

## EVALUACIÓN DE HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES GRATUITAS PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS DE COMBUSTIÓN EN MOTORES DE ENCENDIDO POR CHISPA

### EVALUATION OF GRATUITOUS COMPUTER TOOLS FOR THE SIMULATION OF PROCESSES OF COMBUSTION IN SPARK IGNITION ENGINES

R.R. Rodríguez<sup>1\*</sup>, Z. Niño<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigaciones Ambientales de la Universidad de Carabobo (CIAUC), Campus Bárbula, Naguanagua, Venezuela.

<sup>2</sup>Departamento de Investigación, Universidad Estatal de Bolívar, Ecuador.

Recibido 11 de abril de 2016; Aceptado 8 de junio de 2016

#### Resumen

La complejidad matemática-termoquímica de los modelos a simular en procesos de combustión efectuados en motores de combustión interna de encendido por chispa, son afectados por múltiples variables, se hace necesario que el estudio sea asistido por herramientas computacionales especializadas. El software comercial representa un alto costo de inversión para la adquisición de licencias, usualmente de vencimiento anual, lo cual resulta inviable para instituciones o centros de investigación, con bajos presupuestos, por ello se torna importante el uso de herramientas computacionales gratuitas confiables. Se evaluaron las herramientas computacionales: CEA, GASEQ y STANJAN, comparando la concentración y composición de las emisiones gaseosas contaminantes y propiedades termodinámicas de los productos de la combustión obtenidas al utilizar como combustible: isoocatano, metano y etanol; relaciones combustible-aire relativa que variaron desde 0,8 hasta 1,2 y obteniendo hasta doce especies químicas en las emisiones (CO, CO<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NO, O, OH, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, N y HC). Los resultados muestran alta precisión entre sí y con resultados obtenidos en investigaciones previas, con un error relativo menor al 6,4%. Esta investigación evidencia la versatilidad de las herramientas computacionales evaluadas aplicadas a los procesos de combustión adiabáticos-isométricos.

**Palabras clave:** emisiones gaseosas, motores de combustión interna, relación combustible-aire relativa, simulación de procesos de combustión.

#### Abstract

The mathematical-thermochemical complexity of models to simulate combustion processes carried out in internal combustion engines with spark ignition, are affected by many variables, it is necessary that the study be assisted by specialized computer tools. The commercial software represents a high cost of investment for the license acquisition, usually from annual expiry date, which is unfeasible for institutions or research centers with low budgets, therefore becomes important the use of reliable gratuitous computer tools. The computational tools were evaluated: CEA, GASEQ and STANJAN, comparing the concentration and composition of the gaseous emissions pollutants and thermodynamic properties of the combustion products to obtain to use as fuel, isoocatane, methane and ethanol; relations relative fuel-air that varied from 0.8 to 1.2 and obtaining up to twelve chemical species in the emissions (CO, CO<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NO, O, OH, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, N and HC). The results show high precision between themselves and with results obtained in previous investigations, with a less relative error to 6,4%. This research evidence the versatility of the computational tools evaluated applied to combustion processes adiabatic-isometric.

**Keywords:** gaseous emission, internal combustion engines, relation fuel-air relative, simulation of processes of combustion.

## 1 Introducción

El análisis de los procesos de combustión realizados en los motores de combustión interna alternativos (MCIA), tienen actualmente una vigencia

destacada pues la implementación de mejoras tecnológicas y de control en los procesos de transformación de materias primas ha mejorado la

\* Autor para la correspondencia. E-mail: rirodrig@uc.edu.ve  
Tel/Fax. 248-48-154-82

eficiencia energética y la reducción de emisiones. (Arango y col., 2014 y Pérez y col., 2001). Adicionalmente, la relación entre salud y ambiente nunca ha sido tan evidente, como es el caso de la contaminación atmosférica que presentan las grandes ciudades debido principalmente al gran volumen de emisiones vehiculares. Todos estos contaminantes tienen efectos adversos en la salud de los habitantes, provocando principalmente enfermedades respiratorias. (Chamarra y Saavedra, 2013).

El MCIA cuyo funcionamiento engloba una gran cantidad de variables y fenómenos físicos, que se traducen en una actividad compleja, cuando de medirlas, cuantificarlas y predecirlas se trata. Los avances recientes han demostrado nuevos procedimientos de combustión para MCIA que presentan bajas concentraciones de óxido nítrico y altos rendimientos térmicos. Estos nuevos modos de combustión implican varias combinaciones de estratificación, mezclas pobres, altos niveles de EGR, múltiples inyecciones, sincronizaciones de válvulas variables y dos combustibles, entre otras características. Aunque la combinación exacta de estas características que ofrece el mejor diseño aún no está clara, los resultados son de gran interés y para lo cual se utilizan simuladores de ciclos Termodinámicos. (Caton, 2012 y Pérez y col., 2006).

Sin embargo, las herramientas computacionales comerciales representan un alto costo en lo que refiere a la inversión en la adquisición de licencias, usualmente de vencimiento anual. Para instituciones o centros de investigación, con bajos presupuestos, se torna importante el uso de herramientas computacionales gratuitas confiables; por lo tanto, en el presente trabajo se evalúan tres herramientas computacionales gratuitas aplicadas a procesos de combustión adiabáticos-isométricos efectuados en motores de combustión interna de encendido por Chispa (MECH).

El proceso de Combustión en MECH se inicia inyectando el combustible dentro del múltiple de admisión por lo que el combustible es pre-vaporizado, entrando al cilindro del motor bien mezclado con el aire. Una chispa enciende la mezcla en el tiempo deseado dentro del ciclo del movimiento del pistón, y esta chispa enciende el núcleo de la llama; la cual desarrolla un frente de llama con alta temperatura y alta turbulencia que se propaga a través de la mezcla aire-combustible dentro del cilindro. La relación aire-combustible en los MECH se mantiene típicamente muy cerca de la mezcla

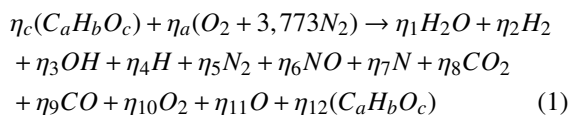
aire-combustible estequiométrica necesaria para una combustión completa con el fin de utilizar modernos catalizadores de 3 vías de escape para el tratamiento de las emisiones de monóxido de carbono (CO), hidrocarburos sin quemar (UHC) y óxidos nítricos (NOx). Para los MECH, la selección de un combustible depende de sus propiedades de auto-ignición, que son importantes para golpeteo del motor, la velocidad de propagación de la llama y las emisiones contaminantes resultantes. (Bergthorson y Thomson, 2015)

## 2 Modelo matemático

Las herramientas computacionales Chemical Equilibrium Applications (CEA, 1994), Gas Equilibrium (GASEQ, 2007) y STANford-JANnaf (STANJAN, 1986) se orientan a determinar la composición, concentración y las propiedades termodinámicas de las mezclas de gases reactantes y productos de los procesos de combustión de combustibles tipo  $C_aH_b$  y  $C_aH_bOH$  con aire seco, en procesos adiabáticos, isobáricos o isométricos. Se considera un intervalo para el factor combustible-aire relativo que va desde 0,8 a 1,2 y se tratan a los gases y sus mezclas como gases en condiciones ideales. Consideran los requerimientos de la Primera y Segunda Ley de la Termodinámica y de la Química de la Combustión, referente al Equilibrio Químico. En particular, permiten la resolución de los sistemas de ecuaciones no lineales que son característicos en estos casos donde el número de constituyentes de los gases productos es mayor al número de los componentes químicos presentes en la reacción (Heywood, 1995; Villamar y col., 2014).

Las herramientas computacionales CEA, GASEQ y STANJAN basan sus fundamentos en teorías de mezcla de gases ideales, Primera y Segunda Ley de la Termodinámica; así como, las reacciones de combustión (Rodríguez y col., 2009; Fygueroa y col., 2012; Ramachandran, 2009).

La Ec. (1) representa una reacción de combustión de un combustible con aire seco para doce elementos en los productos (considerando combustible no quemado) aplicable para cualquier relación combustible-aire relativa ( $\Phi$ ) (Fygueroa y col., 2012; Villamar y col., 2014).



La Ec. (2) permite determinar el número de moles de aire  $\eta_a$  para una combustión general con  $\eta_c$  moles de combustible (Ferguson y Kirkpatrick, 2001).

$$\eta_a = \frac{\eta_c \left( a + \frac{b}{4} - \frac{c}{2} \right)}{\Phi} \quad (2)$$

La relación entre las cantidades de combustible y aire suministradas a los cilindros del motor durante un proceso de combustión viene dada por la relación relativa combustible-aire relativa ( $\Phi$ ) definida por la Ec. 3 (Rodríguez y col., 2009; Ferguson y Kirkpatrick, 2001).

$$\Phi = \frac{CA_{real}}{CA_{esteq}} \quad (3)$$

$CA_{real}$  representa la relación combustible-aire empleada en condiciones de combustión real y  $CA_{esteq}$  es el valor estequiométrico o teórico.

Para la estimación de la composición de los productos se utilizan las Ecs. (4)-(7), que representan los balances atómicos en C, H, O y N.

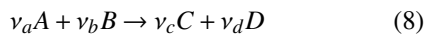
$$\text{Balance C: } \eta_c a = \eta_8 + \eta_9 + \eta_{12} a \quad (4)$$

$$\text{Balance H: } \eta_c b = 2 \cdot \eta_1 + 2 \cdot \eta_2 + \eta_3 + \eta_4 + \eta_{12} b \quad (5)$$

$$\text{Balance O: } \eta_c c + 2 \cdot \eta_a = \eta_1 + \eta_3 + \eta_6 + 2 \cdot \eta_8 + \eta_9 + 2 \cdot \eta_{10} + \eta_{11} + \eta_{12} c \quad (6)$$

$$\text{Balance N: } \eta_a \cdot 3,7274 \cdot 2 = 2 \cdot \eta_5 + \eta_6 + \eta_7 \quad (7)$$

Se tiene un sistema de ecuaciones compuesto por cinco ecuaciones y doce incógnitas. Las siete ecuaciones faltantes las provee el equilibrio químico aplicado a la reacción de combustión (Ramachandran, 2009; Quilez y Quilez, 2014); las cuales son no lineales. Considerando la reacción química (Fygueroa y col., 2012):



Se define la Ec. (9) para determinar el valor de la constante de equilibrio ( $K_p$ ) para la reacción.

$$K_p = \frac{\prod (y^{\nu})_{productos}}{\prod (y^{\nu})_{reactantes}} \cdot p^{\sum \nu_{productos} - \sum \nu_{reactantes}} \quad (9)$$

Formándose un sistema de ecuaciones no lineales el cual puede ser resuelto a través del método de Newton-Raphson o algunas de sus variantes (Gordon y McBride, 1994; Gray y col., 2016; Mueses y Machuca, 2010) para estimar la composición de los productos de la combustión en equilibrio químico.

CEA utiliza las Ecs. (10)-(12) publicadas en Gordon y McBride (1996) para el cálculo de las propiedades de los gases involucrados en las mezclas.

$$\frac{C_P^0(T)}{R} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \quad (10)$$

$$\frac{h^0(T)}{R \cdot T} = -a_1 T^{-2} + \frac{a_2 \ln T}{T} + a_3 + \frac{a_4}{2} T + \frac{a_5}{3} T^2 + \frac{a_6}{4} T^3 + \frac{a_7}{5} T^4 + \frac{b_1}{T} \quad (11)$$

$$\frac{S_P(T)}{R} = \frac{a_1}{2} T^{-2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + \frac{a_5}{2} T^2 + \frac{a_6}{3} T^3 + \frac{a_7}{4} T^4 + b_2 \quad (12)$$

GASEQ y STANJAN utilizan las Ecs. (13)-(15) publicadas en Gordon y McBride (1994) para el cálculo de las propiedades de los gases involucrados en las mezclas.

$$\frac{C_P^0(T)}{R} = c_1 + c_2 T + c_3 T^2 + c_4 T^3 + c_5 T^4 \quad (13)$$

$$\frac{h^0(T)}{R \cdot T} = c_1 + \frac{c_2}{2} T + \frac{c_3}{3} T^2 + \frac{c_4}{4} T^3 + \frac{c_5}{5} T^4 + \frac{c_6}{T} \quad (14)$$

$$\frac{S_P(T)}{R} = c_1 \ln T + c_2 T + \frac{c_3}{2} T^2 + \frac{c_4}{3} T^3 + \frac{c_5}{4} T^4 + c_7 \quad (15)$$

## 3 Materiales y métodos

### 3.1 Herramientas de cálculo utilizadas

#### CEA

Chemical Equilibrium with Applications (CEA) es un programa desarrollado por la Administración Nacional de Aeronáutica y del Espacio de los Estados Unidos (NASA) en el año de 1994, que considera el equilibrio químico de reacciones a partir de cualquier conjunto de reactivos y determina las concentraciones, propiedades termodinámicas y de transporte para la mezcla de los productos. El programa se encuentra disponible en la página oficial de la NASA; <http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/ceaWhat.htm> y su descarga es gratuita. En la misma se suministra el procedimiento para la descarga del programa y el procedimiento para su instalación.

#### GASEQ

El programa Gas Equilibrium (GASEQ), creado por el Prof. Chris Morley (2007), es un programa

desarrollado en ambiente Windows, para el estudio de procesos de combustión. GASEQ realiza cálculos considerando el equilibrio químico y estima la composición de los gases de escape, propiedades termodinámicas y de transporte en un proceso de combustión. El programa trabaja con la base de datos antigua para el cálculo de propiedades termodinámicas de la NASA, es de licencia libre y para su descarga e instalación el autor desarrolló el sitio web <http://www.gaseq.co.uk/>, donde incluye instrucciones de instalación, actualizaciones, ventajas, limitaciones y métodos de cálculo, entre otras.

### STANJAN

Este programa STANJAN fue publicado por el Prof. William Reynolds (1986). Su título proviene de la conjunción entre el título de la Universidad de STANFORD y las tablas de propiedades termodinámicas JANNAF. El programa considera que los gases presentes se comportan como gases ideales dentro de la mezcla. La composición de la mezcla producto de la combustión puede ser determinada en equilibrio químico o puede ser especificada, para la evaluación de ciclos termodinámicos. STANJAN puede ser usado para estimar la temperatura de combustión adiabática de reacciones de combustión en procesos isobáricos o isométricos. Una versión de esta herramienta de cálculo, Chemical Equilibrium Calculation, se encuentra disponible online en la página: <http://navier.engr.colostate.edu/~dandy/code/code-4/> bajo la supervisión del Prof. David Dandy.

### 3.2 Metodología empleada

Se consideraron parámetros típicos de motores de encendido por chispa (Ferguson y Kirkpatrick, 2001; Heywood, 1995), tales como:

- El estado termodinámico de la mezcla reactante al inicio del proceso de compresión-isoentrópico está definido por 298 K y 101,325 kPa.
- Se utiliza una relación de compresión igual a ocho (8).
- Se considera un proceso de combustión adiabático-isométrico.
- Para el proceso de combustión en motores de encendido a chispa, se seleccionan combustibles usuales como: Iso-Octano ( $C_8H_{18}$ ), Metano ( $CH_4$ ) y Etanol ( $C_2H_5OH$ ).

- Relaciones combustible-aire relativa en el intervalo de 0,8 a 1,2.
- Las emisiones gaseosas a estudiar por sus efectos adversos en el ambiente son Dióxido de carbono ( $CO_2$ ), Monóxido de Carbono (CO) y Monóxido de Nitrógeno (NO).

Para cada combustible y cada relación combustible-aire relativa, se siguió el procedimiento siguiente:

- Determinación del estado termodinámico de la mezcla reactante antes del proceso de compresión; principalmente, lo referente a volumen específico y entropía.
- Determinación del estado termodinámico de la mezcla reactante al final del proceso de compresión adiabático-reversible, es decir, estado inicial de la combustión. Para esto se considera el volumen inicial, relación de compresión y un proceso isoentrópico.
- Uso de cada herramienta computacional con los datos iniciales del proceso de combustión adiabático-isométrico, es decir, proceso de combustión a energía interna constante.
- Tabulación de los resultados obtenidos.
- Aplicación de la Ec. 16 para el cálculo de los errores relativos entre los resultados de las herramientas.

$$Error(\%) = \frac{|V_E - V_R|}{V_E} \cdot 100 \quad (16)$$

Para las herramientas computacionales utilizadas, se elaboraron gráficos de Temperatura de Combustión Adiabática (TCA), Presión de los Productos (Pproductos) y fracciones molares de CO ( $Y_{CO}$ ),  $CO_2$  ( $Y_{CO_2}$ ) y NO ( $Y_{NO}$ ) en función de la relación combustible-aire relativa ( $\Phi$ ) y del combustible empleado.

## 4 Resultados y discusión

Principalmente se plasmaron los resultados de los productos de la combustión respecto a propiedades termodinámicas (Temperatura y Presión); así como, emisiones tóxicas o contaminantes (CO,  $CO_2$  y NO). Las Figs. 1 y 2 muestran el comportamiento de la temperatura de combustión adiabática (TCA) y presión de los productos (Pproductos) en función de la relación combustible-aire relativa ( $\Phi$ ) para los

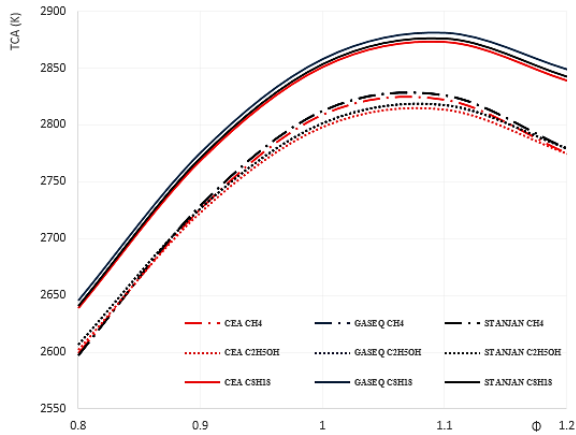


Fig. 1. Temperatura de combustión adiabática en función de la relación combustible-aire relativa.

combustibles considerados ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  y  $\text{C}_8\text{H}_{18}$ ) y las herramientas computacionales empleadas.

La Temperatura de Combustión Adiabática (TCA) alcanzó los valores más elevados en el intervalo comprendido entre:  $1.0 \leq \Phi \leq 1.1$ , Ver Fig. 1. Para la combustión adiabática-isométrica del Isooctano ( $\text{C}_8\text{H}_{18}$ ) se obtuvieron los valores más elevados entre los combustibles empleados. La TCA máxima se encuentra alrededor de 2880 K. En mezclas pobres en combustible, la TCA crece linealmente con  $\Phi$ ; esto se debe a que al aumentar el valor de  $\Phi$  el calor específico de la mezcla disminuye porque aumenta la cantidad de combustible presente en ella. En mezclas cercanas a la estequiométrica el crecimiento de la TCA es cada vez menos pronunciado y alcanza su valor máximo cuando  $\Phi$  es ligeramente mayor que uno, a causa que la reacción de disociación del  $\text{CO}_2$  a  $\text{CO} + \text{O}_2$  es endotérmica (Fygueroa y Araque, 2005; Fygueroa y col., 2012).

En el caso de los productos, Ver Fig. 2, su tendencia fue a aumentar con el aumento de  $\Phi$ . Para mezclas gaseosas donde aumente la temperatura y/o disminuya el volumen específico, la tendencia es aumentar la presión de la mezcla. Para el intervalo estudiado, se obtuvo una presión máxima para el  $\text{C}_8\text{H}_{18}$  alrededor de 8.640 kPa para un  $\Phi=1,2$ .

Las Figs. (3)-(5) señalan la tendencia de las emisiones de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  y  $\text{NO}$  en función de la relación combustible-aire relativa, para los tres combustibles y las tres herramientas.

Las concentraciones de las emisiones de  $\text{CO}_2$  tienden a aumentar hasta alcanzar valores tope en el intervalo de:  $0,9 \leq \Phi \leq 1,0$ ; siendo mayores en el caso de la combustión del  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  con valores que oscilan entre 0,1 y 0,1015.

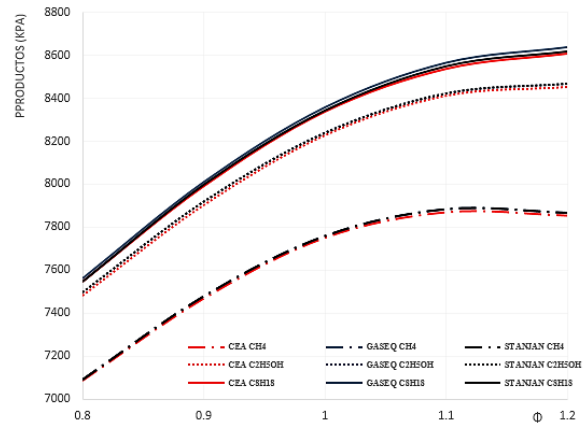


Fig. 2. Presión de los productos en función de la relación combustible-aire relativa.

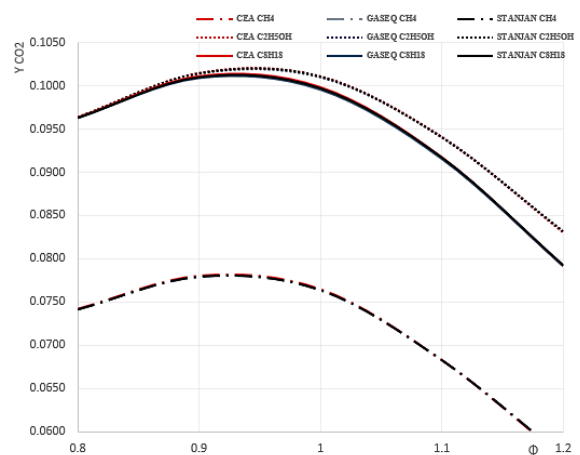


Fig. 3. Emisión de  $\text{CO}_2$  en función del combustible y la relación combustible-aire relativa.

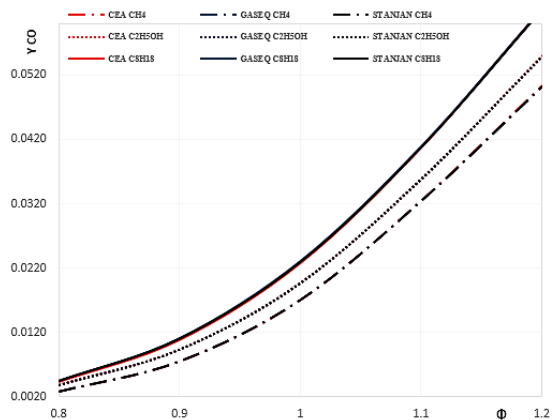


Fig. 4. Emisión de  $\text{CO}$  en función del combustible y la relación combustible-aire relativa.



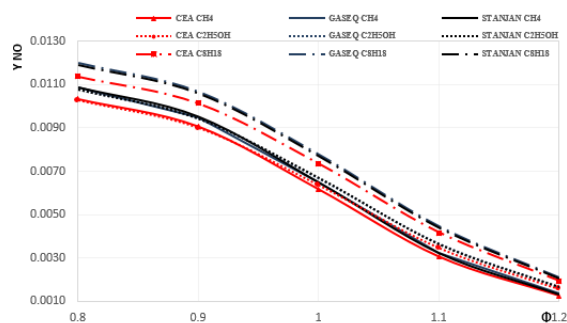


Fig. 5. Emisión de NO en función del combustible y la relación combustible-aire relativa.

Las fracciones de CO en los productos tienen una tendencia a incrementar su concentración con el aumento de  $\Phi$  motivado a la disminución de las concentraciones de oxígeno cuando hay mezclas ricas en combustible. Para el intervalo estudiado, se obtuvo un valor máximo de 0,0623 para la combustión del  $C_8H_{18}$  para una  $\Phi=1,2$ .

Las concentraciones de NO en las emisiones de la combustión tienen una tendencia contraria a las de CO. En este caso, las mayores concentraciones se encuentran en la zona pobre en combustible ( $\Phi < 1$ ) debido a la presencia elevada de oxígeno. Las mayores concentraciones se reportan para la combustión del  $C_8H_{18}$  con valores cercanos a 0,012.

Con la información presentada en las Figuras anteriores se puede constatar, que los resultados obtenidos mediante la utilización de las tres herramientas computacionales son consistentes para todo el intervalo de valores empleado. En todos los casos los resultados entre el GASEQ y el STANJAN no hubo divergencias significativas.

Comparando los resultados del CEA con el resto de las herramientas, las tendencias de las curvas se mantiene y en muchos casos son prácticamente idénticas. La mayor desviación entre los resultados mostrados se encuentra en la Figura 5, principalmente, en la zona rica en combustible ( $\Phi > 1$ ). Aunque los errores relativos entre las herramientas no supera el 6,4%; específicamente, en el caso del Etanol ( $C_2H_5OH$ ) y  $\Phi=1,2$ . Fenomenológicamente, las tendencias fueron similares.

El combustible con menor concentración de emisiones de CO,  $CO_2$  y NO fue el  $CH_4$ , pero también fue el de menor TCA, lo cual está asociado con los valores energéticos de la mezcla de gases quemados.

Los resultados presentados en las Figs. (1)-(5) fueron contrastados con proyectos similares publicados (Rodríguez y col., 2009; Fygueroa y col., 2012; Ferguson y Kirkpatrick, 2001;

Heywood, 1995) encontrándose una concordancia fenomenológica entre todos los resultados.

Las herramientas computacionales concuerdan satisfactoriamente dentro del alcance propuesto permitiendo obtener resultados referentes a la concentración de elementos y compuestos químicos contaminantes presentes en las emisiones; así como, propiedades termodinámicas necesarias para la evaluación energética de los parámetros involucrados en el ciclo de funcionamiento de los motores de combustión interna. CEA posee una extensa base de datos en cuanto a elementos y compuestos químicos considerados; además de poseer versiones online y escritorio. GASEQ tiene como ventaja que permite la simulación de procesos isoentrópicos de expansión o compresión de mezclas de gases ideales. La versión de STANJAN sólo está disponible online.

## Conclusiones

Fenomenológicamente y cuantitativamente, los resultados obtenidos utilizando las tres herramientas computacionales concuerdan satisfactoriamente para la obtención de propiedades termodinámicas y concentraciones de las mezclas producto de la combustión, en procesos adiabáticos-isométricos.

En el intervalo estudiado para  $\Phi$ , la presencia de CO se incrementa en los productos en la misma medida que la relación  $\Phi$  aumenta, encontrándose su máximo valor para  $\Phi = 1,2$ .

Las mayores concentraciones de NO se presentan para mezclas pobres ( $\Phi=0,8$ ) y disminuyen considerablemente con el aumento de la riqueza de la mezcla.

Para mezclas alrededor de la estequiométrica ( $1 \leq \Phi \leq 1,1$ ) se obtienen los valores máximos de temperatura de combustión adiabática y también valores máximos de las concentraciones de  $CO_2$ . Para hacer estimaciones iniciales, puede recurrirse al método de interpolación lineal para la estimación de la TCA cuando las mezclas sean pobres en combustible.

Las concentraciones de especies CO y NO más elevadas en los motores de encendido por chispa se consiguieron utilizando como combustibles al  $C_8H_{18}$ .

En el proceso de combustión adiabático-isométrico, las menores concentraciones de especies contaminantes, entre los combustibles considerados, resultan de la combustión del  $CH_4$ .

## Nomenclatura

$C_p$	capacidad Calorífica, $\text{kJ.kmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$h$	entalpía, $\text{kJ.kmol}^{-1}$
$K_p$	constante de equilibrio químico
$P_{\text{productos}}$	presión de los productos, kPa
$R$	constante universal de los gases, $\text{kJ.kmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$S_p$	factor entrópico isobárico, $\text{kJ.kmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$T$	temperatura, K
$T_{CA}$	temperatura de combustión adiabática, K
$V_E$	valor esperado, mol
$V_R$	valor resultante, mol
$\eta_c$	moles de combustible, mol
$\eta_a$	moles de aire, mol
$\Phi$	relación combustible-aire relativa

## Referencias

- Arango, J., Sierra, F., y Silva, V. (2014). Análisis exploratorio de investigaciones sobre los motores de combustión interna que trabajan con biogás. *Tecnura* 18, 152-164.
- Bergthorson, J., y Thomson, M. (2015). A review of the combustion and emissions properties of advanced transportation biofuels and their impact on existing and future engines. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 42, 1393-1417.
- Caton, J. (2012). The thermodynamic characteristics of high efficiency, internal-combustion engines. *Energy Conversion and Management* 58, 84-93.
- CEA (1994). Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications. Disponible en: <https://cearun.grc.nasa.gov/>. Accesado: 02 de noviembre 2015.
- Chamarra, O., y Saavedra, G. (2013). Evaluación del impacto ambiental generado por la emisión de gases en motores que utilizan complementos lubricantes, en la ciudad de Bogotá, D.C. Universidad de Manizales. Centro de Investigaciones en Medio Ambiente y Desarrollo (CIMAD). Trabajo de Grado de Maestría en desarrollo sostenible y medio ambiente.
- Chemical Equilibrium Calculation (sin fecha). Disponible en: <http://navier.engr.colostate.edu/~dandy/code/code-4/>. Accesado: 10 de noviembre 2015.
- Ferguson, C. y Kirkpatrick, A. (2001). *Internal Combustion Engines Applied Thermodynamics*. (2da ed.). John Wiley & Sons.
- Fygueroa, S., y Araque, J. (2005). *El Proceso de Combustión en Motores de Combustión Interna*. Editorial Venezolana/Mérida 2004.
- Fygueroa, S., Serrano, J., y Molina, J. (2012). Método para determinar las propiedades termodinámicas de mezclas combustibles considerando doce especies químicas en los productos. *Ingeniería y Universidad*, Vol. 16, No 1, Pontificia Universidad Javeriana. Colombia.
- Morley, C. (2007). A Chemical equilibrium program for Windows, GASEQ. Disponible en: <http://www.gaseq.co.uk/>. Accesado: 23 de noviembre 2015.
- Gordon, S. y McBride, B. (1994). Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. I Analysis. NASA Reference Publication 1311.
- Gordon, S. y McBride, B. (1996). Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. II User manual and program description. NASA Reference Publication 1311.
- Gray, J., Chin, J., Hearn, T., Hendricks, E. y Lavelle, T. (2016). Thermodynamics of Gas Turbine Cycles With Analytic Derivatives in OpenMDAO. 4-8 January 2016, San Diego, California, USA. 57th AIAA/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference.
- Heywood, J. (1995). *Internal Combustion Engine Fundamentals*. Mc Graw Hill.
- Merker, G., Schwarz, C., Stiesch, G. y Otto, F. (2006). *Simulating Combustion and Pollutant Formation for Engine- Development*. Springer-Verlag.
- Mueses, M. y Machuca, F. (2010). Una Solución de la Ecuación de Rachford-Rice para Sistemas Multifases Aplicando el Método

- Newton Raphson, un Parámetro de Broyden y el Flash Negativo. *Información Tecnológica 21*, 3-10.
- Pérez, S., Thérien, N. y Broadbent, A. (2001) Modelling the continuous drying of a thin sheet of fibres on a cylinder heated by electric induction. *Canadian Journal of Chemical Engineering 79*, 977-989.
- Pérez, S., Niño, Z. y Cisneros, G. (2006). SIMPHA, programa de simulación para el proceso de producción de aceite de maíz y harina de maíz precocida. *Revista Información Tecnológica 17*, 133-139.
- Quílez, A. y Quílez, J. (2014). Definición y cálculo de las constantes de equilibrio en los libros de texto de Química General preuniversitarios y Universitarios. Enseñanza de las ciencias. Num 32.3: pp 187-203. Departament d'Educació, Universitat Jaume I. España.
- Ramachandran, S. (2009). Rapid Thermodynamic simulation model of an internal combustion engine on alternate fuels. Proceedings of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientists (IMECS). Hong Kong.
- Rodríguez, R., Niño, Z. y Romero, J. (2009). Programa de cálculo para la caracterización termoquímica de los procesos de combustión de hidrocarburos CaHb considerando los gases en condiciones ideales. *Ingeniería UC 16*, 34-40.
- Reynolds, W. (1986). The element potential method for chemical equilibrium analysis: Implementation in the interactive program STANJAN. Department of Mechanical Engineering Stanford University.
- Villamar, C., Santos, R. y Bermúdez, J. (2014). Modelo Termodinámico de combustión empleando EGR. Memorias del XII Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, CIMENICS'2014.(pp MF13-MF18). 24-26 Marzo de 2014, Isla de Margarita, Venezuela.