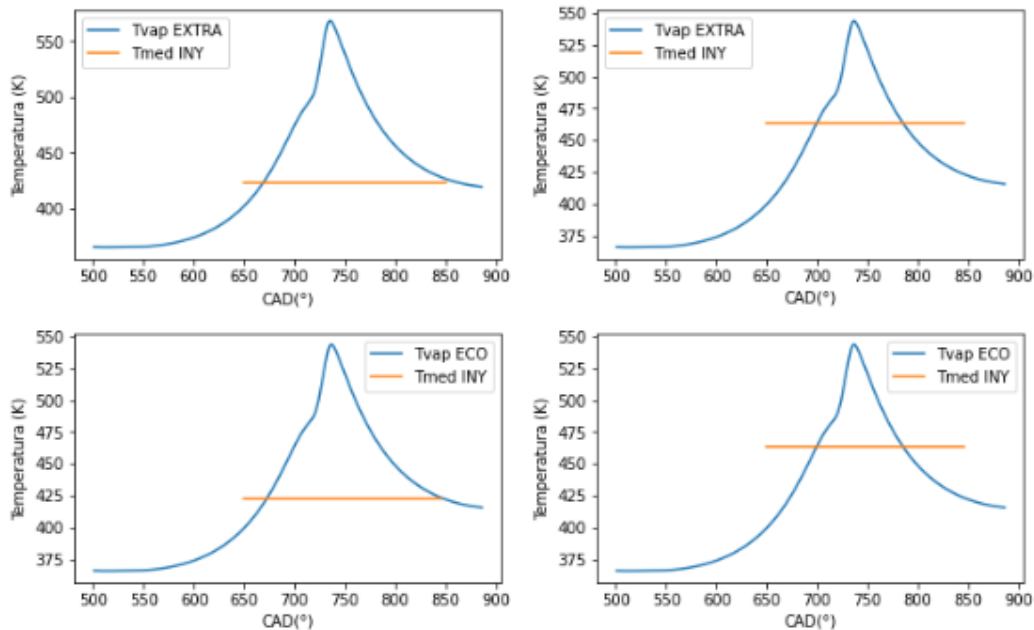


Figura 22 Tebullición y Tinyector A)Extra a T=150 °C, B)Extra a T=190 °C, C)Eco a T=150 °C, D) Eco a T=190 °C. Fuente: investigador.

Estos diagramas son de gran importancia, ya que permiten establecer el intervalo de estudio en el que se produce las reacciones de oxidación en estado líquido con los gases de combustión.

La zona superior comprendida entre la curva de evaporación y la línea de temperatura del inyector indica la zona en la que el combustible se mantiene en estado líquido. La presión de la gota es menor que la presión de evaporación. Para las zonas fuera del intervalo, el combustible cambia de fase, se evapora, Tabla 14 y se incorpora al fenómeno de combustión.

CASO	Intervalo ° CAD
Combustible Extra a T= 150°C	177-343
Combustible Extra a T= 190°C	190 -285
Combustible ECO a T= 150°C	177-342
Combustible ECO a T= 190°C	202-282

Tabla 14 Intervalos de formación de gomas. Fuente:investigador

4.3 Velocidades de reacción para la formación de gomas

En esta etapa, se obtiene la tasa de formación de gomas [mM/s] vs tiempo de reacción [ms], generada mediante la programación de toda la cinética química de reacciones basada en las ecuaciones [3.4] a [3.9], de esa forma se obtiene los diagramas de inicio y

final de la reacción mostrados en la Figura 23. Estos diagramas en su forma y orden de magnitud se encuentran acorde a lo descrito en [15],[17].

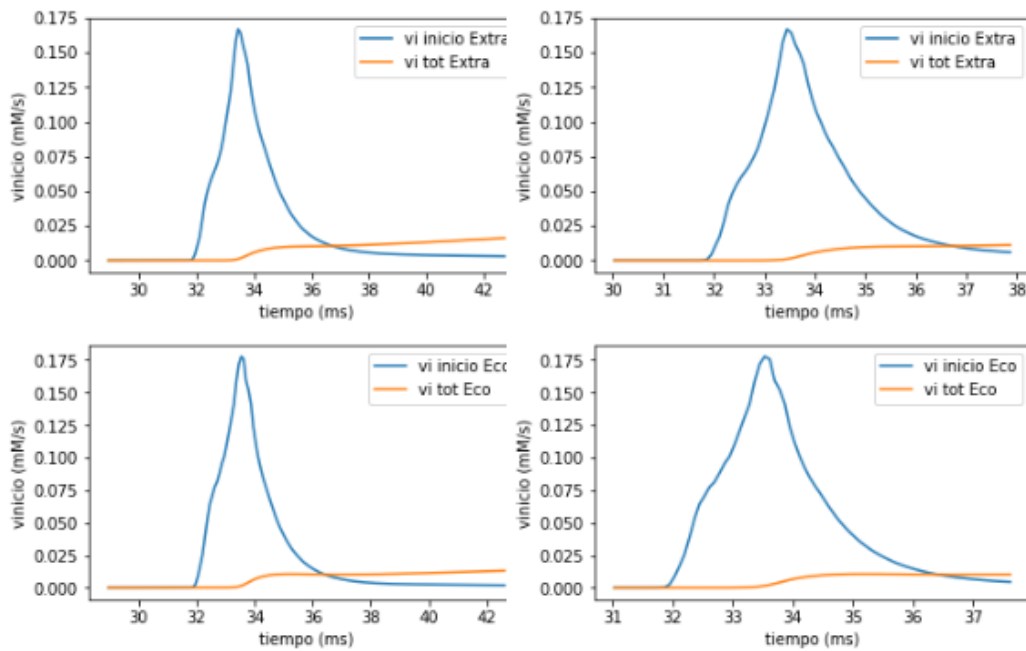


Figura 23 : Velocidad inicial y final de reacción en [mM/s] para cada tratamiento A)Extra a $T=150^{\circ}C$, B)Extra a $T=190^{\circ}C$, C)Eco a $T=150^{\circ}C$, D) Eco a $T=190^{\circ}C$. Fuente: investigador.

El dominio en estos diagramas se expresa en ms y corresponde al intervalo de tiempo de reacción obtenido en el anterior apartado. El área bajo la curva de color naranja de la Tabla 15 representa la tasa de formación de gomas [mM] por cada ciclo del motor.

Vel. reacción mM/s	Extra	ECO
Rx ini. a $T= 150^{\circ}C$	0.16690	0.17750
Rx ini. a $T= 190^{\circ}C$	0.16690	0.17750
Rx tot. a $T= 150^{\circ}C$	0.016290	0.01331
Rx tot. a $T= 190^{\circ}C$	0.011230	0.01062

Tabla 15 Velocidades de reacción iniciales y totales a $T= 150^{\circ}C$ y $T= 190^{\circ}C$. Fuente:investigador.

La formación de gomas ocurre a partir del punto de velocidad inicial máxima y en forma de escalón.

4.3.1 Concentración de gomas

Los siguientes diagramas mostrados en la Figura 24 y 25, describen la tasa de formación de gomas por ciclo. Se ratifica el inicio de la formación en torno a los 34ms y en forma lineal y creciente hasta alcanzar el máximo de formación con:tasa de formación máxima

para combustible extra a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ 0.105 (mM/ciclo) y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$ 0.04(mM/ciclo), tasa de formación máxima para combustible eco a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ 0.096 (mM/ciclo) y $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$ 0.038(mM/ciclo)

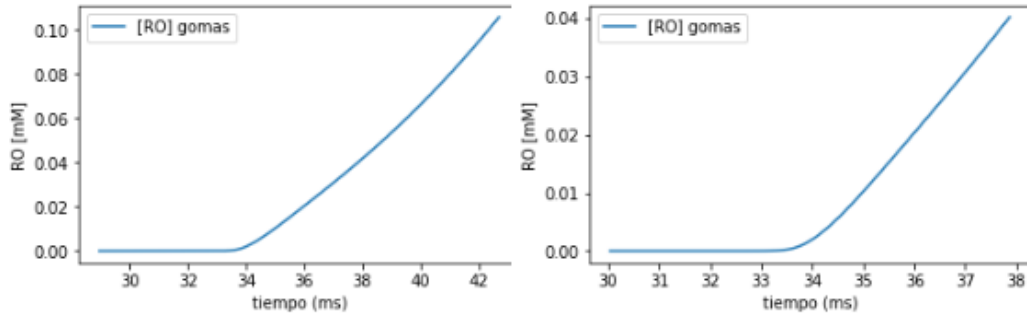


Figura 24 Concentración final de gomas A)Extra a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$, B)Extra a $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$, C)Eco a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$, D) Eco a $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$. Fuente: investigador.

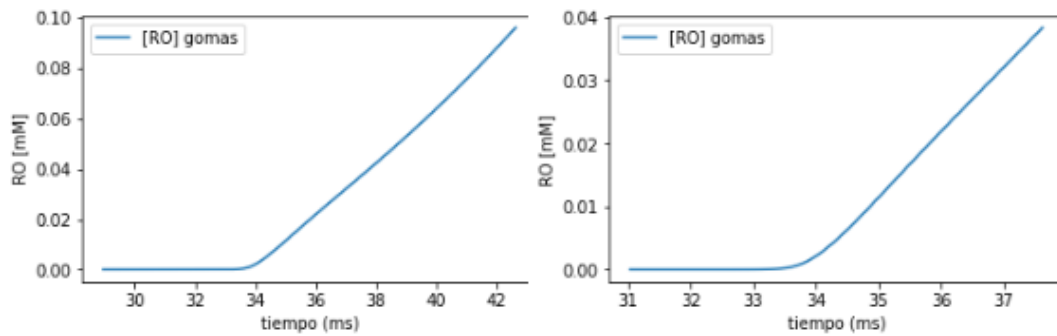


Figura 25 Concentración final de gomas A)Extra a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$, B)Extra a $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$, C)Eco a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$, D) Eco a $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$. Fuente: investigador.

4.3.2 Análisis de la razón de formación de gomas

Al ser los resultados muy cercanos, primeramente se ejecutó una superposición de los diagramas por temperatura del inyector. Ver Figura 26, para el caso de $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ EXTRA-ECO muestra que existe una misma tendencia de crecimiento correspondiente a un polinomio de grado 2 con $R^2 = 0.99$, en tanto que para el caso de $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$ EXTRA-ECO se muestra que existe una misma tendencia de crecimiento correspondiente a un polinomio de grado 2 con $R^2 = 0.99$ y un cambio en el coeficiente del primer término significativo respecto de $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$

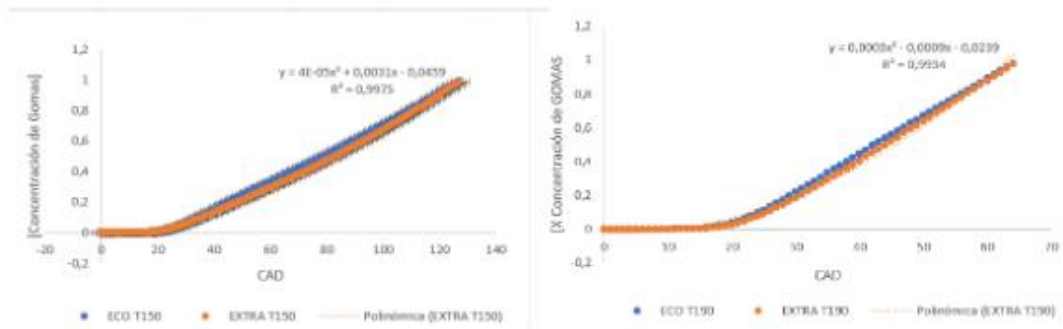


Figura 26 Concentración de gomas A)Extra a T=150 °C y Eco a T=150 °C B)Extra a T=190 °C y Eco a T=190 °C. Fuente: investigador.

Al ser los resultados muy cercanos. Se realiza un análisis normalizado de la variable de respuesta (tasa de formación de gomas por ciclo) por estratos de temperatura, como se muestra en la Figura 27. Para el caso de T=150 °C ECO/EXTRA muestra que existe proceso de formación desde el inicio del intervalo cercanos a cero y de manera fluctuante para luego crecer de manera polinómica de grado 3 con un $R^2 = 0.99$.

Por otro lado, cuando T=190 °C eco/extra, muestra que no existe proceso de formación desde el inicio del intervalo para luego crecer de manera polinómica de grado 5 con un $R^2 = 0.99$. Creciente hasta recorrer 45 grados CAD del intervalo de formación para luego decrecer hasta el final del intervalo.

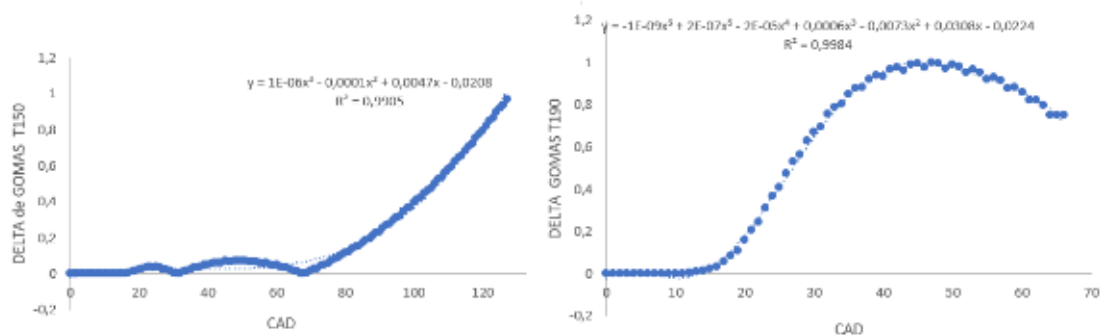


Figura 27 DELTA DE GOMAS A)Extra a T=150 °C y Eco a T=150 °C B)Extra a T=190 °C y Eco a T=190 °C. Fuente: investigador.

4.4 Concentración de gomas por ciclo

En este apartado se visualiza, el resultado de la aplicación del modelo de generación de gomas, al obtener la tasa de formación de gomas por ciclo [μM /ciclo] para cada uno de los ensayos planteados, mediante la Tabla 16, Observando que la tasa de formación de gomas para la gasolina extra es mayor que para la ecopaís, sin importar la temperatura de

la punta del inyector, adicionalmente, la tasa de formación para la temperatura de la punta del inyector en $T= 150\text{ }^{\circ}\text{C}$ es mayor e independiente del tipo de combustible, debido a que el intervalo de tiempo de reacción es mayor a menor temperatura.

	Tinyector 150°C	Tinyector 190°C
EXTRA	0.105	0.04
ECO	0.096	0.038

Tabla 16 Concentración de gomas [$\mu\text{M}/\text{ciclo}$]. **Fuente:**investigador.

4.5 Análisis de varianza

En función de los resultados mostrados en la Tabla , con respecto al tipo de combustible,y debido a que el valor de $p= 0.36$ mayor que 0.05 , se puede concluir que no existe diferencia significativa entre la tasa máxima de formación entre la gasolina extra y ecopaís. Mientras que entre las temperaturas $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $T=190\text{ }^{\circ}$ si existe diferencia significativa entre la tasa máxima de formación de gomas, ya que $p=0.03619$ es menor que 0.05 . Ahora, considerando el valor de F respecto del valor F crítico para el factor combustibles y dado que $F=2.4693$ menor que 161.4476 , significa que no existe evidencia para rechazar H_0 , concluyendo que el factor combustible no es significativo para la tasa máxima de formación de gomas. Para el caso del factor temperatura, al tener el estadístico F un valor de 308.7551 mayor que el valor de F crítico = 161.4476 , nos lleva a rechazar H_0 , es decir, si hay diferencias significativas del factor temperatura en la tasa máxima de formación de gomas. En resumen, se puede afirmar que el tipo de combustible no influye significativamente en la tasa máxima de formación de gomas, mientras que la temperatura si influye significativamente en la tasa máxima de formación de gomas.

Variaciones	Suma de cuadrados	Promedio cuadrados	F	Probabilidad	F crítico
Combustible	3.025E-05	3.025E-05	2.469	0.360	161.4476
Temperatura	0.0037	0.0037	308.75	0.0361	161.4476
Error	1.225E-05	1.225E-05	2.469	0.360	
Total	0.00382475				

Tabla 17 Análisis de varianza. Fuente:investigador

CAPITULO V

CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES, BIBLIOGRAFÍA Y ANEXOS

5.1 CONCLUSIONES

Al variar el tipo de combustible en la simulación se observa que la presión máxima es 8% mayor para la gasolina extra respecto de la ecopaís y sus valores se encuentran en el orden de los 5MPa. La presión durante la expansión es aproximadamente mayor en 1% a favor de la gasolina ecopaís. Para la temperatura se invierte el comportamiento y la temperatura máxima es un 6% mayor para la gasolina ecopaís. Tanto para presión como para temperatura vs CAD se observa el mismo patrón de cambio en forma de pico para el diagrama normalizado.

Los resultados de la simulación para la concentración de NO_2 es un 12.5% mayor para la gasolina ecopaís, las concentraciones se encuentran en el orden de los [mM], la forma de pico del diagrama de concentración versus CAD para ambos combustibles es la misma. Durante la etapa de combustión la variación de la concentración de NO_2 entre los dos combustibles es fluctuante, terminando 5% a favor de la gasolina extra en la etapa de expansión. Respecto de la concentración de NO mantiene la forma de pico con un 12% mayor para la gasolina extra. El diagrama de la desviación unitaria es en forma de pico a favor de la gasolina extra.

La fuga de combustible en el cierre de la válvula del inyector y la temperatura de la punta del inyector aparecen como los factores precursores de la formación de gomas, marcando los intervalos de reacción sobre los que se aplica el análisis de la cinética química. A mayor área comprendida entre la curva de evaporación del combustible y la temperatura de la punta del inyector mayor será el tiempo de polimerización y por ende la formación de gomas.

El análisis de la formación de gomas mediante el uso de la cinética química permitió obtener los diagramas de velocidad de reacción en [mM/s] vs. CAD en [ms] cuya pendiente representa la aceleración en la formación de gomas dada por [mM/s²]. Observando que la velocidad de reacción inicial para todos los casos es una función en forma de pico, mientras que la velocidad total de reacción es una función tipo escalón debido a la dinámica de las reacciones químicas. La velocidad de reacción inicial máxima

para gasolina ecopaís es mayor que para la extra en un 6% y en el orden de los (0.1775,0.1669)[mM/s], la velocidad de reacción máxima para cada combustible es la misma sin ser afectada por la temperatura de la punta del inyector. Además, la velocidad total de reacción a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ es mayor en ambos combustibles, 31% para gasolina extra y 22% en el caso de ecopaís.

Los diagramas de concentración de gomas en [mM] vs. CAD[ms], cuya pendiente sería la tasa de formación de gomas en [M/s], muestran que la concentración de gomas crece en forma lineal para todos los combustibles y temperaturas consideradas, también la tasa de formación de gomas es inversamente proporcional a la temperatura de la punta del inyector y no dependiente del tipo de combustible. La mayor tasa de formación de gomas se presenta para la gasolina extra independientemente de la temperatura de la punta del inyector, encontrando su mayor valor en $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ con $0.105\text{ }[\mu\text{M}/\text{ciclo}]$. Al comparar las curvas por la temperatura de la punta del inyector a $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$, se obtiene una variación del tipo polinómica de grado 3 a favor de la gasolina extra siempre creciente. Mientras que para $T=190\text{ }^{\circ}\text{C}$ el ajuste de la variación es de grado cinco, con zona de crecimiento y decrecimiento igualmente a favor de la gasolina extra, este comportamiento encuentra sus causas en el corto tiempo de reacción que se tiene y eso impide que se completen los procesos de polimerización. De manera global, se puede decir que la mayor tasa de formación de gomas se presenta en la etapa de encendido del vehículo y primeras horas de uso, en la que la temperatura de la punta del inyector es baja y facilita el proceso de polimerización.

El resultado de la prueba de varianza (anova) refleja que con respecto al tipo de combustible, y debido a que el valor de $p=0.36$ mayor que 0.05 , se puede concluir que no existe diferencia significativa entre la tasa máxima de formación de gomas entre la gasolina extra y ecopaís. Mientras que entre las temperaturas $T=150\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $T=190\text{ }^{\circ}$ si existe diferencia significativa entre la tasa máxima de formación de gomas, ya que $p=0.03619$ es menor que 0.05 . Además, siendo el valor de $F=2.4693$ menor que $F_{\text{crítico}}=161.4476$, para los combustibles. Indica que el factor combustible no es significativo para la tasa máxima de formación de gomas, en tanto que para el caso del factor temperatura, al tener el estadístico un valor de $F=308.7551$ mayor que el valor de $F_{\text{crítico}}=161.4476$, muestra que el factor temperatura es significativo en la tasa máxima de formación de gomas. En resumen, se puede afirmar que el tipo de combustible no

influye significativamente en la tasa máxima de formación de gomas, mientras que la temperatura si influye significativamente en la tasa máxima de formación de gomas.

5.2 RECOMENDACIONES

Sería conveniente realizar una experimentación a nivel local de la cual se pueda extraer las curvas de presión, temperatura y concentración de los gases de combustión versus CAD para las condiciones planteadas en este trabajo, con la finalidad de realizar la validación y ajuste del modelo simulado.

Un tema que requiere mayor desarrollo es el estudio de las fugas en la válvula del inyector, sobre la cual se pueden plantear nuevas estrategias o modelos que permitan minimizar las fugas y con ello la formación de gomas.

Aún queda pendiente un estudio experimental más profundo de las consecuencias que acarrearán las gomas en los inyectores, considerando los combustibles locales y tipo de inyector.

5.3 BIBLIOGRAFÍA

- [1] K. M. C. Corr C. Jewitt, «Changes in Gasoline IV ‘The Auto Technician’s Guide to Sprak Ignition Engine Fuel Quality», *Chang. Gasol. IV*, 2009.
- [2] J. A. Avilés Mata, «Análisis comparativo de la cinética de formación de gomas de las gasolinas extra y super que produce la Refinería Esmeraldas en reactores experimentales de vidrio y acero», B.S. thesis, Quito: UCE, 2018.
- [3] Z. Stepien, «Study of the various factors influencing deposit formation and operation of gasoline engine injection systems», en *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2016, vol. 148, n.º 1, p. 012052.
- [4] Inec, «Anuario de Estadísticas de Transporte 2018», *Inec*, 2018.
- [5] F. Palencia, M. Folgeras, y F. Gómez, «Influencia de los aditivos oxigenados sobre las propiedades de las gasolinas», *Univ. Oviedo*, 2014.
- [6] G. do S. V. Martins y others, «Caracterização e comportamento térmico de gomas de gasolina depositadas em veículos automotivos.», 2006.
- [7] W. Zhang *et al.*, «Impact of injector tip deposits on gasoline direct injection engine combustion, fuel economy and emissions», *Appl. Energy*, vol. 262, p. 114538, 2020.
- [8] J. M. Mantilla, «Modelado de la combustión de mezclas gasolina-etanol en motores de combustión interna.», *Esc. Procesos Energ.*, 2010.
- [9] J. M. Nagpal, G. C. Joshi, J. Singh, y S. N. Rastogi, «Gum forming olefinic precursors in motor gasoline. a model compound study», *Fuel Sci. Technol. Int.*, vol. 12, n.º 6, pp. 873-894, 1994, doi: 10.1080/08843759408916211.

- [10] F. Pradelle, S. Leal Braga, A. R. Fonseca de Aguiar Martins, F. Turkovics, y R. Nohra Chaar Pradelle, «Certainties and challenges in modeling unwashed and washed gums formation in Brazilian gasoline–ethanol blends», *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 122, pp. 77-96, 2017, doi: 10.1016/j.cherd.2017.03.037.
- [11] J. B. J. Reid *et al.*, «The Investigation of the Structure and Origins of Gasoline Direct Injection (GDI) Deposits.», 2019.
- [12] N. Li, J. Long, Y. Zhao, Z. Tao, y Z. Dai, «DFT study of Oxidation Initiation for Different Compound in Gasoline», *J. Clean Energy Technol.*, vol. 6, n.º 3, 2018.
- [13] B. Wang *et al.*, «Numerical analysis of deposit effect on nozzle flow and spray characteristics of GDI injectors», *Appl. Energy*, vol. 204, pp. 1215-1224, 2017.
- [14] J. R. Sodr e y R. N. D. A.  vila, «Kinetic model for gasoline gum formation during storage under use conditions in vehicle engine», 2006.
- [15] R. I. Slavchov, S. Mosbach, M. Kraft, R. Pearson, y S. V. Filip, «An adsorption-precipitation model for the formation of injector external deposits in internal combustion engines», *Appl. Energy*, vol. 228, pp. 1423-1438, 2018.
- [16] D. E. Ramajo, «Simulaci n computacional de los procesos fluidodin micos en el interior de motores de combusti n interna», *CIMEC Doc. Repos.*, 2008.
- [17] A. Islam, M. U. Sohail, S. M. Ali, y R. K. Ammar-ul-Hassan, «Simulation of four stroke internal combustion engine», *Int. J. Sci. Eng. Res.*, vol. 7, n.º 2, pp. 1212-1219, 2016.
- [18] X. Zhen, Y. Wang, S. Xu, y Y. Zhu, «Study of knock in a high compression ratio spark-ignition methanol engine by multi-dimensional simulation», *Energy*, vol. 50, pp. 150-159, 2013.
- [19] J. K. Smith, P. Roberts, A. Kountouriotis, D. Richardson, P. Aleiferis, y D. Ruprecht, «Thermodynamic modelling of a stratified charge spark ignition engine», *Int. J. Engine Res.*, vol. 21, n.º 5, pp. 801-810, 2020.
- [20] K. Kolambe y S. Borse, «ENGINE COMBUSTION SIMULATION USING OPENFOAM».
- [21] T. Lucchini *et al.*, «Modeling internal combustion engines using the OpenFOAM® library», 2014.
- [22] L. Anetor, E. E. Osakue, y K. Harris, «Simulation studies of combustion in spark ignition engine using OpenFOAM», *FME Trans.*, vol. 48, n.º 4, pp. 787-799, 2020.
- [23] S. Gundmalm, «CFD modeling of a four stroke SI engine for motorcycle application», *Master Sci. Thesis Stockh. Swed.*, 2009.
- [24] H. Xu, C. Wang, X. Ma, A. K. Sarangi, A. Weall, y J. Krueger-Venus, «Fuel injector deposits in direct-injection spark-ignition engines», *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 50, pp. 63-80, 2015.
- [25] Petroecuador, «Informe estadístico anual 2018», *Inf. Estad. Anu. Petroecuador*, 2018.
- [26] J. C. C. Valdivieso *et al.*, «Estudio comparativo de potencia, torque y emisiones contaminantes en un motor de combusti n interna de encendido provocado (MEP) con combustible extra, e5 y e10 a una altura de 2700 MSNM», *Infociencia*, vol. 11, n.º 1, pp. 132-138, 2017.

- [27] E. Llanes Cedeño, J. Rocha-Hoyos, D. Peralta Zurita, y J. Leguísamo Milla, «Evaluación de emisiones de gases en un vehículo liviano a gasolina en condiciones de altura», *Caso Estud. Quito Ecuad. Enfoque UTE*, vol. 9, n.º 1, pp. 119-158, 2018.
- [28] J. R. Sodr  y R. N. De Andrade  vila, «Kinetic model for gasoline gum formation during storage under use conditions in vehicle engine"», dic. 2006.

5.4 ANEXOS

ANEXO A Código de programación en Python

```
"
"

7  import matplotlib.pyplot as plt
8  import pandas as pd
9  import numpy as np
10 import statistics
11 #Importando archivo de excel
12 #cadpt=pd.ExcelFile('D:\Documentos\PHYTON TRABAJOS\KIVA-PY/P_TvsCAD.xlsx')
13 #cadpt=pd.read_excel('D:\Documentos\PHYTON TRABAJOS\KIVA-PY/P_TvsCAD.xlsx')
14 cadpt=pd.read_excel('D:\Documentos\PHYTON TRABAJOS\KIVA-PY\datmotor1_1.xlsx')
15 cadpt1=pd.read_excel('D:\Documentos\PHYTON TRABAJOS\KIVA-
    PY\thermo1etanol_1.xlsx')
16 #mirar la data
17 m= 387 #numero de filas de la data
18 #print(cadpt)
19 #print (cadpt.dtypes)
20 x=cadpt['Angulo (deg)']
21 x1=cadpt['Tiempo (ms)']
22 y=cadpt['Temperatura (K)']
23 z=cadpt['Presion (MPa)']
24 zm=cadpt['Mc8h18']

25 z1=cadpt['NO (g/kgfuel)']*(1/(0.69*30.06*10))
26 z2=cadpt['NO2 (g/kgfuel)']*(1/(0.69*46.06*1))
27 z3=cadpt['CO (g/kgfuel)']*(1/(0.69*28.01*100))

28

29 #####

30 xe=cadpt1['Angulo (deg)']
31 x1e=cadpt1['Tiempo (ms)']
32 ye=cadpt1['Temperatura (K)']
33 ze=cadpt1['Presion (MPa)']

34 z1e=cadpt1['NO (g/kgfuel)']*(1/(0.69*30.06*10))
35 z2e=cadpt1['NO2 (g/kgfuel)']*(1/(0.69*46.06*1))
36 z3e=cadpt1['CO (g/kgfuel)']*(1/(0.69*28.01*100))

37 #####

38 fig30 = plt.figure(30)
39 fig30.clf()
40 ax = fig30.add_subplot(1,1,1)
41 ax.plot(x,z,'-',label='Presion EXTRA')
42 ax.plot(xe,ze,label='Presion ECO')
43 ax.set_xlabel('CAD(°)')
44 ax.set_ylabel('Presion (MPa)')
45 #ax.set_title('NO2')
46 ax.grid(False)
47 ax.legend()
48 fig3
0.set_size_inches(5,3)
```

```

49
50 #####
51 fig31 = plt.figure(31)
52 fig31.clf()
53 ax = fig31.add_subplot(1,1,1)
54 ax.plot(x,y,label='Temperatura EXTRA')
55 ax.plot(xe,ye,label='Temperatura ECO')
56 ax.set_xlabel('CAD(°)')
57 ax.set_ylabel('Temperatura (K)')
58 #ax.set_title('NO2')
59 ax.grid(False)
60 ax.legend()
61 fig3
1.set_size_i
nches(5,3)
62
63 #####
64 fig32 = plt.figure(32)
65 fig32.clf()
66 ax = fig32.add_subplot(1,1,1)
67 ax.plot(x,z2,'-',label='NO2 EXTRA')
68 ax.plot(xe,z2e,'-',label='NO2 ECO')
69 ax.set_xlabel('CAD(°)')
70 ax.set_ylabel('NO2 (mM)')
71 #ax.set_title('NO2')
72 ax.grid(False)
73 ax.legend()
74 fig3
2.set_size_i
nches(5,3)
75
76 #####
77 fig33 = plt.figure(33)
78 fig33.clf()
79 ax = fig33.add_subplot(1,1,1)
80 ax.plot(x,z1,'-',label='NO EXTRA')
81 ax.plot(xe,z1e,label='NO ECO')
82 ax.set_xlabel('CAD(°)')
83 ax.set_ylabel('NO (mM)')
84 #ax.set_title('NO2')
85 ax.grid(False)
86 ax.legend()
87 fig3
3.set_size_i
nches(5,3)
88
89 #####
90 fig34 = plt.figure(34)
91 fig34.clf()
92 ax = fig34.add_subplot(1,1,1)
93 ax.plot(x,z3,'-',label='CO EXTRA')
94 ax.plot(xe,z3e,label='CO ECO')
95 ax.set_xlabel('CAD(°)')
96 ax.set_ylabel('CO(mM)')
97 #ax.set_title('NO2')
98 ax.grid(False)

```

```

99     ax.legend()
100    fig3
4.set_size_in
ches(5,3)101
102    ##### VARIACION NO2
103    fig35 = plt.figure(35)
104    fig35.clf()
105    ax = fig35.add_subplot(1,1,1)
106    ax.plot(xe,((z1e-z1)/5.0e-5),label='NOdesviacion')
107    ax.set_xlabel('CAD(°)')
108    ax.set_ylabel('X')
109    #ax.set_title('NO2')
110    ax.grid(False)
111    ax.legend()
112    fig35.set_size_inches(5,3)
113    ##### VARIACION NO2
114    fig36 = plt.figure(36)
115    fig36.clf()
116    ax = fig36.add_subplot(1,1,1)
117    ax.plot(xe,((z2e-z2)/6e-8),label='NO2desviacion')
118    ax.set_xlabel('CAD(°)')
119    ax.set_ylabel('X')
120    #ax.set_title('NO2')
121    ax.grid(False)
122    ax.legend()
123    fig3
6.set_size_in
ches(5,3)124

125

126    #ANÁLISIS DE TEMPERATURA
127    Tm= 423 # T150C  Tm=463  190C#temperatura media del inyector
128    #Tmed=np.zeros([1,m]) #22
129    #for i in range (1,m):
130        #    Tmed[0,i]=Tm
131    #print (Tmed)
132    Tmed =np.full((x.size,1),Tm)
133    print (Tmed)
134    #Tm=statistics.mean(y) #promedio de la temperartua de combustion
135    #Tmediana=statistics.median(y)# valor de la mediana de la distribucion de la
    temperatura
136    print ("Tm=",Tm)
137    #print ("Tmediana=",Tmediana)
138    #plt.plot(x, z)

139    #####

140    #CONTANTES PARA GASOLINA EXTRA
141    Tbo=373 #Grados Kelvin
142    Po=0.101325 #presion atmosferica a nivel del mar en Mpascales
    75    R=8.314 #J/mol k  conatnte de los gases ideales
143    lb=35000 #calor de vaporización del combustible
EXTRA J/mol145
146    #FUNCION PARA DETERMINAR T VAPORIZACION DEL COMBUSTIBLE EXTRA
    COMO f(P)
147    def h(P):
148        a = np.log(P/Po)
149        b=1-( Tbo*a*R/lb)
150        res=Tbo*(1/b)
151        r
153    #Temperatura de ebullicion del isooctano EXTRA =f(P) en todo el ciclo

```

```

154 Tiso = np.zeros([m,1]) #22
155 for i in range (1,m):
156     Tiso[i,0]=h(z[i])
157 #print ('Tiso=', Tiso)
158 #
160 # GRAFICA DE LA TEMPERATURA DE VAPORIZACION EXTRA VS ANGULO
161 # Object oriented syntax
162 fig2 = plt.figure(2)
163 fig2.clf()
164 ax = fig2.add_subplot(1,1,1)
165 ax.plot (x[1:m],Tiso[1:m,0],label='Tvap EXTRA')
166 ax.plot (x[150:m-35],Tmed[150:m-35,0],label='Tmed INY')
167 ax.set_xlabel('CAD(°)')
168 ax.set_ylabel('Temperatura (K)')
169 #ax.set_title('Temperatura Extra')
170 ax.grid(False)
171 ax.legend()
172 fig
2.set_size_inches(5,3)
173
174 #####
175 #CONSTANTES PARA GASOLINA ECO
176 Tboet=373 #Grados Kelvin
177 #Po=0.101325 #presion atmosferica a nivel del mar en Mpascales
178 #R=8.314 #J/mol k  conatnte de los gases ideales
179 lbet=38000 #calor de vaporización del combustible
ECO J/mol180
181 #FUNCION PARA DETERMINAR T VAPORIZACION DEL COMBUSTIBLE ECO
COMO f(P)
182 def het(P):
183     ae = np.log(P/Po)
184     be=1-( Tbo*ae*R/lbet)
185     res=Tbo*(1/be)
186     return res
187 #Temperatura de ebullicion del isooctano ECO =f(P) en todo el
ciclo188
189 Tiso_e=np.zeros([m,1]) #22
190 for i in range (1,m):
191     Tiso_e[i,0]=het(ze[i])
192 #print (Tiso_e)
193 # GRAFICA DE LA TEMPERATURA DE VAPORIZACION ECO VS ANGULO
194 fig21 = plt.figure(21)
195 fig21.clf()
196 ax = fig21.add_subplot(1,1,1)
197 ax.plot (xe[1:m],Tiso_e[1:m,0],label='Tvap ECO')
198 ax.plot (xe[150:m-40],Tmed[150:m-40,0],label='Tmed INY')
199 ax.set_xlabel('CAD(°)')
200 ax.set_ylabel('Temperatura (K)')
201 #ax.set_title('Temperatura Extra')
202 ax.grid(False) # False
203 ax.legend()
204 fig2
1.set_size_inches(5,3)205
206 ##### CINETICA QUIMICA #####

```



```

207 #Importacion de datos del
simulador de motor208

209 #####1.- REACCION DE INICIO #####
210 # Concentración de isooctano (BASE 1 GOTA)
211 celo=177
212 celf=343
213 mce=(celf-celo)
214 #tiempo de reaccion transforma CAD a tiempo en segundos

t1=x1[celo:celf]

215 #(M)concentracion isooctano
216 kiso=zm[celo:celf]
217 #Concentración NO matriz
218 Cno=z1[celo:celf]
219 #Concentración NO2 matriz
220 C
223 #Calculo de la
concentracion del O2 224
NO2O2=1.0E8

225 C_o2=np.zeros([mce,1])
226 for i in range (0,mce):
227 C_o2[i,0]=
Cno2[celo+i]/NO2O2
228
#####
##
229 print ('kiso',kiso)
230 print ('t1',t1)
231 print ('Cno',Cno)
232 print ('Cno2',Cno2)
233 print (C_o2)
234

235 #####INICIACION CON NO2#####
236

237 #velocidad de raecion iniciacion rx li
238 kio=1.2E8 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R2CH2
239 kio_1=5.9E8 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R3CH
240 kio1=np.zeros([mce,1])
241 for i in range (1,mce):
242 kio1[i,0]=kio*np.exp(-86.6/(8.314*Tiso[i,0]))
243 print ('kio1',kio1)
244

245 kio2=np.zeros([mce,1])
246 for i in range (1,mce):
247 kio2[i,0]=kio_1*np.exp(-73.6/(8.314*Tiso[i,0]))
248 print ('kio2', kio2)249

250 ##### # NO2+R2CH2 ->HNO2+R2CH NO2 Isooctano R2CH
251 rx li=np.zeros([mce,1])
252 for i in range (1,mce):

```

```

253     rx1i[i,0]=kiso[celo+i]*Cno2[celo+i]*kio1[i,0]
254     print (rx1i)
255
256     #####NO2+R3CH ->HNO2+R3C  NO2 Isooctano R3CH
257     rx1i2=np.zeros([mce,1]) #kR3CH
258     for i in range (1,mce):
259         rx1i2[i,0]=kiso[celo+i]*Cno2[celo+i]*kio2[i,0]
260     print (rx1i2)
261
262     #####INICIACION CON O2#####
263     #velocidad de raeccion iniciacion rx1i
264     kiox=1.5E9 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R3CH
265     kiox_1=7.94E9 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R2CH2
266     kiox1=np.zeros([mce,1])
267     for i in range (1,mce):
268         kiox1[i,0]=kiox*np.exp(-159/(8.314*Tiso[i,0]))
269     print (kiox1)
270
271     kiox2=np.zeros([mce,1])
272     for i in range (1,mce):
273         kiox2[i,0]=kiox_1*np.exp(-167.4/(8.314*Tiso[i,0]))
274     print (kiox2)
275
276     ##### O2+R3CH ->HO2+R3C O2 _Isooctano R3CH (O2)
277     rox1i=np.zeros([mce,1])
278     for i in range (1,mce):
279         rox1i[i,0]=kiso[celo+i]*C_o2[i,0]*kiox1[i,0]
280     print (rox1i)
281
282     ##### O2+R2CH2 ->HO2+R2CH  O2 Isooctano R2CH2 (O2)
283     rox1i2=np.zeros([mce,1]) #kR3CH
284     for i in range (1,mce):
285         rox1i2[i,0]=kiso[celo+i]*C_o2[i,0]*kiox2[i,0]
286     print (rox1i2)
#plt.plot(t1[0:],rx1i[0:],label='vi NO2')
289     #####2.-REACCION DE
OXIDACION DE R CON EL NO2
#####
###
290     #CALCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL PRODUCTO
291     #concentración inicial del producto es cero
292     #Calculo del area bajo la curva
293     #####Concentracion de R2CH ->NO2
294     C
r2ch=np.
zeros([m
ce,1])
295
Cr2ch[1,
0]=0

```

```

296  for i in range (1,mce-1):
297      Cr2ch[i+1,0]=Cr2ch[i,0]+0.5*(rx1i[i,0]+rx1i[i+1,0])*(t1[celo+i]-t1[i+celo-1])
298  print (Cr2ch)
299
300  #####Concentracion de R3CH->NO2
301  C
r3ch=np.
zeros([m
ce,1])
302

Cr3ch[1,
0]=0

303  for i in range (1,mce-1):
304      Cr3ch[i+1,0]=Cr3ch[i,0]+0.5*(rx1i2[i,0]+rx1i2[i+1,0])*(t1[celo+i]-t1[i+celo-1])
305  print (Cr3ch)
306
307  ##### Concentracion de R2CH->O2 con el O2
308  C
r3c=np
.zeros(
[mce,1
])309  Cr3c[1,0]=0

310  for i in range (1,mce-1):
311      Cr3c[i+1,0]=Cr3c[i,0]+0.5*(rox1i[i,0]+rox1i[i+1,0])*(t1[celo+i]-t1[i+celo-1])
312  print (Cr3c)
313
314  ##### Concentracion de R3CH ->O2 con el O2
315  Cr
2chox=np.z
eros([mce,1
])316
    Cr
2chox[1,0]
=0

317  for i in range (1,mce-1):
318
    Cr2chox[i+1,0]=Cr2chox[i,0]+0.5*(rox1i2[i,0]+rox1i2[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo- 1])

319  print (Cr2chox)
320
321  #####VELOCIDAD DE REACCION
OXIDACION R2CHO2 Del NO2322

323  #R2CH+O2 -> R2CHO2
324  ko=1.7E6 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion
325  ko1=np.zeros([mce,1])
326  for i in range (1,mce):
327      ko1[i,0]=ko

```

```

328 print (ko1)
329 # velocidad de reaccion R2CH+O2 -> R2CHO2
330 rx2o=np.zeros([mce,1])
331 for i in range (1,mce):
332     rx2o[i,0]=ko1[i,0]*(Cr2ch[i,0]+Cr2chox[i,0])*C_o2[i,0]
333 print (rx2o)
334
335 #####VELOCIDAD DE REACCION OXIDACION R3CO2 del O2
336 # R3CH+O2 -> R3CO2
337 kox=4.9E6 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion
338 kox1=np.zeros([mce,1])
339 for i in range (1,mce):
340     kox1[i,0]=ko
341 print (kox1)
342 # velocidad de reaccion R3CH+O2 -> R3CO2
343 rx2o2=np.zeros([mce,1])
344 for i in range (1,mce):
345     rx2o2[i,0]=kox1[i,0]*(Cr3c[i,0]+Cr3ch[i,0])*C_o2[i,0]
346 print (rx2o2)
347
348 #CALCULO DE LA CONCENTRACION DEL PRODUCTO
349 #concentración inicial del producto es cero
350 #Calculo del area bajo la curva
351 Cr2chO2=np.zeros([mce,1]) #
concentracion [R2CHO2]352     Cr2chO2[1,0]=0
353 for i in range (1,mce-1):
354     Cr2chO2[i+1,0]=Cr2chO2[i,0]+0.5*(rx2o[i,0]+rx2o[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo-1])
355 print (Cr2chO2)
356
357 #Calculo del area bajo la curva
358 Cr3co2=np.zeros([mce,1]) #
concentracion [R3CO2]359
Cr3co2[1,0]=0
360 for i in range (1,mce-1):
361     Cr3co2[i+1,0]=Cr3co2[i,0]+0.5*(rx2o2[i,0]+rx2o2[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo-1])
362 print (Cr3co2)
363
364
365
366 #####3.-REACCION DE PROPAGACION DE RO2
#####
367 # R2CHO2+R3CH -> RO2H + R3C
368 #
R2CHO2+R2CH2 ->
RO2H + R2CH 369
#####
#####
####
370 #velocidad de propagacion de RO2
371 kao=1.58E6 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R3CH

```

```

372 kao1=np.zeros([mce,1])
373 for i in range (1,mce):
374     kao1[i,0]=kao*np.exp(-66.7/(8.314*Tiso[i,0]))##### R3CH
375     print (kao1)
376     # velocidad de reaccion R2CHO2+R3CH -> RO2H + R3C
377     rx3a1=np.zeros([mce,1])
378     for i in range (1,mce):
379         rx3a1[i,0]=kao1[i,0]*Cr2chO2[i,0]*kiso[i+celo]##### R3CH
380     print (rx3a1)
381
382     #####
383     #velocidad de propagacion de RO2
384     kaor=1.1E6 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R2CH2
385     kaor1=np.zeros([mce,1])
386     for i in range (1,mce):
387         kaor1[i,0]=kaor
388     print (kaor1)
389     # velocidad de reaccion R2CHO2+R2CH2 -> RO2H + R2CH
390     rx3a2=np.zeros([mce,1])
391     for i in range (1,mce):
392         rx3a2[i,0]=kaor1[i,0]*Cr2chO2[i,0]*kiso[i+celo]
393     print (rx3a2)
394
395     #CALCULO DE LA
CONCENTRACIÓN DEL
PRODUCTO396
397     Cr3c_p1=np.zeros([mce,1]) # concentracion
[R3C_propagacion R3CH]398     Cr3c_p1[1,0]=0
399     for i in range (1,mce-1):
400
401         Cr3c_p1[i+1,0]=Cr3c_p1[i,0]+0.5*(rx3a1[i,0]+rx3a1[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo-1]
)
402     print (Cr3c_p1)
403
404     Cr2ch_p1=np.zeros([mce,1]) # concentracion [R3C_propagacion
R3CH2]404     Cr2ch_p1[1,0]=0
405     for i in range (1,mce-1):
406
407         Cr2ch_p1[i+1,0]=Cr2ch_p1[i,0]+0.5*(rx3a2[i,0]+rx3a2[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo- 1])
408     print (Cr2ch_p1)
409
410     #####3.-REACCION DE PROPAGACION DEL RO #####
411     #####Transformacion de R3CO2 en R3CO

```

```

414  for i in range (1,mce):
415      Cr3co[i,0]=Cr3co2[i,0]**(1/0.17)          #0.17
416  print (Cr3co)
417  ##### velocidad de propagacion del RO
418  # R3CO+R3CH -> R3COH + R3C
419  # R3CO+R2CH2 -> R3COH + R2CH
420  kaorx=2.51E6 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R3CH
421  kaorx1=np.zeros([mce,1])
422  for i in range (1,mce):
423      kaorx1[i,0]=kaorx
424
print (kaorx1)

425  # velocidad de reaccion  R3CO+R3CH -> R3COH + R3C
426  rx3ax=np.zeros([mce,1]) #velocidad de propagacion de
427  for i in range (1,mce):
428      rx3ax[i,0]=kaorx1[i,0]*Cr3co[i,0]*kiso[i+celo]
429  print (rx3ax)
430
431  kaorx_1=1.58E6 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion R2CH2
432  kaorx1_1=np.zeros([mce,1])
433  for i in range (1,mce):
434      kaorx1_1[i,0]=kaorx
435  print (kaorx1)
436  # velocidad de reaccion  R3CO+R2CH2 -> R3COH + R2CH
437  rx3ax2=np.zeros([mce,1]) #velocidad de propagacion de
438  for i in range (1,mce):
439      rx3ax2[i,0]=kaorx1_1[i,0]*Cr3co[i,0]*kiso[i+celo]
440  print (rx3ax2)
441
442  #CALCULO DE LA
CONCENTRACIÓN DEL
PRODUCTO443
444
445  Cr3c_p2=np.zeros([mce,1])          #          concentracion
[R3C_propagacion R3CO]446  Cr3c_p2[1,0]=0

447  for i in range (1,mce-1):
448
          Cr3c_p2[i+1,0]=Cr3c_p2[i,0]+0.5*(rx3ax[i,0]+rx3ax[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo-1]
          )
449  print (Cr3c_p2)
450
451  Cr2ch_p2=np.zeros([mce,1])          #          concentracion
[R2CH_propagacion R3CO]452  Cr2ch_p2[1,0]=0

453  for i in range (1,mce-1):
454
          Cr2ch_p2[i+1,0]=Cr2ch_p2[i,0]+0.5*(rx3ax2[i,0]+rx3ax2[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+cel o-1])
455  print (Cr2ch_p2)
456

```

```

457 ##### DERIVACION POR NO
458 # RO2+NO->NO2+RO    (RO depositos)
459 #NO+R2CH2O2-> NO2+R2CHO
460 #NO+R3CO2-> NO2 +R3CO461

462 kono=5E9 # 1/sM #constante de velocidad de iniciacion
463 kono1=np.zeros([mce,1])
464 for i in range (1,mce):
465     kono1[i,0]=ko
466 print (kono1)
467 #velocidad de NO+R2CH2O2-> NO2+R2CHO
468 rx4no=np.zeros([mce,1])
469 for i in range (1,mce):
470     rx4no[i,0]=kono1[i,0]*(Cr2chO2[i,0]+Cr3co2[i,0])*Cno[i+celo]/1000
471 print (rx4no)
472
473 #####5.- FORMACION DE RO a partir del NO
474 #Calculo del area bajo la curva
475 for i in range (1,mce-1):
476     CROno[i+1,0]=CROno[i,0]+0.5*(rx4no[i,0]+rx4no[i+1,0])*(t1[i+celo]-t1[i+celo-1])
477 print (CROno)
478
479
480
481 #####FORMACION DE RO a partir de la oxidacion de RR2CHO2
482 for i in range (1,mce):
483     CROf1[i,0]=(Cr2chO2[i,0])**2*(1/0.5) #0.5
484 print (CROf1)
485
486 #####FORMACION DE RO TOTAL
487 CROf=np.zeros([mce,1])489     CROf[1,0]=0
488
489 for i in range (1,mce):
490     CROf[i,0]=CROf1[1,0]+Cr3co[i,0]+CROno[i,0]
491 print (CROf)
492
np.savetxt('CTEXTRAT150.txt',CROf,fmt='%f') 494
495 #####VELOCIDAD TOTAL#####
496 ###3VELOCIDAD DE INICIO
497 inicio=np.zeros([mce,1])
498 for i in range (mce):
499     inicio[i,0]=rx1i[i,0]+rx1i2[i,0]+rox1i[i,0]+rox1i2[i,0]
500 print(inicio)
501 #VELOCIDAD TOTAL
502 vtot=np.zeros([mce,1])
503 for i in range (mce):

```

```

504
    vtot[i,0]=rx2o[i,0]+rx2o2[i,0]+rx3a1[i,0]+rx3ax[i,0]+rx3ax2[i,0]+rx3a2[i,0]+rx4no[ i,0]
505 print(vtot)
506
507 #####GRAFICA VELOCIDAD DE FORMACION INICIAL Y FINAL
508 fig41 = plt.figure(41)
509 fig41.clf()
510 ax = fig41.add_subplot(1,1,1)
511 ax.plot(x1[celo:celf],vinicio[:,0],label='vi inicio Extra')
512 ax.plot(x1[celo:celf],vtot[:,0],label='vi tot Extra')
513 ax.set_xlabel('tiempo (ms)')
514 ax.set_ylabel('vinicio (mM/s)')
515 #ax.set_title('Concentracion Extra')
516 ax.grid(False)
517 ax.legend()
518 fig41.set_size_inches(5,3)
519 ##### GRAFICA DE PORMACIÓN DE PRECIPRADOS DE GOMAS RO
520 fig4 = plt.figure(4)
521 fig4.clf()
522 ax = fig4.add_subplot(1,1,1)
523 ax.plot(x1[celo:celf],CROf[:,0],label='[RO] gomas')
524 ax.set_xlabel('tiempo (ms)')
525 ax.set_ylabel('RO [mM]')
526 #ax.set_title('Concentracion Extra')
527 ax.grid(False)
528 ax.legend()
529 fig
4.set_size_i
nches(5,3)
530
531
532 ##### ESPESOR PROMEDIO DE PRECIPITADOS #####
533 ###Dhp=Md*hf*[ROH+RO2+RO2H]/rho_p
534 Md=12 #g/mol carbono
535 rho_p=0.3 #g/cm3carbono
536 hf= 100 #um
537 KDhp=Md*hf/rho_p
538 KDhp1=np.zeros([mce,1])
539 for i in range (1,mce):
540     KDhp1[i,0]=KDhp
541 print (KDhp1)
542 Dhp=np.zeros([mce,1])
543 for i in range (mce):
544     Dhp[i,0]=KDhp1[i,0]*(CROf[i,0])/1000
545 print (Dhp)
546
547 ##### GRAFICA DE CRECIMIENTO DE ESPESOR DE PELICULA 1 PRECIPITADOS
548 fig42= plt.figure(42)
549 fig42.clf()
550 ax = fig42.add_subplot(1,1,1)
551 ax.plot(x1[celo:celf],Dhp[:,0],label='Espesor')
552 ax.set_xlabel('tiempo (ms)')
553 ax.set_ylabel('Espesor(um)')

```



```

554 #ax.set_title('Concentracion Extra')
555 ax.grid(False)
556 ax.legend()
557 fig4
2.set_size_in
ches(5,3)558
559 ##### PRECIPITACION DE DEPOSITOS EN LA SUPERFICIE #####
560 ##SH +NO2-> s +HNO2 , ki
561 ##SH +RO2-> s +RO2H ,ka
562 ##SH +RO-> s +ROH , kaoh
563 ## SH =Xact*rw/Na*ash
564 Xactc_h =2/17 ## CH
565 Xactc_h2 =1/17 ##CH2
566 Xactc_h3=5/17 ##CH3
567 rw=10 # factor de Wenzel
568 ash=0.1 #
570 SHc_h=Xactc_h*rw/(Na*ash)
571 SHc_h1=np.zeros([mce,1])
572 for i in range (1,mce):
573     SHc_h1[i,0]=SHc_h
574 print (SHc_h1)
575
576 ###velocidad de precipitacion de CH con NO2
577 rxSHc_h=np.zeros([mce,1])
578 for i in range (1,mce):
579     rxSHc_h[i,0]=SHc_h1[i,0]*kio1[i,0]*Cno2[celo+i]
580 print (rxSHc_h)
581
582 ###velocidad de precipitacion de CH con RO2
583 rxSHc_hro2=np.zeros([mce,1])
584 for i in range (1,mce):
585     rxSHc_hro2[i,0]=SHc_h1[i,0]*kao1[i,0]*(Cr2chO2[i,0]+Cr3co2[i,0])
586 print (rxSHc_hro2)
587
588 ###velocidad de precipitacion de CH con RO
589 rxSHc_hro=np.zeros([mce,1])
590 for i in range (1,mce):
591     rxSHc_hro[i,0]=SHc_h1[i,0]*kaorx1[i,0]*CROf[i,0]
592 print (rxSHc_hro)
593
594 ###velocidad total de reaccion de CH
595 ## vttotal =rxSHc_h+rxSHc_hro2+rxSHc_hro
596 rxTSHc=np.zeros([mce,1])
597 for i in range (1,mce):
598     rxTSHc[i,0]=(rxSHc_h[i,0]+rxSHc_hro2[i,0]+rxSHc_hro[i,0])*1E6
599 print (rxTSHc)
600 fig44= plt.figure(44)
601 fig44.clf()
602 ax = fig44.add_subplot(1,1,1)
603 ax.plot(x1[celo:celf],rxTSHc[:,0],label='vf Gomas')
604 ax.set_xlabel('tiempo (ms)')
605 ax.set_ylabel('[mM]/s')
606 #ax.set_title('Concentracion Extra')
607 ax.grid(False)
608 ax.legend()

```

```

609 fig44.set_size_inches(5,3)
610
611 ###TASA DE FORMACION DE DEPOSITOS A PARTIR DE LA VELOCIDAD TOTAL sh
612 CtrxTSH=np.zeros([mce,1])
613 CtrxTSH[1,0]=0
614 for i in range (1,mce-1):
615
        CtrxTSH[i+1,0]=CtrxTSH[i,0]+0.5*(rxTSHc[i,0]+rxTSHc[i+1,0])*(t1[celo+i+1]-t1[celo+
        i])

616 print (CtrxTSH)
617 fig45= plt.figure(45)
618 fig45.clf()
619 ax = fig43.add_subplot(1,1,1)
620 ax.plot(x1[celo:celf],CtrxTSH[:,0],label='Gomas')
621 ax.set_xlabel('tiempo (ms)')
622 ax.set_ylabel('Gomas [mM]')
623 #ax.set_title('Concentracion Extra')
624 ax.grid(False)
625 ax.legend()
626 fig43.set_size_inches(5,3)
627 Md=12 #g/mol
628 rho_p=0.3 #g/cm3
629 hf= 100 #um
630 KDhp_1=Md/rho_p
631
        CTrxTSH[i,0]=SHc_h1[i,0]*CtrxTSH[i,0]*KDhp2[i,0]*1E12
638 print (CTrxTSH)
639 #np.savetxt('CTEXTRAT150.txt',CTrxTSH,fmt='% .10f')
640 ##### GRAFICA DE CRECIMIENTO DE ESPESOR DE PELICULA 2 GOMAS
641 fig43= plt.figure(43)
642 fig43.clf()
643 ax = fig43.add_subplot(1,1,1)
644 ax.plot(x1[celo:celf],CTrxTSH[:,0],label='Espesor')
645 ax.set_xlabel('tiempo (ms)')
646 ax.set_ylabel('Espesor(um)')
647 #ax.set_title('Concentracion Extra')
648 ax.grid(False)
649 ax.legend()
650 fig43.set_size_inches(5,3)
651
652 ##### % VARIACION DEL CAUDAL EN FUNCION DE LOS
        DEPOSITOS
653 AH= CTrxTSH[mce-1,0] # formacion de goma por
        ciclo(ug/ciclo)654 rev=2000 #rev/min
655 VAHt=AH*rev*0.5*60 # tasa de formacion por hora ug/h
        I ciclo 2 rev656 KR=0.535 #h-1

657 Rr=5 #radio de orificio en um
658 #####Espesor de la
        pelicula de deposito659 hr=51
        #horas de funcionamiento

660 tmotor=np.zeros([hr,1])
661 tmotor[1,0]=0

```

```

662 for i in range (1,hr-1):
663     tmotor[i+1,0]=tmotor[i,0]+1
664 print (tmotor)
665 hgm=np.zeros([hr,1]) 666     for i in range (1,hr):
667     hgm[i,0]= (VAHt/KR)*(1-np.exp(-KR*tmotor[i,0]))
668 print (hgm)
669
670 ""
671 #####VARIACION DE CAUDAL CON EL ESTRECHAMIENTO
672 Q=np.zeros([1,51])
673 for i in range (51):
674     Q[0,i]= 2*hgm[0,i]/Rr
675 print (Q)
676 #####OK#####
677
678 ""
679 plt.show ()

```

Anexo B

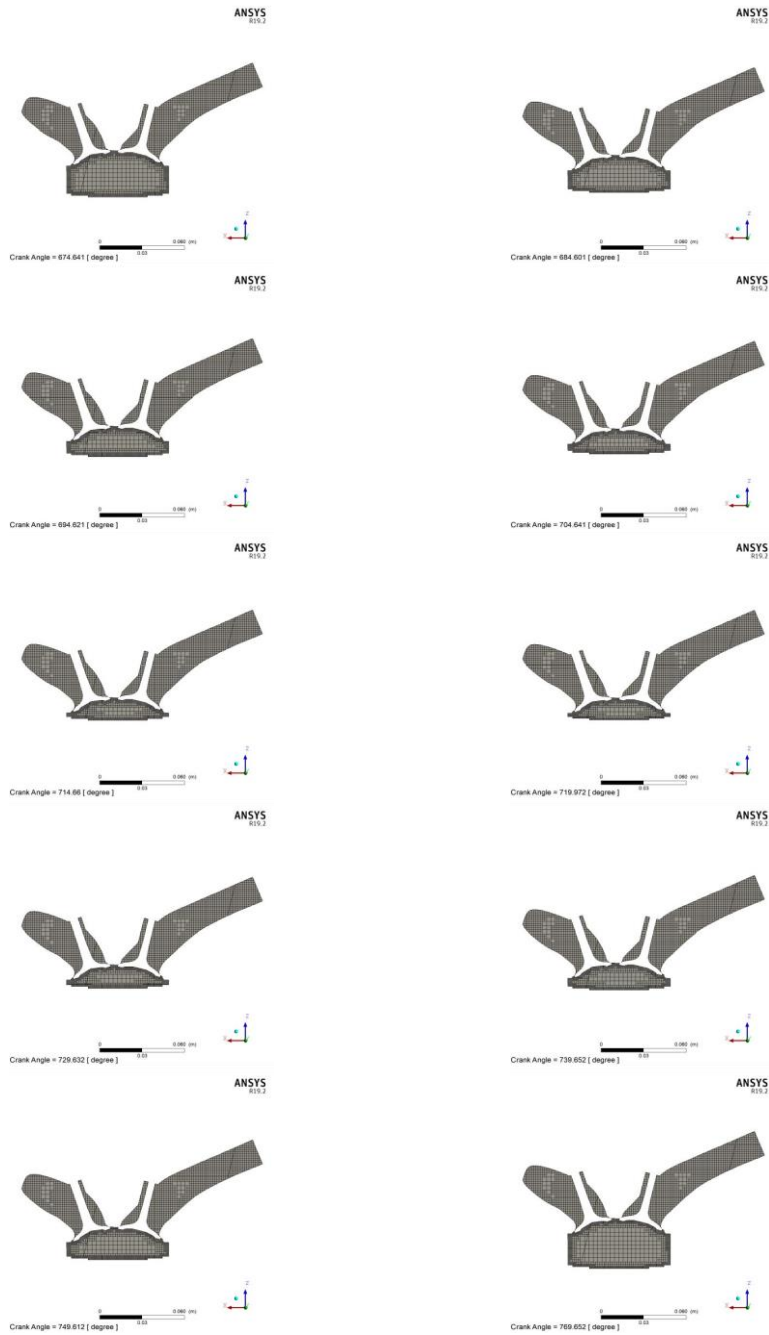


Figura 1: Evolución del mallado entre 700° y 900° CAD

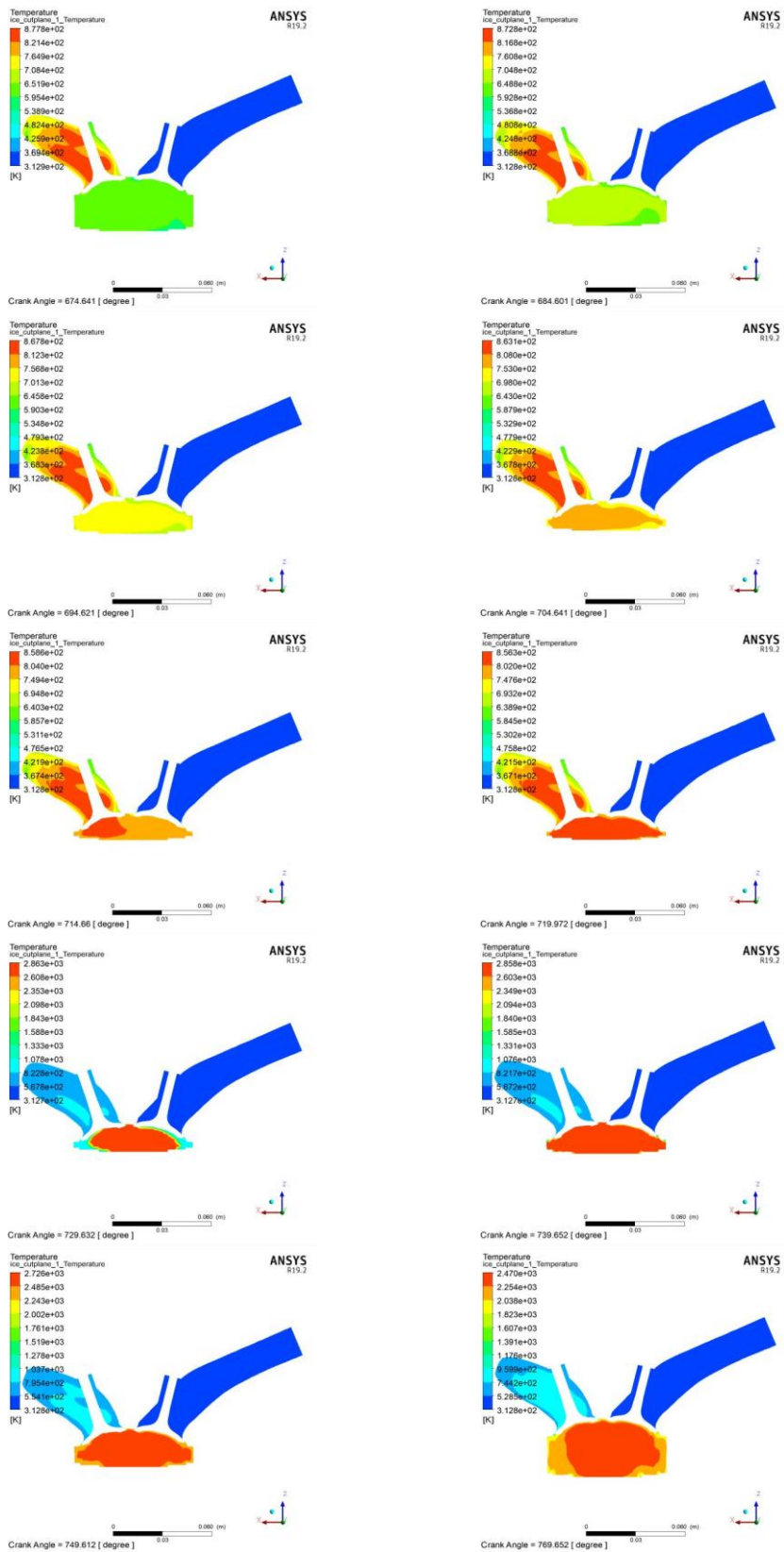


Figura 2: Campo de temperatura entre 700° y 900° CAD

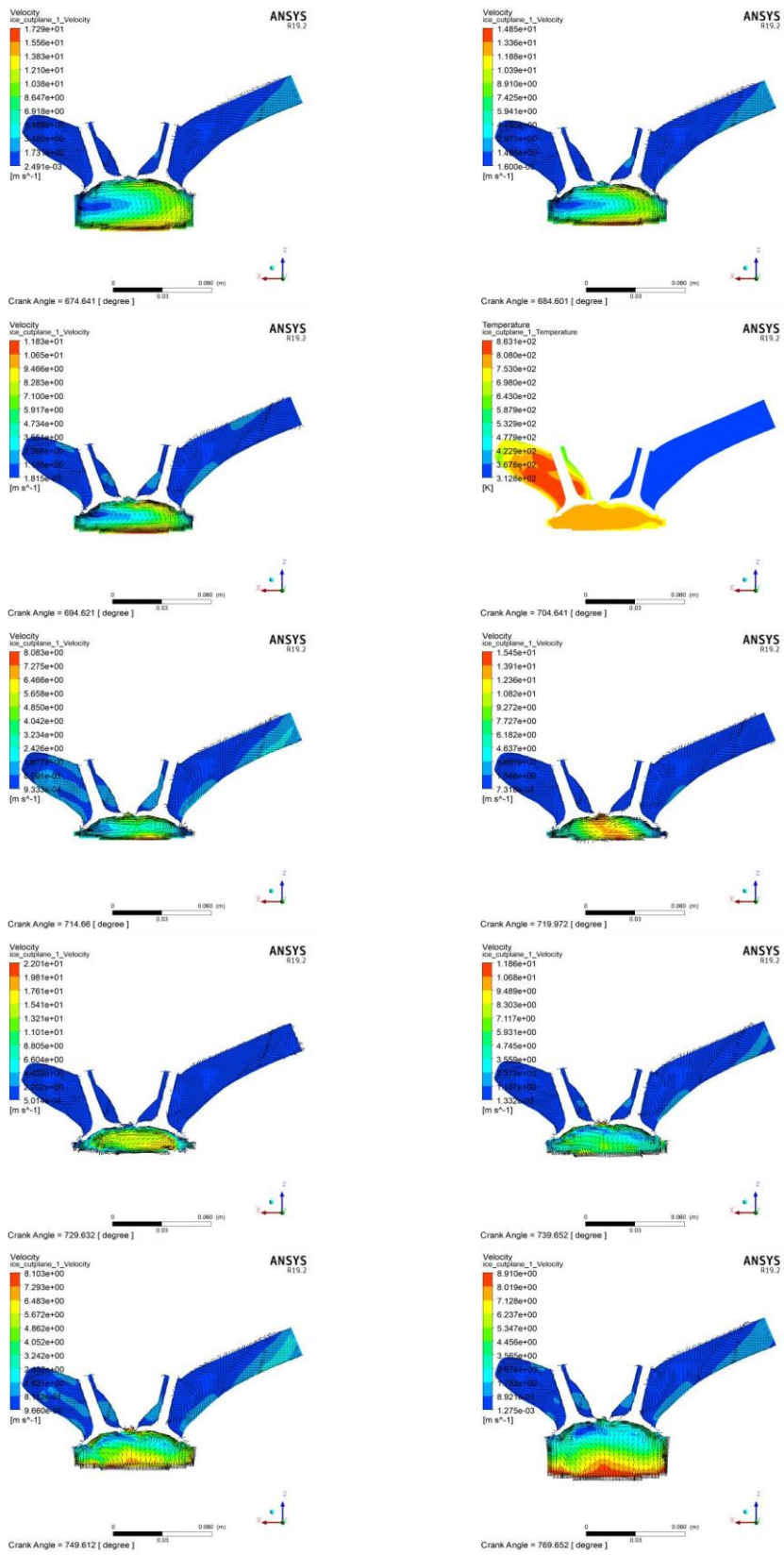


Figura 3: Campo de velocidades entre 700° y 900° CAD