

# Modelado de un Motor HCCI usando Cantera

Yesid Antonio Romero Mora

Motores de Combustion Interna

Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica

Bogotá, Colombia

Universidad Nacional de Colombia

**Resumen**—El siguiente informe expresa el proyecto en la caracterización en el modelado del modelado de un motor HCCI haciendo uso de la librería cantera de los módulos de python, en este esquema a diferentes regimenes del motor y en una comparacion con un motor convencional, haciendo uso como combustible de manera idealizada hidrogeno, en una alta temperatura.

**Index Terms**—HCCI, Engine, Cantera

## I. INTRODUCCIÓN

Los ultimos avances y esfuerzos en la investigacion de motores se encaminan en impulsar las tecnologias practicas a producir y mejorar nuevas tecnologias, y motores que permitan una emision de cero contaminacion, impulsados en algunos casos por celdas de consumo con hidrogeno producto del agua y la electricidad en el uso de las energias renovables.

Muchos de los ultimos articulos y publicaciones de la ultima decada tienen de tematica la investigacion en motores HCCI (Motores de carga homogenea de compresion ignicion)[1]

### A. Cantera

Cantera es una suite open source de herramientas para la solucion de problemas que involucran la cinetica quimica, la termodinamica, y los procesos de transporte sin embargo tambien trae consigo paquetes que permiten el modelamiento de los motores desde la optica termodinamica en ejemplo funciona por medio de la automatizacion e iteracion, contiene objetos que permiten exportar los modelos requeridos.

### B. Parametros importantes en la simulacion

#### 1) Componentes

Cantera permite cargar los componentes de los gases que se van a utilizar ingresando estos de manera libre y facil en una variable

#### 2) gri30

Permite por medio de la instancia solucion llamar la informacion importante que contiene esta libreria quimica:

- Las propiedades de diferentes sustancias
- Reacciones
- Cinetica
- Tipos de tranposrte

Tambien permite definir el estado del gas, que se va emplear en caso de que este no se encuentre en la libreria

Para conocer lo que posee cada sustancia declarada por esta libreria basta con dar *Help(gas)* y se despliega todos los recursos disponibles de las propiedades de los gases.

## II. MODELO

En este caso se utiliza un modelado por medio de la configuracion *Cantera-zero-dimensional-reactors-network*, esto significa que las propiedades del gas son las mismas en toda la parte del cilindro, entonces no es posible un modelo de propagacion de frente de llama

Como parametros fundamentales estan los reservorios en este caso los de ingreso Inlet, salida Outlet, ambiente ambiente, tambien las valvulas se emplearon para interconectar los reservorios de los cilindros, el cilindro se empleo para modearse como un reactor, el piston fue modelado con el objeto de cantera wall tal como se muestra en el siguiente esquema.

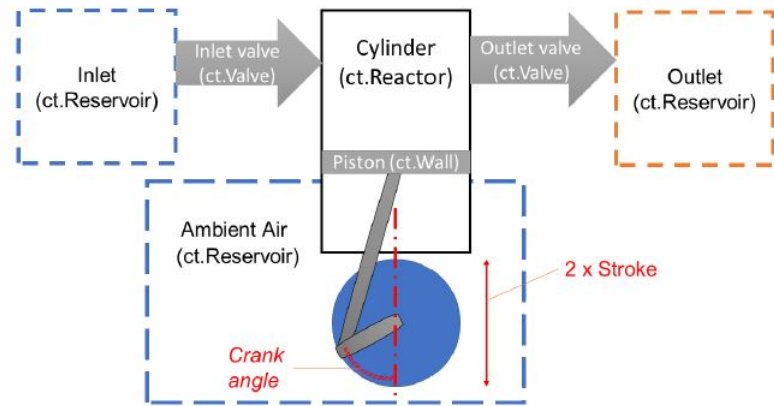


Fig. 1: Esquema del modelamiento del motor

La sustancia de trabajo empleada fue hidrogeno en un una mezcla estequiometrica con aire

## III. DESARROLLO DE LA SIMULACION

Se ingresan como primera medida los parametros caracteristicos del motor en este caso se utiliza para un motor con las siguientes caracteristicas

$$N = 1500 \text{ r.p.m}$$

$$Vd = 0.5e - 3 [m^3]$$

$$rc = 30$$

$$d_{piston} = 0.083 [m]$$

Velocidad del motor, velocidad de desplazamiento, relacion de compresion, diametro del piston.

Tambien permite ingresar los valores de los parametros de ingreso del turbocargador, presion de entrada y presion de salida

$$T_{ingreso} = 300[K]$$

$$p_{ingreso} = 1.3e5[Pa]$$

Y los componentes de gases de ingreso  $H_2 : 2$  ,  $O_2 : 1$  ,  $N_2 : 3.76$

Los parametros de presion de salida, temperatura ambiente y presion ambiente con los componentes ambientales

$$T_{ambiente} = 300[K]$$

$$p_{ambiente} = 1e5[Pa]$$

Composicion ambiental es de  $O_2 : 1$  ,  $N_2 : 3.76$

En seguida se cargara la libreria de reacion de mecanismos *gri30.xml*

Se ingresa el coeficiente de friccion, apertura y cierra en los tiempos de la valvula de ingreso

$$C_{coefopenvalve} = 1.e - 6$$

$$i_{inletopen} = 2/180 * \pi$$

$$i_{inletclose} = 198/180 * \pi$$

Tambien se ingresa los parametros de friccion , apertura y cierre de la valvula de salida

$$C_{coefclosevalve} = 1.e - 6$$

$$o_{outletopen} = 522./180 * \pi$$

$$o_{outletclose} = 198./180 * \pi$$

Finalmente el numero de iteracion de simulacion 10

#### A. Incorporacion de las propiedades de la sustancia y creacion de objetos

- 1) Se ingresa la sustancia en este caso en la variable gas la cual sera un objeto

$$gas = ct.Solution(reactionmechanism)$$

- 2) Se define los estados antes propuestos iniciales a la sustancia para el modelamiento de reactor gas
- 3) Se crea el parametro de cantera para modelamiento de un gas ideal por medio de la siguiente ecuacion donde se ingresara la sustancia

$$r = ct.IdealGasReactor(gas)$$

- 4) Se define los estados antes propuestos iniciales a la sustancia para el reservorio de salida

- 5) Se crea el parametro de cantera para el reservorio ingresando la sustancia de gas

$$inlet = ct.Reservoir(gas)$$

- 6) Se define los estados antes propuestos a la salida para crear un reservorio de salida

$$outlet = ct.Reservoir(gas)$$

- 7) Se definen los estados antes propuestos para las condiciones ambientes en un reservorio

$$ambientair = ct.Reservoir(gas)$$

#### B. Interconectando Recervorios

Se procede a interconectar los parametros de la sustancia y de los reservorios propuestos

Se interconecta utilizando la libreria de *Valve* uniendo asi los parametros de *inlet* y *r* del gas ideal a su vez tambien para los parametros de la valvula de salida *outlet* y *r*

Se define el objeto de muro que simulara un piston en lazandolo con las condiciones de *ambiente* y *r* gas ideal

En seguida se define el angulo del cigueñal.

#### C. Parametros del Motor

Se define el volumen por medio de la relacion de compresion, se ingresa el area del piston, se ingresa el diametro de carrera, se define posterior a ello la velocidad del piston.

Se define el objeto que contendra la propiedades de la sustancia al interior del cilindro

#### D. Variables del motor

Se definen los estados, el tiempo de simulacion, el tiempo , la variable de volumen, masa, flujo masico , trabajo

### IV. SIMULACION

Para cada variable de tiempo se registra el movimiento y apertura de las valvulas y el inyector dependiendo de la apertura y de la salida

Se define un refinamiento de la simulacion

Finalmente se registran los valores de salida, del volumen, masa, flujomasico, y de trabajo

### V. RESULTADOS

Finalmente se ejecutan y se generan los resultados de acuerdo a las variables anteriores se examina los datos maximos obteniendo

$$P_{max} : 342.2bar$$

$$T_{max} : 3362.4K$$

$$W_{max} : 0.2MJ$$

## VI. GRAFICOS

Posterior a ello teniendo los resultados de las variables y la funcion de rotacion del angulo de cigueñal se registra los graficos de presion y temperatura en funcion del angulo

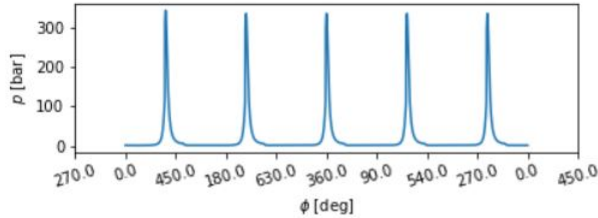


Fig. 2: Grafico Presion vs Angulo Cigueñal para 1500 rpm

Tambien con las variables anteriormente registrada se puede obtener en funcion de temperatura

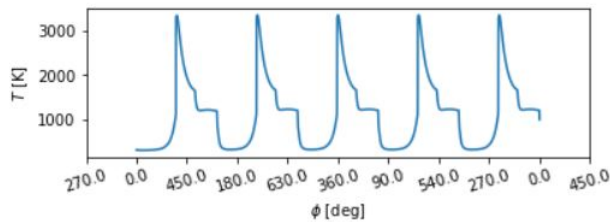


Fig. 3: Grafico Temperatura vs Angulo Cigueñal para 1500 rpm

Tambien el modulo de cantera permite conocer el flujo masico de las valvulas de ingreso y salida

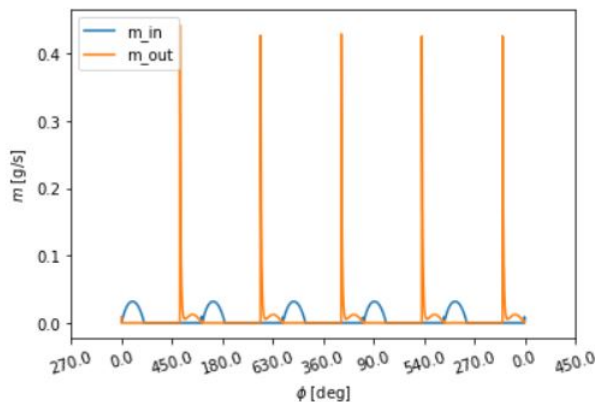


Fig. 4: Flujo masico del motor de ingreso y de salida del motor a 1500rpm

En seguida tambien se puede conocer el diagrama de P-V de acuerdo a los datos ingresados hacia las variables en funcion de la rotacion del angulo

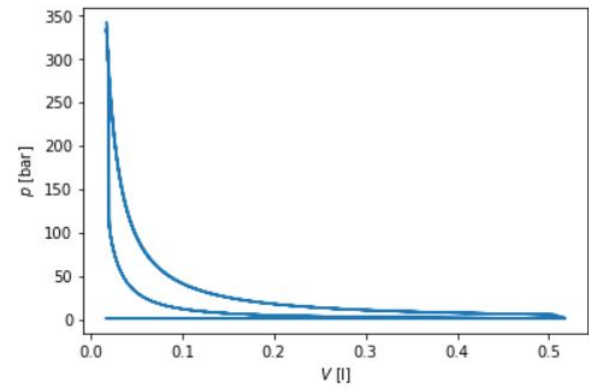


Fig. 5: Flujo masico del motor de ingreso y de salida del motor a 1500rpm

A su vez se puede tambien conocer la configuracion del motor regular en el esquema de apertura y cierre de las valvulas para este modelo en los rangos de la anterior configuracion de diagrama

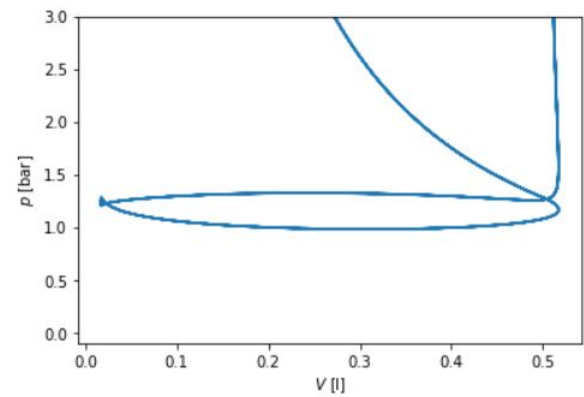


Fig. 6: Diagrama PV en la apertura y cierre de la valvulas

Tambien se permite conocer el trabajo de expansion en funcion del angulo producido por el motor

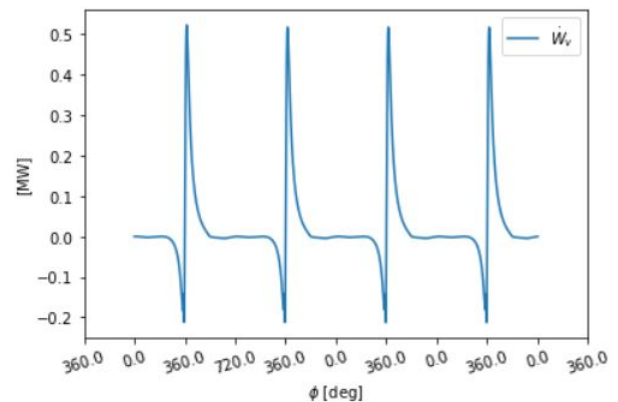


Fig. 7: Trabajo de expansion en funcion del angulo del cigueñal

Finalmente tambien es posible conocer la fraccion masica en funcion del angulo de rotacion del cigueñal

## VII. FLUJO MASICO Y POTENCIA

Finalmente conociendo la composicion molar de los productos y conociendo el flujo masico que ingresa es posible hallar el trabajo realizado por el motor y la eficiencia de este dandonos como resultado

Potencia realizada por Cilindro = 20.9 kW  
Potencia de expansion por cilindro = 11.5 kW  
Eficiencia = 55.3%  
Flujo masico de ingreso = 2.455  
Flujo masico de salida = 2.466

## VIII. SEGUNDO MOTOR CONVENCIONAL - DIESEL

En este caso se hizo una simulacion para un motor convencional con los siguientes parametros

$$N = 3000rpm$$

$$Vd = 5e - 3m^3$$

$$rc = 50$$

$$d_{piston} = 0.083M$$

La salida de la temperatura del turbocargador  
Temperatura de entrada

$$T_{inlet} = 300K$$

Presion de entrada

$$p_{inlet} = 1.3e5Pa$$

Presion de salida

$$p_{outlet} = 1.2e5Pa$$

Las propiedades en este caso del combustible son

$$T_{injector} = 300K$$

$$p_{injector} = 1600e5Pa$$

En este caso es C3H8

$$p_{ambient} = 1e5Pa$$

Componentes del ambiente son O2 : 1, N2 : 3.76

### A. Parametros de Timing en las valvulas

En apertura de valvulas de ingreso

### 1) Valvula de ingreso

$$inlet_{valve_{coeff}} = 1.e - 6$$

$$inlet_{open} = -18/180 * \pi$$

$$inlet_{close} = 198/180 * \pi$$

### 2) Valvula de Salida

$$outlet_{valve_{coeff}} = 1.e - 6$$

$$outlet_{open} = 522/180 * \pi$$

$$outlet_{close} = 18/180 * \pi$$

### 3) Inyector timing

$$injector_{open} = 350/180 * \pi$$

$$injector_{close} = 365/180 * \pi$$

$$outlet_{close} = 18/180 * \pi$$

## IX. RESULTADOS

Con estos valores se obtiene

$$P_{max} = 420.2bar$$

$$T_{max} = 3143.5K$$

$$W_{max} = 0.5MJ$$

En seguida se muestra el grafico de temperatura y presion vs angulo para esta configuracion de motor

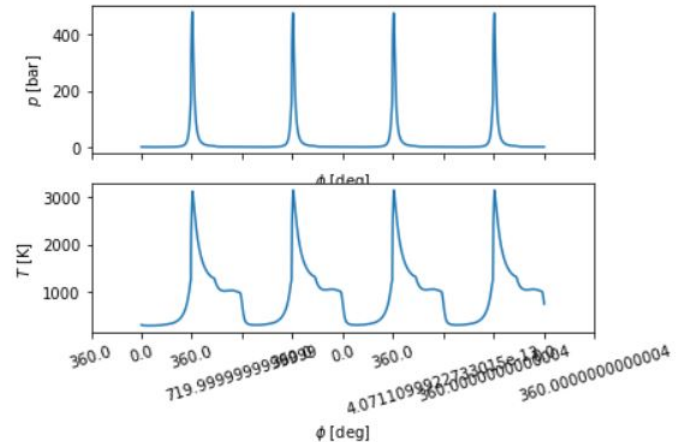


Fig. 8: Temperatura Presion vs Angulo

Tambien se permite mostrar el diagrama real PV para esta configuracion

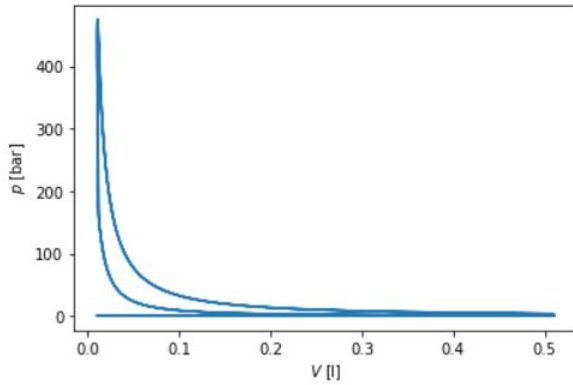


Fig. 9: Diagrama PV real motor diesel

El diagrama de Temperatura vs Entropia

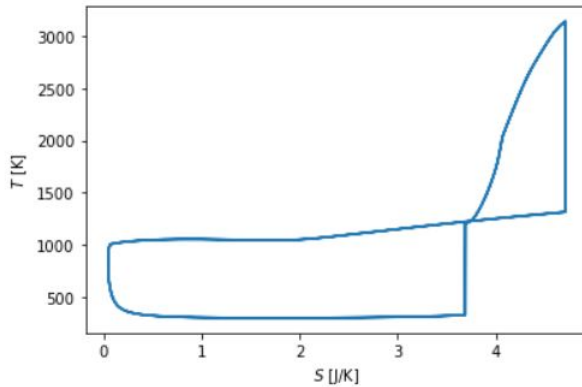


Fig. 10: Diagrama Entropia vs Temeperatura

La composicion de los gases

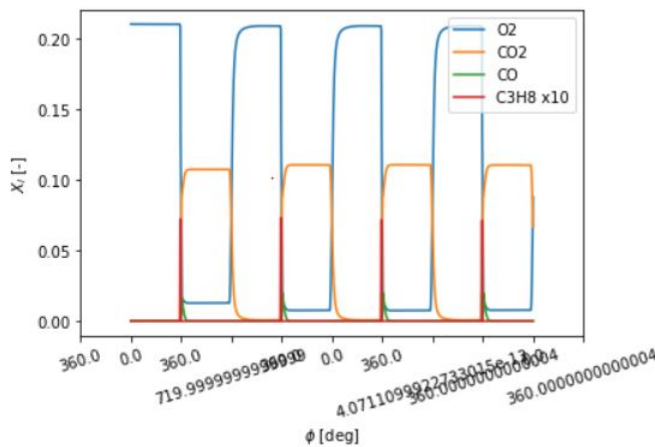


Fig. 11: Composicion de los gases del motor

Finalmente se calcula el trabajo y eficiencias del ciclo

Calor Producido por ciclo =  $37.3 kW$

Potencia de expansion por cilindro =  $22.9 kW$

Eficiencia = 61.6%

Emision de CO =  $5.4 ppm$

## X. VALIDACION DEL MODELO

En este apartado se hace una verificacion del cumplimiento del modelo para ello se emplearon los datos obtenidos en referencia del articulo de M Flekiewicz [10] en el cual se emplea el ensayo experimental del uso de mezcla de combustible metano e hidrogeno con aire, en funcion de adicionar distintos porcentajes de hidrogeno y registrar el comportamiento con el uso de sensores, los parametros que se registraron son:

- Presiones en el cilindro, angulo del cigueñal, identificacion del tope del cigueñal con la carrera superior
- Potencia en las ruedas, flujo de aire en ingreso
- Gases de salida temperatura
- Flujo masico de combustible en el motor

Para ello se emplearon los siguientes sensores Kistler 6121 el cual es un piezo electrico que registra la presion en el cilindro, conectado a un transductor Kistler 5011A el cual envia las señales hacia una tarjeta NI PCI-6143 que esta conectada hacia un computador, tambien se empleo un sensor Kistler 2613B para registrar el recorrido del angulo de cigueñal y su presion.

### A. Metodologia

La presente tabla representa la variacion de los combustibles en cada ensayo experimental con las relaciones estequimetricas de aire y combustible

Fuel	Symbol used on figures	Molecular mass of fuel [kg/kmol]	Stoichiometric air fuel ratio A/F [kg/kg]
LPG 50/50	LPG	51	15.76
Methane	NG	16	17.48
95%CH <sub>4</sub> and 5%H <sub>2</sub> by vol.	95NG5H	15.3	17.596
90%CH <sub>4</sub> and 10%H <sub>2</sub> by vol.	90NG10H	14.6	17.72
80%CH <sub>4</sub> and 20%H <sub>2</sub> by vol.	80NG20H	13.2	18.01
70%CH <sub>4</sub> and 30%H <sub>2</sub> by vol.	70NG30H	11.8	18.37
60%CH <sub>4</sub> and 40%H <sub>2</sub> by vol.	60NG40H	10.4	18.826
50%CH <sub>4</sub> and 50%H <sub>2</sub> by vol.	50NG50H	9	19.424
95%LPG and 5%DME by mass	5DME	50.75	15.466
89%LPG and 11%DME by mass	11DME	50.45	15.101
83%LPG and 17%DME by mass	17DME	50.15	14.73
79%LPG and 21%DME by mass	21DME	49.95	14.482
74%LPG and 26%DME by mass	26DME	49.7	14.168

Fig. 12: Relaciones Combustible Aire

### B. Integracion al modelo

Finalmente teniendo los datos previos experimentales se procedio implementar la simulacion de estados para 4 procesos en este caso los porcentajes de metano e hidrogeno se variaron de distinta manera los cuales son :

- NG : 100%
- 95NG5H : 95% CH<sub>4</sub> y 5 % Hidrogeno
- 50Ng50H : 50% CH<sub>4</sub> y 50 % Hidrogeno

- 70Ng30H : 70% CH<sub>4</sub> y 30 % Hidrogeno

El proceso de insercion de los distintos porcentajes en el modelo del motor se establecieron diferentes configuraciones a los parametros del motor las cuales son:

```
comp_injector = 'CH4:1'
comp_injector1 = 'CH4:0.5, H2:0.5'
comp_injector2 = 'CH4:0.7, H2:0.3'
comp_injector3 = 'CH4:0.95, H2:0.05'
```

Fig. 13:Codigo componentes

Se simulo una primera parte para los parametros del motor, y una segunda parte integrando las variaciones por tipo de combustible obteniendo la siguiente forma 4 tipo de estados enseguida se permite ver una parte del codigo empleado para llamar las variables de volumen y estados de la sustancia empleada en un caso:

```
# write output data
states1.append(r.thermo.state)
V1[n1] = r.volume
m[n1] = r.mass
```

Fig. 14:Codigo variable

### C. Comparacion

Teniendo simulados los datos y registrados en variables se procede a la visualizacion de los mismos en seguida se evidencia la comparacion de los datos reales experimentales de M Flekiewicz y los datos obtenidos por medio de la simulacion:

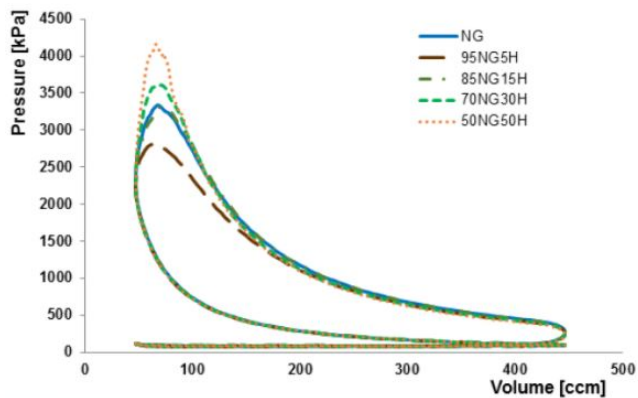


Fig. 15: Datos experimentales de M Flekiewicz Diagrama P-V

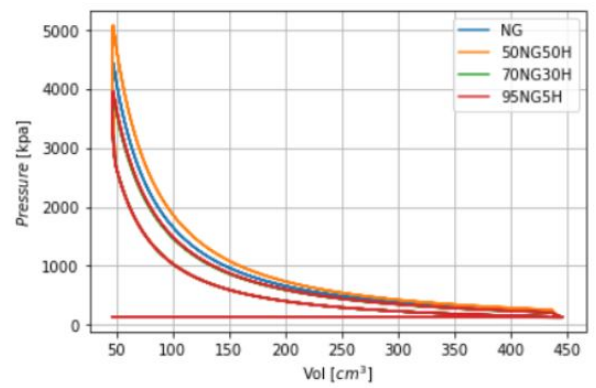


Fig. 16: Datos por simulacion Diagrama P-V

También se permitió conocer la variación de presión y temperatura en función del recorrido del ángulo del motor para los distintos tipos de combustible

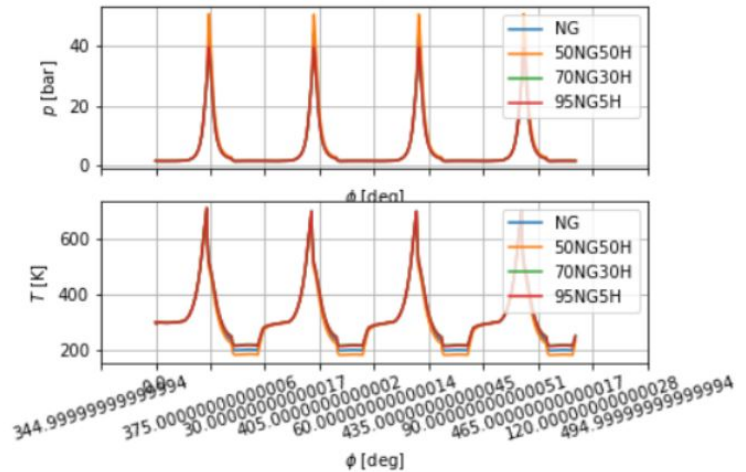


Fig. 17: Datos por simulacion Diagrama P-T vs  $\theta$

Finalmente con la obtención de los registros de presiones en el motor se logró obtener la presión media indicada obteniendo los siguientes resultados que se compararon con los datos experimentales obtenidos por M Flekiewicz:

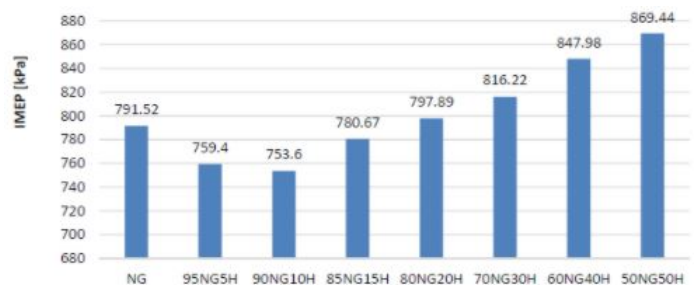


Fig. 18: Datos experimentales para la presión media indicada real

En seguida los daots por simulacion que son:



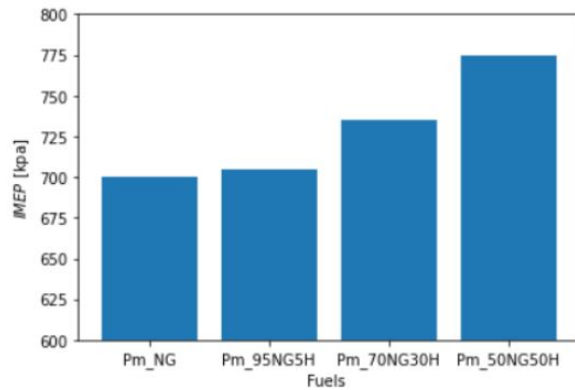


Fig. 19: Datos experimentales para la presión media indicada real

## XI. CONCLUSIONES

- Los resultados resultaron distintos para los distintos regímenes del motor como se esperaba ya que cada uno utiliza un tipo de combustible distinto además de una relación de apertura, y propiedades de temperatura y presión de operación distintas en este caso la eficiencia es mayor para el caso del motor diesel
- Como primer punto de análisis en comparación de los resultados obtenidos se compararon con el programa de uso aircycle ingresando los valores de entrada de la sustancia, ambiente y de salida, también con los parámetros de apertura y salida de las válvulas respecto a los flujos sin embargo los resultados obtenidos no concuerdan con los resultados de la operación actual, los datos a nivel de potencia resultaban muy por encima en el programa de simulación de air cycle a comparación de los resultados obtenidos por el modelo presentado previamente
- Se intentó simular empleando el actual modelo con una sustancia de combustible de  $C_8H_{18}$  sin embargo el modelo de gas de cantera no posee como tal estas sustancias para la modelación de los motores a diesel con el uso del presente modelo se utiliza  $C_3H_8$  y  $CH_4$ , de modo que no se logró realizar una comparación con los modelos suministrados para el desarrollo de las últimas actividades del curso.
- En la validación del modelo la agregación de mezcla en porcentaje de hidrógeno incrementa la eficiencia y la potencia.
- A diferencia del modelo real para mezclas inferiores a 15% esto no perjudica el rendimiento del motor, se intuye esto que es debido a errores respecto al manejo en la programación.
- Se establece que unos de los factores por los cuales las presiones que se obtuvieron respecto al modelo experimental son mayores en el diagrama P-V se debe acerca de que en la simulación no se incluyó los factores de carga y eficiencias mecánicas precisas que se emplearon en la experimentación.
- Actualmente el modelo utilizado con cantera presenta una gran precisión debido al robusto entorno que se puede obtener por medio de las librerías de uso con cantera, sin embargo por errores de programación o extracción de las propiedades no se logra obtener realmente para poco porcentaje de hidrógeno, sin embargo si percibe los mismos patrones y crecimiento exponencial en el incremento utilizando el combustible de hidrógeno.
- A futuro se deja como motivación la comparación con modelos de simulación que utilicen otras características en tipo de combustible como gas natural.

## REFERENCES

- [1] Hua Zhao Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) and Controlled Auto Ignition (CAI) Engines for the automotive industry
- [2] Simulating HCCI engine in Python Cantera Package, Warsaw University Technology.
- [3] Cantera Tutorial Hands On, Libro de apéndice de funciones en cantera
- [4] [url ] <http://Cantera.org> Ejemplos de uso de Python en Combustion
- [5] Reactor Networks D.G Goodwin Division Engineering and Applied Science California Institute of Technology
- [6] <https://skill-lync.com/projects/week-7-auto-ignition-using-cantera-18>, Autoignition utilizando Cantera
- [7] <https://cerfacs.fr/chemistry-repo/pub/canteraajpnb/1-Gas.html>, Utilización de los parámetros de Gas en las funciones de Cantera
- [8] A New 0D Diesel HCCI Combustion Model Derived from a 3D CFD Approach with Detailed Tabulated Chemistry
- [9] Motores de Combustión interna alternativos, Prof. F. Payri
- [10] The use of gaseous fuels mixtures for SI engines propulsion M Flekiewicz and G Kubica 2016 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 148 012064