



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Modelado numérico de la
generación de entropía en un
motor de combustión interna**

TESIS

Que para obtener el título de
Ingeniero Mecánico

P R E S E N T A

Luis Gerardo Bautista Cruz

DIRECTOR DE TESIS

Dr. William Vicente y Rodríguez



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

A mis padres por darme todo el apoyo para concluir esta etapa de mi vida y estar siempre presente en todos mis logros.

A mi papá por enseñarme a alcanzar mis metas y transmitirme su conocimiento de la vida cada día.

A mi mamá por enseñarme a ser fuerte en los momentos difíciles y guiar mis pasos en todo momento.

A mis hermanos por compartir muchos momentos increíbles y ser compañeros de vida.

Al Dr. William Vicente y Rodríguez por la dedicación y entrega que dio a este trabajo, también por su labor incansable en la enseñanza y ser una gran persona.

A Nicté por enseñarme a apreciar la vida, disfrutar cada momento y darle a todo un significado positivo.

A mis amigos por formar parte de mi formación como estudiante y lo más importante, como persona.

A todos mis profesores que fueron parte de mi formación académica.

A todas las personas que estuvieron presente en alguna etapa de mi vida y me obsequiaron buenos y malos momentos, que contribuyeron a formar mi carácter para enfrentar todos los obstáculos en el camino.

Al Programa UNAM-PAPIIT AG101018 “Simulación de la combustión en motores de combustión interna usando biocombustibles y medición de la masa de contaminantes, a fin de estructurar un inventario de emisiones en el Valle de México”

Al Programa UNAM-DGAPA-PAPIIME PE108418 “Desarrollo de equipo y manuales para prácticas de laboratorio de motores de combustión interna”

Tabla de contenido

Agradecimientos.....	III
Resumen.....	VII
1 Objetivo General.....	1
1.1 Objetivos específicos.....	1
2 Antecedentes.....	3
2.1 Contaminación del aire debido a los motores de combustión interna.....	3
2.2 Segunda Ley de la Termodinámica.....	6
2.2.1 El ciclo de Carnot (procesos reversibles).....	7
2.2.2 Escala termodinámica de temperatura absoluta.....	9
2.3 Entropía Introducción.....	11
2.3.1 Desigualdad de Clausius.....	12
2.3.2 Entropía.....	12
2.3.3 Generación de entropía, principio de generación de entropía.....	14
2.3.4 Diagramas T-S.....	14
2.3.5 Relaciones termodinámicas (Ecuaciones de Maxwell).....	15
2.4 Motores de combustión interna (MCI).....	17
2.4.1 El ciclo estándar de Otto.....	20
2.4.2 El ciclo Diesel estándar.....	22
3 Modelos matemáticos para el flujo en la Cámara de Combustión.....	25
3.1 Modelo matemático de un motor de combustión interna.....	25
3.2 Sub-modelo geométrico.....	26
3.3 Balance químico dentro de la cámara de combustión.....	28
3.3.1 Balance químico durante la etapa de compresión.....	28
3.3.2 Balance químico durante la etapa de combustión.....	29
3.3.3 Balance químico en la Expansión.....	31
3.4 Segunda Ley de la Termodinámica (análisis de disponibilidad).....	32
3.5 Diagrama del programa realizado en la tesis.....	35
3.6 Modelo numérico en software Mathematica®.....	35
4 Validación y verificación del modelo.....	38
5 Resultados y análisis de resultados.....	42
5.1 Predicciones con la Primera Ley de la Termodinámica.....	42
5.2 Predicciones con la Segunda Ley de la Termodinámica.....	46

5.3	Resultados de la Primera Ley variando parámetros.....	50
5.3.1	Resultados de la Primera Ley variando la razón de equivalencia ϕ	50
5.4	Resultados de la Segunda Ley variando los parámetros.....	52
5.4.1	Disponibilidad variando la razón de equivalencia ϕ	52
5.4.2	Disponibilidad variando el ángulo donde se inicia la combustión θ_s	55
5.4.3	Disponibilidad variando la velocidad del motor rpm.....	59
5.5	Resumen de Resultados.....	64
6	Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros.....	65
7	Referencias.....	67
8	Apéndices.....	71
8.1	Apéndice 1 Propagación de la flama.....	71
8.2	Apéndice 2: Tablas de datos para calcular las funciones termodinámicas de (4.13), (4.14) y diferentes combustibles.....	77

Resumen

En la presente tesis se programó un modelo numérico para el flujo dentro de la cámara de un motor de combustión interna con el software Mathematica®; en este modelo se resuelven las ecuaciones del motor apoyado de la Primera y Segunda Ley de la Termodinámica. Uno de los objetivos de este trabajo es presentar cuales son las formas en las que se aprovecha la energía (disponibilidad) dentro de la cámara de combustión del motor simulado. El modelo numérico es validado y verificado con datos experimentales y numéricos de otros trabajos presentados en la literatura abierta.

Los resultados obtenidos demuestran cuáles son los parámetros óptimos de funcionamiento del motor simulado; es decir, bajo los cuales la entropía que se genera dentro del sistema es la mínima.

1 Objetivo General

Simular numéricamente la generación de entropía en un motor de combustión interna mediante un modelo matemático cero dimensional.

1.1 Objetivos específicos

- Programar las ecuaciones diferenciales de la primera y segunda ley de la termodinámica en el software Mathematica®.
- Validar y verificar el modelo por comparación de las predicciones con datos experimentales y numéricos de trabajos de la literatura abierta.
- Analizar numéricamente la disponibilidad total del sistema variando parámetros de funcionamiento del motor, específicamente razón de equivalencia (ϕ), ángulo de inicio de la combustión (θ_s) y la velocidad del motor (rpm).
- Cuantificar las irreversibilidades del sistema (entropía).
- Determinar los parámetros óptimos de funcionamiento del motor simulado.

2 Antecedentes

Al día de hoy se tienen modelos matemáticos que permiten conocer la eficiencia de un motor de combustión interna mediante análisis basados en la Primera Ley de la Termodinámica; en los últimos años se comenzó a dar importancia a los análisis que proporcionan información de la forma en la que se aprovecha la energía. La base de estos análisis es la Segunda Ley de la Termodinámica, la que permite conocer la forma ideal de operación de una máquina térmica, estableciendo restricciones que no toma en cuenta la Primera Ley; dichas restricciones son la degradación de la energía y las formas en las que se puede aprovechar ésta en todo el sistema, que da paso a un concepto llamado entropía. La entropía es una de las formas en las que se degrada la energía, dicha degradación se puede presentar mediante efectos viscosos, químicos, de conducción y de mezcla.

Las bajas eficiencias de los Sistemas Térmicos (ST) generan contaminación del aire, que actualmente es un grave problema ya que se han presentado afectaciones a la salud de los seres vivos. Por lo tanto, los análisis para la disminución de la generación de entropía han tenido como objetivo explorar cómo se involucran cada una de las formas de generación de ésta en la eficiencia de los ST y con base en los resultados que proporcionan, permiten el conocimiento de cuáles son las principales formas en las que se pierde la energía, que podría ser aprovechada en forma de trabajo y poder rediseñar los ST. Lo anterior, permitiría reducir las emisiones que éstos generan o en el mejor de los casos observar el comportamiento de los combustibles alternos para introducirlos como una forma de disminuir las emisiones. Uno de los principales trabajos que dieron pie a este tipo de análisis fue el publicado en 1982 por Bejan [1], en el cual se realizó un análisis desde el punto de vista de la Segunda Ley de la Termodinámica y en el que se buscaba conocer los efectos de los fenómenos que promueven la generación de la entropía con el fin de buscar una manera de minimizarla.

2.1 Contaminación del aire debido a los motores de combustión interna

Uno de los principales efectos que tiene la baja eficiencia de un motor de combustión interna es la contaminación del aire atmosférico y las consecuencias que se pueden presentar se ven reflejadas directamente en la salud y el medio ambiente. Di et al. [2] y Landrigan et al. [3] han reportado que las personas tienden a sufrir enfermedades circulatorias, respiratorias, cáncer y hasta la muerte debido a la frecuente exposición a fuentes emisoras de gases de efecto invernadero (GEI), algunas de las cuales no cuentan con medidas de control que permitan disminuir los índices de contaminación atmosférica, y en consecuencia, presentándose, además el cambio climático.

El calentamiento global ha sido uno de los mayores de los problemas a los que se ha enfrentado la humanidad; no todos lo producimos, pero todos lo vivimos. La causa principal es que se ha tenido un aumento considerable en los niveles de contaminación mundial, que ha generado que se produzcan gases que son denominados de efecto invernadero. Los gases de efecto invernadero son aquellos que se encuentran en la atmósfera y se producen de manera natural y antropogénica. Como su nombre lo establece, la fuente de contaminación natural es aquella provocada por la misma naturaleza, como, por ejemplo, incendios forestales, erupciones volcánicas, corrientes de

viento y de acuerdo a Contreras [4] en porcentaje representan un 20.7% del total de la contaminación. El otro 79.3 % está ligado a las fuentes de contaminación antropogénicas, que son las producidas por la industria (58.3%), fuentes misceláneas (0.9%), quema de combustibles en fuentes estacionarias (8.3%), uso de solventes (1.5%), almacenamiento y transporte de derivados de petróleo (0.5%), vehículos que circulan por carretera (6.9%), agropecuarias (2%) y manejo de residuos (0.2%). En otras estadísticas publicadas por Moreno [5] en 2017 las emisiones de los GEI por sectores se encuentran distribuidas de la siguiente manera; Electricidad y producción térmica (25%), agricultura (24%), industria (21%), transporte (14%), construcción (6%) y otros (10%).

Dentro de los GEI que se producen se encuentran el vapor de agua, dióxido de carbono, metano, óxido de nitrógeno y ozono [6]. En el proceso de calentamiento de la tierra mediante la radiación solar, el suelo libera calor para mantener equilibrio térmico, pero dichos gases se encargan de absorber la mayor parte de ese calor evitando que salga de la atmosfera, que ocasiona que exista un aumento en la temperatura en el planeta [6]. Cada uno los GEI tienen diferentes consecuencias y a continuación se enuncian algunas:

Vapor de agua: es el GEI que más abunda en la atmosfera, y se debe principalmente a la gran cantidad de agua que se encuentra en el planeta. La mayoría de los estudios realizados se enfocan a los efectos de gases como el dióxido de carbono y el metano, pero el vapor de agua realiza la misma acción que éstos; absorber el calor que emite el suelo. Los cambios en la temperatura van ligados a la formación de nubes. Por un lado, cuando las nubes son delgadas permiten que la mayoría de la radiación solar llegue al suelo, pero son frías por lo que absorben el calor emitido por el suelo, lo cual ocasiona que aumente la temperatura del ambiente. Por otro lado, las nubes que son voluminosas, se encuentran más cerca del suelo, lo que propicia que la radiación solar se refleje en ellas por lo que la temperatura en las zonas donde se encuentren disminuya. En la **Figura 2.1** se muestra el efecto descrito anteriormente.



Figura 2.1. Efecto del vapor de agua como GEI [10].

Dióxido de carbono: Este GEI se produce debido al uso de combustibles fósiles en algunas de las actividades humanas cotidianas. Este gas es inodoro e incoloro y puede presentar afectaciones directas a la salud humana cuando se encuentra a exposición frecuente, por ejemplo, problemas respiratorios. En la atmósfera se comporta como el vapor de agua, absorbe el calor que se genera

en el suelo; en noviembre de 2018 en el portal de noticias de la ONU[7] se publicó una columna en la que se dice que el nivel de CO₂ en la atmósfera se encontraba en 403.3 partes por millón (ppm) en el año 2016, y en el año 2018 el portal NOAA Research News [8] declaró que los niveles de CO₂ se encontraba en promedio 411.25 ppm, lo que indica que se ha tenido un crecimiento muy notable en las concentraciones de este GEI en la atmósfera.

Metano: es un gas inodoro e incoloro y no es tóxico. Este GEI se origina principalmente por descomposición de material orgánico, y también es producido por el hombre; siendo éstos los que más contribuyen a su producción debido a actividades como la quema de combustibles fósiles, ganadería, minería y agricultura. A pesar de encontrarse en menos cantidad en la atmosfera, absorbe mucho mayor calor que el CO₂ por lo que su efecto es equivalente a 21 veces el del CO₂ en un lapso de tiempo de 100 años. [9]

Óxido de nitrógeno: las fuentes de emisión de este GEI son las bacterias del suelo, agricultura, industria, quema de combustibles fósiles; se forma por la oxidación del nitrógeno atmosférico debido a las altas temperaturas. Algunas de las consecuencias en la salud se ven reflejadas en afecciones a los órganos (bazo e hígado), sistema circulatorio, inmunológico y respiratorio [11].

Ozono: es un GEI indirecto, y se forma de manera natural y debido a reacciones fotoquímicas que se producen entre otros GEI. El ozono es el encargado de regular la radiación ultravioleta en la estratósfera, pero cuando se encuentra a menos de 15 km del suelo es considerado como un gas contaminante ya que genera problemas respiratorios y se convierte en un GEI [12].

Para tratar de controlar el efecto invernadero, el 11 de diciembre de 1997, se firmó un tratado llamado el “*Protocolo de Kioto*” en Kioto, Japón, en el que participaron 180 países; este tratado establece un compromiso de las naciones participantes de reducir un 5% las emisiones de los GEI en comparación al año de 1990. Anualmente se reúnen las naciones participantes en una Conferencia de las Partes (COP) en la cual se establecen y adoptan medidas que permitan alcanzar los objetivos que se planteen para combatir el cambio climático. Sin embargo, países que generan gran cantidad de estos gases se negaron a firmar dicho tratado por lo que sus emisiones no son controladas, tal es el caso de EU que es el principal generador de CO₂.

Las COP’s han permitido que las grandes naciones, que son los principales contaminantes, realicen acuerdos que mejoren la calidad del medio ambiente. Uno de dichos acuerdos fue el que se logró en la COP 21 de París, en diciembre de 2015, el cual es llamado “Acuerdo de París”. Éste establece que se limite el calentamiento global a 2°C con respecto a la era preindustrial, lo cual se pretendía alcanzar disminuyendo las emisiones de los GEI [13].

Otro de los factores que influye a la contaminación ambiental, es el crecimiento demográfico de manera descontrolada. Por ejemplo, a nivel nacional, se tiene un registro de millón y medio de nacimientos anuales, lo cual es un problema grave ya que, de acuerdo al Investigador del Instituto de Geografía de la UNAM, Antonio Armando García de León Griego [14], se espera que en 2030 México sea el noveno país con más habitantes del mundo. En la **Figura 2.2** se muestran los estados con mayor crecimiento poblacional anual entre los años 2017-2018.

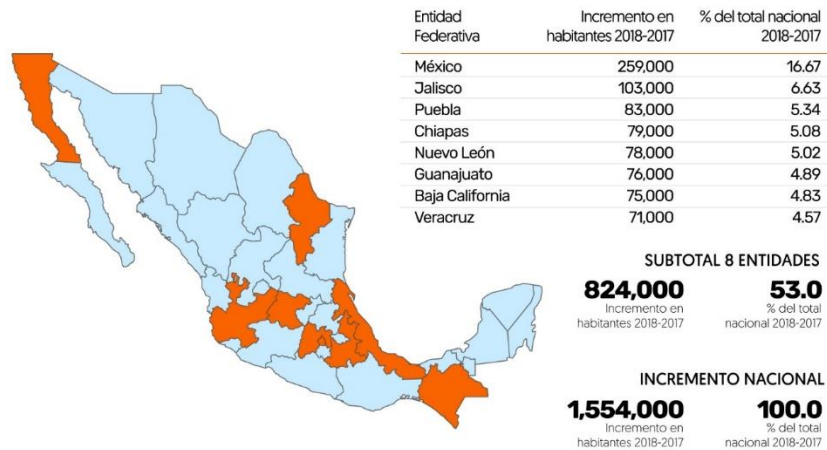


Figura 2.2. Crecimiento poblacional en México, periodo 2017-2018 [15].

La Ciudad de México actualmente es una de las ciudades donde se concentran la mayor cantidad de actividades económicas, culturales y políticas del país. Desafortunadamente, no se tuvo una planeación demográfica cuando se optó por llevar a cabo dicha concentración de actividades. En consecuencia, se ha tenido un gran deterioro ambiental.

De acuerdo a un registro realizado por el INEGI en 2017, en la CDMX se tenían 5,471,904 vehículos en circulación, de los cuales 4,873,995 eran particulares [16]. Esto refleja un grave problema ya que la mayoría de los vehículos son particulares, y no se les da un uso eficiente; es decir, un automóvil en promedio puede ser ocupado por 4 personas, pero en muchas ocasiones sólo es un ocupante, lo que origina que exista mayor número de vehículos y, en consecuencia, aumento en la contaminación del aire por vehículos de combustión interna.

Los niveles de contaminación del aire se miden mediante un Índice de calidad que está basado en la norma mexicana NADF-009-AIRE-2017 (Norma Ambiental del Distrito Federal), la cual especifica los requisitos para que pueda ser calculada y establece rangos permisibles; es decir, que no presenten riesgo para la salud. Los contaminantes que permite calcular este índice son cinco: dióxido de azufre, monóxido de carbono, dióxido de nitrógeno, ozono y partículas suspendidas. Los gases contaminantes que se producen en un motor de combustión interna se deben a una combustión incompleta, que es causa de las bajas eficiencias; un motor más eficiente conlleva a un mejor aprovechamiento de la energía y, en consecuencia, menor contaminación. En este estudio se realizó un modelo que permite cuantificar la energía que se tiene dentro del cilindro aplicando la Segunda Ley de la Termodinámica y observar qué parámetros son los que hacen que el motor sea más eficiente, estudios conocidos como estudio paramétrico.

2.2 Segunda Ley de la Termodinámica

Para comenzar a presentar el tema de la Segunda Ley es necesario establecer que en la naturaleza existen diversos procesos físicos que tienen como finalidad el equilibrio, y que ocurren espontáneamente; no requieren de acciones externas al proceso, por ejemplo, el calor fluye de los cuerpos calientes a los cuerpos fríos (se lleva a cabo en una dirección particular) [18]. Todos los

procesos espontáneos se pueden invertir, pero esto implica que se tengan que suministrar energía al sistema para poder revertir el proceso. La Primera Ley de la Termodinámica habla sobre la conservación de la energía en todos los procesos; es decir, no proporciona información sobre la dirección en la que se llevan a cabo. Existen restricciones que se imponen a la Primera Ley, y se refieren a que la energía se degrada y que los procesos se llevan a cabo en una dirección en particular, y que son consideradas en la Segunda Ley.

La energía se puede aprovechar en dos formas, trabajo y calor, siendo el primero el más valioso para el ingeniero. Dentro de estas dos formas de aprovechamiento de la energía, la Segunda Ley establece que el trabajo se puede convertir en calor al 100 por ciento, pero el proceso contrario no es posible. Hasta el día de hoy se conocen diversos axiomas que permiten enunciar la Segunda Ley de la Termodinámica, por ejemplo, el físico y matemático alemán Rodolf Clausius desarrolló el siguiente axioma [19]:

“Es imposible que el calor pase, por sí solo, desde una región de menor temperatura hasta otra de mayor temperatura”.

El axioma desarrollado por Kelvin-Planck es equivalente al desarrollado por Clausius, esto debido a que la violación de uno de ellos lleva a la violación del otro. Parafraseando el axioma de Kelvin-Planck dice:

“Es imposible para cualquier dispositivo operar de manera cíclica, producir trabajo e intercambiar calor sólo con una región de temperatura constante”.

En general, los axiomas que se utilizan para enunciar la Segunda Ley son equivalentes y describen que el calor fluye siempre del cuerpo más caliente al más frío (kelvin-Planck), o que se le debe suministrar energía al sistema para poder retirar calor de una fuente térmica de baja temperatura y poder conducirlo a una fuente térmica de alta temperatura (Clausius), que indica que la Segunda Ley es de naturaleza direccional, es decir, es una ley no conservativa. Del enunciado de Kelvin-Planck se puede establecer que no existe una máquina que pueda convertir el calor al 100 por ciento en trabajo, lo que implicaría que exista una máquina con eficiencia del 100 por ciento, que existen sólo teóricamente. Este tipo de máquinas son conocidas como máquinas de movimiento perpetuo de segunda especie (viola la Segunda Ley de la Termodinámica) y una representación clara de este tipo de máquinas, es descrito mediante al *ciclo de Carnot*, el cual permite describir procesos reversibles (ideales), mientras que las máquinas que operan de manera real presentan efectos disipantes debido a fenómenos físicos y son por tanto, procesos irreversibles.

Los procesos reales están limitados por fenómenos físicos conocidos como efectos disipativos, que se presentan debido a la viscosidad, reacciones químicas espontaneas, de conducción, de mezcla de sustancias, deformación plástica de los sólidos, flujo de corriente a través de una resistencia en un circuito eléctrico o histéresis. Los efectos disipativos son los responsables de que los procesos sean reversibles o irreversibles.

2.2.1 El ciclo de Carnot (procesos reversibles)

Los procesos totalmente reversibles son aquellos que, en cualquier instante durante el proceso, tanto el sistema como el ambiente con el que interactúa pueden ser devueltos a sus estados iniciales. El proceso totalmente reversible es una idealización ya que para que se pueda llevar a cabo se imponen dos restricciones, la primera es que no deben existir irreversibilidades debido a

efectos disipativos (fricción, resistencia eléctrica, deformación inelástica, etc.), y la segunda es que el proceso debe ser cuasiestático [19].

De los procesos totalmente reversibles se desprenden dos conceptos conocidos como procesos internamente reversibles y los procesos externamente reversibles. Los procesos internamente reversibles ofrecen ventajas debido a que se consideran procesos en los que dentro del sistema no existen irreversibilidades, pero que en su entorno pueden existir o no. Para que pueda existir un proceso internamente reversible, es necesario que toda interacción de trabajo con el sistema deba ser cuasiestática. Los procesos cuasi estáticos requieren de condiciones de equilibrio en el interior de las fronteras del sistema, pero no imponen restricciones sobre efectos que puedan ocurrir fuera del sistema. Por otro lado, los procesos externamente reversibles son aquellos en los que no se presentan irreversibilidades fuera de la frontera del sistema, pero en el interior pueden o no presentarse.

Nicolás Sadi Carnot (1769-1832), ingeniero militar de origen francés, fue uno de los primeros investigadores de la Segunda Ley de la Termodinámica, y fue el primero en establecer el concepto de operación cíclica (ciclo); la sustancia de trabajo al pasar por diversas transformaciones vuelve a su estado inicial [18]. En 1824, Carnot publicó un tratado en el que ideó un ciclo clásico ideal que hoy en día es conocido como el *ciclo de Carnot*. En la **Figura 2.3** se muestra esquemáticamente el *ciclo de Carnot*:

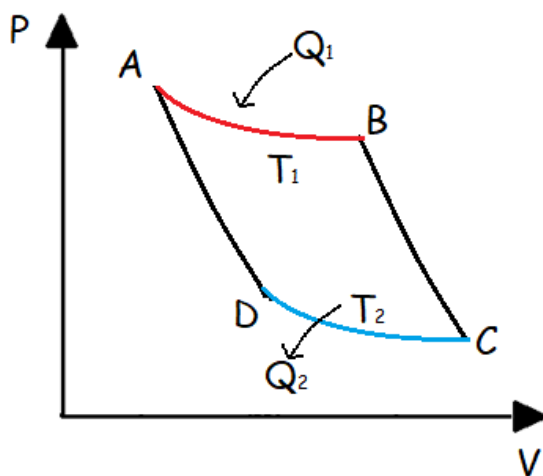


Figura 2.3. Ciclo de Carnot.

A continuación, se describe el proceso tomando como etapa inicial el punto A:

- En el proceso A-B se absorbe calor por la sustancia de trabajo de manera reversible e isotérmicamente de una fuente térmica de temperatura alta a una T_1 constante. Durante el proceso se realiza un trabajo igual al área bajo la curva de la trayectoria A-B en el diagrama P-V de la **Figura 2.3**.
- En el proceso B-C se lleva a cabo una expansión adiabática reversible en la que el sistema está térmicamente aislado y la temperatura de la sustancia decrece de T_1 a T_2 . El trabajo

que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria B-C en el diagrama P-V de la **Figura 2.3**.

- En el proceso C-D, el sistema se encuentra en contacto con una fuente térmica de baja temperatura a la cual se le cede calor de manera reversible e isotérmicamente. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria C-D en el diagrama P-V de la **Figura 2.3**.
- El proceso D-A es adiabático reversible en la que el sistema vuelve a su estado original A; la temperatura aumenta de T_2 a T_1 . El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria D-A en el diagrama P-V de la **Figura 2.3**.

De acuerdo al ciclo de Carnot, el balance neto de calor es igual al trabajo neto desarrollado por el sistema y viene dado por la ecuación (2.1):

$$Q_1 - Q_2 = W_{neto} \quad (2.1)$$

La eficiencia térmica del ciclo viene dada por:

$$\eta = \frac{W_{neto}}{Q_1} = \frac{\oint p dV}{Q_1} = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} \quad (2.2)$$

Si el ciclo de Carnot se invierte el sistema operaría como una bomba de calor y su coeficiente de operación (COP) está dado de acuerdo a:

$$COP = \frac{Q_2}{W_{neto}} = \frac{Q_2}{\oint p dV} = \frac{Q_2}{Q_1 - Q_2} \quad (2.3)$$

Gracias al trabajo de Carnot se desprende el concepto de trabajo máximo, el cual es el límite óptimo de funcionamiento de las máquinas reales. En conclusión, un proceso reversible es aquel que volverá a su estado inicial, debido a que no se presentan efectos disipativos, por lo tanto, el proceso se puede invertir de tal forma que no deja historia, por lo cual es un proceso ideal como el descrito anteriormente mediante el ciclo de Carnot.

2.2.2 Escala termodinámica de temperatura absoluta

La eficiencia térmica de las máquinas de Carnot dependen únicamente de las temperaturas absolutas T_1 y T_2 , que son las temperaturas del fluido de trabajo durante el suministro y la cesión de calor respectivamente (**Figura 2.3**), que se demuestra a continuación.

De la ecuación (2.2), la eficiencia del ciclo de Carnot se tiene:

$$\eta = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} \quad (2.4)$$

el calor que se suministra al sistema se puede calcular a partir de la siguiente expresión:

$$Q_1 - W_1 = \Delta U_1 = 0 \quad (2.5)$$

despejando Q_1

$$Q_1 = \oint p dV = RT_1 \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (2.6)$$

de la misma manera, el calor que es cedido al sistema es el siguiente:

$$Q_2 = \oint p dV = RT_2 \ln \frac{V_4}{V_3} < 0 \quad (2.7)$$

a la vez:

$$|Q_2| = RT_2 \ln \frac{V_3}{V_4} \quad (2.8)$$

sustituyendo la ecuación (2.4):

$$\eta = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{RT_2 \ln \frac{V_C}{V_D}}{RT_1 \ln \frac{V_B}{V_A}} \quad (2.9)$$

del ciclo de Carnot se puede observar que los procesos B-C y D-A son adiabáticos reversibles por lo que:

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{T_B}{T_C} = \left(\frac{V_C}{V_B}\right)^{k-1} = \frac{T_A}{T_D} = \left(\frac{V_D}{V_A}\right)^{k-1} \quad (2.10)$$

de las igualdades anteriores se tiene:

$$\frac{V_C}{V_D} = \frac{V_B}{V_A} \quad (2.11)$$

al sustituirlas en la ecuación (2.9):

$$\eta = 1 - \frac{T_2}{T_1} \quad (2.12)$$

La operación de cualquier máquina externamente reversible constituye un medio para establecer una escala de temperaturas que es independiente de las propiedades físicas de las sustancias. Esta escala es conocida como escala termodinámica de temperatura absoluta.

De acuerdo a las relaciones obtenidas anteriormente:

$$\eta = 1 - \frac{T_2}{T_1} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} \quad (2.13)$$

$$\therefore \frac{T_2}{T_1} = \frac{Q_2}{Q_1} \quad (2.14)$$

Esta relación indica que el cociente entre dos temperaturas arbitrarias debe ser igual al cociente de los calores transferidos por un motor térmico internamente reversible que intercambia calor a su entorno bajo esas mismas temperaturas en la frontera. Para que la escala de gas ideal fuera

consistente con la escala termodinámica de temperatura absoluta, se le asignó el valor de 273.16 a la temperatura del punto triple del agua; es decir:

$$T = 273.16 \frac{Q}{Q_{pt}} \quad (2.15)$$

donde Q representa el calor que se libera de una fuente a temperatura T desconocida, y Q_{pt} es el calor liberado hacia la región de baja temperatura que se encuentra a 273.16 K.

2.3 Entropía (Introducción)

La Segunda Ley de la Termodinámica establece que los procesos siempre se llevan a cabo en una dirección particular; para explicar el principio físico que conlleva a estas afirmaciones, Clausius intentó en 1854 desarrollar un modelo matemático que permitiera aplicar la Segunda Ley de una manera cuantitativa mediante una función matemática a la que denominó entropía [18]. La entropía es una consecuencia de la Segunda Ley que proporciona un método para demostrar la imposibilidad de que ciertas transformaciones energéticas se verifiquen, así como identificar la dirección de los procesos espontáneos.

La Segunda Ley se puede expresar analíticamente para cualquier máquina térmica a partir de los axiomas que la enuncian, el más apropiado para llevar a cabo la deducción matemática útil es el axioma de Kelvin-Planck. En este enunciado se expresa que ninguna máquina térmica puede producir trabajo neto de salida si sólo intercambia calor con una sola fuente térmica, pero no se imponen restricciones sobre un trabajo neto externo sobre el sistema o que sea nulo.

De acuerdo a lo descrito anteriormente, el enunciado de Kelvin-Planck para un sistema cerrado con un proceso cíclico que interactúa con una sola fuente térmica (**Figura 2.4**) se expresa analíticamente de la siguiente manera:

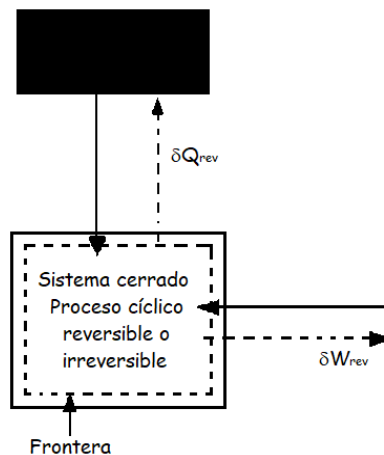


Figura 2.4. Sistema cerrado interactuando con una sola fuente térmica en un proceso reversible o irreversible [19].

$$W_{net} = \sum W \geq 0 \quad \text{ó} \quad W_{net} = \oint \partial W \geq 0 \quad (2.16)$$

el balance energético de acuerdo a la primera Ley es:

$$\oint \partial W = - \oint \partial Q \quad (2.17)$$

el resultado obtenido lleva a la siguiente expresión:

$$\therefore Q_{net,sum} = \oint \partial Q \leq 0 \quad (2.18)$$

Esto significa que el calor que se suministra $Q_{net,sum}$, debe cederse por el sistema o ser nulo. Los signos “=” y “<” indican que el ciclo es internamente reversible e internamente irreversible respectivamente.

En base a esto, se desprende una desigualdad que permite representar la degradación de la energía y que se presenta a continuación.

2.3.1 Desigualdad de Clausius

Un dispositivo que opera de manera cíclica que interactúa con solo una fuente térmica no puede entregar trabajo neto a su entorno, pero éste puede recibir trabajo neto de su entorno mientras rechaza calor a una sola fuente térmica. Esto se puede expresar apoyado de una desigualdad conocida como la desigualdad de Clausius, la cual establece que:

“Un sistema cerrado cualquiera realiza un proceso cíclico, la suma de todos los términos $\frac{\partial Q}{T}$ en la frontera del sistema para cada evolución diferencial del proceso será siempre igual o menor que cero”

Esto se puede expresar matemáticamente de acuerdo a la ecuación (2.19):

$$\oint \left(\frac{\partial Q}{T} \right) \leq 0 \quad (2.19)$$

El signo “=” se ocupa para sistemas internamente reversibles y el signo “<” se ocupa para procesos internamente irreversibles.

2.3.2 Entropía

La forma internamente reversible de la desigualdad de Clausius para sistemas cerrados se expresa de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\oint \left(\frac{\partial Q}{T} \right)_{Int Rev} = 0 \quad (2.20)$$

De la definición de una propiedad termodinámica de acuerdo a Wark [19]: Una propiedad es una característica del sistema, y su valor es independiente de la historia del sistema. En ocasiones se define una propiedad como combinación matemática de otras propiedades. Otro tipo de propiedades incluye aquellas definidas mediante las leyes de la termodinámica. El valor de cada propiedad es único y está fijado por la condición del sistema en el momento en que es medida. El cambio del valor de cualquier propiedad en un proceso cíclico es cero.

En base a lo anterior, $\frac{\partial Q}{T}$ representa una variación diferencial de una propiedad termodinámica, que es conocida como entropía y se denota por la letra "S":

$$dS \equiv \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Int Rev} \quad (2.21)$$

y para una diferencia finita de S se tiene que:

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_1^2 \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Int Rev} \quad (2.22)$$

La variación de la entropía puede calcularse mediante la ecuación (2.20), sólo cuando el proceso es reversible. Para calcular la entropía en un proceso irreversible se puede idear uno o varios procesos reversibles entre los estados finales e iniciales debido a que los extremos de ambos procesos son los mismos, por lo que el cambio de entropía debe ser el mismo.

Por ejemplo, en un proceso cíclico internamente irreversible del estado 1 a 2 y un proceso internamente reversible entre los mismos puntos, como el mostrado en la **Figura 2.5**, se tiene que:

$$\oint \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Int Rev} = \int_1^2 \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Irr} + \int_2^1 \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Rev} < 0 \quad (2.23)$$

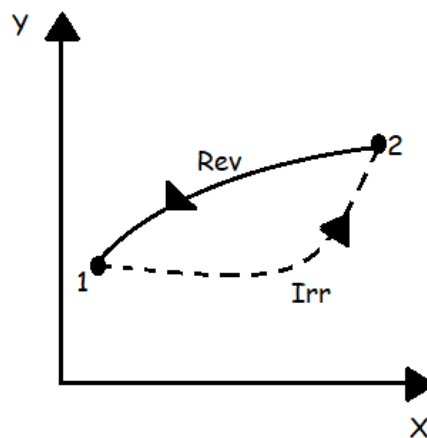


Figura 2.5. Trayectoria para un proceso reversible e irreversible [19].

La desigualdad se aplica debido a que una parte del ciclo es irreversible, y sustituyendo la ecuación (2.22) en el segundo término de la ecuación e invirtiendo los límites de la integral se llega a:

$$\int_1^2 \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Irr} < S_2 - S_1 = \Delta S \quad (2.24)$$

Esto permite demostrar que para los procesos internamente irreversibles, la integral $\int_1^2 \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Irr}$ siempre es menor que el valor ΔS , es decir, el valor de la transferencia de entropía nunca es mayor que la variación de entropía.

2.3.3 Generación de entropía, principio de generación de entropía.

En un sistema cerrado en el que no hay transferencia de energía con los alrededores, de acuerdo a la Primera Ley de la Termodinámica, se establece que este sistema sólo puede adquirir los estados en los que su energía interna total permanece constante. La Segunda Ley establece que el sistema sólo puede adquirir los estados en los que la entropía aumenta o permanece constante, como se demostró en la ecuación (2.24).

La ecuación (2.24) se conoce como el *principio de incremento de entropía* y es una de las formas cuantitativas de establecer la Segunda Ley. En resumen, la Segunda Ley establece que la entropía sólo se crea, es imposible destruirla.

La diferencia que se presenta para que un sistema sea irreversible o reversible es la presencia física de irreversibilidades internas. Las reversibilidades internas siempre contribuyen a la variación de entropía y se representan mediante “ σ ” cuando es una magnitud extensiva y σ_m cuando es una magnitud intensiva. La ecuación (2.19) puede hacerse igualdad si se le agregan la presencia de las irreversibilidades internas:

$$dS \equiv \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{Int Rev} + \partial\sigma \quad (2.25)$$

para un cambio finito:

$$S_2 - S_1 = \oint \left(\frac{\partial Q}{T}\right) + \sigma \quad (2.26)$$

y σ siempre es mayor a 0 para procesos internamente irreversibles o igual a cero para procesos internamente reversibles.

En las últimas décadas, la mayoría de los estudios que se han realizado para conocer al aprovechamiento energético están basado en la Primera Ley, es por ello, que con este trabajo se busca establecer un análisis de generación entropía que permita conocer cuánto del trabajo disponible se está aprovechando y cuánto se está desperdiciando o tirando al medio ambiente debido a los efectos disipativos.

2.3.4 Diagramas T-S

Los diagramas T-S son una manera de representar los procesos termodinámicos que se llevan a cabo durante un ciclo. Dentro de un diagrama T-S los procesos isotérmicos se representan mediante líneas horizontales, mientras que los procesos adiabáticos se representan mediante líneas verticales. En los procesos reversibles el intercambio de calor en el sistema se calcula a través de la siguiente expresión:

$$dQ_{rev} = Tds \quad (2.27)$$

Y en un diagrama T-S, la transferencia de calor se representa mediante el área bajo la curva que comprende la trayectoria a-1-2b de la **Figura 2.6**

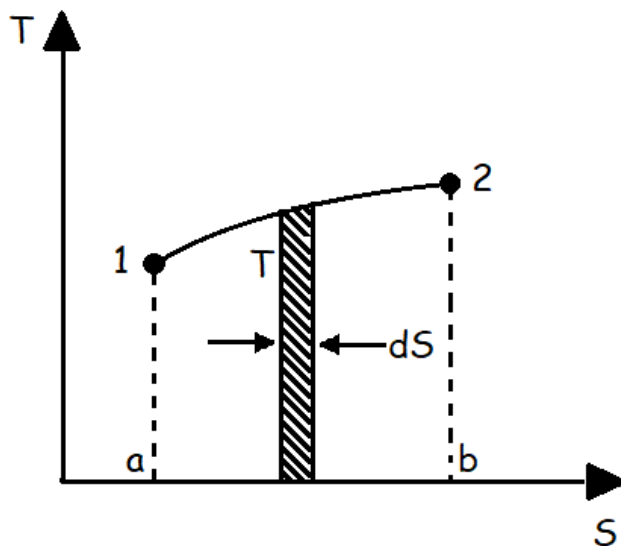


Figura 2.6. Diagrama Temperatura-Entropía (T-S) [18].

Matemáticamente, el calor total del proceso será la integral de TdS entre los estados 1 y 2:

$$Q_{rev} = \int_1^2 TdS \quad (2.28)$$

En los procesos irreversibles, el área bajo la curva será superior al calor intercambiado.

Los procesos que se llevan a cabo a entropía constante se les denomina isoentrópicos y son representados mediante líneas verticales en el diagrama T-S, que se comprueba debido a que en los procesos adiabáticos reversibles $dQ_{rev} = 0$ y $dS = \left(\frac{\partial Q}{T}\right)_{rev}$, $dS = 0$. Los procesos adiabáticos reversibles siempre son isoentrópicos, pero no todos los procesos isoentrópicos son adiabáticos reversibles. Ejemplo de lo anterior, en un flujo de fluido se presenta fricción debido al roce entre las moléculas del mismo fluido y ésto llevará a un incremento en su entropía; si se extrae calor del fluido de tal forma que su entropía permanezca constante se comprueba que el proceso será isoentrópico pero no es ni adiabático ni reversible.

Lo anterior lleva a que para tener un proceso isoentrópico, es obligatorio que incremente la entropía a los alrededores del sistema, es decir, que el sistema ceda calor.

2.3.5 Relaciones termodinámicas (Ecuaciones de Maxwell)

Las ecuaciones de Maxwell permiten relacionar las propiedades termodinámicas y facilitar el análisis de ellas; es decir, contienen información del comportamiento termodinámico macroscópico del sistema. El ejemplo claro del porqué utilizar estas ecuaciones es la dependencia de la entropía, que es una variable natural de U y H (energía interna y entalpía, respectivamente), ya que la entropía no se puede medir experimentalmente y mucho menos mantenerla constante en el estudio de las otras propiedades termodinámicas, por ello es que se expresa la U y H en función de variables que se pueden medir fácilmente como lo es P y T (donde P es la presión y T la temperatura).

Para llegar a las relaciones de Maxwell para la entropía se sigue un procedimiento, en el cual se busca relacionar las propiedades termodinámicas unas con otras, a continuación, se muestran las funciones de estado que permiten llegar a las relaciones de Maxwell:

Ecuación de la energía:

$$du = dq + dw = Tds - pdv \quad (2.29)$$

donde v es el volumen específico.

Ecuación de la entalpía:

$$h = u + pv \quad (2.30)$$

$$dh = du + pdv + vdp \quad (2.30a)$$

Ecuación de Helmholtz:

$$a = u - Ts \quad (2.31)$$

$$da = du - Tds - sdT \quad (2.31a)$$

donde a es la función de Helmholtz.

Ecuación de Gibbs:

$$g = u + pv - Ts \quad (2.32)$$

$$dg = du + pdv + vdp - Tds - sdT \quad (2.32a)$$

donde g es la función de Gibbs.

Sustituyendo (2.29) en (2.30a):

$$dh = Tds - \cancel{pdv} + \cancel{pdv} + vdp \quad (2.33)$$

$$dh = Tds + vdp \quad (2.33a)$$

sustituyendo (2.29) en (2.31a):

$$da = \cancel{Tds} - pdv - \cancel{Tds} - sdT \quad (2.34)$$

$$da = -pdv - sdT \quad (2.34a)$$

finalmente (2.29) en (2.32a):

$$dg = \cancel{Tds} - \cancel{pdv} + \cancel{pdv} + vdp - \cancel{Tds} - sdT \quad (2.35)$$

$$dg = vdp - sdT \quad (2.35a)$$

las funciones de estado son finalmente:

$$du = Tds - pdv \quad (2.36)$$

$$dh = Tds + vdp \quad (2.37)$$

$$da = -pdv - sdT \quad (2.38)$$

$$dg = vdp - sdT \quad (2.39)$$

donde u, s, p, v, h, a, g son propiedades específicas. O

2.3.5.1 Relaciones para la entropía

Las relaciones termodinámicas que se emplean para el cálculo de la entropía se representan empleando los calores específicos:

$$c_v \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v \quad (2.40)$$

$$c_p \equiv \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p \quad (2.41)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v \quad (2.42)$$

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v = \frac{c_v}{T} \quad (2.43)$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p \quad (2.44)$$

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p = \frac{c_p}{T} \quad (2.45)$$

Entropía en función de los calores específicos:

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v dT + \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T dv \quad (2.46)$$

$$ds = \frac{c_v}{T} dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v dv \quad (2.47)$$

$$ds = \frac{c_p}{T} dT - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p dv \quad (2.48)$$

Estas relaciones permiten calcular la entropía, como se mencionó anteriormente. Al ser la entropía una propiedad termodinámica, cualquier cambio que ocurra en ella sólo dependerá de su estado inicial y final, es por eso que la evaluación de cualquier propiedad puede evaluarse a través de una o varias trayectorias según sea más conveniente.

2.4 Motores de combustión interna (MCI)

El punto de partida para el análisis de un motor de combustión interna es el ciclo de Carnot, como se presentó en el apartado 2.2.1. El ciclo de Carnot permite comparar cuál es el rendimiento de una máquina que opera bajo una serie de procesos termodinámicos, al que se denominan ciclo. El

ciclo real también es idealizado; es decir, se busca que el rendimiento sea el máximo, aunque a el día de hoy aún es muy deficiente.

Existen 4 tipo de ciclos básicos; el ciclo Rankine de una máquina de vapor, el ciclo de un motor de combustión interna, el ciclo Brayton para una turbina de gas y el ciclo Rankine de compresión de vapor. Este apartado se encarga de describir el ciclo de un motor de combustión interna, que es el que se abordará en esta tesis.

Para entender cuáles son los problemas que surgen al utilizar un vehículo que funciona con motor de combustión interna, es necesario definirlo. El motor de combustión interna es un mecanismo que está compuesto principalmente por un pistón, un cilindro y una biela. En conjunto del cilindro con el pistón forman la cámara de combustión (**Figura 2.7**), en la cual se inyecta el combustible mezclado con aire y mediante una chispa se genera una explosión, que libera energía química generando el desplazamiento lineal del pistón, que posteriormente se transforma en movimiento radial.

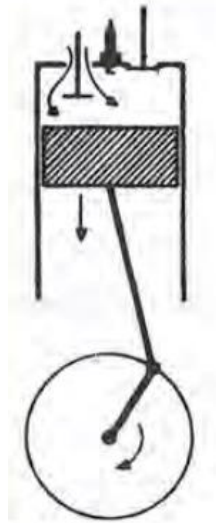


Figura 2.7. Motor de combustión interna [20].

Dentro de los MCI se encuentran dos clasificaciones de acuerdo al ciclo de operación: motores de 4 tiempos (admisión, compresión, expansión y escape) y de 2 tiempos (compresión y escape); el esquema de funcionamiento de ambos se muestra en la **Figura 2.8**. El encendido puede ser mediante una chispa o ignición por compresión de aire (Motor diésel).

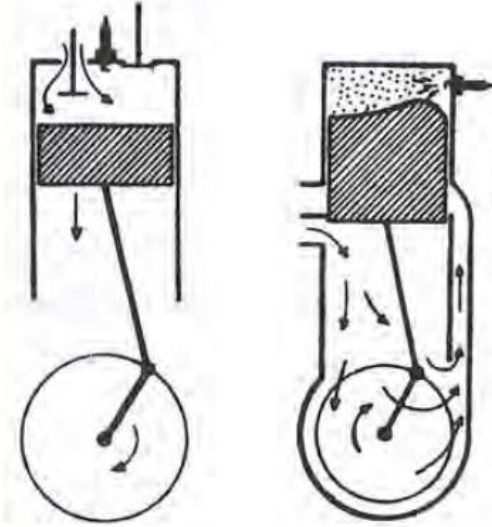


Figura 2.8. MCI de 2 y 4 tiempos [20].

Los elementos de los motores de combustión interna realizan ciclos completos, pero el fluido de trabajo no, que se debe a que la mezcla de aire-combustible reacciona y genera gases productos de la combustión los cuales se expulsan a la atmósfera; este tipo de ciclos son denominados abiertos y el análisis se vuelve complicado, razón por lo que, como se mencionó anteriormente, el análisis de este tipo de ciclos se simplifica mediante un modelo de ciclo estándar cerrados. Para que un ciclo sea estándar debe cumplir lo siguiente: el fluido de trabajo debe ser un gas ideal (con calores específicos constantes), procesos reversibles y una interacción entre dos fuentes térmicas, una de alta temperatura (en lugar de la cámara de combustión) y una de baja temperatura (en lugar del escape).

Aún cuando se idealizan estos ciclos, la conversión de energía química en mecánica es incompleta ya que, en los procesos reales existen irreversibilidades; la combustión del fluido de trabajo puede ser incompleta y el sistema puede ceder gran cantidad de calor al medio ambiente.

Para llevar a cabo un análisis de eficiencia en un MCI se utiliza el rendimiento térmico, que es definido como la relación entre el trabajo neto producido y la energía que se le suministra; éste de acuerdo a la ecuación (2.49). Otra manera de conocer la eficiencia mecánica de los MCI es mediante la relación de potencias de acuerdo a la ecuación (2.50):

$$\eta = \frac{W_{neto}}{Q_{sum}} \quad (2.49)$$

$$\eta_{mec} = \frac{PF}{PI} \quad (2.50)$$

donde PF es la potencia al freno, la cual indica la potencia desarrollada por el eje del motor y PI es la potencia indicada, que es la potencia desarrollada por los cilindros.

Otro indicador del rendimiento de un MCI es el rendimiento volumétrico, el cual depende directamente de la capacidad de aspiración, que se muestra en la ecuación (2.51):

$$\eta_{vol} = \frac{m_{real}}{m_{ideal}} = \frac{\dot{m}_{real}}{\dot{m}_{ideal}} \quad (2.51)$$

Hasta el día de hoy, el hombre ha desarrollado diversas formas de convertir cualquier forma de energía en trabajo para cubrir necesidades como el transporte, los más utilizados para cubrir dicha necesidad se basan en los ciclos estándar de Otto y el ciclo estándar de Diesel.

2.4.1 El ciclo estándar de Otto

Este tipo de ciclo es la idealización de un MCI encendido por chispa; es decir, el motor de gasolina convencional. Para realizar un análisis de termodinámico de este tipo de ciclo, se llevan a cabo idealizaciones; el fluido de trabajo es un gas ideal, la adición de calor a volumen constante es realizada proporcionalmente a la combustión de la mezcla aire-combustible, y los procesos de compresión y expansión son isoentrópicos. El diagrama del ciclo Otto se muestra en la **Figura 2.9**:

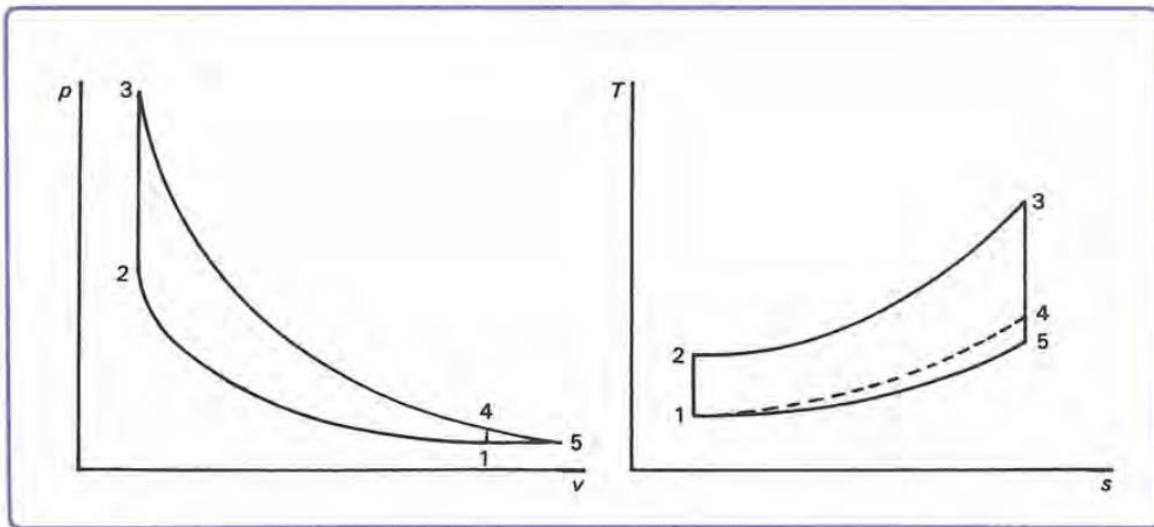


Figura 2.9. Diagrama PV y TS para el ciclo Otto [20].

A continuación, se describe el ciclo de Otto tomando como estado inicial el punto 1:

- En el proceso 1-2 se lleva a cabo la compresión del gas de manera adiabática. Durante el proceso se realiza un trabajo igual al área bajo la curva de la trayectoria 1-2 en el diagrama P-V de la **Figura 2.9**.
- En el proceso 2-3 se le suministra calor al fluido de trabajo y esto se realiza a volumen constante. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria 2-3 en el diagrama P-V de la **Figura 2.9**.
- En el proceso 3-4 se lleva a cabo una expansión adiabática. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria 3-4 en el diagrama P-V de la **Figura 2.9**.
- En el proceso 4-1 se cede calor a volumen constante. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria 4-1 en el diagrama P-V de la **Figura 2.9**.

La eficiencia térmica es uno de los parámetros más importantes en el análisis de los ciclos en general, y para un ciclo Otto la eficiencia térmica se expresa de acuerdo a la ecuación (2.52):

$$\eta = 1 - \frac{1}{r^{k-1}} \quad (2.52)$$

donde r es la relación de compresión que permite medir la proporción de volumen comprimido de la mezcla aire- combustible; está relación es llamada relación de compresión y está definida como se muestra en la ecuación (2.53):

$$r = \frac{V_1}{V_2} \quad (2.53)$$

El resultado anterior indica que entre mayor sea la relación de compresión, la eficiencia aumentará, lo que se puede observar gráficamente de acuerdo a la **Figura 2.10**:

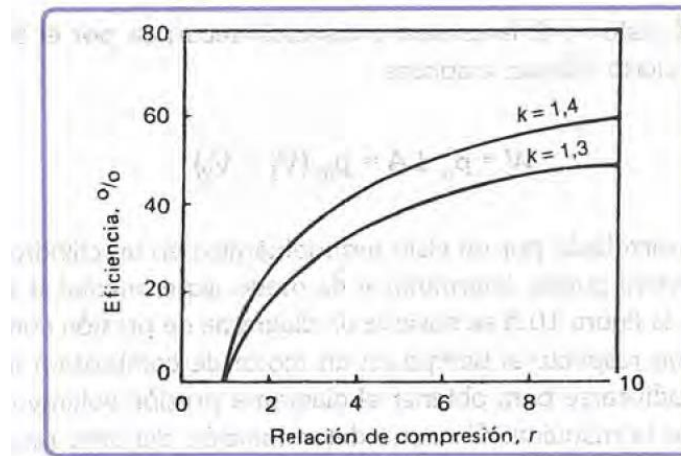


Figura 2.10. Eficiencia de un ciclo Otto de acuerdo a su relación de compresión [20].

La presión media efectiva (P_m) es un parámetro importante en el ciclo Otto, y representa a una presión que se ejerce de manera constante durante todo el ciclo y que proporciona una cantidad de trabajo equivalente al producido por el sistema. La importancia de este parámetro es que el objetivo de los diseños de las máquinas tengas altos valores de P_m , es decir, se diseña en base a la P_m . El trabajo que desarrolla un ciclo depende de la P_m y esto se muestra en la ecuación (2.53):

$$W = P_m A L = P_m (V_1 - V_2) \quad (2.53)$$

donde W es el trabajo desarrollado en el ciclo, V es el volumen y el subíndice indica el estado al que pertenece, A el área de la sección transversal del pistón y L la carrera recorrida por el pistón.

La P_m se determina experimentalmente al utilizar un diagrama indicador de presión. En la **Figura 2.11** se muestra un diagrama P-t en el que se observa la variación de presión respecto al tiempo en un MCI.

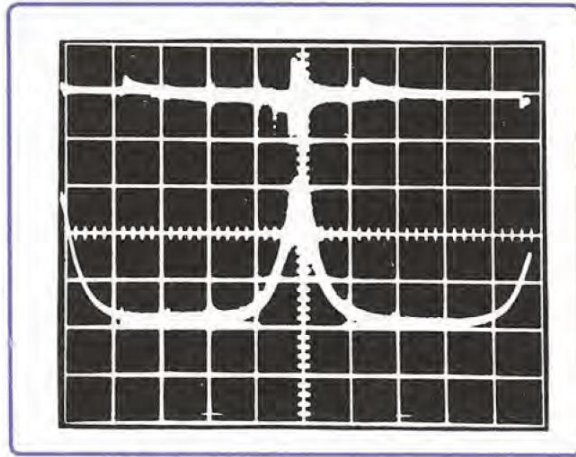


Figura 2.11. Diagrama P-t de un motor de combustión interna [20].

2.4.2 El ciclo Diesel estándar

El ciclo de Diesel es un ciclo que en la admisión sólo aspira aire, la relación de compresión es mayor a la del ciclo Otto, que implica que el aire alcance temperaturas y presiones más elevadas, ocasionando que, al inyectar el combustible, éste espontáneamente se queme sin necesidad de una chispa. En la **Figura 2.12** se muestra los diagramas P-V y T-S del ciclo Diesel:

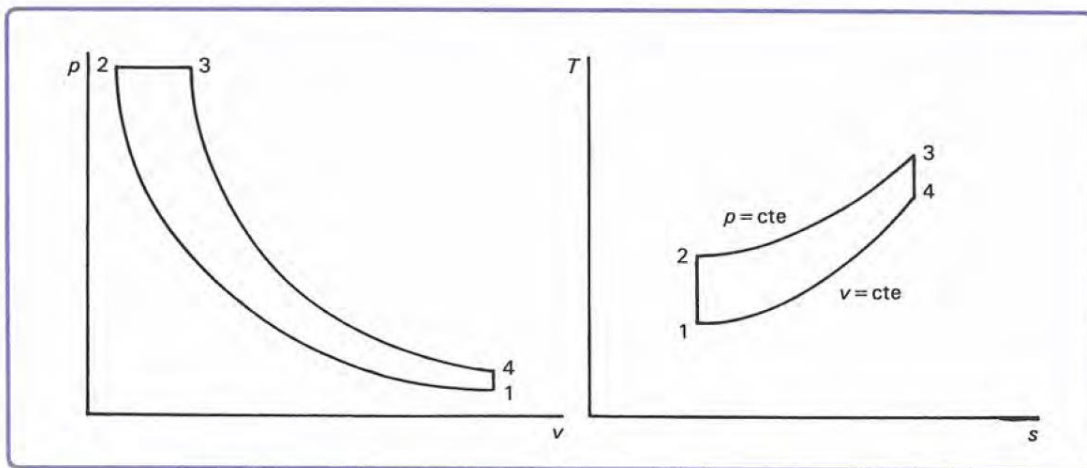


Figura 2.12. Diagrama pv y Ts para el ciclo Diesel [20].

El proceso del ciclo Diesel se describe a continuación tomando como referencia el punto 1:

- En el proceso 1-2 se lleva a cabo la compresión del fluido de trabajo de manera adiabática. Durante el proceso se realiza un trabajo igual al área bajo la curva de la trayectoria 1-2 en el diagrama P-V de la **Figura 2.12**.
- En el proceso 2-3 se le suministra calor al fluido de trabajo, realizándose a presión constante. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria 2-3 en el diagrama P-V de la **Figura 2.12**.

- En el proceso 3-4 se lleva a cabo una expansión adiabática. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria 3-4 en el diagrama P-V de la **Figura 2.12**.
- En el proceso 4-1 se cede calor a presión constante. El trabajo que se realiza durante este proceso es igual al área bajo la curva de la trayectoria 4-1 en el diagrama P-V de la **Figura 2.12**.

Cómo se puede observar, la diferencia entre los ciclos Diesel y Otto es que, en la combustión, el proceso en el ciclo Otto se supone a volumen constante, mientras que en el ciclo de Dieses se supone a Presión constante.

Para un ciclo Diesel la eficiencia térmica se expresa de acuerdo a la ecuación (2.54):

$$\eta = 1 - \frac{1}{r^{k-1}} \left[\frac{r_c^k - 1}{k(r_c - 1)} \right] \quad (2.54)$$

donde r_c es relación de corte y r es la relación de compresión. El término entre corchetes es siempre mayor o igual a la unidad, lo que indica que para una misma relación de compresión para los ciclos Otto y Diesel:

$$\eta_{Otto} > \eta_{Diesel} \quad (2.55)$$

y en el límite cuando la relación de corte es igual a la unidad, la eficiencia de los ciclos Otto y Diesel es igual. Pequeñas variaciones en la relación de corte pueden repercutir directamente en la eficiencia del ciclo Diesel, que se muestra en la **Figura 2.13**:

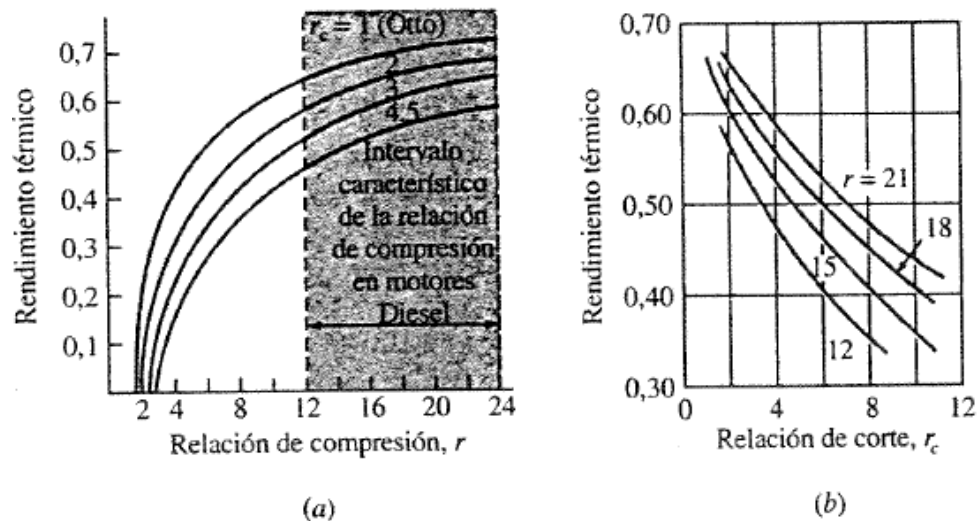


Figura 2.13. Rendimiento de un motor contra la relación de compresión y relación de corte [19].

3 Modelos matemáticos para el flujo en la Cámara de Combustión

Los modelos matemáticos que se han desarrollado son una herramienta muy útil que permiten cuantificar el desempeño de los motores de combustión interna. Estos modelos pueden clasificarse en: modelos basados en la termodinámica y modelos basados en la dinámica de fluidos computacional (CFD). Los modelos termodinámicos son modelos cuasi y cero dimensionales. A continuación, se presenta el modelo termodinámico que representa el comportamiento del flujo dentro de la cámara de combustión y que se resolvió en el software Mathematica®.

3.1 Modelo matemático de un motor de combustión interna

El modelo que se utiliza en los análisis de los motores de combustión está basado principalmente en el presentado por Ferguson [21] en 1985, en el cual se asume que en el cilindro se encuentra un gas ideal:

$$\Delta U = Q - W \rightarrow m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad (3.1)$$

donde U es la energía interna, Q es el calor, W es el trabajo, m es la masa, P es la presión, V es el volumen instantáneo y θ el ángulo del cigüeñal. Los cambios en las propiedades termodinámicas se determinan a partir de las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{A_{pr} + B + C_{pr}}{D + E} \quad (3.2)$$

donde

$$A_{pr} = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right) \quad (3.2a)$$

$$B = \frac{hA_b}{\omega m} \frac{v_b}{C_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \left(1 - \frac{T_w}{T_b} \right) + \frac{hA_u}{\omega m} \frac{v_u}{C_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \left(1 - \frac{T_w}{T_u} \right) \quad (3.2b)$$

$$C_{pr} = -(v_b - v_u) \frac{dx}{d\theta} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_u - h_b}{C_{pb} T_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - \left(\frac{(x-x^2)C}{\omega} \right) \right] \quad (3.2c)$$

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{C_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right] \quad (3.2d)$$

$$E = (1 - x) \left[\frac{v_u^2}{C_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right] \quad (3.2e)$$

En las ecuaciones (3.2a) a (3.2e) los subíndices u y b significan las regiones de la mezcla de no quemada (unburn) y quemada (burn) respectivamente. El término ω es la velocidad angular del cigüeñal, C_p es el calor específico de la mezcla, v es el volumen específico de la mezcla, T es la temperatura de la mezcla y h con subíndice u o b es la entalpía de la mezcla. Adicionalmente, el término h sin subíndice representa el coeficiente de transferencia de calor, T_w es la temperatura de la pared del cilindro, A_b y A_u son el área que cubren los gases quemados y no quemados dentro del cilindro, respectivamente.

Las ecuaciones para calcular las temperaturas de la mezcla se muestran a continuación:

$$\frac{dT_b}{d\theta} = \frac{-hA_b(T_b - T_w)}{\omega * m * Cp_b * x} + \frac{v_b}{Cp_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{dP}{d\theta} + \frac{h_u - h_b}{Cp_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - \left((1-x) \frac{Cm}{\omega} \right) \right] \quad (3.3)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = \frac{-hA_u(1-x^2)(T_u - T_w)}{\omega * m * Cp_u * (1-x)} + \frac{v_u}{Cp_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} \quad (3.4)$$

El trabajo, las pérdidas de calor y entalpía durante el ciclo de un MCI son mostradas a continuación:

$$\frac{dW}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} \quad (3.5)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = \frac{1}{\omega} [hA_b(T_b - T_u) + hA_u(T_u - T_w)] \quad (3.6)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = \frac{C * m}{\omega} [(1-x^2)h_u + x^2h_b] \quad (3.7)$$

El término C de las ecuaciones (3.7), (3.3) y (3.2a) representa las pérdidas de masa del cilindro al exterior. Estas pérdidas se pueden calcular mediante modelos matemáticos o de manera experimental; para este trabajo se ha tomado un valor de cero, para el coeficiente de transferencia de calor h y la temperatura de la pared T_w , el valor es de $500 \left[\frac{W}{m^2k} \right]$ y 400 K, respectivamente, estos valores son sugeridos por Ferguson [21].

3.2 Sub-modelo geométrico

Este modelo está basado en el presentado por Bilgin y Sezer [27] y en éste se supone que la propagación de la flama es esférica en la cámara de combustión, como se muestra en la **Figura 3.1**, y el centro de dicha esfera es la ubicación de la bujía en la cámara de combustión.

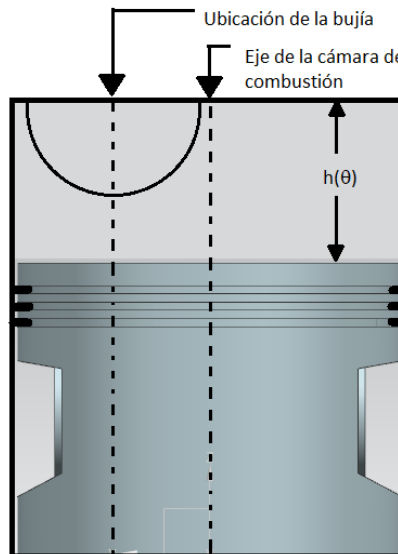


Figura 3.1. Esquema de la cámara de combustión.

El modelo geométrico permite conocer el volumen instantáneo de la cámara de combustión en cada posición angular del cigüeñal, que es requerido para resolver las ecuaciones (3.2), (3.3), (3.4) y (3.5).

El volumen instantáneo dentro de la cámara de combustión se obtiene de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$V(\theta) = V_c \left(1 + \frac{r-1}{2} \left(1 - \cos(\theta) + \frac{1}{r_{cr}} \left[1 - \sqrt{(1 - r_{cr}^2 \sin^2(\theta))} \right] \right) \right) \quad (3.8)$$

donde V_c representa el volumen dentro del cilindro cuando el pistón se encuentra en punto muerto inferior, r es la relación de compresión y r_{cr} es la mitad de la relación de longitud de la carrera L_s a la longitud de la biela L_{cr} :

$$r_{cr} = \frac{L_s}{2L_{cr}} \quad (3.9)$$

El área dentro de la cámara de combustión se calcula de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$A(\theta) = 2\pi a^2 + 2\pi a h(\theta) \quad (3.10)$$

donde a es el radio de la cámara de combustión y $h(\theta)$ la altura instantánea, la cual se obtiene de la siguiente manera:

$$h(\theta) = \frac{V(\theta)}{\pi a^2} \quad (3.10.a)$$

El área que representa la ecuación (3.10) es el área instantánea dentro de la cámara de combustión; esta área se debe descomponer a su vez en un área que ocupan los gases que no están quemados y otra en la que se encuentran los gases quemados, es decir:

$$A(\theta) = A_b(\theta) + A_u(\theta) \quad (3.11)$$

donde A_b es el área de los gases quemados y A_u representa el área de los gases no quemados.

En el programa que se desarrolló se establecen condiciones que permiten conocer el área y volumen de los gases quemados y no quemados en cada etapa (compresión, combustión, expansión) y se encuentran desarrolladas en el **Apéndice 1**. Este modelo se conoce como propagación de la flama.

La función de Wiebe permite calcular la fracción de masa quemada dentro de la cámara de combustión en cada ángulo del cigüeñal, dicha expresión es:

$$x = \begin{cases} 0 & \theta < \theta_s \\ \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{\pi(\theta - \theta_s)}{\theta_b} \right) \right) & \theta \geq \theta_s \text{ \& \ } \theta \leq \theta_s + \theta_b \\ 1 & \theta > \theta_s + \theta_b \end{cases} \quad (3.12)$$

donde x representa la fracción de masa quemada, θ_s es el ángulo donde se inicia la combustión, θ_b la duración de la combustión y θ es el ángulo instantáneo del cigüeñal. El término θ_b se puede obtener mediante una relación empírica desarrollada por Bayraktar y Durgun [41], la cual es:

$$\theta_b(r, rpm, \phi, \theta_s) = f(r)f(rpm)f(\phi)f(\theta_s)\Delta\theta_{b1} \quad (3.12a)$$

donde las funciones $f(r)$, $f(rpm)$, $f(\phi)$ y $f(\theta_s)$ se calculan de acuerdo a:

$$f(r) = 3.2989 - 3.3612 \left(\frac{r}{7.5} \right) + 1.08 \left(\frac{r}{7.5} \right)^2 \quad (3.12b)$$

$$f(rpm) = 0.1222 + 0.9717 \left(\frac{rpm}{1000} \right) - 0.05051 \left(\frac{rpm}{1000} \right)^2 \quad (3.12c)$$

$$f(\phi) = 4.3111 - 5.6383 \left(\frac{\phi}{1} \right) + 2.304 * \left(\frac{\phi}{1} \right)^2 \quad (3.12d)$$

$$f(\theta_s) = 1.0685 - 0.2902 \left(\frac{\theta_s}{-30} \right) + 0.2545 \left(\frac{\theta_s}{-30} \right)^2 \quad (3.12e)$$

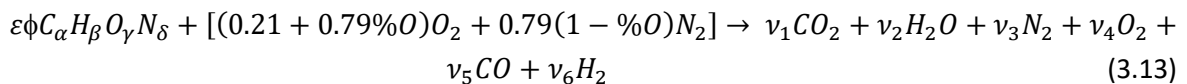
donde rpm es la velocidad del motor en revoluciones por minuto, ϕ es la razón de equivalencia y $\Delta\theta_{b1}$ es una condición de referencia.

3.3 Balance químico dentro de la cámara de combustión

Es necesario realizar un balance químico para cada etapa del proceso (compresión, combustión y expansión), con la finalidad de calcular las funciones termodinámicas específicas de la mezcla (oxígeno-aire-combustible) las cuales son entalpía, entropía y capacidad térmica. Como se ha mencionado anteriormente, el proceso consta de tres etapas que permiten evaluar el cambio en las funciones termodinámicas, a continuación, se describen brevemente los balances químicos requeridos en cada etapa.

3.3.1 Balance químico durante la etapa de compresión

En la etapa de compresión se resuelve el siguiente balance químico:



donde $\epsilon\phi$ y los términos ν_i representan los coeficientes que se deben calcular para balancear la reacción química y $\%O$ representa el porcentaje adicionado de oxígeno a la mezcla; para este estudio $\%O$ es igual a cero.

La solución para el sistema de ecuaciones que se genera a partir de esta reacción y para los casos en que $\phi < 1$ y $\phi > 1$, esta dada en **Tabla 3.1**:

Tabla 3.1. Productos de la combustión a bajas temperaturas. ν_i [moles/mol de mezcla]			
i	Especies	$\phi < 1$	$\phi > 1$
1	CO ₂	$\alpha\phi\epsilon$	$\alpha\phi\epsilon - \nu_5$
2	H ₂ O	$\beta\phi\epsilon/2$	$2(0.21+0.79\%O) - \phi\epsilon(2\alpha-\gamma) + \nu_5$
3	N ₂	$0.79(1-\%O) + \delta\phi\epsilon/2$	$0.79(1-\%O) + \delta\phi\epsilon/2$
4	O ₂	$(0.21+0.79\%O)(1-\phi)$	0
5	CO	0	ν_5
6	H ₂	0	$2(0.21+0.79\%O)(1-\phi) - \nu_5$

Como se puede observar, el término ν_5 en las mezclas ricas es aún una incógnita, y para poder calcular dicha incógnita se introduce una constante de equilibrio dada para la reacción (3.13):

$$K = \text{Exp}^{[2.743 + \frac{1000}{T} * (-1.761 + \frac{1000}{T} * (-1.611 + \frac{1000}{T} * 0.2803))]} \quad (3.13.1)$$

El rango en el cual se puede utilizar esta ecuación es de $400 < T < 3200$, donde T es la temperatura en la escala absoluta (Kelvin). Esta curva se aproxima de acuerdo a los datos de las tablas JANAF.

Finalmente:

$$\nu_5 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (3.13.2)$$

donde

$$a = 1 - K \quad (3.13.3)$$

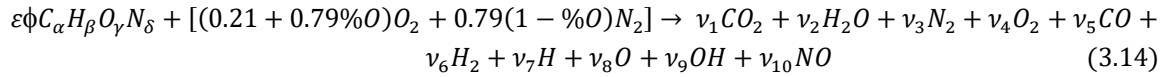
$$b = 2(0.21 + 0.79\%O) - \phi\epsilon(2\alpha - \gamma) + K[2(0.21 + 0.79\%O)(\phi - 1) + \alpha\phi\epsilon] \quad (3.13.4)$$

$$c = -2(0.21 + 0.79\%O)\alpha\phi\epsilon(\phi - 1)K \quad (3.13.5)$$

Las funciones termodinámicas calculadas en la etapa de compresión se denominan *no quemadas* (unburn), para resolver las ecuaciones de las funciones termodinámicas se hace uso de las tablas mostradas en el **Apéndice 2**.

3.3.2 Balance químico durante la etapa de combustión

La etapa de combustión requiere de un modelo combinado debido a que en esta etapa los gases comienzan a quemarse gradualmente, por lo que se utiliza el balance químico (3.13) en conjunto con (3.14):



Del balance se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$C \quad \varepsilon\phi\alpha = (y_1 + y_5)N \quad (3.14.1)$$

$$H \quad \varepsilon\phi\beta = (2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9)N \quad (3.14.2)$$

$$O \quad \varepsilon\phi\gamma + 2(0.21 + 0.79\%O) = (2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10})N \quad (3.14.3)$$

$$N \quad \varepsilon\phi\delta + 2[0.79(1 - \%O)] = (2y_3 + y_{10})N \quad (3.14.4)$$

donde N representa el número de moles presentes en la reacción y los términos y_i representan las fracciones molares en la reacción.

Para resolver el sistema es necesario introducir constantes de equilibrio. Las constantes de equilibrio permiten maximizar la entropía del gas; para el caso de un modelo más completo, es necesario ocupar un modelo químico más complejo, el cual permitirá conocer las propiedades termodinámicas tales como entalpia, entropía, volumen específico y energía interna.

Las constantes de equilibrio se pueden aproximar mediante una curva que Olikara y Borman [40] desarrollaron para resolver la composición, la ecuación es:

$$\log K_p = A \ln\left(\frac{T}{1000}\right) + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 \quad (3.14.5)$$

Los coeficientes para la ecuación (3.14.5) se encuentran en la **Tabla 3.2**:

Tabla 3.2. Coeficientes para calcular las constantes de equilibrio 3.14.6 a 3.14.11.

	A	B	C	D	E
K ₁	0.432168	-11246.4	2.67269	-7.45744E-05	2.42484E-09
K ₂	0.310805	-12954	3.21779	-7.38336E-05	3.44645E-09
K ₃	-0.141784	-2133.08	0.853461	3.55015E-05	-3.10227E-09
K ₄	0.0150879	-4709.59	0.646096	2.72805E-06	-1.54444E-09
K ₅	-0.752364	12421	-2.60286	0.000259556	-1.62687E-08
K ₆	-0.00415302	14862.7	-4.75746	0.000124699	-9.00227E-09

Se puede reacomodar las expresiones de las constantes de equilibrio con la finalidad de obtener las fracciones molares del N_2 , O_2 , CO y H_2 (y_3 , y_4 , y_5 y y_6 respectivamente):

$$y_7 = C_1 y_6^{1/2} \quad C_1 = \frac{K_1}{p^{1/2}} \quad (3.14.6)$$

$$y_8 = C_2 y_4^{1/2} \quad C_2 = \frac{K_2}{p^{1/2}} \quad (3.14.7)$$

$$y_9 = C_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} \quad C_3 = K_3 \quad (3.14.8)$$

$$y_{10} = C_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} \quad C_4 = K_4 \quad (3.14.9)$$

$$y_2 = C_5 y_4^{1/2} y_6 \quad C_5 = K_5 P^{1/2} \quad (3.14.10)$$

$$y_1 = C_6 y_4^{1/2} y_5 \quad C_6 = K_6 P^{1/2} \quad (3.14.11)$$

Para eliminar el número de moles de las ecuaciones (3.14.2) a (3.14.4), se pueden dividir entre (3.14.1) y se obtiene:

$$2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9 - \frac{\beta}{\alpha}(y_1 + y_5) = 0 \quad (3.14.12)$$

$$2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10} - \left[\left(\gamma + \frac{2(0.21+0.79\%O)}{\varepsilon\phi} \right) \frac{1}{\alpha}(y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (3.14.13)$$

$$2y_3 + y_{10} - \left[\left(\delta + \frac{0.79(1-\%O)}{\varepsilon\phi} \right) \frac{1}{\alpha}(y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (3.14.14)$$

Las ecuaciones (3.14.6) a (3.14.11) se pueden sustituir en (3.14.12) a (3.14.14) y resulta un sistema de ecuaciones de 3x4 (3 ecuaciones y 4 incógnitas), para cerrar el sistema se hace uso de la siguiente ecuación:

$$\sum_{i=1}^{10} y_i - 1 = 0 \quad (3.14.15)$$

Este sistema no se puede resolver de manera analítica por lo que se recurre a métodos numéricos, para este caso se utiliza el método de Newton-Raphson; para más detalles de la aplicación del método de resolución se puede consultar [21].

El uso de los balances químicos (3.13) y (3.14), tiene como finalidad calcular las funciones termodinámicas específicas de los gases no quemados (3.13) y los quemados (3.14).

3.3.3 Balance químico en la Expansión

En la etapa de expansión el balance químico que se resuelve es el (3.14), y el modelo para calcular las funciones termodinámicas que se utilizó está basado en el propuesto por Gordon y McBride [22], que, al igual que en el balance (3.13), las funciones termodinámicas se calculan de acuerdo a un polinomio de coeficientes de mínimos cuadrados como lo muestra Ferguson [21]. Una vez que se conocen los gases productos de la combustión (gases quemados), se calculan las siguientes funciones termodinámicas adimensionales:

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (3.15)$$

$$\frac{h}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \quad (3.16)$$

$$\frac{s}{R} = a_1 \ln[T] + a_2 T + a_3 \frac{T^2}{2} + a_4 \frac{T^3}{3} + a_5 \frac{T^4}{4} + a_7 \quad (3.17)$$

donde $\frac{c_p}{R}$, $\frac{h}{RT}$, $\frac{s}{R}$ representan la capacidad térmica específica, la entalpía y la entropía respectivamente, los coeficientes a_n están tabulados en las tablas JANAF [23], T representa la

temperatura de los gases y R es la constante particular de la mezcla. Cabe mencionar que este polinomio permite conocer la función termodinámica adimensional de cada especie de la mezcla y para conocer la propiedad termodinámica específica de la mezcla se requiere realizar la suma de cada especie, es decir:

$$c_p = \sum_{i=1}^n \left(\frac{c_p}{R}\right)_i y_i R \quad (3.18)$$

donde i es el elemento i ésimo de la mezcla, y_i la fracción molar del elemento i ésimo de la mezcla.

3.4 Segunda Ley de la Termodinámica (análisis de disponibilidad)

Como se mencionó en el capítulo 2, la Segunda Ley de la Termodinámica establece una propiedad no conservativa, que es debido a que ciertos procesos termodinámicos pueden destruir la capacidad que tiene un sistema de convertir la energía disponible (disponibilidad) en una forma más útil (trabajo). El uso explícito de la Primera Ley de la Termodinámica en conjunto con la Segunda Ley permite identificar los procesos específicos en los que se pierde la capacidad del sistema de producir la energía útil. El análisis de disponibilidad es:

$$\frac{dA}{d\theta} = \frac{dA_Q}{d\theta} - \frac{dA_W}{d\theta} + \frac{dA_{Combustible}}{d\theta} - \frac{dA_I}{d\theta} \quad (3.19)$$

donde $\frac{dA}{d\theta}$ es el cambio instantáneo de disponibilidad, $\frac{dA_Q}{d\theta}$ es la disponibilidad debido a la transferencia de calor, $\frac{dA_W}{d\theta}$ es la disponibilidad debido a la transferencia de trabajo, $\frac{dA_{Combustible}}{d\theta}$ es la disponibilidad química del combustible y $\frac{dA_I}{d\theta}$ es la disponibilidad destruida debido a procesos como la combustión. Cada una de las diferentes ecuaciones de disponibilidad se calculan de acuerdo a:

$$\frac{dA_Q}{d\theta} = \left(1 - \frac{T_0}{T}\right) \frac{dQ}{d\theta} \quad (3.19a)$$

$$\frac{dA_W}{d\theta} = \left(\frac{dW}{d\theta} - P_0 \frac{dV}{d\theta}\right) \quad (3.19b)$$

$$\frac{dA_{Combustible}}{d\theta} = \frac{m_f}{m} \frac{dx_b}{d\theta} a_{f,ch} \quad (3.19c)$$

$$\frac{dA_I}{d\theta} = \frac{dI_{tot}}{d\theta} \quad (3.19d)$$

donde m_f representa la masa del combustible, m es la masa de la mezcla y $a_{f,ch}$ es la disponibilidad máxima del combustible. La ecuación (3.19d) está compuesta de dos contribuciones de acuerdo a Sezer [27]:

$$\dot{I}_{tot} = \dot{I}_{comb} + \dot{I}_Q \quad (3.20)$$

donde

$$\dot{I}_{comb} = T_0 \dot{S}_{comb} \quad (3.21)$$

$$\dot{S}_{comb} = \frac{dm_b s_b}{d\theta} + \frac{dm_u s_u}{d\theta} \quad (3.22)$$

y

$$\dot{I}_Q = T_0 \dot{S}_Q \quad (3.23)$$

$$\dot{S}_Q = \frac{\dot{Q}_b}{T_b} + \frac{\dot{Q}_u}{T_u} \quad (3.24)$$

además

$$\frac{dm_b s_b}{d\theta} = s_b \frac{dm_b}{d\theta} + m_b \frac{ds_b}{d\theta} \quad (3.25)$$

$$\frac{ds_b}{d\theta} = -\frac{hA_b(T_b - T_w)}{\omega x T_b m_b} \quad (3.26)$$

de igual manera para $\frac{dm_u s_u}{d\theta}$

$$\frac{dm_u s_u}{d\theta} = s_u \frac{dm_u}{d\theta} + m_u \frac{ds_u}{d\theta} \quad (3.27)$$

$$\frac{ds_u}{d\theta} = -\frac{hA_u(T_u - T_w)}{\omega(1-x)T_u m_u} \quad (3.28)$$

y

$$\dot{Q}_b = \frac{hA_b(T_b - T_w)}{\omega x T_b m_b} \quad (3.29)$$

$$\dot{Q}_u = \frac{hA_u(T_u - T_w)}{\omega(1-x)T_u m_u} \quad (3.30)$$

sumando todos los términos

$$\dot{I}_{tot} = s_b \frac{dm_b}{d\theta} + m_b \left(-\frac{hA_b(T_b - T_w)}{\omega x T_b m_b} \right) + s_u \frac{dm_u}{d\theta} + m_u \left(-\frac{hA_u(T_u - T_w)}{\omega(1-x)T_u m_u} \right) + \frac{hA_b(T_b - T_w)}{\omega x T_b m_b} + \frac{hA_u(T_u - T_w)}{\omega(1-x)T_u m_u} \quad (3.31)$$

simplificando términos similares se tiene:

$$\dot{I}_{tot} = s_b \frac{dm_b}{d\theta} + s_u \frac{dm_u}{d\theta} \quad (3.32)$$

La eficiencia del ciclo se puede calcular en base a la Primera y Segunda Ley como se muestra a continuación:

$$\eta_I = \frac{W}{Q_{LHV} m_f} \quad (3.33)$$

donde Q_{LHV} es el menor valor calorífico del combustible, el cual se calcula de acuerdo a la fórmula de Mendeleyev:

$$Q_{LHV} = 33.91c' + 125.6h' - 10.89(o' - s') - 2.51(9h' - w') \quad (3.34)$$

donde c' , h' , o' , s' y w' representan las fracciones másicas del carbono, hidrogeno, oxígeno, azufre y agua que contiene el combustible, respectivamente; para este estudio o' , s' y w' son cero. Para la eficiencia de Segunda Ley se tiene:

$$\eta_{II} = \frac{A_W}{A_{f,ch}} \quad (3.35)$$

donde A_W es la disponibilidad al final de la etapa de expansión y $A_{f,ch}$ es la disponibilidad química del combustible, la cual se calcula de acuerdo a una expresión desarrollada por Kotas [39]:

$$A_{f,ch} = Q_{LHV} \left[1.0401 + 0.01728 \frac{h'}{c'} + 0.0432 \frac{o'}{c'} + 0.2196 \frac{s'}{c'} \left(1 - 2.0628 \frac{h'}{c'} \right) \right] \quad (3.36)$$

3.5 Diagrama del programa realizado en la tesis

Para mostrar de una manera más clara como se resolvieron las ecuaciones de las subsecciones anteriores, se realizó un diagrama de flujo, mostrado en la **Figura 3.2**:

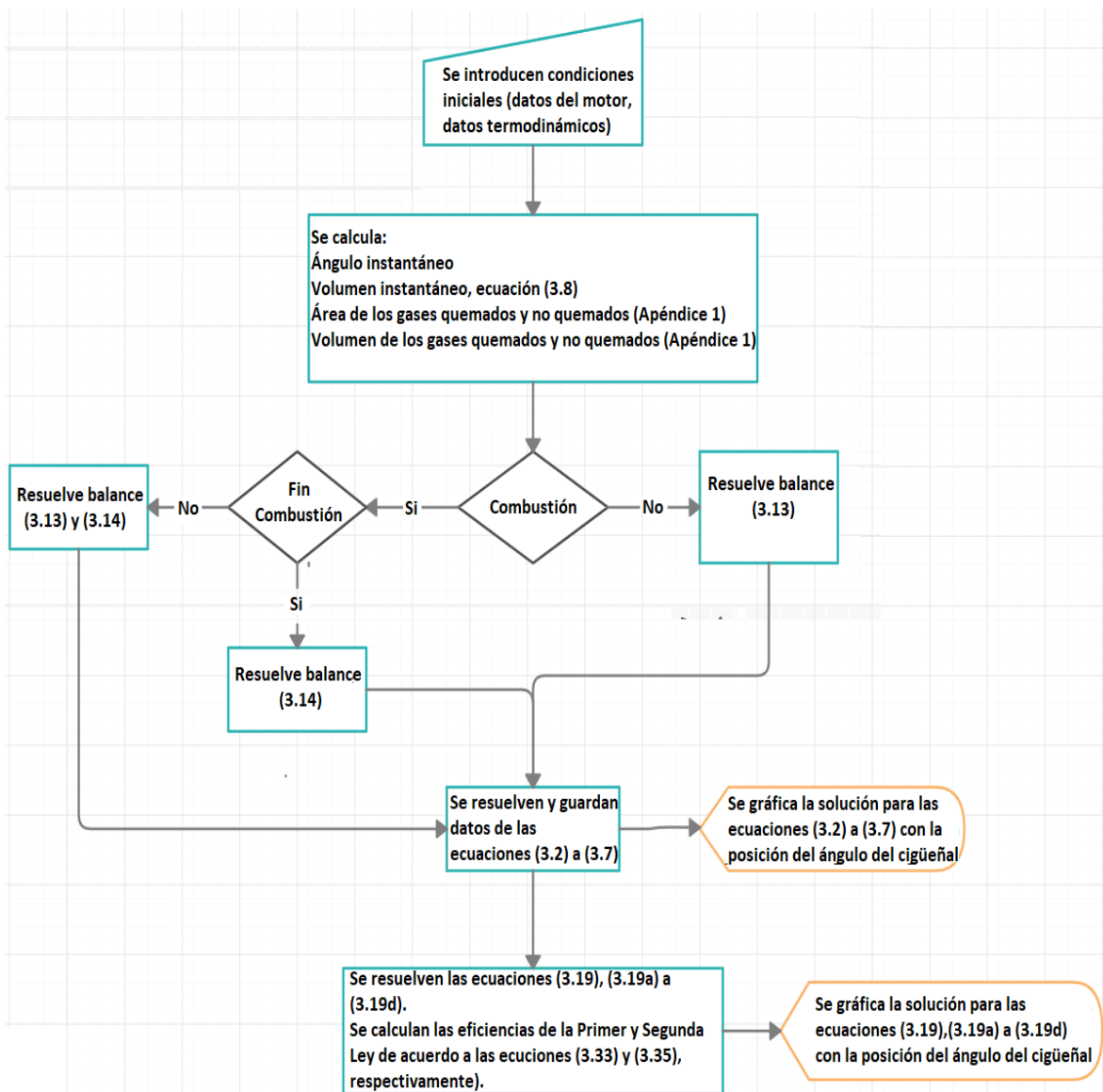


Figura 3.2. Diagrama del programa desarrollado.

3.6 Modelo numérico en software Mathematica®

Las ecuaciones anteriores se programaron en el software Mathematica® para ser resueltas simultáneamente. Mathematica® es un software que tiene amplia aplicación en diversas áreas de la ciencia como lo son ingeniería, matemática y áreas computacionales. Dentro de las características de este software se puede encontrar gran capacidad para realizar simulaciones y modelado, manejo de grandes cantidades de datos, pero el más importante es la alta precisión con la que cuenta.

El programa que se realizó está estructurado de acuerdo a la **Figura 3.3**; el programa se compone de secciones y en cada una de ellas se encuentran programadas la función correspondiente a cada una de los modelos presentados en el capítulo anterior.

Simulación de la compresión, combustión y expansión de un MCI

[Gráficas](#) »

[Volúmen y función de Wiebe](#) »

[Funciones para evaluar la integral](#) »

[Integral](#) »

[Propagación de la Flama](#) »

[Propiedades de Gases Quemados](#) »

[Composición de Gases Quemados](#) »

[Ecuaciones Diferenciales primera ley](#) »

[Combustión Temperaturas Bajas](#) »

[Combustión Temperaturas Altas](#) »

[Ciclo completo de las 3 Etapas](#) »

[Gráficas finales primera ley](#) »

[Ecuaciones de segunda ley](#) »

[Gráficas de Disponibilidad](#) »

Figura 3.3. Estructura del Programa.

A continuación, se describen brevemente las secciones del programa desarrollado:

1. *Gráficas*

En esta sección se ha establecido una función que permite graficar los resultados obtenidos al finalizar el programa. Los parámetros para las gráficas que se mostraran en la pantalla, tamaño de letra, escala, colores de las gráficas, tamaño de línea y el mallado, los cuales permiten tener un formato de gráfica adecuado para ser visualizado.

2. *Volumen y función de Wiebe*

Se calcula el volumen instantáneo dentro de la cámara de combustión dada por la ecuación (4.8) y la fracción quemada de la mezcla de acuerdo a la función de Wiebe.

3. *Funciones para evaluar la integral*

Esta sección entrega una función que requiere la sección *Integral*; la función que se entrega será la requerida de acuerdo a las condiciones dadas en el **Apéndice1 (propagación de la flama)**.

4. *Integral*

Se programó el método de integración de Simpson $\frac{1}{3}$, se apoya de la sección anterior la cual proporciona la función a integrar.

5. *Propagación de la flama*

Resuelve las áreas y volúmenes de los gases quemados y no quemados requeridos para evaluarlas en las ecuaciones (7), (9), (10) y (12).

6. *Propiedades de los gases quemados*

Calcula las funciones termodinámicas de los gases quemados en el proceso de combustión y al final de ésta.

7. *Composición de los gases quemados*

Se programa el método de Runge-kutta de cuarto orden para conocer las fracciones molares de los gases quemados productos de la combustión.

8. *Ecuaciones diferenciales primera ley*

En esta sección se resuelven las ecuaciones diferenciales de la Primera Ley de la Termodinámica, ecuaciones (7) a (13); para ello se deben introducir las condiciones iniciales de operación del ciclo y se hace uso de la función **NDSolve** para su resolución simultánea.

9. *Combustión Temperaturas Bajas*

Se resuelve el balance químico en la etapa de compresión requerido para conocer las funciones termodinámicas que deben ser sustituidas en la sección de *Ecuaciones Diferenciales*.

10. *Combustión Temperaturas Altas*

Resuelve el balance químico presentado en la etapa de combustión, permite conocer las funciones termodinámicas de los gases productos de la combustión que, al igual que en la sección anterior, se requieren para resolver las ecuaciones diferenciales.

11. *Ciclo Completo de las 3 etapas*

En esta sección se introducen las condiciones iniciales de operación del ciclo termodinámico y permite realizar la simulación numérica completa para la Primera Ley de la Termodinámica.

12. *Graficas primera ley*

Se presentan las gráficas que representan el ciclo termodinámico, temperaturas de los gases quemados, temperaturas de los gases no quemados, volumen dentro de la cámara de combustión, presión, trabajo; cada una de estas variables esta graficada contra el ángulo del cigüeñal.

13. *Ecuaciones de la Segunda ley*

En esta sección se programaron las ecuaciones que se requieren para realizar el análisis energético de la Segunda Ley; es decir, la disponibilidad por transferencia de calor, disponibilidad por transferencia de trabajo, disponibilidad del combustible y disponibilidad destruida. Se toman valores necesarios de las ecuaciones diferenciales de la Primera Ley y se resuelven simultáneamente usando la función **NDSolve**.

14. *Gráficas Disponibilidad*

En esta sección se establecieron los comandos para que se grafiquen los resultados que se obtienen al resolver las ecuaciones de disponibilidad total y cada una de las disponibilidades por separado.

4 Validación y verificación del modelo

Es necesario demostrar que el modelo desarrollado en este trabajo predice adecuadamente los procesos dentro de la cámara de combustión en un motor de combustión interna, por lo que se comparó con datos de trabajos que han sido publicados y el modelo presentado por Ferguson [21]. La primera validación que se realizó es con Rakopoulos en 1993 [29]. En este trabajo se realizaron experimentos y simulación numérica; para validar el programa desarrollado en esta tesis, las predicciones se compararon con los resultados experimentales obtenidos por Rakopoulos [29] bajo las condiciones de operación mostradas en la **Tabla 4.1**:

Tabla 4.1 Datos utilizados en la comparación con los datos experimentales de Rakopoulos [29]

r	D[cm]	Ls[cm]	Lr[cm]	RPM	ϕ	F	θ_s
7	7.62	11	24.13	2500	1	0.1	-30

donde r representa la relación de compresión, D el diámetro, Ls la longitud de la carrera, Lr longitud de la biela, RPM la velocidad del motor, ϕ es la razón de equivalencia, F la fracción residual de los gases y θ_s representa el ángulo donde inicia la combustión.

En la **Figura 4.1** se muestra la comparación entre el modelo desarrollado en la tesis y el realizado por Rakopoulos; el rango donde se lleva a cabo la variación más significativa de los datos es en la etapa de combustión, que se debe principalmente al modelo químico es sencillo. No obstante, la forma de la curva y el resto de las predicciones son bastante aceptables.

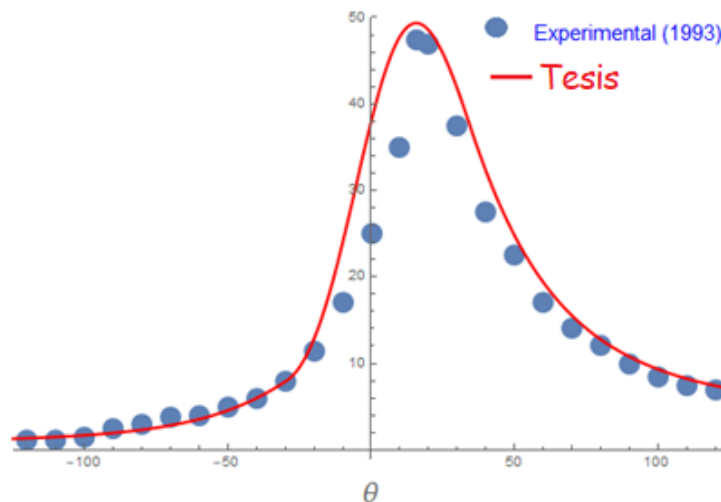


Figura 4.1. Comparación entre los resultados experimentales obtenidos por Rakopoulos y la presente tesis.

Diversos artículos están basados en el modelo presentado por Ferguson [21] para resolver las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior. En el trabajo de Ferguson se presentan diversos casos con condiciones iniciales que sirven como referencia a las diversas publicaciones científicas;

para este trabajo se introdujeron los valores de las variables requeridas para la simulación, los cuales se muestran en la **Tabla 4.2**:

Tabla 4.2 Datos utilizados en la comparación con Ferguson

r	D[cm]	Ls[cm]	Lr[cm]	RPM	ϕ	F	θ_s	θ_b	h[w/m ² K]	T _w [K]
7	8.25	11.43	22.86	1200	0.88	0.05	-15	45	500	500

En la **Figura 4.2** se muestra la comparación de los resultados de las temperaturas presentados por Ferguson y el desarrollado en este trabajo; como se puede observar, las temperaturas calculadas presentan un margen de error bastante aceptable.

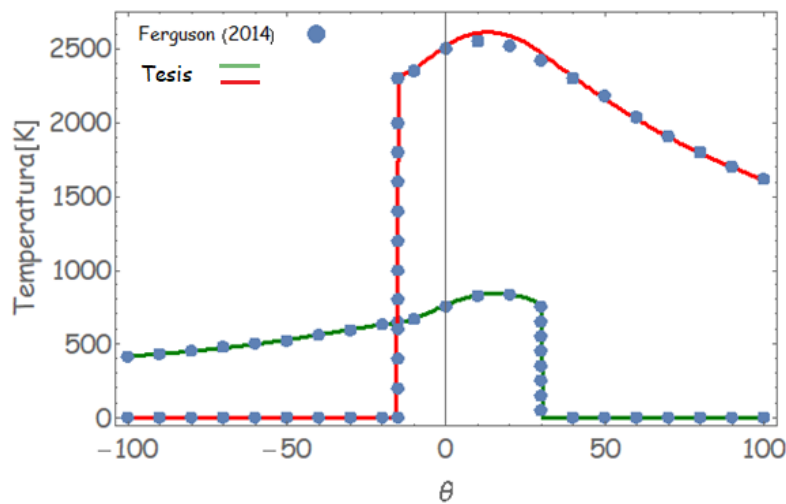


Figura 4.2 Comparación de temperaturas de los gases quemados y no quemados entre el modelo presentado y el realizado por Ferguson (2014).

Otro parámetro de comparación que se puede realizar es el de la presión, la cual se muestra en la **Figura 4.3**

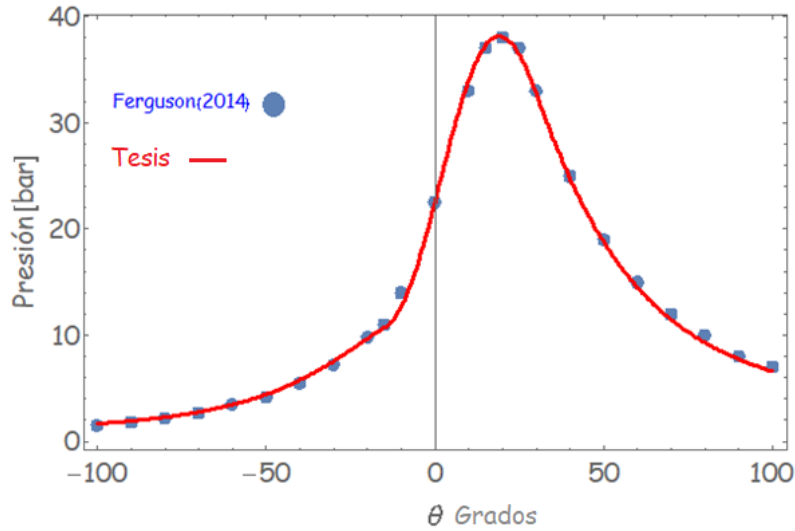


Figura 4.3. Predicción para la presión con el modelo de esta tesis y el modelo de Ferguson [21].

Los datos de presión mostrados en la **Figura 4.3** permiten verificar que el programa desarrollado tiene alta confiabilidad respecto a los datos teóricos del trabajo de Ferguson [21].

La última comparación de las predicciones del programa se realizó con los resultados obtenidos por Bilgin y Sezer [27]; los datos que se consideraron en la simulación se muestran en la **Tabla 4.3**:

Tabla 4.3 Datos utilizados en la comparación con Bilgin & Sezer

r	D[cm]	Ls[cm]	Lr[cm]	RPM	ϕ	F	θ_s	θ_b	$h[w/m^2K]$	$T_w[K]$
10	10	8	16	3000	1	0	-30	65	500	400

La **Figura 4.4** muestra la comparación entre el resultado de disponibilidad total obtenido por Bilgin y Sezer 2008; en esta gráfica se muestra la disponibilidad que se tiene en el sistema y que puede ser aprovechada.

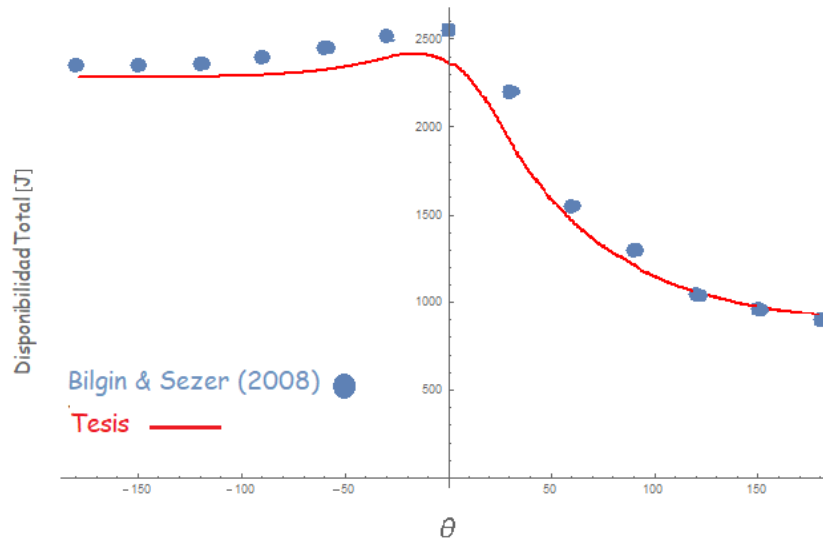


Figura 4.4. Comparación de la disponibilidad obtenida en esta tesis con la obtenida por Bilgin & Sezer 2008.

Una gráfica importante es la disponibilidad que se genera por irreversibilidades; la **Figura 4.7** muestra la comparación de las irreversibilidades calculadas por Bilgin&Sezer y el modelo presentado en esta tesis, como se puede apreciar las predicciones de esta tesis tiene diferencias de menos del 5% con respecto al trabajo de Bilgin y Sezer [27]:

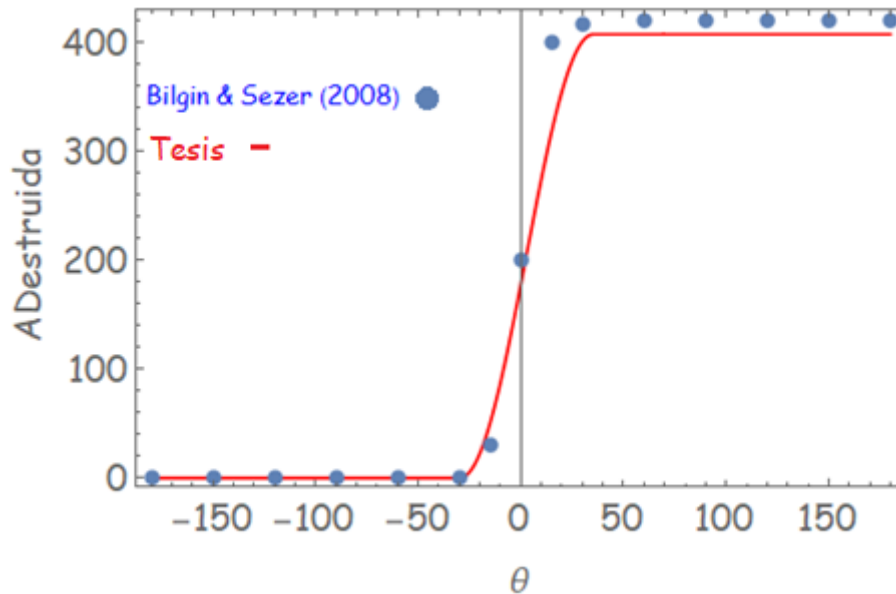


Figura 4.7 Comparación de las irreversibilidades que se generan en la cámara de combustión.

5 Resultados y análisis de resultados

En este capítulo se muestran las predicciones que se obtienen al realizar un análisis de Primera y Segunda Ley de la Termodinámica y los resultados que se tienen al variar parámetros de funcionamiento de un motor de combustión interna; estos parámetros permiten visualizar cuál es el rango donde la disponibilidad total es mayor. El caso base se propuso con datos de operación que se tienen en Ferguson [21]. Los parámetros que se variaron fueron la velocidad del motor (rpm), razón de equivalencia (ϕ) y el ángulo de inicio de la combustión (θ_s).

Las condiciones iniciales y los datos geométricos de la simulación se muestran en la **Tabla 5.1**, estos datos son propuestos por Ferguson [21] y retomados en esta tesis:

Tabla 5.1 Datos de la simulación

r	D[cm]	Ls[cm]	Lr[cm]	F	h[w/m ² K]	P[bar]	T[k]	Tw[K]
10	8.25	11.43	22.86	0.05	500	1	350	400

5.1 Predicciones con la Primera Ley de la Termodinámica

Los resultados que se obtuvieron con la Primera Ley se presentan a continuación; estos resultados están graficados respecto al ángulo del cigüeñal. Los parámetros adicionales que se introdujeron son ϕ con valor de 0.9, 3000 rpm y ángulo de inicio de la combustión (θ_s) con valor de -35 grados.

En la **Figura 5.1** se muestra la variación del volumen con el ángulo del cigüeñal; de esta figura se puede apreciar que el valor mínimo del volumen se alcanza cuando el pistón se encuentra en el punto muerto superior, es decir, 0 grados; mientras que el valor máximo se encuentra en el punto muerto inferior (-180 y 180). En base a la **Figura 5.1** se observa que el inicio de la etapa de compresión se lleva a cabo en -180 y final de la expansión en 180 grados.

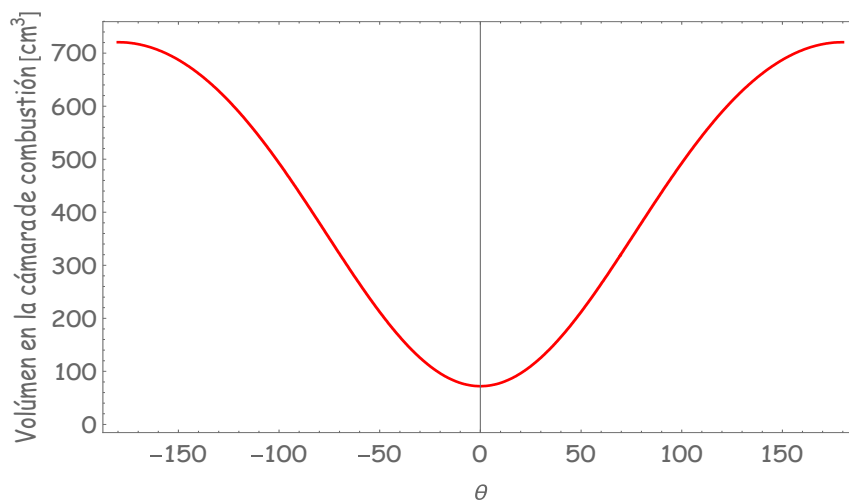


Figura 5.1. Variación del volumen con el ángulo del cigüeñal.

En la **Figura 5.2** se representa la variación de la presión dentro de la cámara de combustión en cada posición angular del cigüeñal; de esta figura se puede observar que la variación de presión

comienza a tener un mayor cambio cuando se le suministra el calor en -35 grados (combustión) y alcanza su valor máximo en 10 grados.

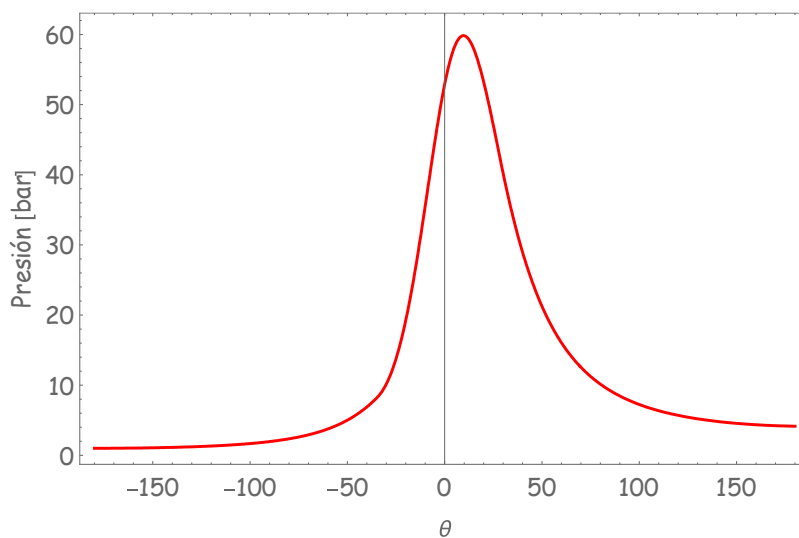


Figura 5.2. Variación de la presión dentro de la cámara de combustión.

En la **Figura 5.3** se aprecia el incremento de temperatura que tienen la mezcla de combustible y aire; como se puede observar, la temperatura comienza a tener un cambio más notable cuando se le suministra calor. Al inicio del proceso, de la fracción de la mezcla no quemada, la temperatura aumenta debido a los cambios de presión dentro de la cámara de combustión; cuando se termina de suministrar calor la temperatura de los gases no quemados cae a cero y se mantiene constante, que indica que la mezcla se ha quemado completamente.

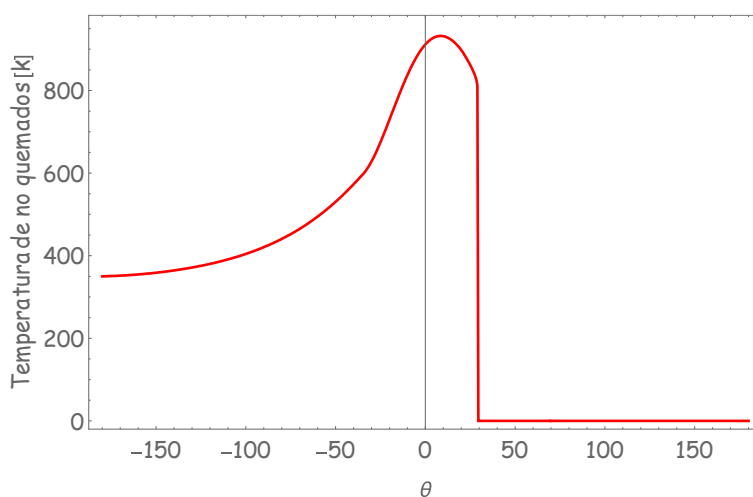


Figura 5.3. Variación de la Temperatura de los gases no quemados con el ángulo de cigüeñal.

En La **Figura 5.4** se muestra la variación de temperatura de los gases que se han quemado; como se puede observar en la figura, conforme se van quemando los gases, la temperatura sigue incrementando y en consecuencia la presión. Una vez que termina la etapa de combustión, el

sistema comienza a ceder cierta fracción del calor al medio ambiente y se presenta el proceso de expansión, motivo por el cual disminuye la temperatura.

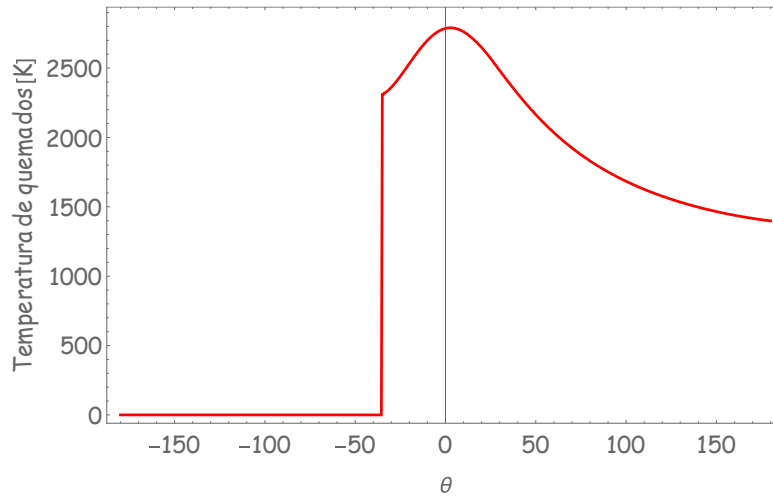


Figura 5.4. Variación de la Temperatura de los gases quemados con el ángulo de cigüeñal.

En la **Figura 5.5** muestra el trabajo realizado por el sistema en función del ángulo del cigüeñal; en ésta se puede apreciar que en la etapa de compresión (ángulos negativos) se le suministra trabajo al sistema y cuando el pistón alcanza el punto muerto superior (0 grados), el sistema alcanza una alta presión y temperatura, lo que ocasiona que el pistón comience a retroceder al punto muerto inferior, movimiento que produce el trabajo que el sistema entrega. Como se puede observar, el trabajo entregado es mayor que el trabajo suministrado por lo que se tiene una ganancia neta de trabajo.

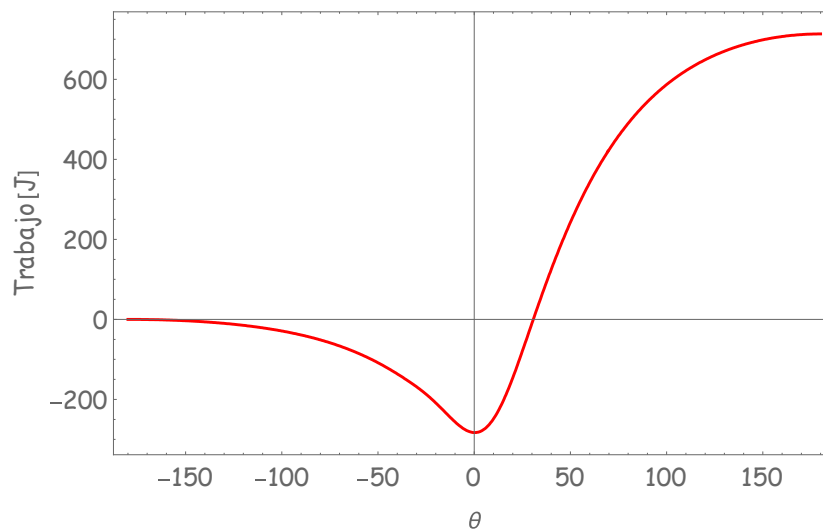


Figura 5.5. Trabajo realizado por el sistema.

La variación del trabajo con respecto a la posición del cigüeñal se muestra en la **Figura 5.6**; de esta figura se puede observar que al inicio el calor permanece constante y próximo a cero, cuando se le

suministra calor, el sistema comienza a ceder una fracción de éste al ambiente, debido al gradiente de temperatura entre la cámara de combustión y el medio ambiente.

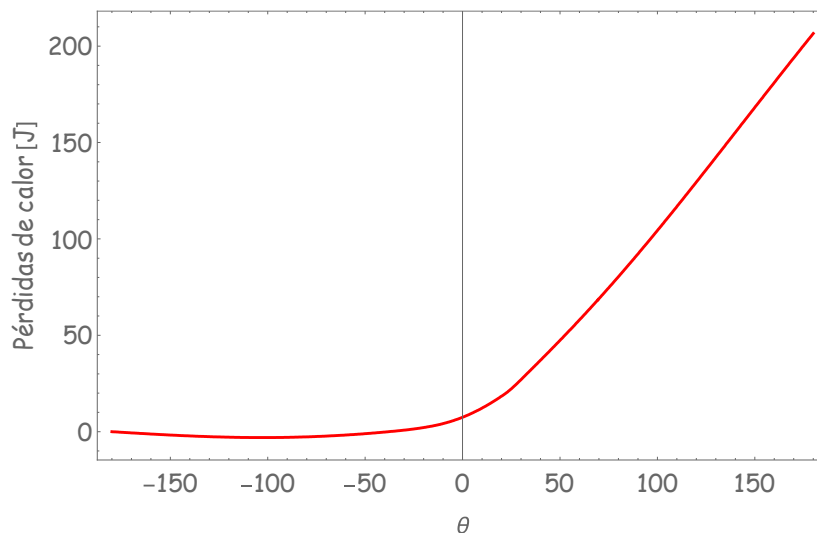


Figura 5.6. Pérdidas de calor del sistema.

La **Figura 5.7** muestra la variación de trabajo que se tiene conforme cambia la presión; de esta figura se puede apreciar de mejor manera el proceso que se lleva a cabo dentro de la cámara de combustión. El trabajo se suministra en la etapa de compresión hasta alcanzar el punto muerto superior, que una vez que lo alcanza, comienza el proceso de expansión (cuando la curva cambia de dirección) y allí es cuando el sistema tiene una ganancia neta de trabajo, como se puede apreciar en la figura.

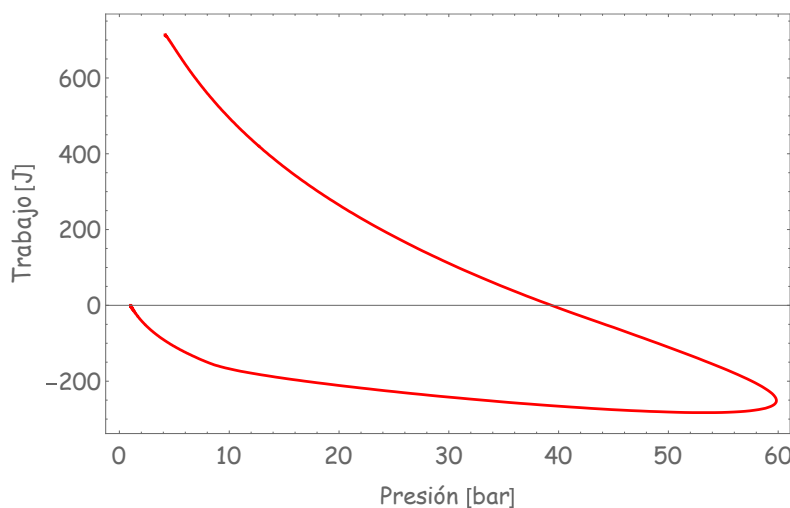


Figura 5.7. Variación del trabajo con la presión en la cámara de combustión.

En la **Figura 5.8** se representa el cambio de presión respecto al volumen dentro de la cámara de combustión; de ésta se aprecia que conforme el volumen va disminuyendo, la presión se

incrementa y como consecuencia se tiene un incremento de temperatura para después tener el proceso de combustión. El gas del sistema, ya con una alta energía, empuja el pistón hacia abajo que produce un incremento en el volumen dentro de la cámara hasta alcanzar el valor inicial.

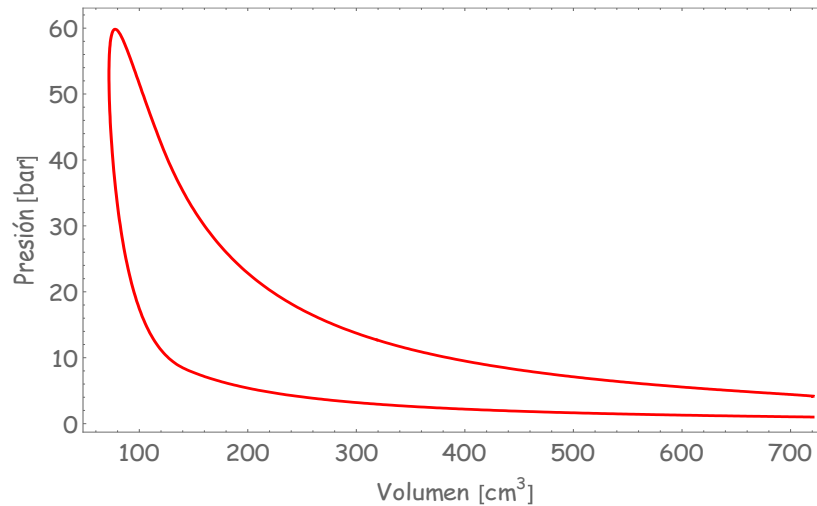


Figura 5.8. Variación de la presión con el volumen dentro de la cámara de combustión.

5.2 Predicciones con la Segunda Ley de la Termodinámica

El análisis de disponibilidad que se realizó permite observar qué parámetros se pueden modificar para mejorar el desempeño que tenga un motor; en la **Figura 5.9** se muestra una variación típica de los términos de disponibilidad que se tiene durante el proceso analizado.

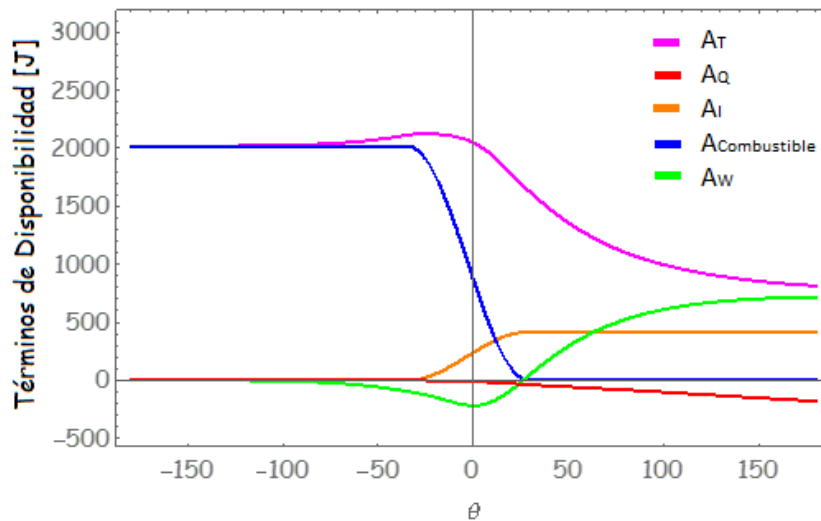


Figura 5.9. Contribución de los términos de disponibilidad.

Como se puede apreciar en la **Figura 5.9**, la gráfica permite visualizar cada contribución de los términos de disponibilidad de las ecuaciones (3.19), (3.19a) a (3.19d), donde A_T es la disponibilidad total, A_Q es la disponibilidad por transferencia de calor, A_W es la disponibilidad por

transferencia de trabajo, A_I es la disponibilidad debido a las irreversibilidades y $A_{Combustible}$ es la disponibilidad del combustible. El decremento de la disponibilidad total se debe a los términos antes mencionados. Los términos A_W , A_Q , y A_I representan el 39.62%, 9.9% y 20.8 %, respectivamente, de la disponibilidad total para la gráfica dada en la **Figura 5.9**.

A continuación, se describe brevemente cada uno de los términos de disponibilidad mostrados en la figura anterior. La **Figura 5.10** muestra la variación de disponibilidad por transferencia de calor con la posición del cigüeñal, la disponibilidad que se pierde por transferencia de calor es un fenómeno común en la naturaleza, ya que se busca que el sistema se encuentre en equilibrio con el ambiente y para ésto se debe ceder calor del sistema hacia el ambiente. Después del proceso de combustión se cede más calor al ambiente por la diferencia de temperatura que se tiene entre el sistema y el medio ambiente.

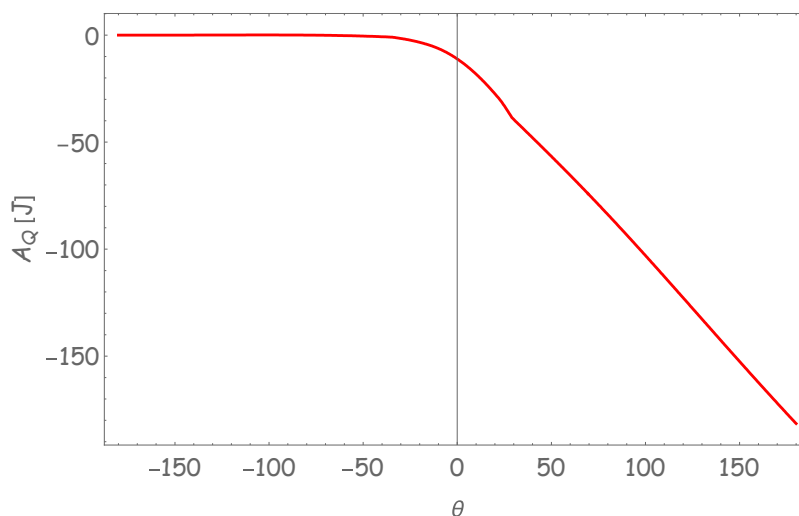


Figura 5.10. Disponibilidad por transferencia de calor con el ángulo del cigüeñal.

La **Figura 5.11** muestra la disponibilidad que tiene el sistema para producir trabajo (transferencia de trabajo) en cada posición del cigüeñal; de ésta se observa un comportamiento idéntico a uno hecho por la Primera Ley de la Termodinámica.

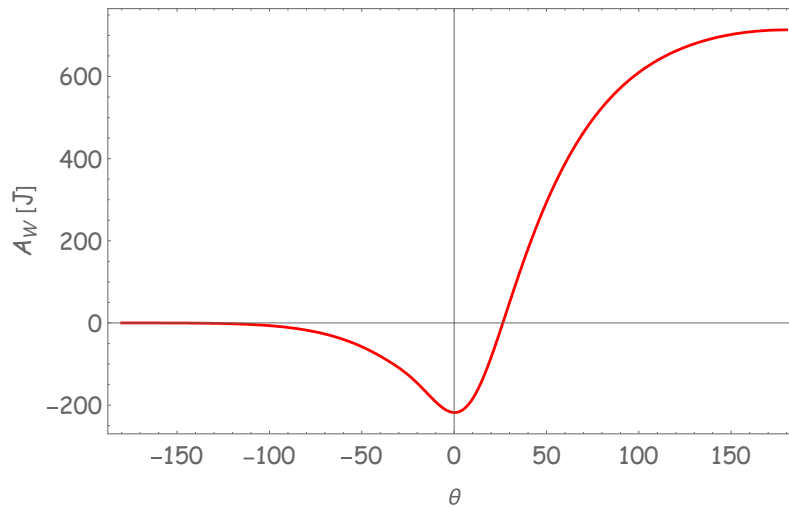


Figura 5.11. Disponibilidad por transferencia de trabajo.

En la **Figura 5.12** se muestra como varía la disponibilidad que se obtiene del combustible contra la posición del cigüeñal; la figura muestra que conforme el combustible se va quemando, la energía que se puede aprovechar comienza a disminuir gradualmente hasta que se quema completamente y la energía aprovechable vale aproximadamente cero.

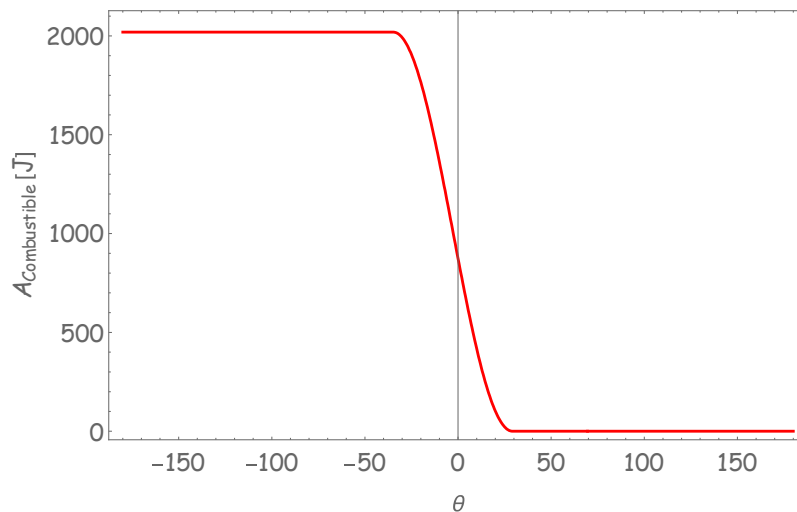


Figura 5.12. Variación de la disponibilidad del combustible.

En la **Figura 5.13** se puede observar como varían las irreversibilidades que se presentan en el sistema (entropía) con respecto al ángulo del cigüeñal. Esta figura es la que se busca analizar con más detenimiento ya que se presentan fenómenos particulares que involucran la variación de la masa y la transferencia de calor. En la posición angular de -180 grados hasta -35 grados se aprecia que la entropía permanece constante y con el valor aproximado a cero, esto debido a que no existen pérdidas de masa del sistema y tampoco existe transferencia de calor. La entropía del sistema comienza a incrementar cuando se suministra calor, debido a un cambio en la composición de la mezcla; es decir, se comienza a quemar, lo que origina que los cambios en la

composición de la masa de la mezcla (derivadas de la masa respecto al ángulo) sean diferentes de cero. Los términos de transferencia de calor, como se muestra en el capítulo 4 se cancelan y sólo tiene contribución los cambios en la masa. Finalmente, cuando se termina el suministro de calor y ya no existen cambios en la masa que se encuentra dentro del sistema (la mezcla se quemó completamente); para que la entropía permanezca constante es necesario que el sistema ceda calor al ambiente, lo que sucede de acuerdo a la **Figura 5.10**, en la cual se observa que el sistema está cediendo calor.

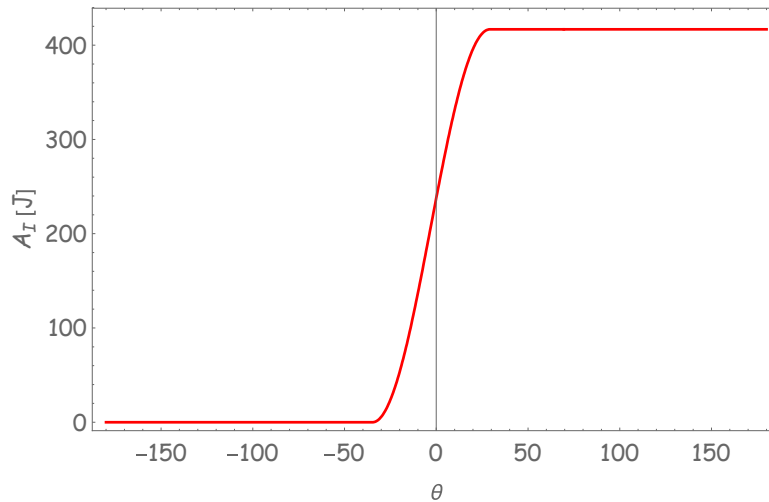


Figura 5.13. Variación de las irreversibilidades.

La **Figura 5.14** muestra la disponibilidad total contra la posición del cigüeñal; la disponibilidad alcanza su máximo valor en -35 grados, ángulo donde comienza la combustión, después comienza a decrecer, cambio que se debe principalmente a la transferencia de calor, la masa de combustible que se quema, las irreversibilidades que se presentan en el sistema y el trabajo que se extrae.

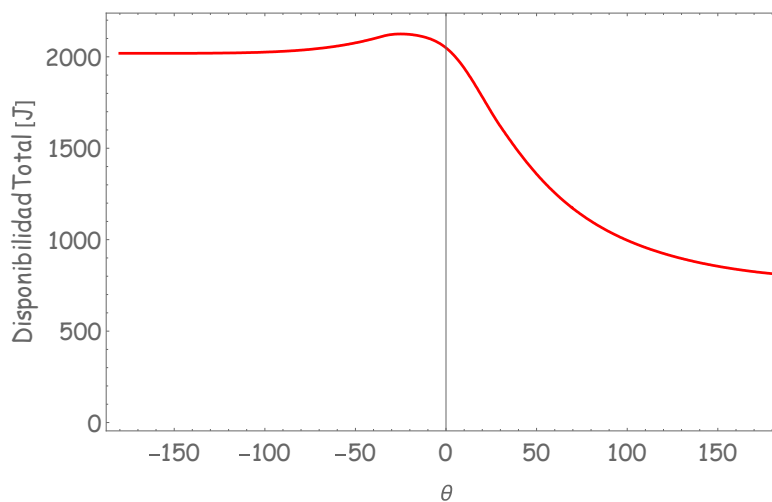


Figura 5.14. Variación de la disponibilidad total.

5.3 Resultados de la Primera Ley variando parámetros

Los parámetros proporcionan variaciones en la eficiencia al final del ciclo por lo que, a continuación, se muestran los cambios que se generan en el ciclo al variar la razón de equivalencia (ϕ), el ángulo de inicio de la combustión y la velocidad del motor.

5.3.1 Resultados de la Primera Ley variando la razón de equivalencia ϕ

Los cambios que se generan al variar la razón de equivalencia (ϕ), manteniendo constante la velocidad del motor y el ángulo de suministro de calor se observan en las **Figuras 5.15a a Figura 5.15f**. De la **Figura 5.15b** se puede observar que la presión, tanto en $\phi = 1$ como en $\phi = 1.1$, incrementa en 4 bar (2.4%) respecto a $\phi = 0.9$; por otro lado, el volumen y temperatura de los gases no quemados mostrados en la **Figura 5.15a** y **Figura 5.15d**, respectivamente, permanecen constantes.

Las variaciones en el trabajo (**Figura 5.15.e**), temperatura de los gases quemados (**Figura 5.15.c**), presión (**Figura 5.15b**) y transferencia de calor (**Figura 5.15f**) están relacionados con la cantidad de combustible que ingresa al cilindro, ya que el combustible extra agrega mayor energía disponible que puede ser aprovechada como trabajo. Por lo que con $\phi = 1.1$, el trabajo que se puede extraer es el mayor en comparación con $\phi = 1$ y $\phi = 0.9$.

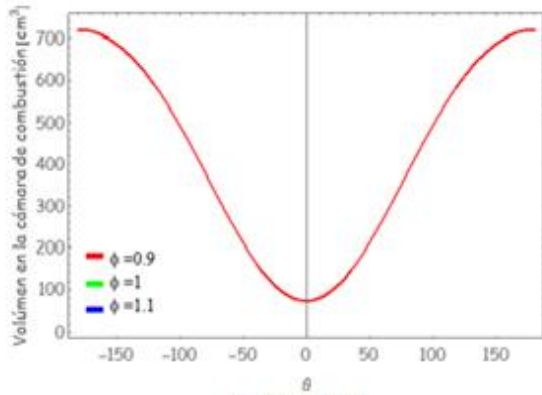


Figura 5.15a

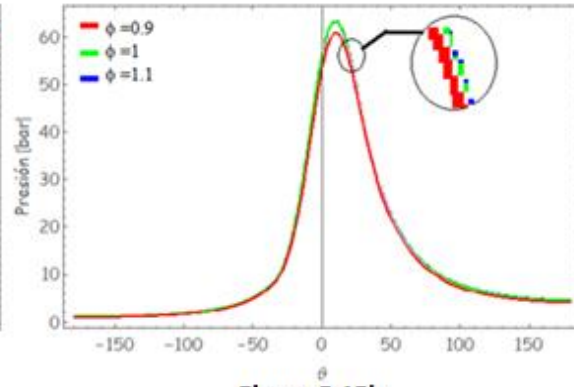


Figura 5.15b

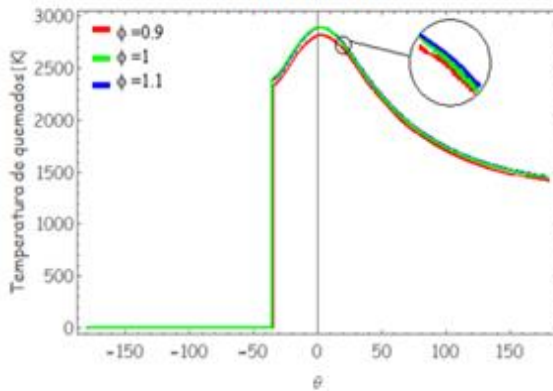


Figura 5.15c

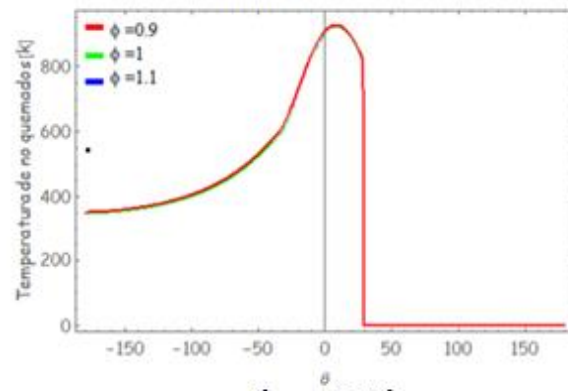


Figura 5.15d

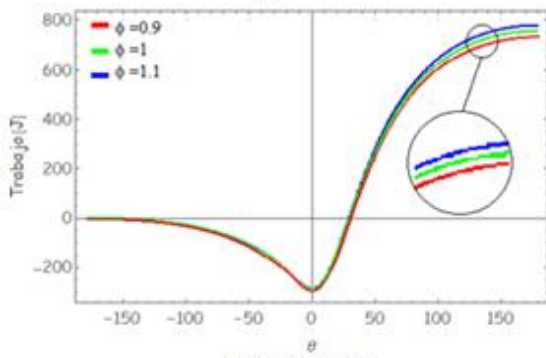


Figura 5.15e

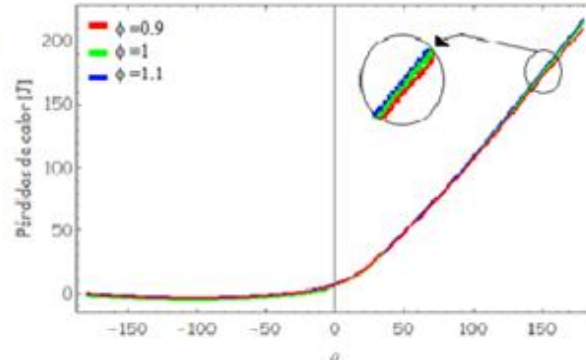


Figura 5.15f

Figura 5.15. Efectos de la variación de la relación de equivalencia. Análisis de Primera Ley. Rpm = 3000 y $\theta_s = -35^\circ$.

La eficiencia de la Primera Ley para el ciclo con $\phi = 0.9$, $\phi = 1$ y $\phi = 1.1$ es 39.75%, 37.75% y 35.61%, respectivamente. La eficiencia cae cuando la relación de equivalencia se va incrementando y este decremento se debe principalmente a la adición de combustible; la energía disponible del combustible no se aprovecha para realizar trabajo. Como se puede observar en las gráficas de trabajo de la **Figura 5.15e**, el trabajo final varía en aproximadamente 25 J (3.22%) entre cada curva. A pesar de que existe un incremento en el trabajo realizado por el ciclo, con la información proporcionada por la Primera Ley, no se puede conocer dónde se pierde la mayoría de la energía disponible, por lo que con la información de Segunda Ley éstas pérdidas se pueden apreciar de mejor manera. A partir de ahora el análisis se basará con respecto a la Segunda Ley de la Termodinámica.

5.4 Resultados de la Segunda Ley variando los parámetros

Como se ha mencionado anteriormente, un análisis de la Primera Ley de la Termodinámica no permite conocer cómo se aprovecha la energía o como se pierde la disponibilidad que tiene un sistema para producir trabajo. Los siguientes resultados muestran la disponibilidad total variando la razón de equivalencia (ϕ), el ángulo de inicio de la combustión y la velocidad del motor.

5.4.1 Disponibilidad variando la razón de equivalencia ϕ

En la **Figura 5.16** se muestran las variaciones en la disponibilidad con respecto al ángulo, variando la relación de equivalencia ϕ .

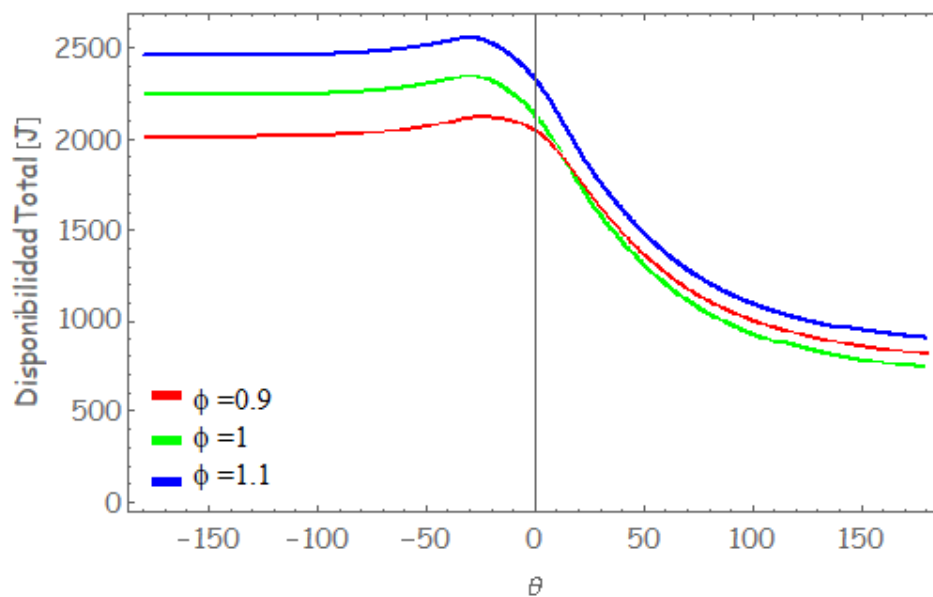


Figura 5.16. Variación de la disponibilidad total Con el ángulo del cigüeñal.

Como se puede apreciar en la **Figura 5.16**, existe un incremento en la disponibilidad, la cual es proporcional al incremento en la masa del combustible que ingresa al sistema, es decir, para $\phi = 0.9$ la masa de combustible es de 3.93×10^{-2} [g], mientras que para $\phi = 1$ y $\phi = 1.1$ la masa es de 4.36×10^{-2} (10.94%) y 4.79×10^{-2} [g] (21.88%), respectivamente. La **Figura 5.17** muestra el incremento que se tiene en la disponibilidad de combustible con la variación de ϕ .

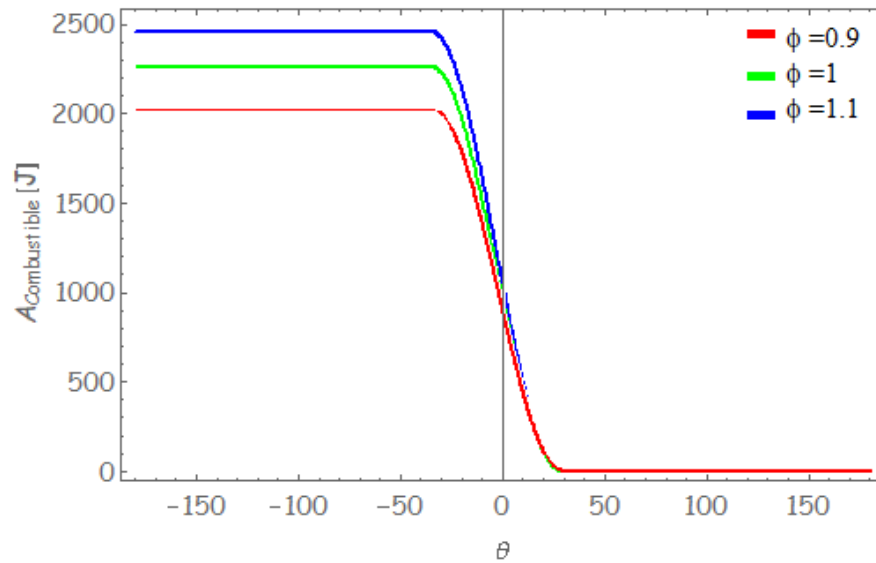


Figura 5.17. Disponibilidad del combustible con el ángulo del cigüeñal.

En las gráficas de disponibilidad del combustible mostrada en la **Figura 5.17** se puede apreciar que la energía incrementa con los cambios en la masa del combustible, es decir, la variación de la masa de combustible entre las 3 curvas es de $4.3 \times 10^{-3} [\text{g}]$ (10.98%) y esta cantidad de combustible representa 250 J de energía adicional al ciclo (11.11% de energía).

La disponibilidad por transferencia de trabajo que se tiene en el sistema, como se mencionó anteriormente, es idéntica a la calculada en la Primera Ley y se muestra en la **Figura 5.18**, en ésta se puede apreciar que el mayor trabajo que se puede extraer es con $\phi = 1.1$, que tiene un valor de 782 J.

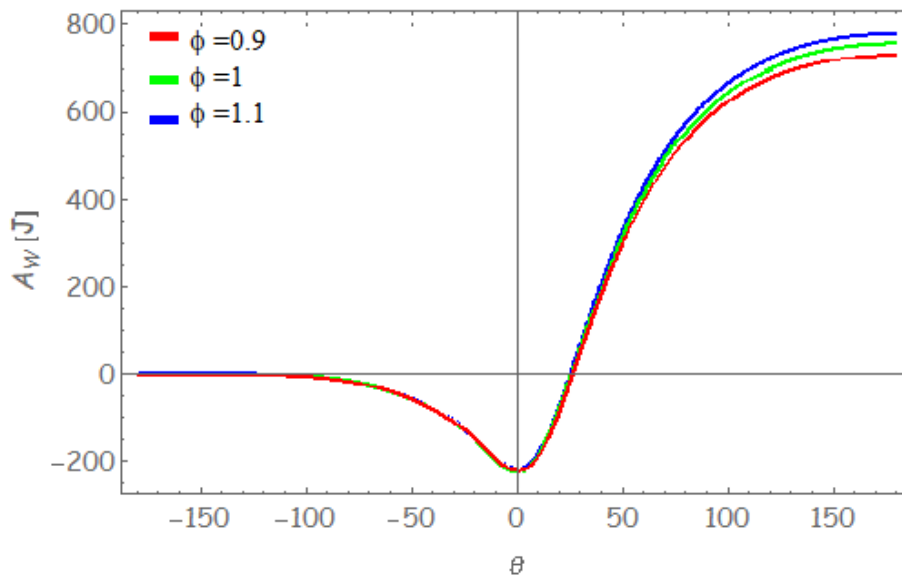


Figura 5.18. Disponibilidad por transferencia de trabajo con el ángulo del cigüeñal.

La **Figura 5.19** muestra las pérdidas de disponibilidad debido a las irreversibilidades que se tienen en el cilindro; en ésta se puede apreciar que las mayores irreversibilidades se presentan con $\phi = 1.1$, donde el valor que alcanzan es 412 J, mientras que con $\phi = 1$ y $\phi = 0.9$, las irreversibilidades son de 410 J y 409 J, respectivamente. En la **Figura 5.20** se presenta la disponibilidad por transferencia de calor, la mayor disponibilidad que se pierde en este fenómeno, es con $\phi = 1.1$, donde el valor alcanza 191 J, y para $\phi = 1$ y $\phi = 0.9$ es de 189 J y 190 J, respectivamente.

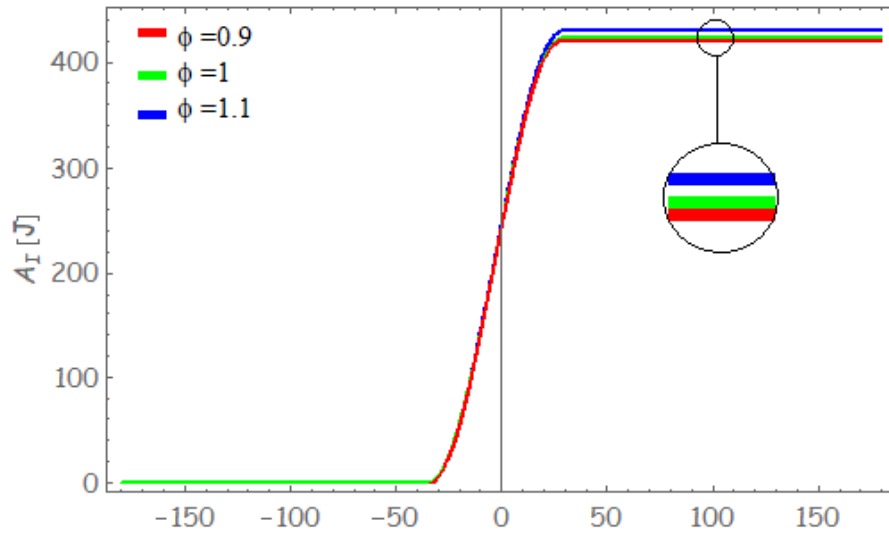


Figura 5.19. Disponibilidad debido a las irreversibilidades con el ángulo del cigüeñal.

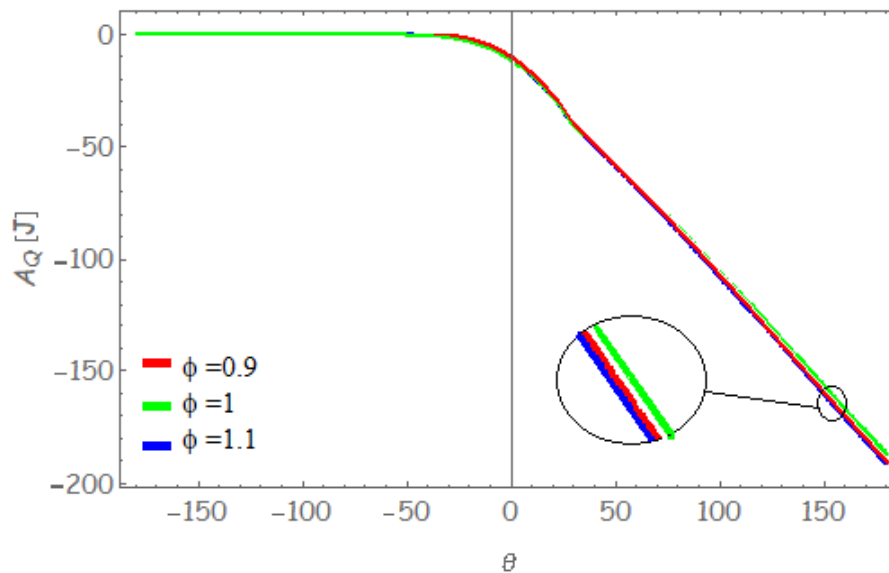


Figura 5.20. Disponibilidad por transferencia de calor con el ángulo del cigüeñal.

Con base en a la disponibilidad total que se tiene en el sistema, se calculó el porcentaje que representa cada uno de los términos de disponibilidad; en la **Tabla 5.2** se muestra el porcentaje de cada uno de los términos:

Tabla 5.2 Porcentaje de cada término de disponibilidad variando ϕ .

Parámetro \ Término	$\phi = 0.9$	$\phi = 1$	$\phi = 1.1$
Trabajo	35.25%	33.33%	31%
Calor	9.5%	8.22%	7.64%
Irreversibilidades	20.5%	18.31%	15.6%

De los resultados de la **Tabla 5.2** se puede apreciar que conforme se incrementa la relación de equivalencia ϕ , las irreversibilidades se incrementan; sin embargo, el porcentaje que representan las irreversibilidades en el sistema disminuyen. La suma del porcentaje de la disponibilidad por transferencia de trabajo, transferencia de calor y las irreversibilidades no suma el 100 por ciento en la tabla anterior, que indica que existe otra fracción de energía que se está perdiendo; esta fracción de energía representa alrededor del 30 al 45 por ciento y se pierde en los gases de escape en forma de calor. Este término es conocido como transferencia de disponibilidad por escape.

Las eficiencias dadas en la **Tabla 5.3** fueron calculadas con base en la Primera y Segunda Ley de la Termodinámica, y al comparar los resultados obtenidos con la Primera Ley se observa que la eficiencia del ciclo también decae con ϕ , al hacer el análisis con la Segunda Ley, debido principalmente a la inclusión de los términos de disponibilidad del ciclo.

Tabla 5.3 Eficiencias de la primera y Segunda Ley del ciclo variando ϕ .

Parámetro \ Eficiencia	η_I	η_{II}
$\phi = 0.9$	39.75%	35.34%
$\phi = 1$	37.75%	33.56%
$\phi = 1.1$	35.61%	31.65%

5.4.2 Disponibilidad variando el ángulo donde se inicia la combustión θ_s

En esta sección se presentan los resultados que se obtuvieron al variar el ángulo de inicio de la combustión θ_s ; los parámetros que se mantuvieron fijos fueron $\phi = 1$ y $\text{rpm} = 3000$.

En la **Figura 5.21** se muestra la disponibilidad del combustible al cambiar el ángulo de inicio de la combustión; de esta figura se observa que la disponibilidad al inicio y al final para los tres casos ($\theta_s = -45^\circ$, $\theta_s = -35^\circ$ y $\theta_s = -15^\circ$) es la misma ya que la masa de combustible es la misma para los tres casos. La diferencia que se muestra al variar θ_s es que cambia la duración de la combustión como se puede apreciar en la gráfica, es decir para $\theta_s = -45^\circ$, $\theta_s = -35^\circ$ y $\theta_s = -15^\circ$, la duración de la combustión (θ_b) será 67 grados, 65 grados y 77 grados, respectivamente. En la posición del

cigüeñal en 0 grados, la disponibilidad del combustible para $\theta_s=-35^\circ$, es igual a 950 J, para $\theta_s=-45^\circ$ en 0 grados, el valor es de 1100 J (115.78%) más que con $\theta_s=-35^\circ$ y en $\theta_s=-15^\circ$ el valor cae en 400 J (42.10%).

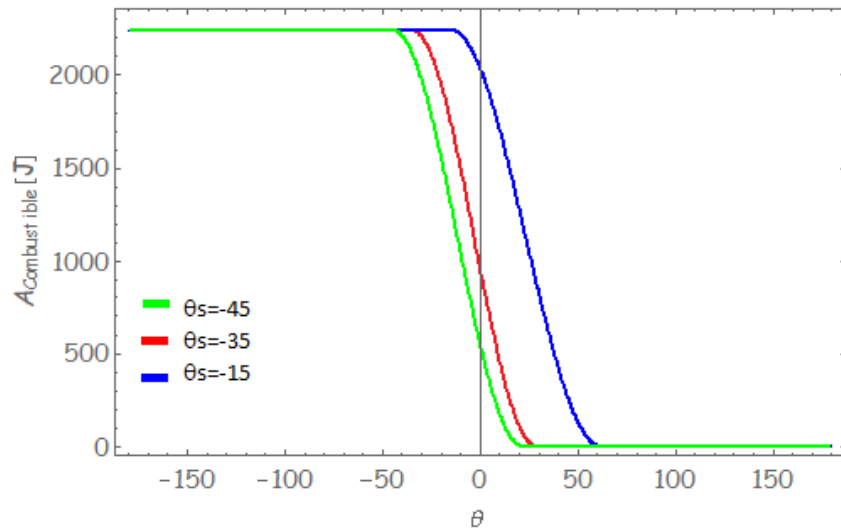


Figura 5.21. Disponibilidad del combustible con el ángulo del cigüeñal.

La **Figura 5.22** muestra la variación de disponibilidad por transferencia de trabajo con la posición del cigüeñal, variando el ángulo de inicio de combustión. De la **Figura 5.12** se puede observar que, al suministrar calor para el caso de -45° , el trabajo que se le suministra es el mayor en comparación con $\theta_s=-35^\circ$ (20%) y $\theta_s=-15^\circ$ (28%), el trabajo que se puede obtener al finalizar el ciclo será 750 J con $\theta_s=-35^\circ$, para $\theta_s=-15^\circ$ es 45 J (6%) y para $\theta_s=-45^\circ$ es 30 J (4%) menos en comparación con $\theta_s=-35^\circ$, de lo anterior, el parámetro óptimo de funcionamiento para este caso es con $\theta_s=-35^\circ$.

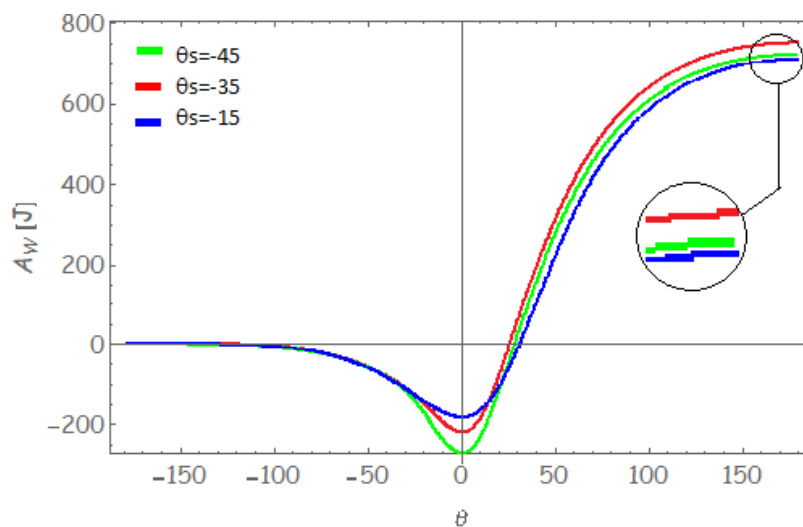


Figura 5.22. Disponibilidad por transferencia de trabajo.

La disponibilidad por transferencia de calor se puede apreciar en la **Figura 5.23**; con base en esta figura, el término de disponibilidad al final del ciclo varía dependiendo del ángulo de inicio de suministro de calor, para $\theta_s = -45^\circ$ se alcanza el valor máximo de transferencia de calor (200 J) para el caso dado. Esto es debido que se alcanza una mayor temperatura de los gases quemados como se puede apreciar en la **Figura 5.24**, y en la **Figura 5.21**. También se observa que la combustión termina en 20 grados, lo que lleva a que los gases calientes permanezcan más tiempo dentro la cámara de combustión y como consecuencia, exista mayor transferencia de calor a través de las paredes del cilindro.

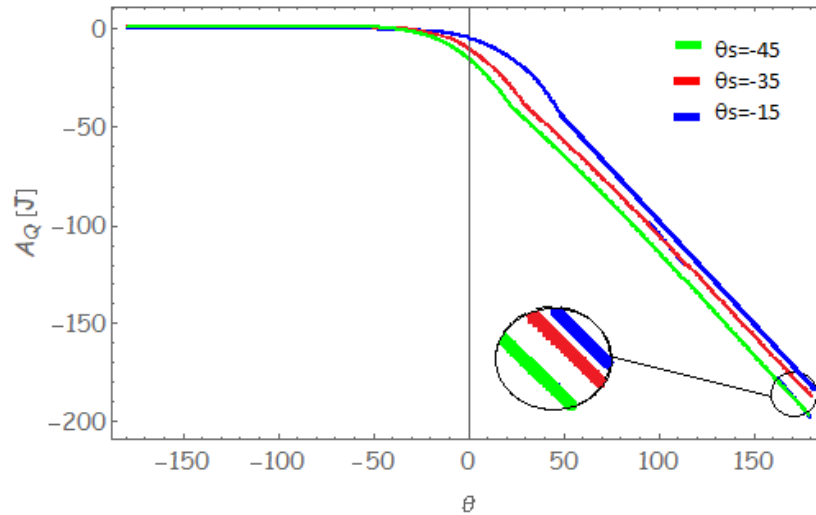


Figura 5.23. Disponibilidad por transferencia de calor con el ángulo del cigüeñal.

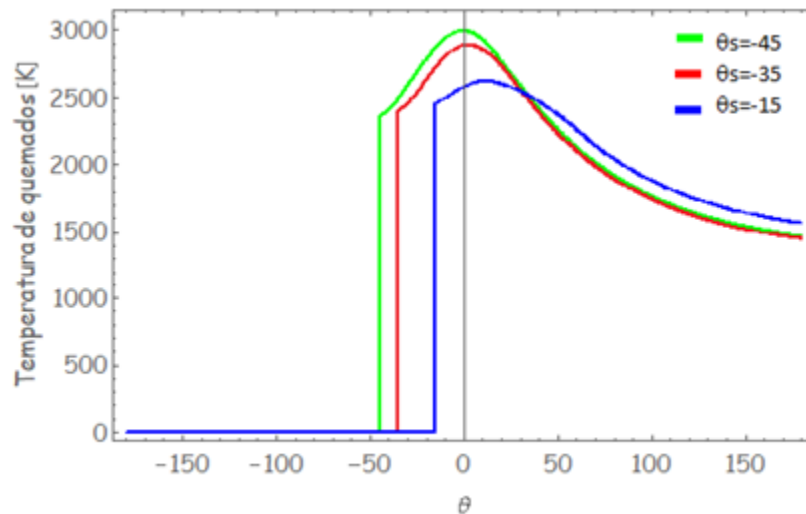


Figura 5.24. Temperatura de los gases quemados con el ángulo del cigüeñal.

De lo anterior se concluye que, a mayor temperatura de los gases dentro del cilindro y mayor duración de dichos gases dentro del cilindro, la transferencia de calor al medio ambiente incrementará.

En la **Figura 5.25** se muestran los cambios en las irreversibilidades contra el ángulo del cigüeñal; como se puede observar de esta figura, las irreversibilidades del sistema para el caso de -35 y -15 grados varían en 1 J (0.24%) y la de -45 grados varia en 5 J (1.2%) más en comparación a la obtenida en -15 grados.

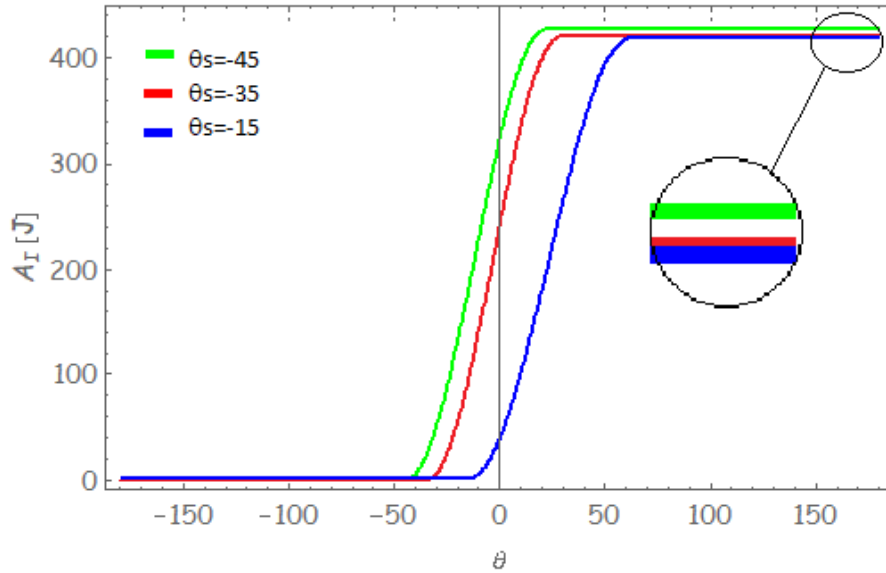


Figura 5.25. Irreversibilidades con el ángulo del cigüeñal.

La **Figura 5.26** muestra los cambios de la disponibilidad total respecto a la posición del cigüeñal; las gráficas que muestra esta figura permiten observar que la disponibilidad que tiene el sistema para realizar trabajo incrementa conforme se le suministra calor en un ángulo más próximo a cero grados, la disponibilidad del combustible en $\theta_s = -45$ grados, disminuye antes de acuerdo a la **Figura 5.21**, lo que lleva a que la curva de disponibilidad total en $\theta_s = -45$ grados alcance un menor valor en comparación con las otras dos curvas.

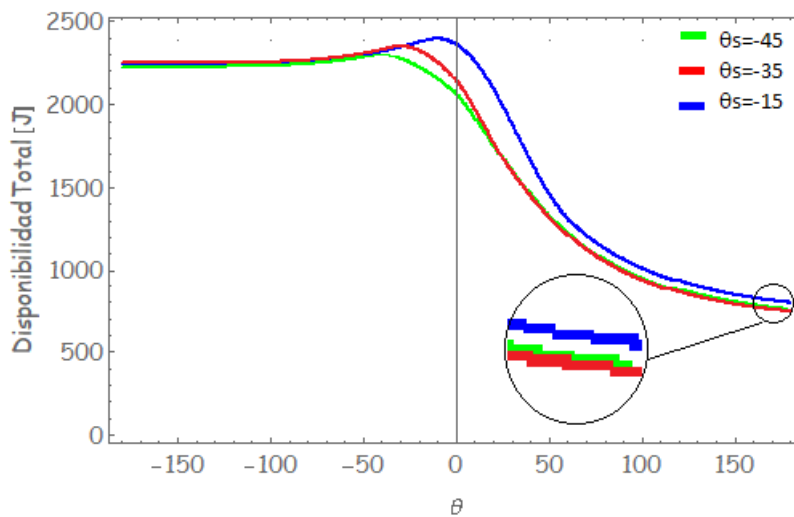


Figura 5.26. Disponibilidad total con el ángulo del cigüeñal.

Con base en los resultados del análisis variando θ_s , al igual que en el análisis hecho en 5.4.1, se calcularon los porcentajes que cada término de disponibilidad representa, los cuales se muestran en la **Tabla 5.4**.

Tabla 5.4 Porcentaje de cada término de disponibilidad variando θ_s .

Parámetro \ Término	$\theta_s=-45$	$\theta_s=-35$	$\theta_s=-15$
Trabajo	32.15%	33.5%	31.7%
Calor	8.93%	8.48%	8.33%
Irreversibilidades	18.53%	18.35%	18.26%

De estos resultados se puede concluir que gran cantidad de la disponibilidad, que representa alrededor de 41% se tira al medio ambiente en los gases de escape. Las eficiencias de los ciclos para la Primera y Segunda Ley están dadas en la **Tabla 5.5**.

Tabla 5.5 Eficiencias de la primera y Segunda Ley del ciclo variando θ_s .

Parámetro \ Eficiencia	η_I	η_{II}
$\theta_s=-45$	35.46%	32.41%
$\theta_s=-35$	37.75%	33.56%
$\theta_s=-15$	34.77%	30.91%

Los resultados indican que el valor óptimo de suministro de calor es $\theta_s=-35$ bajo las condiciones dadas. La duración del suministro de calor no representa efectos significativos en las irreversibilidades. La transferencia de calor está relacionada directamente con el ángulo de inicio de combustión y la duración del suministro de calor; ésto debido a que se extiende la duración del contacto de los gases quemados con la pared del cilindro.

5.4.3 Disponibilidad variando la velocidad del motor rpm

En esta sección se presentan los resultados que se obtuvieron al variar la velocidad del motor; los parámetros que se mantuvieron fijos fueron $\phi = 1$ y $\theta_s = -35^\circ$.

La **Figura 5.27** muestra la disponibilidad del combustible con respecto a la posición del cigüeñal, la masa de combustible es la misma para los tres casos y por tanto, la disponibilidad dentro del cilindro será la misma para las tres velocidades. En la gráfica también se puede observar la dependencia de la duración del suministro de calor con respecto a la velocidad del motor, la cual se incrementa cuando se aumentan las rpm de acuerdo a la ecuación (3.12a).

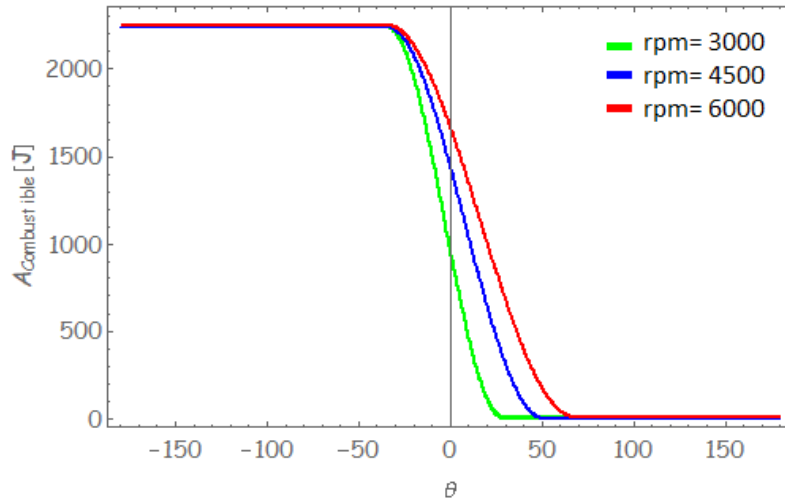


Figura 5.27. Disponibilidad del combustible con el ángulo del cigüeñal.

La disponibilidad por transferencia de trabajo contra la posición del cigüeñal mostrada en la **Figura 5.28** resulta con una variación de 5 J (0.66%) entre cada gráfica al final de la expansión. De esta figura se puede apreciar que el trabajo realizado por el ciclo, a las condiciones dadas en la **Tabla 5.1**, tiene pocos cambios respecto a cambios en la velocidad del motor. Los cambios más significativos se muestran en la **Figura 5.29** en la cual se puede observar la disponibilidad por transferencia de calor.

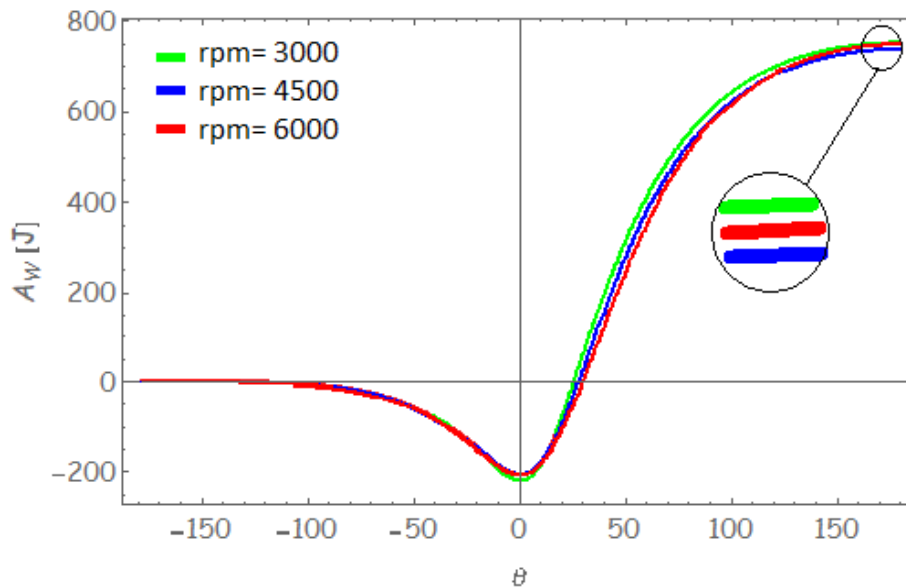


Figura 5.28. Disponibilidad por transferencia de trabajo.

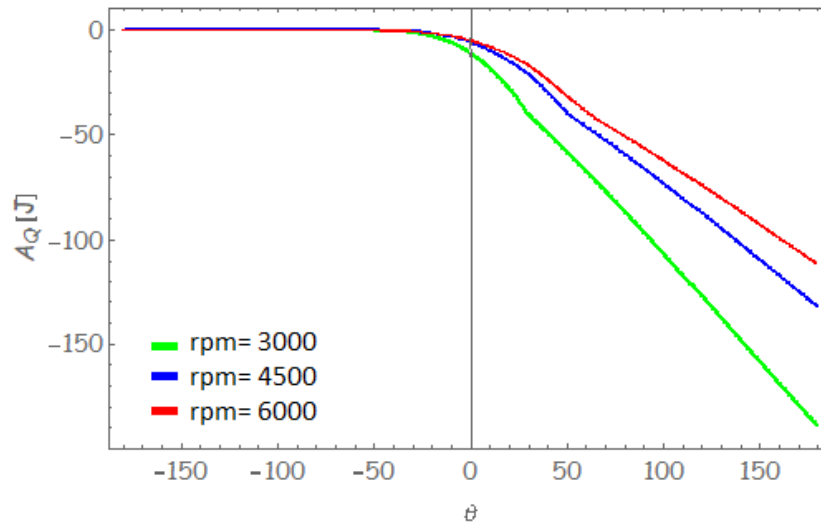


Figura 5.29. Disponibilidad por transferencia de calor.

Como se puede apreciar en la **Figura 5.29**, los términos de la disponibilidad por transferencia de calor se ven afectados por la velocidad del motor. Esto es el resultado de la velocidad con que interaccionan los gases quemados con las paredes del cilindro, a mayor velocidad del motor, menor interacción se tendrá entre el interior del cilindro y el medio ambiente; es decir, en rpm= 3000, la disponibilidad que se pierde al final del ciclo por transferencia de calor es de 190 J, mientras que para rpm= 4500 y rpm=6000, las pérdidas disminuyen en 30% y 41.57%, respectivamente.

La **Figura 5.30** muestra la variación de las irreversibilidades contra la posición del cigüeñal con los cambios realizados en la velocidad del motor. De esta figura, se observa que las irreversibilidades presentes en el cilindro al final del ciclo, al igual que en el trabajo, no tienen una variación significativa una respecto de la otra, el valor mínimo para los tres casos es el que tiene rpm=3000 con 418 J. Las irreversibilidades se presentan más rápido con bajas revoluciones; es decir, para rpm= 3000 y posición angular en 0 grados, las irreversibilidades tienen un valor de 240 J, y para rpm=4500 y rpm=6000 alcanzan un valor de 142 J y 104 J, respectivamente, que representan 40.83% y 55% menos en comparación con rpm=3000.

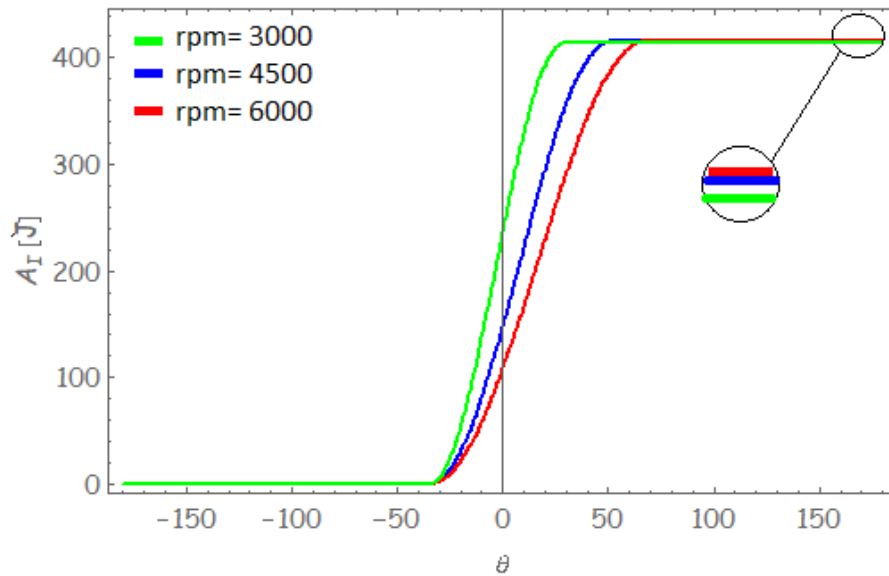


Figura 5.30. Irreversibilidades.

La **Figura 5.31** muestra la variación de disponibilidad total que se tiene en el cilindro respecto a la posición del cigüeñal. De la **Figura 5.31** se puede observar que conforme una mayor velocidad tiene el motor, la disponibilidad se incrementa debido a lo expuesto anteriormente. Adicionalmente, en la **Tabla 5.6** se muestran los porcentajes correspondientes de los términos de disponibilidad al variar la velocidad del motor.

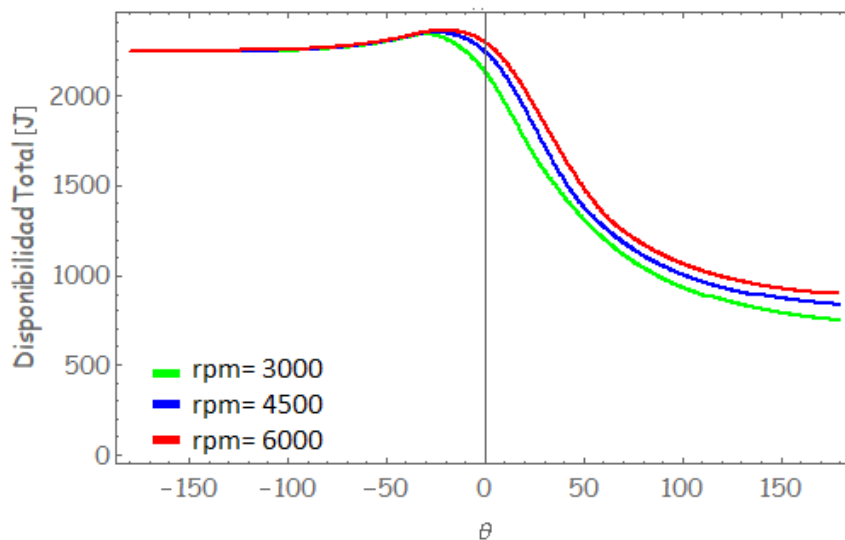


Figura 5.31. Disponibilidad total del sistema.

Tabla 5.6 Porcentaje de cada término de disponibilidad variando las rpm.

Parámetro / Término	rpm=3000	rpm=4500	rpm=6000
Trabajo	33.50%	33.27%	33.05%

Calor	8.48%	6.03%	4.91%
Irreversibilidades	18.68%	18.75%	18.80%

Las eficiencias de los ciclos para la primera y Segunda Ley están dadas en la **Tabla 5.7**.

Tabla 5.7 Eficiencias de la primera y Segunda Ley del ciclo variando rpm.

Parámetro \ Eficiencia	η_I	η_{II}
rpm=3000	37.75%	33.56%
rpm=4500	36.78%	32.70%
rpm=6000	35.13%	31.21%

Con los datos mostrados anteriormente se puede observar que, con 3000 rpm, la eficiencia del motor es la más alta dada las condiciones de la **Tabla 5.1**, que indica que la energía suministrada se aprovecha en mayor cantidad.

5.5 Resumen de Resultados

En la **Tabla 5.8** se muestra el resumen de los resultados que se obtuvieron anteriormente; cada uno de los resultados presentados fueron comparados contra los resultados obtenidos con los parámetros de $\phi = 1$, $\theta_s = -35$ y $\text{rpm} = 3000$ que es el caso base.

Tabla 5.8 Resumen de resultados.

Parámetro	Valor	Presión	Temperatura quemados	Trabajo	Transferencia de calor	Entropía (Irreversibilidades)	Eficiencia η_I	Eficiencia η_{II}
ϕ	0.9	↓	↓	↓	↓	↓	↑	↑
	1	=	=	=	=	=	=	=
	1.1	=	=	↑	↑	↑	↓	↓
θ_s	-45	↑	↑	↓	↑	↑	↓	↓
	-35	=	=	=	=	=	=	=
	-15	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓
rpm	3000	=	=	=	=	=	=	=
	4500	↑	↑	↓	↓	↑	↓	↓
	6000	↑	↑	↓	↓	↑	↓	↓

Como se puede observar en la **Tabla 5.8**, el resultado óptimo de funcionamiento para las características del motor simulado son las siguientes:

- $\phi = 0.9$
- $\theta_s = -35$
- $\text{rpm} = 3000$

6 Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros

Al evaluar el funcionamiento de un motor de combustión interna es posible realizar un análisis desde dos puntos de vista: de la Primera Ley y de la Segunda Ley de la Termodinámica. Un análisis paramétrico realizado desde el punto de vista de la Segunda Ley, como el que se ha realizado en este trabajo, permite cuantificar cuál es la energía total que tiene el sistema al final de la etapa de admisión, así como las formas en las que se degrada y aprovecha dicha energía. La energía total del sistema estará en función de la masa de combustible, que se ingresa en el cilindro durante la etapa de admisión. La degradación de la energía se presenta mediante los efectos disipativos y para el caso de este análisis, se observa que dichos efectos se presentan mediante la transferencia de calor, irreversibilidades y el calor que tienen los gases quemados al final de la etapa de expansión.

Para cumplir con lo anterior, se programó un modelo que está basado en la Primera y Segunda Ley de la Termodinámica en el software Mathematica®. Este es un modelo de dos zonas, una donde se calculan las propiedades de los gases quemados y otra para los gases no quemados. Con las ecuaciones que se presentaron en el capítulo 3 y con condiciones iniciales propuestas por Ferguson [21], se propuso un caso base y se eligió como parámetros a analizar la velocidad del motor (rpm), el ángulo de inicio de combustión (θ_s) y la razón de equivalencia (ϕ).

El análisis paramétrico permite conocer cuál es el funcionamiento óptimo de los motores de combustión interna, en consecuencia, se puede concluir lo siguiente de cada uno de los parámetros:

- La razón de equivalencia es uno de los parámetros que modifican de manera más significativa las irreversibilidades, una menor razón de equivalencia permite reducir las irreversibilidades. Una menor masa de combustible significa menor disponibilidad para poder realizar trabajo, pero para el análisis paramétrico que se realizó se observa que a pesar de tener menor combustible (debido a la menor razón de equivalencia) el trabajo que se realiza por el pistón es alto, lo que lleva a una mayor eficiencia; es decir, se aprovecha de mejor manera la energía que se le suministra al sistema.

La entropía es una propiedad que depende de la presión y de la temperatura, disminuir la masa del combustible significa disminuir la temperatura que alcanzan los gases, y en consecuencia, la presión que se alcanza dentro de la cámara de combustión.

La mayor eficiencia para esta tesis calculada con la Primera y Segunda Ley se alcanza con $\phi = 0.9$.

- La disponibilidad por transferencia de calor incrementa, si se disminuye el ángulo donde se inicia la combustión y ésta disminuye conforme se acerca al punto muerto superior.

La eficiencia óptima se alcanza con $\theta_s = -35$ grados, que se debe a que de la disponibilidad total que se tiene en el sistema, el trabajo que se extrae es mayor en comparación con los datos que se obtuvieron con $\theta_s = -45$ grados y $\theta_s = -15$ grados.

Los gases quemados que tienen alta temperatura se mantienen en contacto más tiempo con el sistema, que implica que la transferencia de calor sea mayor para $\theta_s = -45^\circ$.

La generación de entropía en el sistema incrementa con $\theta_s = -45^\circ$; este incremento es resultado de una mayor temperatura que se alcanza debido a la presión que se tiene dentro de la cámara de combustión.

- La velocidad del motor implica incremento en las irreversibilidades, la entropía es una función de presión y temperatura, y los cambios en la velocidad del motor incrementan la temperatura y en consecuencia, la presión dentro de la cámara de combustión.

Al tener una mayor temperatura dentro de la cámara de combustión, la transferencia de calor incrementa, debido al gradiente de temperatura que se presenta entre el sistema y su entorno.

La disponibilidad por transferencia de trabajo disminuye a mayor velocidad del motor; esto debido a la presión media efectiva, la cual es mayor para $\text{rpm}=3000$.

La mayor eficiencia se alcanza con $\text{rpm}=3000$.

La Segunda Ley permite conocer, además de la forma en la que se degrada la energía, los parámetros bajo los cuales la eficiencia del ciclo se incrementa; es decir, las condiciones óptimas de funcionamiento. Conocer estos parámetros permite reducir las pérdidas de disponibilidad, que como se ha demostrado en la presente tesis, se presentan principalmente durante la etapa de combustión.

Para trabajos futuros se espera que el programa pueda ser complementado con un modelo químico que incluya reacciones químicas completas, una combustión incompleta y que sea complementada con un modelo de propagación de la flama en la que se contemplen dichas consideraciones, y observar que ocurre con la disponibilidad total del sistema, así como la degradación de la disponibilidad.

También para un trabajo futuro se pudiera desarrollar el análisis paramétrico para una mayor cantidad de combustibles, incluyendo dentro de éstos, los biocombustibles como una alternativa de energía, lo que permita conocer las irreversibilidades que se presentan al utilizarlos y su funcionamiento óptimo de los motores bajo el uso de estos combustibles.

7 Referencias

- [1] Bejan, A. (1982). Second-Law Analysis in Heat Transfer and Thermal Design. *Advances in Heat Transfer*. [https://doi.org/10.1016/S0065-2717\(08\)70172-2](https://doi.org/10.1016/S0065-2717(08)70172-2)
- [2] Di, Q., Wang, Y., Zanobetti, A., Wang, Y., Koutrakis, P., Choirat, C., ... Schwartz, J. D. (2017). Air Pollution and Mortality in the Medicare Population. *New England Journal of Medicine*, 376(26), 2513–2522. <https://doi.org/10.1056/NEJMoa1702747>
- [3] Landrigan, P. J., Fuller, R., Acosta, N. J. R., Adeyi, O., Arnold, R., Basu, N. (Nil), ... Zhong, M. (2018). The Lancet Commission on pollution and health. *The Lancet*, 391(10119), 462–512. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(17\)32345-0](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(17)32345-0)
- [4] Contreras, A. M., García, G., Icaza, B. (2013). *Calidad del aire: una práctica de vida*. Centro de Educación y Capacitación Sustentable.
- [5] Moreno, G. (2017, 02 de junio). Los países más contaminantes del mundo. *statista*. Recuperado el 08 de enero de 2019 de <https://es.statista.com/grafico/9662/los-paises-mas-contaminantes-del-mundo/>
- [6] Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (2018). Gases y compuestos de efecto invernadero. Recuperado el 8 de enero de 2019 de <https://www.gob.mx/inecc/acciones-y-programas/gases-y-compuestos-de-efecto-invernadero>
- [7] Noticias ONU. (2018, 22 de noviembre). Los niveles de gases de efecto invernadero en la atmósfera alcanzan un nuevo record [en línea]. Noticias ONU. Recuperado el 8 de enero de 2019 de <https://news.un.org/es/story/2018/11/1446191>
- [8] NOAA RESEARCH NEWS. (2017, 07 de junio). Another climate milestone on Mauna Loa, Peak Carbon Dioxide Levels Surpass 410 Parts Per Million For April And May [en línea]. Excelsior. Recuperado el 8 de enero de 2019 de <https://research.noaa.gov/article/ArtMID/587/ArticleID/2362/Another-climate-milestone-falls-at-NOAA%E2%80%99s-Mauna-Loa-observatory>
- [9] Garrido, F. (2017). COMBUSTIÓN DE METANO A BAJA TEMPERATURA SOBRE CATALIZADORES DE ÓXIDO DE COBALTO Efecto del hierro y el cerio como promotores.
- [10] Debayle, M. (2017, 30 de octubre). Del calentamiento global, la Antártida y ¿el fin del mundo?. Martha Debayle. Recuperado el 8 de enero de 2019 de <https://www.marthadebayle.com/v3/radiov3/nospusimosserios/del-calentamiento-global-la-antartida-y-el-fin-del-mundo/>

- [11] OCEANA. (s/f). Gases de efecto invernadero [en línea]. OCEANA Protegiendo los Océanos del Mundo. Recuperado el 8 de enero de 2019 de <https://eu.oceana.org/es/node/46897>
- [12] Oswaldo, H., Ballesteros, B., Esperanza, G., & Aristizabal, L. (2007). Información técnica sobre gases de efecto invernadero y el cambio climático. IDEAM. Recuperado el 13 de enero de 2019 de <http://www.ideam.gov.co/documents/21021/21138/Gases+de+Efecto+Invernadero+y+el+Cambio+Climatico.pdf/7fabbbd2-9300-4280-befe-c11cf15f06dd>
- [13] Naciones Unidas. (2015). Acuerdo de París. Naciones Unidas. Recuperado el 13 de enero de 2019 de https://unfccc.int/sites/default/files/spanish_paris_agreement.pdf
- [14] López, P. (2018, 14 de mayo). Mientras la población crezca más que el PIB, los problemas económicos en México serán mayores. Boletín UNAM-DGCS-299. Recuperado el 13 de enero de 2019 de http://www.dgcs.unam.mx/boletin/bdboletin/2018_299.html
- [15] El Financiero. (2018). Crecimiento poblacional en México, detonante de la delincuencia: UNAM. El Financiero. Recuperado el 13 de enero de 2019 de <https://www.elfinanciero.com.mx/nacional/crecimiento-poblacional-en-mexico-detonante-de-la-delincuencia-unam>
- [16] INEGI, Estadísticas de Vehículos de Motor Registrados. (2017). Parque vehicular. INEGI. Recuperado el 14 de enero de 2019 de <https://www.inegi.org.mx/temas/vehiculos/>
- [17] Bravo, H., Roy, G., Ocotla, Sánchez, P., & Torres, R. (s/f). Contaminación atmosférica por ozono en la zona metropolitana de la ciudad de México: evolución histórica y perspectivas.
- [18] Saad, M. A. (1974). *Termodinámica : teoría y aplicaciones técnicas*. Urmo.
- [19] Wark, K., & Richards, D. E. (2001). *Termodinámica*. McGraw-Hill.
- [20] Manrique Valadez, J. A. (2001). *Termodinámica*. Oxford University Press.
- [21] Ferguson, C. R., & Kirkpatrick, A. (2015). *Internal combustion engines : applied thermosciences*. Wiley.
- [22] Gordon, M. (1971). Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouquet Detonations. *NASA 5P-273 Interim Revision*.
- [23] JANAF. (1970) *Thermochemical Tables*, National Bureau of Standards
- [24] Abo-Tabik, M., Meyer, R., & Fajardo, C. (2018). *Second Law of Thermodynamics-Based Optimization of Spark-Ignition Engine Operation*. <https://doi.org/10.23919/ACC.2018.8431423>

- [25] Safer, K., Ouadha, A., & Tabet, F. (2017). Entropy generation in turbulent syngas counter-flow diffusion flames. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(49), 29532–29544. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2017.08.217>
- [26] D. Rakopoulos, C., & Giakoumis, E. (2006). Second-law analyses applied to internal combustion engines operation. En *Progress in Energy and Combustion Science* (Vol. 32). <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2005.10.001>
- [27] Sezer, İ., & Bilgin, A. (2008). Exergy analysis of SI engines. En *International Journal of Exergy* (Vol. 5). <https://doi.org/10.1504/IJEX.2008.016676>
- [28] Rakopoulos, C. D., & Giakoumis, E. G. (1997). Simulation and exergy analysis of transient diesel-engine operation. *Energy*, 22(9), 875–885. [https://doi.org/10.1016/S0360-5442\(97\)00017-0](https://doi.org/10.1016/S0360-5442(97)00017-0)
- [29] Rakopoulos, C. D. (1993). Evaluation of a spark ignition engine cycle using first and second law analysis techniques. *Energy Conversion and Management*, 34(12), 1299–1314. [https://doi.org/10.1016/0196-8904\(93\)90126-U](https://doi.org/10.1016/0196-8904(93)90126-U)
- [30] Caton, J. A. (2000). On the destruction of availability (exergy) due to combustion processes — with specific application to internal-combustion engines. *Energy*, 25(11), 1097–1117. [https://doi.org/10.1016/S0360-5442\(00\)00034-7](https://doi.org/10.1016/S0360-5442(00)00034-7)
- [31] Keck, J. C. (1982). Turbulent flame structure and speed in spark-ignition engines. *Symposium (International) on Combustion*, 19(1), 1451–1466. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(82\)80322-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80322-6)
- [32] Agarwal, A., Filipi, Z. S., Assanis, D. N., & Baker, D. M. (1998). Assessment of Single- and Two-Zone Turbulence Formulations for Quasi-Dimensional Modeling of Spark-Ignition Engine Combustion. *Combustion Science and Technology*, 136(1–6), 13–39. <https://doi.org/10.1080/00102209808924163>
- [33] Bilgin, A. (2002). Geometric features of the flame propagation process for an SI engine having dual-ignition system. En *International Journal of Energy Research* (Vol. 26). <https://doi.org/10.1002/er.832>
- [34] İsmet, S., & Atila, B. (2008). Mathematical analysis of spark ignition engine operation via the combination of the first and second laws of thermodynamics. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 464(2100), 3107–3128. <https://doi.org/10.1098/rspa.2008.0190>
- [35] Tabaczynski, R. J., Trinker, F. H., & Shannon, B. A. S. (1980). Further refinement and validation of a turbulent flame propagation model for spark-ignition engines. *Combustion and Flame*, 39(2), 111–121. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(80\)90011-5](https://doi.org/10.1016/0010-2180(80)90011-5)

- [36] Bayraktar, H., & Durgun, O. (2004). Development of an empirical correlation for combustion durations in spark ignition engines. *Energy Conversion and Management*, 45(9–10), 1419–1431. <https://doi.org/10.1016/J.ENCONMAN.2003.09.010>
- [37] Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2012). *Termodinámica*. McGraw-Hill.
- [38] Javaheri, A., Esfahanian, V., Salavati-Zadeh, A., & Darzi, M. (2014). Energetic and exergetic analyses of a variable compression ratio spark ignition gas engine. *Energy Conversion and Management*. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2014.09.009>
- [39] Kotas, T.J. (1995). *The Exergy Method of Thermal Plant Analysis*. Reprint Edition, Krieger Publishing Company, Malabar.
- [40] Olikara, C., & Borman, G. L. (2010). A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines. *SAE Technical Paper Series*. <https://doi.org/10.4271/750468>
- [41] Bayraktar, H., & Durgun, O. (2004). Development of an empirical correlation for combustion durations in spark ignition engines. *Energy Conversion and Management*, 45(9–10), 1419–1431. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2003.09.010>

8 Apéndices

8.1 Apéndice 1 Propagación de la flama

Las suposiciones para el sub-modelo geométrico son las siguientes; la cámara de combustión es cilíndrica, la tapa del cilindro es plana, la propagación de la flama es esférica siendo el centro la ubicación de la bujía. En la **Figura A1.1** se aprecia la cámara de combustión.

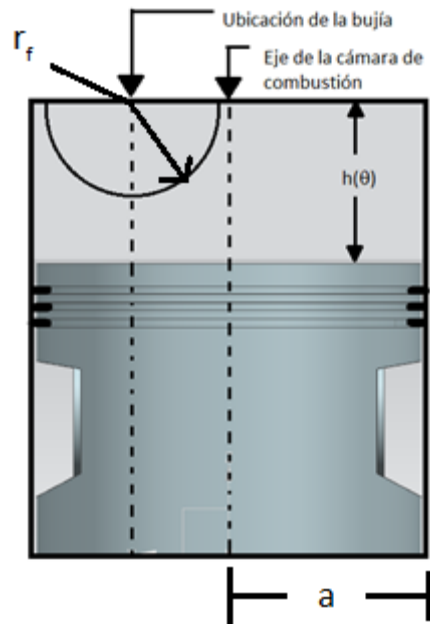


Figura A1.1. Cámara de combustión.

De la **Figura A1.1** los parámetros que se pueden observar son el radio de la cámara de combustión (a), el radio de la flama (r_f) y la distancia de la cabeza del pistón a la tapa de la cámara de combustión ($h(\theta)$). Otro parámetro que se puede conocer es la separación de la bujía al eje del pistón, esta longitud es denominada en esta tesis como S_b .

Los parámetros que se deben conocer en todo instante se enlistan y desarrollan a continuación:

- El volumen al final de la combustión (V_{Fc}):

$$V_{Fc} = V_c \left(1 + \frac{r-1}{2} \left(1 - \cos(\theta_s + \theta_b) \right) + \frac{1}{r_{cr}} \left[1 - \sqrt{(1 - r_{cr}^2 \sin^2(\theta_s + \theta_b))} \right] \right) \quad (\text{Ae1.1})$$

- La distancia entre la cabeza del pistón y la tapa del cilindro al final de la combustión (h_{Fc}):

$$h_{Fc} = \frac{V_{Fc}}{\pi \cdot (a)^2} \quad (\text{Ae1.2})$$

- Velocidad de la flama (v_{flama}):

$$v_{flama} = \frac{D_{flama}}{\left(\frac{\text{seg}}{\text{grado}} \right) \cdot \theta_b} \quad (\text{Ae1.3})$$

donde D_{flama} es la distancia máxima que recorre la flama al radio máximo

$$D_{flama} = \sqrt{(a + Sb)^2 + h_{FC}^2} \quad (Ae1.4)$$

y la relación $\frac{seg}{grado}$ es la relación temporal por cada grado que avanza el cigüeñal:

$$\frac{seg}{grado} = \frac{1}{60 * rpm} \quad (Ae1.5)$$

- El radio de la flama r_f , para cada instante es:

$$r_f = (\theta - \theta_s) * \frac{seg}{grado} * v_{flama} \quad (Ae1.6)$$

Para el cálculo total de los volúmenes y áreas de las zonas quemadas y no quemadas son entonces:

$$A(\theta) = A_b(\theta) + A_u(\theta) \quad (Ae1.7)$$

y

$$V(\theta) = V_b(\theta) + V_u(\theta) \quad (Ae1.8)$$

Para ambos casos (área y volumen), sólo se requiere conocer la parte quemada o no quemada ya que tanto el área como el volumen instantáneo se conocen en cada ángulo del cigüeñal; para este caso se resuelven A_u y V_u .

Como primera observación es que existen casos triviales, es decir, las zonas donde se presenta el área y volumen de los gases no quemadas son antes de la combustión, es decir, $A_b(\theta) = 0$ y $V_b(\theta) = 0$. Cuando finaliza la combustión, todos los gases se han quemado, por lo que $A_u(\theta) = 0$ y $V_u(\theta) = 0$.

El instante donde existen las dos áreas (quemados y no quemados) es mientras se lleva a cabo la combustión, por lo que, se ha dividido cada etapa de la combustión en 8 casos.

- ❖ Caso 1, en el inicio de la combustión si se cumple que $r_f + Sb \leq a$:

$$A_b(\theta) = \pi * r_f^2 \quad (Ae1.9)$$

$$V_b(\theta) = \frac{2}{3} * \pi * r_f^3 \quad (Ae1.10)$$

- ❖ Caso 2, el radio de la flama llega a una pared del cilindro si se cumple que $r_f + Sb > a$ y $Sb - r_f \geq -a$, se define la siguiente constante:

$$C_1 = \frac{Sb^2 - r_f^2 + a^2}{2 * Sb} \quad (Ae1.11)$$

$$V_b(\theta) = V_1 + V_2 \quad (Ae1.12)$$

donde

$$V_1 = \frac{\pi}{2} \int_{Sb-r_f}^{C_1} [r_f^2 - (x - Sb)^2] dx \quad (Ae1.13)$$

$$V_2 = \int_{C_1}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} \right] dx \quad (Ae1.14)$$

para

$$A_b(\theta) = 2(A_1 + A_2 + A_3) \quad (\text{Ae1.15})$$

$$A_1 = \int_{Sb-r_f}^{C_1} [r_f^2 - (x - Sb)^2] dx \quad (\text{Ae1.16})$$

$$A_2 = \int_{C_1}^a \sqrt{(a^2 - x^2)} dx \quad (\text{Ae1.17})$$

$$A_3 = \int_{C_1}^a \left[\sqrt{(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} * \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} \right] dx \quad (\text{Ae1.18})$$

❖ Caso 3, el radio de la flama supera la tapa del cilindro, si se cumple $Sb - r_f < -a$

$$V_b(\theta) = \int_{-a}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} \right] dx \quad (\text{Ae1.19})$$

para

$$A_b(\theta) = A_1 + A_2 \quad (\text{Ae1.20})$$

$$A_1 = \pi * a^2 \quad (\text{Ae1.21})$$

$$A_2 = 2\pi \int_{-a}^a \left[\sqrt{(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} \right] dx \quad (\text{Ae1.22})$$

En los casos siguientes para r_f es mayor que la altura del pistón $h(\theta)$

❖ Caso 4, si se cumple $r_f^2 \leq (a - Sb)^2 + h(\theta)^2$ y $r_f + Sb \leq a$:

$$V_b(\theta) = V_1 - V_2 \quad (\text{Ae1.23})$$

$$V_1 = \frac{2}{3} * \pi * r_f^3 \quad (\text{Ae1.24})$$

$$V_2 = \frac{\pi}{3} (r_f - h(\theta))^2 (2r_f + h(\theta)) \quad (\text{Ae1.25})$$

para

$$A_b(\theta) = A_1 + A_2 \quad (\text{Ae1.26})$$

$$A_1 = \pi * r_f^2 \quad (\text{Ae1.27})$$

$$A_2 = \pi(r_f^2 - h(\theta)^2) \quad (\text{Ae1.28})$$

❖ Caso 5, si se cumple $r_f^2 \leq (a - Sb)^2 + h(\theta)^2$, $r_f + Sb > a$ y $Sb - r_f \geq -a$, entonces:

$$V_b(\theta) = V_1 + V_2 - V_3 \quad (\text{Ae1.29})$$

$$V_1 = \frac{\pi}{2} \int_{Sb-r_f}^{C_1} [r_f^2 - (x - Sb)^2] dx \quad (\text{Ae1.30})$$

$$V_2 = \int_{C_1}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} \right] dx \quad (\text{Ae1.31})$$

$$V_3 = \frac{\pi}{3} (r_f - h(\theta))^2 (2r_f + h(\theta)) \quad (\text{Ae1.32})$$

para

$$A_b(\theta) = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 \quad (\text{Ae1.33})$$

$$A_1 = 2 \int_{Sb-r_f}^{C_1} \left[\sqrt{r_f^2 - (x - Sb)^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.34})$$

$$A_2 = 2 \int_{C_1}^a \sqrt{(a^2 - x^2)} dx \quad (\text{Ae1.35})$$

$$A_3 = 2 \int_{C_1}^a \left[\sqrt{(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} * \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} \right] dx \quad (\text{Ae1.36})$$

$$A_4 = \pi(r_f^2 - h(\theta)^2) \quad (\text{Ae1.37})$$

❖ Caso 6, si $r_f^2 \leq (a - Sb)^2 + h(\theta)^2$ y $Sb - r_f < -a$, se tiene:

$$V_b(\theta) = V_1 - V_2 \quad (\text{Ae1.38})$$

$$V_1 = \int_{-a}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} \right] dx \quad (\text{Ae1.39})$$

$$V_2 = \frac{\pi}{3} (r_f - h(\theta))^2 (2r_f + h(\theta)) \quad (\text{Ae1.40})$$

para

$$A_b(\theta) = A_1 + A_2 + A_3 \quad (\text{Ae1.41})$$

$$A_1 = \pi * a^2 \quad (\text{Ae1.42})$$

$$A_2 = 2 \int_{-a}^a \left[\sqrt{(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} * \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} \right] dx \quad (\text{Ae1.43})$$

$$A_3 = \pi(r_f^2 - h(\theta)^2) \quad (\text{Ae1.44})$$

❖ Caso 7, si $r_f^2 > (a - Sb)^2 + h(\theta)^2$, $r_f^2 \leq (a + Sb)^2 + h(\theta)^2$ y $Sb - r_f > -a$.

Para este caso de nuevo es necesario definir otra constante

$$C_2 = \frac{Sb^2 - r_f^2 + a^2 + h(\theta)^2}{2 * Sb} \quad (\text{Ae1.45})$$

$$V_b(\theta) = V_1 - V_2 - V_3 + V_4 \quad (\text{Ae1.46})$$

$$V_1 = \int_{C_1}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} \right] dx \quad (\text{Ae1.47})$$

$$V_2 = \int_{Sb - \sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2}}^{C_2} \left[r_f^2 - (x - Sb)^2 * \tan^{-1} \sqrt{\frac{r_f^2 - h(\theta)^2 - (x - Sb)^2}{h(\theta)}} - h(\theta) * \sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2 - (x - Sb)^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.48})$$

$$V_3 = \int_{C_2}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} - 2h(\theta)\sqrt{a^2 - x^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.49})$$

$$V_4 = \frac{\pi}{2} \int_{Sb - r_f}^{C_1} [r_f^2 - (x - Sb)^2] dx \quad (\text{Ae1.50})$$

para

$$A_b(\theta) = 2(A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 + A_6) \quad (\text{Ae1.51})$$

$$A_1 = \int_{Sb - r_f}^{C_1} \sqrt{r_f^2 - (x - Sb)^2} dx \quad (\text{Ae1.52})$$

$$A_2 = \int_{C_1}^a \sqrt{(a^2 - x^2)} dx \quad (\text{Ae1.53})$$

$$A_3 = \int_{C_1}^{C_2} \left[\sqrt{(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} \right] dx \quad (\text{Ae1.54})$$

$$A_4 = h(\theta) \int_{C_2}^a \left[\sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} \right] dx \quad (\text{Ae1.55})$$

$$A_5 = \int_{Sb - \sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2}}^{C_2} \left[\sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2 - (x - Sb)^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.56})$$

$$A_6 = \int_{C_2}^a \sqrt{(a^2 - x^2)} dx \quad (\text{Ae1.57})$$

❖ Caso 8, si no se cumple ninguna de las condiciones presentadas en los casos 4 a 7, entonces:

$$V_b(\theta) = V_1 - V_2 - V_3 \quad (\text{Ae1.58})$$

$$V_1 = \int_{-a}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} \right] dx \quad (\text{Ae1.59})$$

$$V_2 = \int_{Sb - \sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2}}^{C_2} \left[r_f^2 - (x - Sb)^2 * \tan^{-1} \frac{\sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2 - (x - Sb)^2}}{h(\theta)} - h(\theta) * \sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2 - (x - Sb)^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.60})$$

$$V_3 = \int_{C_2}^a \left[\sqrt{(a^2 - x^2)(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} + (r_f^2 - (x - Sb)^2) * \tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - x^2}{r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb}} - 2h(\theta)\sqrt{a^2 - x^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.61})$$

para

$$A_b(\theta) = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 \quad (\text{Ae1.62})$$

$$A_1 = \pi * a^2 \quad (\text{Ae1.63})$$

$$A_2 = 2 \int_{-a}^{C_2} \left[\sqrt{(r_f^2 - a^2 - Sb^2 + 2x * Sb)} \right] dx \quad (\text{Ae1.64})$$

$$A_3 = 2h(\theta) \int_{C_2}^a \sqrt{\frac{a^2}{a^2 - x^2}} dx \quad (\text{Ae1.65})$$

$$A_4 = \int_{Sb - \sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2}}^{C_2} \left[\sqrt{r_f^2 - h(\theta)^2 - (x - Sb)^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.66})$$

$$A_5 = 2 \int_{C_2}^a \left[\sqrt{a^2 - x^2} \right] dx \quad (\text{Ae1.66})$$

8.2 Apéndice 2: Tablas de datos para calcular las funciones termodinámicas de (4.13), (4.14) y diferentes combustibles.

En la **Tabla A2.1**, se muestran los datos que se utilizaron para calcular las funciones termodinámicas del balance (4.13) (mezcla no quemada):

Tabla A2.1 Coeficientes de polinomios ajustados para calcular las funciones termodinámicas de las especies químicas requeridas. Datos para 300-1000 K. Datos tomados de [23].

Especies	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
CO ₂	2.4007797	0.0087351	-6.6071E-06	2.0022E-09	6.3274E-16	-48377.527	9.6951457
H ₂ O	4.0701275	-0.00110845	4.1521E-06	-2.9637E-09	8.0702E-13	-30279.722	-0.32270046
N ₂	3.6748261	-0.00120815	2.324E-06	-6.3218E-10	-2.2577E-13	-1061.1588	2.3580424
O ₂	3.6255985	-0.00187822	7.0555E-06	-6.7635E-09	2.1556E-12	-1047.5226	4.3052778
CO	3.7100928	-0.0016191	3.6924E-06	-2.032E-09	2.3953E-13	-14356.31	2.955535
H ₂	3.0574451	0.00267652	-5.8099E-06	5.521E-09	-1.8123E-12	-988.90474	-2.2997056

La **Tabla A2.2**, muestra los datos usados para calcular las funciones termodinámicas del balance (4.14) (mezcla quemada):

Tabla A2.2 Coeficientes de polinomios ajustados para calcular las funciones termodinámicas de las especies químicas requeridas. Datos para 1000-3000 K. Datos tomados de [23].

Especies	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
CO ₂	4.4608041	0.003098172	-1.23926E-06	2.27413E-10	-1.5526E-14	-48961.442	-0.98635982
H ₂ O	2.7167633	0.002945137	-8.02244E-07	1.02267E-10	-4.84721E-15	-29905.826	6.6305671
N ₂	2.8963194	0.001515487	-5.72353E-07	9.98074E-11	-6.52236E-15	-905.86184	6.1615148
O ₂	3.6219535	0.000736183	-1.96522E-07	3.62016E-11	-2.89456E-15	-1201.9825	3.615096
CO	2.9840696	0.001489139	-5.78997E-07	1.03646E-10	-6.93536E-15	-14245.228	6.3479156
H ₂	3.1001901	0.000511195	5.26442E-08	-3.491E-11	3.69453E-15	-877.38042	-1.9629421
H	2.5	0	0	0	0	25471.627	-0.46011763
O	2.5382	-0.000021282	-4.1531E-09	3.9687E-12	-3.0014E-16	29230.803	4.920308
OH	2.9106427	0.000959317	-1.94417E-07	1.37566E-11	1.42245E-16	3935.3815	5.4423445
NO	3.189	0.001338228	-5.28993E-07	9.59193E-11	-6.48479E-15	9828.329	6.7458126

La **Tabla A2.3** muestra los coeficientes para calcular las funciones termodinámicas de algunos combustibles.

Tabla A2.3 Coeficientes de polinomios ajustados para calcular las funciones termodinámicas de algunos combustibles. Datos para 300-1000 K. Datos tomados de [21].

Combustible	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
CH ₄	1.971324	0.007871586	-1.04859E-06	-9930.422	8.873728	0	0
C ₆ H ₆	-2.545087	0.0479554	-2.03077E-05	8782.234	33.48825	0	0
C ₇ H ₁₇	4.0652	0.060977	-0.000018801	-35880	15.45	0	0
C _{14.4} H _{24.9}	7.971	0.11954	-0.000036858	-19385	-1.7879	0	0
CH ₃ NO ₂	1.412633	0.02087101	-8.14213E-06	-10263.51	19.17126	0	0
CH ₃ OH	1.779819	0.01262503	-3.62489E-06	-25254.2	15.0884	0	0
C ₂ H ₆	4.83	0.0138	-0.00000456	6.72E-10	-3.6E-14	-12700	-5.24
C ₃ H ₆	6.73	0.0149	-0.00000495	7.21E-10	-3.77E-14	-924	-13.3
C ₃ H ₈	7.53	0.0189	-0.00000628	9.18E-10	-4.81E-14	-16500	-17.8
C ₄ H ₈	2.05	0.0344	-0.0000159	3.31E-09	-2.54E-13	-2140	15.5
C ₄ H ₁₀	20	0.0104	-0.00000961	-4.62E-10	8.2E-14	-26300	-88.4