

Modelo de combustión de motores de encendido por chispa acoplando Cantera a KIVA 4

Modelling of spark ignited internal combustion engines using Cantera and KIVA 4

Carlos Felipe Forigua Rodríguez^{1,a},
Juan Miguel Mantilla González^{1,b}

Resumen. Un reactor a volumen constante (RVC) fue implementado utilizando Cantera dentro de KIVA-4 en un acople multifísico con el fin de simular un motor de combustión interna encendido por chispa. Sólo densidades parciales se intercambian entre KIVA y Cantera. Una densidad parcial inicial se calcula en KIVA para Cantera. Nuevas densidades son generadas por Cantera usando el RVC y son entregadas de nuevo a KIVA. Por último, los cálculos se completan con KIVA en el esquema principal de avance en tiempo. No hay otras modificaciones para las ecuaciones o modelos constitutivos de KIVA-4 o Cantera. La predicción de la curva de presión del motor sigue la tendencia esperada. Para los casos de los motores encendidos por chispa se requiere emplear modelos adicionales para la ignición y mecanismos químicos más completos. Los tiempos de solución de esta implementación son muy inferiores a las de su equivalente comercial y se logran resultados similares.

Palabras claves: Simulación, Modelado, Motor SI, Combustión, Procesos de combustión, Ignición por chispa.

Abstract. A constant volume, zero-dimensional reactor for ideal gas mixtures (CVR) was implemented using Cantera within KIVA-4 with a multiphysics coupling for internal combustion engines. A Spark Ignition engine was simulated. Only partial densities are exchanged between KIVA and Cantera. An initial partial density is calculated by KIVA for Cantera. New densities are generated by Cantera using the CVR and are given back to KIVA. Finally, the calculations are completed by KIVA in the main iteration scheme. No further modifications for constitutive equations or models were made for KIVA-4 or Cantera. Results for the spark engine have not been satisfactory for the pressure curve. For the spark ignited cases is required to employ additional models for ignition. The time needed to get a solution has been greatly reduced compared to a simulation using similar software

Keywords: Simulation, Modeling, HCCI, Engines, Combustion, Combustion processes, Spark Ignited.

Mathematics Subject Classification: 76V05.

Recibido: mayo de 2016

Aceptado: mayo de 2016

¹Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

^acfforiguar@unal.edu.co

^bjmmentillag@unal.edu.co

1. Introducción

Las emisiones contaminantes en el aire constituyen un problema que afecta la salud humana y el ambiente. Las afecciones para la salud humana varían desde la inflamación pulmonar, infección respiratoria aguda, cáncer, muerte prematura, agravamiento de la enfermedad cardiovascular, daños al sistema nervioso y otros órganos, entre otros [17]. Los efectos sobre el ambiente incluyen enfermedades respiratorias en animales, lluvia ácida, eutrofización de aguas costeras, destrucción de materiales fabricados por el hombre, reducción de la visibilidad, daño al follaje de árboles y cultivos, entre otros. [17].

La combustión de hidrocarburos juega un papel importante como fuente de emisiones contaminantes en el aire. La agencia de protección ambiental de los Estados Unidos, la *Environmental Protection Agency* (EPA) incluye en las fuentes móviles [16] vehículos y equipos que queman combustibles tales como Diésel, gasolina y otros. La contribución porcentual de las fuentes de emisiones se resume en la Figura 1. De dicha figura se puede concluir que la combustión constituye la fuente principal de emisiones de monóxido de carbono, plomo, óxidos de nitrógeno, dióxido de sulfuro y los compuestos orgánicos volátiles. Sin mencionar que es una fuente importante de Material Particulado PM 2.5.

National Multipollutant Emission Comparison by Source Sector in 2008

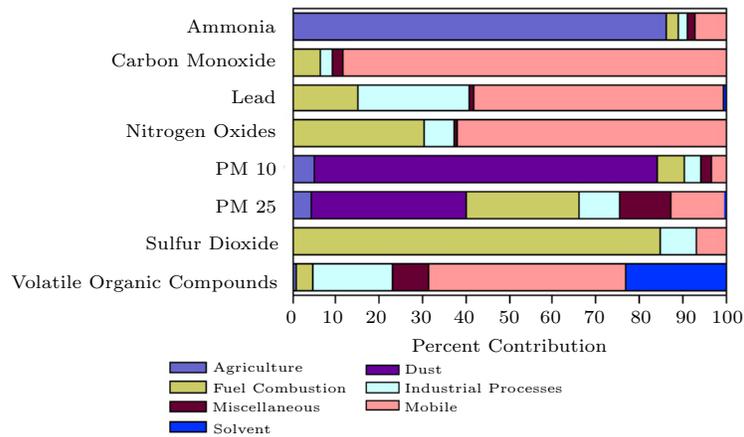


Figura 1: Comparación de múltiples emisiones de acuerdo al sector responsable en Estados Unidos [16].

Las fuentes móviles tradicionalmente han utilizado motores de combustión interna como equipo de potencia.

La posibilidad de eliminar los elementos contaminantes desde la combustión misma existe [36]. Para lograr reducir las emisiones es necesario comprender

mejor los fenómenos físicos y químicos presentes en la cámara de combustión [36]. Cuando se tiene una descripción más exacta de los eventos que se dan durante la combustión se pueden hacer de forma más eficiente diseños de experimentos y pruebas computacionales que permitan mejorar las tecnologías existentes. Las pruebas computacionales o simulaciones tienen la gran ventaja de que permiten hacer pruebas que experimentalmente pueden resultar muy costosas, infactibles o que requieren un estudio previo antes de llevarse a cabo.

Simular los fenómenos presentes en la cámara de combustión presenta una dificultad intrínseca expresada en el acople de diferentes fenómenos físicos interdependientes tales como la dinámica de fluidos, la transferencia de calor, la transferencia de masa, cambios de fase y cinética química. El acople de éstos fenómenos se hace por medio de modelos que se simulan por software.

Actualmente existen programas computacionales con modelos que acoplan y simulan los fenómenos que suceden al interior del motor. Los programas más representativos en 3 dimensiones son KIVA, Star-CD, y Ansys-Fluent, Converse, entre otros. Para esta investigación se usará KIVA-4 [48]. KIVA es un programa que predice el funcionamiento de motores de combustión interna simulando su funcionamiento a través del acople de las ecuaciones de conservación y de formación de especies químicas incluyendo los fenómenos turbulentos y difusivos que acompañan a la combustión de fluidos con chorro de combustible. KIVA también es capaz de simular el movimiento de las válvulas [6] en geometrías complejas [4].

Otros programas capaces de resolver las ecuaciones que describen la cinética química son CHEMKIN o Cantera, que solucionan de forma rápida y eficiente problemas asociados a la combustión. Dichos programas posibilitan la introducción de mecanismos cinéticos de cualquier tamaño, contrario a lo que permite KIVA-4. Para efectos de las simulaciones KIVA-4 sólo acepta el uso de mecanismos cinéticos globales.

En éste trabajo se busca modificar KIVA-4 de tal modo que admita mecanismos cinéticos en fase gaseosa de un número de especies arbitrario, con el fin de lograr una mejor predicción de la tasa de liberación de calor que se da al interior de la cámara de combustión. Para lograr este objetivo se anula el cálculo de las tasas de reacción en KIVA y se resuelve la cinética química con las herramientas provistas por Cantera.

2. Fundamentos matemáticos y físicos

2.1. Principios fundamentales y notación

Por coherencia en este texto se usarán las ecuaciones de los principios generales. La deducción de estos principios puede encontrarse en [27]. Los principios fundamentales acá empleados son el de balance y el teorema de transporte de Reynolds. El principio de balance es usado para calcular el cambio en la intensidad de una función. Para una discusión más extendida acerca de este principio

de balance se puede consultar [24]. Se hace uso del teorema de transporte de Reynolds [19, eq. 1.4], [27, eq. 11] para paredes móviles [51, p. 133]. Éste está demostrado en varios textos de dinámica de fluidos fundamental, más no todos tienen en cuenta fronteras móviles [24]. En este caso se ha mantenido la convención de Holst debido a que las expresiones de ambos autores son equivalentes. La equivalencia se encuentra cuando se usa la regla de integración de Leibniz (*Leibniz integral rule*).

Esta sección se basa extensamente en [27] y reproduce la misma notación dado que es coherente con trabajos que describen los modelos de KIVA [8].

Para empezar se denota un espacio Euclidiano n -dimensional como R^n y un punto el cual se denota $x = (x_1, \dots, x_n)$ donde $x_i \in R$. La norma de R^n se denota como $|x| = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{1/2}$. El conjunto $\Omega \subset R^n$ denota un subconjunto acotado de R^n y el contorno de dicho subconjunto es $\partial\Omega$.

Las funciones escalares (tensores de orden cero) se denotan como $f(x) : \Omega \rightarrow R$, las funciones vectoriales (tensores de primer orden) como $\mathbf{f}(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow R^n$ y las funciones matriciales (tensores de segundo orden) como $\bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbf{L}(R^n, R^n)$. Para este documento se empleará la convención de sumatoria de Einstein donde sea que un subíndice se repita en una suma de componentes tensoriales. Por ejemplo $f_{ij}g_j$ denota $\sum_{j=1}^n f_{ij}g_j$.

Se emplean las siguientes notaciones para los productos tensoriales: El producto punto (escalar) de dos vectores se denota $\mathbf{f} \cdot \mathbf{g} = f_i g_i$. El producto diádico (tensorial) de dos vectores se denota $(\mathbf{f}\mathbf{g})_{ij} = f_i g_j$. El producto de tensores de primer y segundo orden se denota $(\cdot)_i(\bar{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{g})_i = f_{ij}g_j$ y $(\mathbf{g} \cdot \bar{\mathbf{f}})_i = g_j f_{ji}$. El producto interno es la doble suma denotada como $\mathbf{f} : \bar{\mathbf{g}} = f_{ij}g_{ji}$.

Se denotará la derivada parcial como $D_i f = \partial f / \partial x_i$. Y al definir el vector $\nabla = (D_1, \dots, D_n)$ se pueden definir los operadores gradiente, la divergencia y deformación como productos tensoriales: $gradf = \nabla f = (D_1 f, \dots, D_n f)$, $div\mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{f} = D_i f_i$, $(grad\mathbf{f})_{ij} = (\nabla\mathbf{f})_{ij} = D_j f_i$ y $def\mathbf{f} = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{f} + (\nabla\mathbf{f})^T]$

3. Modelos matemáticos y modelos computacionales

La derivación de las ecuaciones de los fluidos se puede hacer desde dos perspectivas diferentes, la perspectiva de un observador estático o Euleriano (espacial) y un observador que se mueve con el flujo o Lagrangiano (material). Las ecuaciones Eulerianas describen en gran parte la fase gaseosa usando un sistema de coordenadas estático. Las ecuaciones Lagrangianas pueden describir el chorro de combustible usando un sistema coordenado que se mueve con el flujo. En este texto se abordará la descripción Euleriana dado que no se modifica la perspectiva Lagrangiana de las ecuaciones.

3.1. Descripción fenomenológica

En este apartado se exponen los principios generales de conservación aplicados al gas confinado en un motor de combustión interna.

3.1.1. Conservación de masa

Dado que KIVA-4 soluciona un fluido multicomponente, reactivo y con chorros de combustible, se establece que el cambio en densidad de la masa se da por advección hacia la región de interés y con nuevos términos fuente y de transporte en el principio de conservación. Dada la función densidad ρ del medio continuo, donde $\rho(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, \infty) \mapsto R$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{\rho}^s. \quad (1)$$

Donde $\dot{\rho}^s$ representa el término fuente por la evaporación del chorro de combustible. Dado que el flujo está compuesto de varias especies químicas, la conservación de masa también se debe aplicar a cada una de ellas. Para cada una de las especies se puede derivar del principio de conservación

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \dot{\rho}^s \delta_{m1}. \quad (2)$$

La expresión 2 es la ecuación de continuidad para la especie m . Donde ρ_m es la densidad de la especie m . Como se trata de un flujo multicomponente, además del transporte advectivo en la expresión 1 se tiene transporte difusivo. Dicho transporte corresponde al tercer término de 2 y está modelado por la ley de Fick con un único coeficiente binario D . El término fuente volumétrico de las reacciones químicas para la especie m es $\dot{\rho}_m^c$. Este término es la tasa en la que se cambia la masa de la especie m como producto de las reacciones químicas al interior de la celda. Mientras que $\dot{\rho}^s \delta_{m1}$ es el término fuente de masa volumétrico aportado por la evaporación del chorro de combustible. En esta última expresión δ es el delta Kronecker y el subíndice 1 corresponde a la especie que se está evaporando. El término δ_{m1} es cero para todas las ecuaciones excepto para la especie de la que está compuesta el chorro de combustible. De este modo se asegura que el compuesto químico contenido en las gotas del chorro inyectado se añada como fuente volumétrica solamente a la ecuación que corresponde al compuesto del combustible. Si se hace una suma de todas las ecuaciones para la especie m se tiene en total la ecuación de conservación de masa para todo el sistema 1.

3.1.2. Conservación de momento

La aplicación de la segunda ley de Newton al movimiento del medio continuo da lugar a esta ecuación. La suma de las fuerzas cambia la cantidad de movimiento de un cuerpo. Esto se hace en términos de la velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ en el punto $\mathbf{x} \in \Omega \subset R^3$ en el tiempo $t \in [0, \infty)$ denotada como $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) =$

$(u_1(\mathbf{x}, t), u_2(\mathbf{x}, t), u_3(\mathbf{x}, t))$ equivalente a $(dx_1/dt, dx_2/dt, dx_3/dt) = d\mathbf{x}/dt$ donde $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, \infty) \mapsto R^3$.

Sea $\rho\mathbf{u}$ la cantidad de momento por unidad de masa y $\rho\mathbf{u}\mathbf{u}$ el vector de flujo advectivo de dicha propiedad en un volumen infinitesimal de fluido. Denotando el tensor fuente de deformación de la superficie $\partial D(t)$ como $\mathbf{Q}_s = \bar{\mathbf{T}}$. Estos términos se relacionan bajo el principio de conservación para obtener el momento total del sistema.

Para incorporar otros efectos se hacen varias precisiones. En primer lugar se describe un flujo compresible. Segundo, se tiene como fuente de momento volumétrica el chorro de combustible evaporándose en el gas y el efecto de la fuerza gravitacional. Por lo tanto se deben añadir los términos fuente $\mathbf{g} + \mathbf{F}^s/\rho$, donde g es la aceleración de la gravedad y \mathbf{F}^s es la rata de ganancia de momento por unidad de volumen debido al chorro de combustible.

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = \nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}}) + \rho\mathbf{g} + \mathbf{F}^s. \quad (3)$$

A continuación, se hace la suposición de que el fluido es Newtoniano [8]. Esto implica que $\bar{\mathbf{T}}$ está descrito por el tensor de esfuerzo en fluidos Newtonianos. Dicho tensor se define de acuerdo a 4. En donde $\bar{\mathbf{I}}$ es el tensor unitario, $\bar{\sigma}$ es el tensor de esfuerzo cortante viscoso dado en 5. Con μ como el primer coeficiente de viscosidad y siendo λ el segundo coeficiente de viscosidad.

$$\bar{\mathbf{T}} = -p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\sigma}, \quad (4)$$

$$\bar{\sigma} = 2\mu \operatorname{def} \mathbf{u} + \lambda \operatorname{div} \mathbf{u}\bar{\mathbf{I}} = \mu[\nabla\mathbf{u} + (\mathbf{u})^T] + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\bar{\mathbf{I}}. \quad (5)$$

Se sustituyen los nuevos valores en 3 para obtener:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho\mathbf{g} + \mathbf{F}^s - \nabla p + \nabla \cdot \bar{\sigma}. \quad (6)$$

El flujo dentro del motor es turbulento, por lo tanto se deben incluir modelos que alteran la ecuación 6 para poder obtener soluciones de la misma. En este trabajo se empleará el modelo de turbulencia de las ecuaciones de Navier Stokes promediadas por Reynolds (*Reynolds Averaged Navier Stokes* ó RANS) [43, p. 133]. Usando RANS las ecuaciones de conservación son promediadas en el tiempo. Las ecuaciones promediadas generan nuevas variables que requieren de más ecuaciones para formar un sistema cerrado de solución. Resolver éstas ecuaciones permite obtener variables promedio en el tiempo sobre diferentes ciclos tales como los que se dan en los motores de combustión interna.

De la familia de modelos RANS, se emplea el RNG $k - \varepsilon$ modificado. Las ecuaciones RNG- $k - \varepsilon$ son derivadas las ecuaciones para escalas pequeñas de Navier-Stokes sobre el campo de flujo fluctuante [52], [53]. Por medio de estas se llega a una expresión similar a la ecuación 7 que es la que se resuelve en KIVA.

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho\mathbf{g} + \mathbf{F}^s - \frac{1}{\alpha^2}\nabla p + \nabla \cdot \bar{\sigma} - A_0\nabla \left(\frac{2}{3}\rho k \right). \quad (7)$$

Desde KIVA-II se emplean las ecuaciones de combustión discutidas en la introducción, con dos características adicionales incluidas en KIVA-4 consignadas en la ecuación 7. La primera, corresponde a $\frac{1}{\alpha^2}\nabla p$ se atribuye al método de escalado del gradiente de presión *Pressure Gradient Scaling* (PGS) [7, p. 2] [6, Ap. A]. En segundo lugar, dos ecuaciones de modelado de la turbulencia están acopladas a las ecuaciones de combustión a través de un parámetro A_0 escalar. De estos dos términos se tratará primero el relacionado con el PSG y posteriormente el de la turbulencia que incluye el término A_0 y k .

El parámetro A_0 en la ecuación 7 activa o desactiva el acople de las ecuaciones de turbulencia correspondiente al término $A_0 \left(\frac{2}{3}\rho k \right)$. Esta última expresión corresponde al transporte de momento debido a las fluctuaciones turbulentas. Si α se fija a uno, y A_0 se iguala a cero, entonces se obtienen las ecuaciones de combustión para el caso laminar de la sección anterior 6 [8, 27]. En 7 el término k corresponde a energía cinética turbulenta y el término ϵ es la rata de disipación de la energía cinética turbulenta. Estos términos están descritos por 8 y 9 respectivamente.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}k) = -\frac{2}{3}\rho k \nabla \cdot \mathbf{u} + \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\nu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \rho\epsilon + \dot{W}^s, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho\epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\epsilon) = -\left(\frac{2}{3}c_{\epsilon 1} - c_{\epsilon 3} \right) \rho\epsilon \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\nu}{Pr_e} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} \left(c_{\epsilon 1} \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - c_{\epsilon 2} \rho\epsilon + c_s \dot{W}^s \right). \quad (9)$$

Los valores $c_{\epsilon 1}, c_{\epsilon 2}, c_{\epsilon 3}, c_{\epsilon s}, Pr_k$ y Pr_e son constantes que se obtienen a partir de experimentos y consideraciones teóricas. Éstos valores cambian según el modelo de turbulencia empleado [6, 8]. Mientras que W^s corresponde al término fuente debido a interacciones con el chorro de combustible y está descrito con detalle en [8].

Las dos ecuaciones previas han sido modificadas para incluir los efectos de la expansión volumétrica; e interacciones entre el chorro de combustible y la turbulencia [8, p. 5]. Este modelo fue mejorado [25] con el modelo RNG- $k - \epsilon$ que fue implementado en KIVA-3V [6, p. 61].

Como se mencionó, el uso de éstos modelos permite calcular un campo que describe el fluido. Estas ecuaciones de Navier Stokes se pueden acoplar con modelos de otros fenómenos añadiendo nuevos términos a las mismas. Al incluir nuevos términos en las ecuaciones se deben diseñar los métodos de acople en función de los modelos a incluir.

3.1.3. Conservación de la energía

KIVA resuelve la ecuación para la energía interna específica I excluyendo la energía química [8]. I es descrita por la relación de la energía total y la energía interna 10.

$$E = I + \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}}{2}. \quad (10)$$

De forma análoga a la ecuación de momento, la turbulencia influye directamente esta ecuación. KIVA resuelve el principio de conservación para la propiedad ρI y añade unos términos fuente con respecto a la turbulencia. En [27, p. 11] se describe este procedimiento. KIVA incluye entonces la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} I) = -p \nabla \cdot \mathbf{u} + (1 - A_0) \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s - \nabla \cdot \mathbf{J} + A_0 \rho \varepsilon. \quad (11)$$

Donde el vector de flujo advectivo es $\rho \mathbf{u} I$. El término \dot{Q}^c corresponde al término fuente debido a la tasa de liberación de calor de las reacciones químicas y \dot{Q}^s es el término fuente por las interacciones con el chorro de combustible. Un tratamiento completo de las ecuaciones de las reacciones químicas ya ha sido detallado por diferentes autores [8, 13].

Finalmente \mathbf{J} es la suma de las contribuciones debido a la difusión de calor y la entalpía y se muestra en 12. La difusión de calor se asume como la ley de Fourier y la difusión de la entalpía con el término de transporte ($D \nabla h$) a partir de la ley de Fick. Donde T es la temperatura del fluido, K es la constante de conducción de Fourier, D es el coeficiente transporte difusivo de la entalpía y h_m la entalpía específica de la especie m .

$$\mathbf{J} = -K \nabla T - \rho D \sum_m h_m (\rho_m / \rho). \quad (12)$$

Las ecuaciones que relacionan los fenómenos químicos constituyen un sistema completo y el acople con el fluido ya está incluido en algunos términos de las ecuaciones de conservación de energía y de masa de las especies. Como ecuación constitutiva adicional se añade la ley de los gases ideales la cual no aporta variables adicionales a ser resueltas.

Otros modelos utilizados para ayudar a resolver las ecuaciones planteadas se explican a continuación.

3.2. Modelos adicionales

3.2.1. Movimientos del dominio

Los movimientos dentro de un motor de combustión interna son básicamente dos. El primero es el movimiento del pistón dentro de la cámara de combustión. El segundo es el movimiento de las válvulas dentro del dominio para permitir o evitar la entrada y salida de gases. KIVA-4 puede simular estos movimientos

usando algoritmos. Estos algoritmos cambian la discretización de acuerdo al movimiento de las superficies dentro del motor [6, p. 11]. Cuando una superficie se mueve, se cambian las dimensiones de las celdas adyacentes para acomodar el nuevo dominio espacial.

3.2.2. Chorro de combustible

Los tres términos fuente $\dot{\rho}_m^s$, \mathbf{F}^s y \dot{Q}^s junto a \dot{W}^s representan los intercambios de masa, momento y energía respectivamente entre la especie inyectada m , y el fluido dentro de la cámara de combustión [27, p. 19].

3.2.3. Combustión y formación de especies

KIVA supone 2 tipos de especies. El primer tipo corresponde a las especies que permanecen en estado gaseoso durante toda la simulación. Para estas especies se deben introducir las propiedades de entalpía, entalpía de formación y masa molecular. El segundo tipo de especies son las de fase líquida. Las especies en dicha fase no reaccionan sólo se tienen en cuenta para el chorro de combustible.

La ignición por chispa se hace durante una ventana de tiempo y en un espacio del dominio definido por el usuario [8, p. 81]. En este volumen se incrementa la energía específica de las celdas. Dicho incremento se da desde el salto de la chispa y continúa de forma proporcional al tiempo de duración de la chispa o hasta que la celda alcance $1600K$. Sin embargo, dicho modelo de encendido no siempre es eficaz y se requieren de otros métodos. Tales como no permitir que el combustible y el oxígeno coexistan en la misma celda donde está la punta de la bujía [8, p. 81].

Se tienen cuatro módulos de combustión originales. El primero consiste en un módulo de cinética química en el cual se introducen reacciones de cinética química con poca complejidad [8, Ap. I]. El segundo módulo de equilibrio se emplea para reacciones extremadamente rápidas [8, Ap. J]. El tercer módulo es un modelo de combustión turbulenta que es muy dependiente de las condiciones experimentales de donde se extraen sus constantes. Finalmente se tiene el módulo de formación de material particulado [6, p. 65].

4. Modelo empleado para la cinética química de gases y Cantera

Cantera es un conjunto de herramientas de software orientado a objetos para la cinética química, termodinámica, y los procesos de transporte [23]. Cantera incluye varias clases que resuelven reactores con volumen, temperatura y presión variables, interacciones con las paredes de los reactores e intercambios de masa y energía [22]. Los mecanismos químicos que Cantera soporta incluyen muchos tipos de reacciones y sus representaciones [22]. Esto permite incluir interacciones más complejas en la cinética que las que KIVA permite en su forma

original.

El modelo de reactor utilizado es un gas ideal, adiabático e independiente de los reactores de los alrededores, como en KIVA [8]. Cada celda se considera un reactor de volumen constante, sin intercambio de masa o cualquier trabajo ejercido sobre él durante el cálculo de la cinética química.

4.1. Descripción fenomenológica

Estas ecuaciones tratan solamente del caso del reactor a volumen constante RVC pues es el que se emplea en este trabajo.

$$\frac{dT(Y, T)}{dt} = \frac{-\sum_m \left(\frac{U_m}{W_m} \frac{dY_m(Y, T)}{dt} \right)}{\sum_m (\bar{c}_{v,m}(T, t))}. \quad (13)$$

Las incógnitas del RVC son la composición y la temperatura de la nueva mezcla. Estas incógnitas son resueltas ahora por Cantera.

Además m representa cada una de las especies en el mecanismo químico y Y_m la fracción de masa de la especie m .

Como tanto el operador derivado y la suma son expresiones lineales, después de la diferenciación, se obtiene la siguiente ecuación:

Para un gas ideal $\bar{c}_v(Y_m, T) = \sum_m (Y_m C_{v,m}/W_m)$ y el hecho de que la mezcla está reaccionando en el tiempo $\bar{c}_v(Y_m, T) = \bar{c}_v(t, T)$ entonces:

$$\frac{dh_m(T)}{dt} = \frac{dh_m(T)}{dT} \frac{dT}{dt} = \bar{c}_v(T, t) \frac{dT}{dt}. \quad (14)$$

También el término $\frac{dY_m}{dt}$ en 13 se conoce como la tasa neta de producción de especies. Esta tasa de producción de especies neta es calculada por Cantera usando mecanismos químicos; los cuales son un conjunto de reacciones químicas de la forma:

$$\sum_m a_{m,r} x_m \rightleftharpoons \sum_m b_{m,r} x_m. \quad (15)$$

Donde a y b son los coeficientes estequiométricos al lado izquierdo y derecho de la ecuación de reacción, m es cada una de las especies, r el número de reacciones en el mecanismo químico y x es la fracción molar. Éste último es definido como:

$$\frac{dY_m}{dt} = \frac{W_m}{\rho} \sum_r (b_{r,m} - a_{r,m}) \dot{\omega}_r, \quad (16)$$

ρ es la densidad media de la mezcla. $\dot{\omega}_r$ se conoce como la rata de progreso de la reacción r . Se debe tener en cuenta que la rata de progreso depende de fracciones másicas y W_m es la masa molar de la especie m . Dicha rata se define como:

$$\dot{\omega}_r = \kappa_{f,r} \prod_m \left(\frac{\rho Y_m}{W_m} \right)^{a_{m,r}} - \kappa_{b,r} \prod_m \left(\frac{\rho Y_m}{W_m} \right)^{b_{m,r}}, \quad (17)$$

$\kappa_{f,r}$ es el coeficiente de velocidad de reacción hacia adelante y $\kappa_{b,r}$ es el coeficiente de velocidad de reacción hacia atrás. Éstos están definidos en términos de la ley de Arrhenius:

$$\kappa_{f,r} = A_{f,r} T^{\zeta_{f,r}} \exp(-E_{f,r}/T), \quad (18)$$

$$\kappa_{b,r} = A_{b,r} T^{\zeta_{b,r}} \exp(-E_{b,r}/T). \quad (19)$$

Donde los subíndices f y b denotan las ratas de reacción hacia adelante y hacia atrás respectivamente. $E_{f,r}$ y $E_{b,r}$ son las temperaturas de activación. $A_{f,r}$ y $A_{b,r}$ son los factores pre-exponenciales. Finalmente $\zeta_{f,r}$ y $\zeta_{b,r}$ son constantes para incluir la dependencia del factor pre-exponencial con respecto a la temperatura. Estas constantes están incluidas en el mecanismo químico.

En esta etapa todas las ecuaciones anteriores dependen de temperatura y composición. En un reactor cerrado la masa de la mezcla de gases se mantiene constante $\frac{dMa}{dt} = 0$, por lo que la suma de las fracciones másicas en la mezcla es también constante.

$$Ma = \sum_m Y_m * W_m. \quad (20)$$

4.2. Esquema numérico de Cantera

La librería de Cantera consta de 2 capas: la capa numérica y la capa de registro. La capa de registro es la que se encarga de manejar los mecanismos químicos, propiedades termodinámicas, ecuaciones de estado, propiedades de la mezcla y demás. La capa numérica acopla las rutinas que se encargan de resolver las ecuaciones planteadas por el usuario haciendo uso de las librerías de Cantera con rutinas de integración numérica encargadas de encontrar las soluciones a dichas ecuaciones [44]. La rutina numérica por defecto de Cantera es CVODE [14, 44].

CVODE se encarga de resolver sistemas de ecuaciones diferenciales de valor inicial rígidos y no rígidos de la forma $y' = Fn(t, y)$. Los métodos empleados por CVODE son de paso y orden variable. CVODE emplea diferentes métodos de discretización dependiendo del tipo de sistema y diferentes esquemas de iteración. CVODE también emplea diferentes métodos de solución de sistemas lineales. Esta librería también funciona en paralelo [30]. CVODE disminuye el paso de tiempo si el sistema de ecuaciones no converge hacia una solución. También se cambia el orden del método de integración en caso de que la solución anterior arroje un error muy grande de forma sucesiva al probar las soluciones o si el cambio de método permite un paso de tiempo más largo en la siguiente iteración temporal. [29].

5. Planteamiento del problema y soluciones

Este apartado tiene 2 partes principales: plantear el problema y finalmente exponer la hipótesis del trabajo. Para explicar la problemática objeto de este proyecto se describen de forma breve los modelos de turbulencia. Luego de esta explicación se muestra la relación de estos modelos con la cinética química. Para terminar la primera parte se hace mención a las principales clasificaciones de los modelos de cálculo de combustión en fase gaseosa. Para la segunda parte se describen y justifican las modificaciones hechas a KIVA para solucionar el problema planteado.

5.1. Planteamiento del problema

Para aplicar el modelo RANS a las ecuaciones de conservación de la masa, momento y energía se debe hacer uso del promedio en tiempo (Reynolds) y el promedio de las variables dependientes ponderando la densidad (Favre). El promedio de Reynolds simplifica las ecuaciones para el caso incompresible, sin embargo el promedio de Favre se hace necesario para el fluido compresible pues acerca las ecuaciones al flujo incompresible. Para llegar a dicha simplificación se hace una descomposición de las variables y se usan varias propiedades que se describen a continuación: El promedio de Reynolds centra la variable dependiente en el tiempo F y la descompone en una parte media \bar{F} y otra fluctuante F' . Está descrito por [3]

$$F \equiv \bar{F} + F'. \quad (21)$$

El promedio de Favre centra la variable dependiente en el tiempo ponderando la densidad F y la descompone en una parte media \tilde{F} y otra fluctuante F'' . El promedio de Favre está descrito por [2]

$$F \equiv \tilde{F} + F''. \quad (22)$$

Donde la línea sobre el símbolo (ej. $\overline{\rho F}$) denota promedios usando la descomposición de Reynolds. Éstas se valen de relaciones auxiliares detalladas en [1].

Usando las relaciones de Reynolds para ρ y P y el Promedio de Favre para u se obtienen ecuaciones intermedias para masa, momento y energía con términos abiertos [1]. Sin embargo las ecuaciones pueden cerrarse [13, p. 692] [43, p. 141] [18] y quedan de la siguiente manera:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{I})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{I}) = -\bar{p}\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + (1 - A_0)\bar{\sigma} : \nabla\tilde{\mathbf{u}} + \bar{Q}^c + \bar{Q}^s - \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}} + A_0\bar{\rho}\varepsilon. \quad (23)$$

Sin embargo el uso de ρ , P y T promediados en el tiempo induce una fuerte influencia sobre el término fuente químico $\underline{\omega}$ y por tanto sobre el término fuente en la ecuación de la energía promediada \bar{Q}^c . Esta interferencia de las variables promediadas lo desarrolla Poinso [43, p. 146]. De tal modo que la rata de

reacción más simple, para una ecuación cinética simple e irreversible entre un Combustible C y un oxidante O, con la siguiente forma:



Implica que la rata de reacción promedio más simple $\overline{\dot{\omega}_F}$ es, según Poinso:

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_F = & - A_1 \bar{\rho}^2 \tilde{T}^{\beta_1} \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp\left(\frac{-T_A}{\tilde{T}}\right) \left[1 + \frac{\widetilde{Y''_F Y''_O}}{\widetilde{Y_F Y_O}} + \right. \\ & (P_1 + Q_1) \left(\frac{\widetilde{Y''_F T''}}{\widetilde{Y_F \tilde{T}}} + \frac{\widetilde{Y''_O T''}}{\widetilde{Y_O \tilde{T}}} \right) + \\ & \left. (P_1 + Q_1 + P_1 Q_1) \left(\frac{\widetilde{T''^2}}{\widetilde{\tilde{T}^2}} + \frac{\widetilde{Y''_F T''^2}}{\widetilde{Y_F \tilde{T}^2}} + \frac{\widetilde{Y''_O T''^2}}{\widetilde{Y_O \tilde{T}^2}} \right) + \dots \right]. \end{aligned} \tag{25}$$

Entonces como se observa en la ecuación 25, la rata de reacción promedio $\overline{\dot{\omega}_F}$ no puede ser fácilmente expresada en función de las fracciones másicas medias \tilde{Y}_F y \tilde{Y}_O , la densidad media $\bar{\rho}$ y la temperatura media \tilde{T} . Esta última ecuación presenta varias dificultades. Entre estas se incluyen el cerrar los nuevos términos oscilatorios producto de la expansión [43, eq. 1.48]. Sin mencionar los errores de truncamiento en un sistema tan rígido de ecuaciones. Cuando un sistema es rígido, un amplio rango de frecuencias ejercen una gran influencia sobre la solución. De este modo, el truncamiento puede no ser representativo del sistema cinético real. Sin mencionar que la última expresión es válida sólo para una sola reacción, si se hace cualquier intento por emplear una cinética más detallada se crearán expresiones mucho más complicadas. Adicional a lo anterior se tiene que éstos términos hacen parte de la ecuación de energía [43, p. 15]. Pues ésta expresión se usa para calcular $\overline{Q^c}$ en la ecuación promediada de energía 23. Esta ecuación tiene aportes de los movimientos del fluido incluida la turbulencia. Adicional a lo anterior, los coeficientes de difusión son función de la temperatura y la temperatura es una función de la energía. Se tiene entonces que los fenómenos térmicos, difusivos y turbulentos están interrelacionados, son interdependientes y juegan un papel fundamental en el fenómeno de la combustión. En concreto, estos efectos se expresan de forma tangible en la velocidad a la que se da la combustión.

Como se mencionó, la rata de reacción también es producto de las interacciones que se dan entre la turbulencia y la difusión a nivel micro. De la teoría de llamas laminares premezcladas y no premezcladas se sabe que si el flujo es muy rápido (Tiempo característico del fluido bajo) comparado con la velocidad a la que ocurre un cambio significativo en la composición química (Tiempo característico de la reacción alto) la turbulencia va a inhibir las reacciones químicas pues dos partículas que traten de hacer una reacción química no van a estar juntas el tiempo suficiente como para lograr reaccionar.

Para hacer comparaciones de tiempos característicos se emplea al número de Damköhler. El número de Damköhler es la razón entre la escala de tiempo del flujo y la escala de tiempo de la reacción química. Si el flujo es muy rápido, tiene una escala de tiempo pequeña y por lo tanto $Da \rightarrow 0$. Bajo este régimen las fuerzas inerciales y viscosas dictaminan el comportamiento del flujo. Si por el contrario, la liberación de energía es más rápida, las especies tienen escala de tiempo pequeña y por lo tanto $Da \rightarrow \infty$. La liberación de energía es el factor dominante en alterar el estado del flujo. Existen varias formas de calcular el número de Da [10, 13, 26, 43]. Varias de ellas involucran los términos turbulentos de la ecuación de energía contra la liberación de energía del término cinético de esta misma ecuación. De este modo se caracteriza el tipo de combustión que se está dando en el dominio.

Es por esto que se tienen varios enfoques para atacar el problema de la combustión turbulenta. Dichos enfoques dependen del tratamiento que se le haya dado a las ecuaciones que gobiernan el fenómeno. Para este caso se usan las ecuaciones de Navier Stokes promediadas por Reynolds (RANS, Reynolds Average Navier Stokes) cuya deducción de forma general es descrita por Poinso [43, p. 140]. Para RANS se tienen los siguientes tres tipos de modelos de acople de combustión turbulenta [43, p. 148] [50, p. 212]:

1. **Modelos de análisis geométrico:** El frente de llama se identifica como una superficie geométrica que evoluciona en un campo de flujo turbulento. Corresponde a los antecedentes que tienen el modelo de la ecuación G. Una implementación representativa es el híbrido KIVA-CHEMKIN-G (o modelo GAMUT) [9]. Éste tipo de modelos además de requerir una malla fina obtienen resultados similares a los basados en los modelos de mezcla turbulenta [9] mencionados a continuación.
2. **Modelos de mezcla turbulenta:** Usa la suposición de que las escalas de tiempo químicas son mucho más cortas que las escalas de tiempo del fluido (Números grandes de Damköhler). En éstos se hace uso de tiempos característicos para modificar las ratas de reacción obtenidas solamente a partir de los mecanismos químicos.
3. **Modelos de estadística de un punto:** Hacen uso de funciones de densidad de probabilidad PDF (*Probability Density Functions*). Las ventajas del modelo de PDF son que por medio de teoría de probabilidad puede representar los efectos conjuntos de la turbulencia y la difusión molecular sin calcular ninguna de las 2 (como sucedería con LES al calcular la turbulencia y con un modelo *flamelet* al calcular la llama). Estos modelos tienen como desventaja que dejan abierta la pregunta de cuál tipo de PDF se debe emplear.

5.2. Hipótesis

La restricción de recursos computacionales hace necesario que el tiempo simulación sea corto. Éste tiempo de simulación depende de forma directa del número

de elementos del dominio de trabajo. Los modelos *flamelet* requieren elementos pequeños [43] para capturar la llama. Por la necesidad de discretizaciones pequeñas los métodos *flamelet* quedan descartados. Además las funciones PDF pueden resultar arbitrarias [20]. Los modelos de mezcla turbulenta han mostrado que pueden aplicarse en varias situaciones [20], [36] sin hacer uso de mallas finas ni suposiciones muy restrictivas pues funcionan para motores HCCI [36] y Diesel [20]. Es por lo anterior que este trabajo no hace uso de los modelos de mezcla estadística de punto en los motores de combustión interna. Teniendo en cuenta lo anterior, se opta por hacer uso de los modelos de mezcla turbulenta de cinética química de rata finita. Estas implementaciones de cinética de rata finita tienden a sobrepredecir los resultados y se han propuesto varias soluciones. Kong y otros suponen que hay unas ratas de reacción que son alteradas por la turbulencia.

Golovitchev [20, 21] supone que si la turbulencia juega un rol, la cinética es más lenta y que el cambio en las ratas de reacción se da por que en cada celda los reactantes se van consumiendo y las colisiones entre los reactantes van disminuyendo. Esto disminuye la rata de reacción al interior de cada celda computacional. Mientras que en el modelo de Kong [28] se introducen modificaciones al término temporal asociado a demoras en la reacción por fenómenos en la sub escala de la discretización espacial. Ambos autores hacen uso de un reactor bien agitado (WSR).

Sin embargo estos modelos basados en un reactor bien agitado tienen una desventaja. Según Turns [49] un reactor bien agitado tiene un flujo másico de entrada, un volumen constante determinado y unas especies en su interior a una presión. Al introducir masa se está introduciendo energía de forma artificial pues no se está teniendo en cuenta que la mezcla fresca incluye no sólo la temperatura de la celda si no la energía de formación de las especies que se añade al reactor, sobreprediciendo la energía liberada.

Esto resulta clave en el análisis de los otros modelos como por ejemplo en el caso de CHEMKIN, en el cual el reactor no tiene control de flujo másico a la salida. Por lo tanto se trataría de un reactor que acumula masa. La acumulación de masa del reactor fue corroborada con pruebas usando varios mecanismos químicos empleados en este trabajo. Dicha acumulación de masa implica que ya no se trata de un reactor de estado estable y por lo tanto está descrito por ecuaciones diferenciales ordinarias. Esto tiene dos implicaciones importantes, la primera es que la energía total de la mezcla inicial no se conserva. En segundo lugar cuando se da la acumulación de masa se pierde la ventaja de dicho reactor sobre el resto de reactores, pues aparece un término temporal que convierte las ecuaciones del sistema de algebraicas a ecuaciones diferenciales [49]. Esta ecuación diferencial hace que el reactor bien agitado tenga un costo computacional similar a los otros reactores. Teniendo en cuenta lo anterior, cabe la posibilidad de asumir el costo computacional y emplear otro reactor con ecuaciones diferenciales tales como el reactor a volumen constante o a presión constante para modelar los términos en las pequeñas escalas.

Para escoger entre un reactor a volumen constante y uno a presión cons-

tante se tuvo en cuenta que Perinni hizo esta prueba [39] y optó por el reactor a volumen constante [37, 38, 40, 41, 42]. Esto sin mencionar que cumple mejor las suposiciones del método numérico de KIVA en las cuales cada celda permanece cerrada, aislada, es homogénea y tiene el volumen constante. Además, el volumen no es una incógnita, la incógnita de las ecuaciones del sistema es la presión. Esta característica del código es quizá la razón por la cual el RVC requiere menos iteraciones que el reactor a presión constante.

El RVC también cambia las ratas de reacción en función de la presión y de los productos de la combustión. Esto es similar a la sugerencia ya mencionada de Golovitchev para la interacción turbulenta [20, 21].

El cumplimiento de la suposición de “Reactor bien agitado” se asegura por el procedimiento de la convergencia de malla. En la convergencia de malla se garantiza que el cambio de las escalas tanto espaciales como temporales de la discretización no afectan la solución.

Se propone usar un modelo que haga uso del criterio del número de Da aplicado al ciclo de solución SIMPLE de tal modo que las relaciones temporales entre la cinética y el flujo se mantengan en $Da = 1$. Para lograr esto se propone un subciclado que separe la solución usando el reactor que conserve la masa constante. El subciclado ya se ha usado antes para empatar términos con escalas de tiempo desiguales [7, p. 2] [39]. Durante las pruebas de desarrollo también se encontró que Cantera resuelve el reactor con pasos de tiempo tan pequeños como $1E - 36$ segundos para la química y KIVA-4 utiliza sólo valores tan pequeños como $1E - 6$ s para el flujo.

Sin embargo no se piensa lograr un $Da = 1$ tomando el menor tiempo de integración de las ecuaciones. Para eso se va a explotar el esquema ya existente. KIVA hace sus cálculos basados en la liberación de energía por la combustión contra la energía total de la celda. Este esquema ya ha sido probado como sustituto del número de Da local de tal modo que la liberación de energía sea muy inferior al aporte turbulento y por tanto se asegure que los tiempos característicos del flujo no sean alterados por la cinética, asegurando la condición de reactor bien agitado que menciona Poinot [43, p. 216] para todas las celdas del dominio.

El esquema de discretización en tiempo es por diferencias finitas. El esquema de discretización espacial es por el método de los volúmenes finitos. La diferenciación espacial se basa en el método ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*). Este método consiste en usar volúmenes de control móviles -Lagrangiano- y estáticos -Euleriano- en las diferentes fases en las que se encuentran las soluciones de las ecuaciones constitutivas.

KIVA-4 tiene 3 fases claramente diferenciadas fase A, fase B y fase C que conserva de KIVA-II [8, p. 22] [27, p. 24]. Un esquema general del funcionamiento se muestra en la Figura 2. La fase A consiste en el cálculo de las reacciones químicas e interacciones de las gotas del chorro de combustible con el gas y la pared [48]. La fase B resuelve la forma Lagrangiana de las ecuaciones de conservación usando el método de los volúmenes finitos. Las fases A y B juntas se rigen bajo un esquema Lagrangiano donde las celdas computacionales se mue-

ven con el fluido [8, p. 24]. La fase C Es la fase Euleriana ó de rediscretización. Esta fase consiste en el cálculo de la advección en el fluido y el movimiento de la malla. Durante esta fase de rediscretización hay intercambio de masa, momento y energía entre las celdas. En caso de no encontrar una solución, KIVA disminuye el paso de tiempo, re calcula los valores de todas las variables e intenta solucionar de nuevo las ecuaciones.

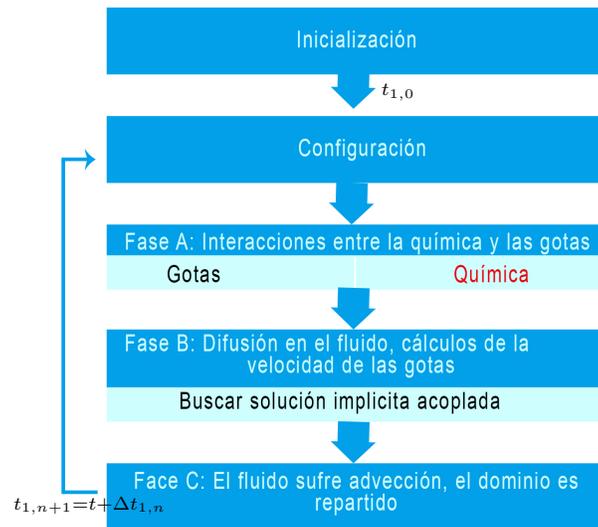


Figura 2: Diagrama de flujo de KIVA-4.

En la fase B se resuelven las las ecuaciones de forma individual que luego se acoplan y se vuelven a resolver todas por el método SIMPLE [48, p. 954] [27, p. 29]. El esquema numérico de la discretización espacial de la fase B es semi implícito. Para la fase B se tiene entonces un cálculo de la conservación de masa para la especie m seguido por el método SIMPLE modificado para resolver el campo de velocidades, las temperaturas de cada celda y las presiones. Una vez terminado la iteración del método SIMPLE se procede a encontrar los valores de k y ε para cada celda. Cada ecuación se resuelve en el orden mencionado usando el algoritmo de residuos conjugados [48, p. 956] [27, p. 33].

Las razones por las cuales el cálculo de las densidades parciales y los valores de k - ε son calculados por fuera del método SIMPLE son dos. La primera es que estas ecuaciones están débilmente acopladas a la solución del campo del flujo. La segunda razón es que al sacarlas del método SIMPLE se disminuye el tiempo de cálculo, sobretodo si existe un gran número de especies. Como se mencionó anteriormente por cada especie existe una ecuación de conservación que debe resolverse, al incluir estas ecuaciones en el esquema SIMPLE se incrementaría de manera importante el tiempo de cálculo [8, p. 44].

Teniendo en cuenta lo anterior, se propone dejar las fases A y C intactas y sólo se altera la fase B 2. Específicamente cuando KIVA llama a la subrutina a cargo de los cálculos cinéticos, se llama a Cantera como se muestra en la figura 3. Las condiciones de cada reactor; presión, volumen, temperatura, tiempo de integración (paso de tiempo del fluido) y fracciones másicas; son entregadas por KIVA a Cantera. Las ecuaciones de cada reactor independiente son planteadas por Cantera [44]. Dichas ecuaciones son integradas por CVODE [14, 44] en el tiempo. En la integración son empleados pasos de tiempo y métodos de integración variables si el sistema de ecuaciones no converge hacia una solución [29]. La integración avanza con pasos de tiempo adaptativos hasta que la suma de estos pequeños pasos alcanza el paso de tiempo del fluido como se ilustra en 4. Luego de resolver cada reactor, Cantera devuelve a KIVA las fracciones de masa de la nueva mezcla. Entonces KIVA-4 acopla los nuevos resultados usando el esquema de método SIMPLE tal como en el algoritmo original. La fase C es dejada sin modificar.

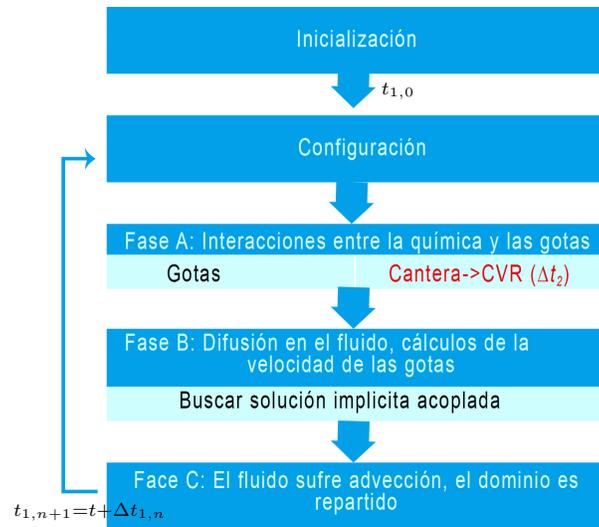


Figura 3: Ciclo de KIVA con el sub ciclo de Cantera.

La separación temporal (Fig. 4) puede hacer que los resultados no sean realistas. Por ejemplo, un flujo que según la cinética química debería quemarse, en realidad es sofocado por la turbulencia. Esto podría afectar la estabilidad del programa. Sin embargo, KIVA-4 no tiene ninguna restricción para la estabilidad debido a términos de difusión están diferenciados implícita y el término de advección es sub-ciclado. El paso de tiempo en KIVA-4 está aún limitado basado en consideraciones de precisión [48]. Este paso de tiempo se escoge teniendo en cuenta: la aceleración con respecto al tamaño de la celda -condición

de Courant-, la distorsión de la célula en la fase Lagrangiana, un valor predefinido para un paso de tiempo máximo introducido por el usuario, un paso de tiempo basado en el avance máximo del cigüeñal, la tasa de liberación de energía por el término fuente química y la evaporación. El paso de tiempo para el siguiente ciclo es el mínimo de todos los anteriores.

KIVA fue diseñado originalmente para adaptar el paso de tiempo con unas pocas reacciones con alta liberación de calor [5]. Por lo tanto un RVC podría liberar toda la energía del mecanismo sin interrumpir la simulación. KIVA detecta el cambio en la energía como si fuese una sola ecuación y adapta el paso de tiempo con su algoritmo original.

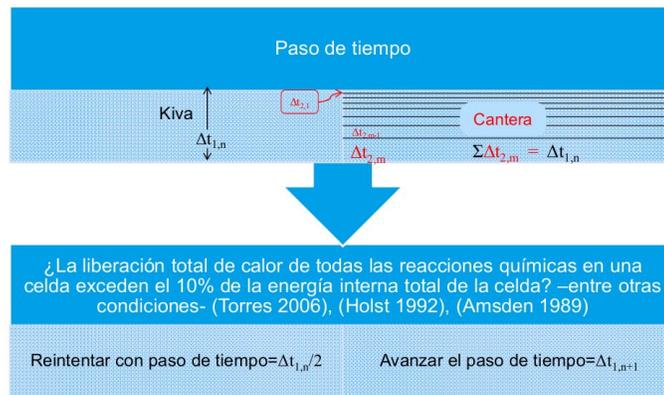


Figura 4: Esquema temporal nuevo. Por cada paso de tiempo para KIVA, múltiples pasos de tiempo en Cantera.

6. Resultados

6.1. Utilización de Kiva-Cantera-UN comparada

El programa Kiva-Cantera-UN desarrollado simplifica en gran medida el proceso que debe seguir el usuario para lograr una simulación exitosa, ver Figura 5. Con KIVA era necesario iterar sobre varios parámetros de cinética química, de la discretización espacial temporal y otros parámetros desconocidos (Parámetros de los modelos de chorro de combustible, chispa y demás). Si se suman estas variables el usuario tendría que modificar una decena o más de parámetros simultáneos y simular para obtener un resultado exitoso. En Kiva-Cantera-UN con las pruebas hechas en este trabajo apenas se requirió de seleccionar el mecanismo cinético y encontrar el parámetro desconocido en el modelo de chispa (8 parámetros en total). No hubo necesidad de cambiar la discretización espacial o temporal para que la simulación mostrara que tiende a los resultados experimentales (La convergencia de malla se tratará más adelante). Adicional

a lo anterior ninguna simulación falló o reportó errores con el software de este proyecto.

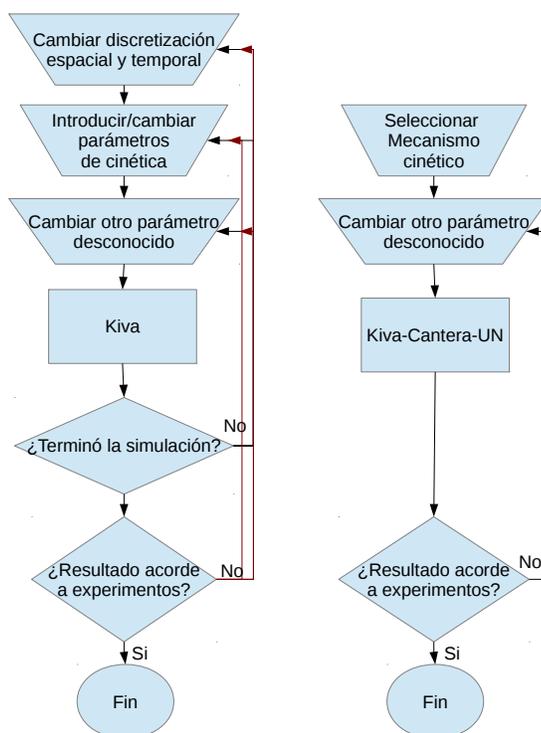


Figura 5: Proceso para lograr una simulación exitosa con KIVA frente al de KIVA-Cantera-UN. Nótese que se simplifica de manera significativa con KIVA-Cantera-UN.

6.2. Metodología de validación

Para la validación se utilizan casos con datos experimentales. A continuación se expone la metodología de validación, los criterios para seleccionar el motor, los criterios para seleccionar los mecanismos cinéticos y las simulaciones obtenidas para el motor. El motor es explicado en detalle en su sección respectiva.

El método de validación consta de los siguientes cinco pasos:

1. Escoger un motor que muestre el fenómeno físico.
2. Escoger un mecanismo acorde.
3. Modelar el motor en KIVA-Cantera-UN.

4. Verificar convergencia de malla.
5. Comparar con resultados experimentales y simulaciones de otros autores.

El primer paso consiste en encontrar motores en los que se pueda comprobar los tres fenómenos acoplados a saber: Cinética química y Turbulencia. En el segundo paso se busca un mecanismo apropiado para simular el caso. Se tiene preferencia por los mecanismos en los casos ya simulados o mecanismos comprobados por varios autores y por mecanismos esqueléticos de pocas especies y reacciones para acelerar la obtención de resultados.

Los datos de los dos pasos anteriores se modelan en KIVA-Cantera-UN. En este paso se verifica la estabilidad de la simulación, la relación de compresión para el dominio discretizado, el tiempo que demora la simulación, entre otros.

En cuarto lugar se hace un estudio de independencia de la malla. Los resultados deben ser independientes del tamaño de malla y del paso de tiempo [15, 47]. Es decir que a medida que se disminuye progresivamente el tamaño de la discretización espacial los resultados del dominio no varían y convergen a una solución determinada.

Finalmente se procede a comparar la curva de presión y la rata de liberación de energía del motor. Esta comparación incluye una medida del error porcentual punto a punto junto con un error promedio de la simulación. Con estos resultados, los resultados de otros autores, los resultados arrojados por KIVA-4 y el tiempo de simulación se procede a evaluar la efectividad y eficiencia de KIVA-Cantera-UN.

6.3. Motor SI

Para la validación del motor SI se utilizan datos experimentales [34]. La plataforma experimental es un motor denominado CFR que tiene un pistón y culata planos. El motor ha sido probado con Iso-Octano y Etanol como combustibles. Este motor funciona con una bujía que enciende una carga premezclada y homogénea de aire y combustible. La bujía está ubicada en la parte superior derecha del cilindro, al lado de la pared. Esta configuración hace que la combustión sea totalmente asimétrica y por tanto se requiere que todo el cilindro sea simulado. El encendido producido por la bujía se simula usando el modelo de encendido en el cual se aumenta de forma progresiva la energía de las celdas, vea Sección 3.2.3. Como característica especial este motor experimental tiene un alto swirl que le permite estudiar la influencia del movimiento del fluido sobre la combustión. El encendido de la bujía permite además estudiar el funcionamiento del programa bajo altos gradientes tanto de temperatura como de especies en el dominio.

La malla se muestra con sus condiciones de frontera en la Figura 6. Este dominio es el espacio que ocupa el aire que está dentro del motor. En azul se puede ver las superficies que representan el pistón plano. En gris se puede apreciar el *squish* que es el volumen limitado por la camisa del pistón. Este volumen en color gris es el que va a ser desplazado durante el movimiento del

pistón. También se puede apreciar en café la culata plana en la parte superior del cilindro (se muestra de perfil y en el corte). Dado que no tiene un cuenco no existe la coloración verde. Nótese que la celda coloreada de rojo indica la ubicación de la chispa en el encendido. Algunas especificaciones del motor se da en 1. Las condiciones iniciales y modelos empleados se dan en 2.

En cuanto a las restricciones computacionales es sabido que la combustión es un problema que requiere de una alta capacidad de cálculo [11, 12, 46]. Por lo tanto los modelos y la ejecución de las simulaciones debe hacerse teniendo en cuenta que una simulación exitosa debe completarse en el menor tiempo posible. Esto quiere decir que la simulación abarca las fases de compresión, combustión y expansión. Durante estas fases todas las válvulas permanecen cerradas. Esto experimentalmente sucede desde el instante en que la válvula de admisión se cierra hasta que la válvula de escape se abre. En la literatura inglesa se le denomina desde IVC (*Intake Valve Closure*) hasta EVO (*Exhaust Valve Opening*). El motor representado en estas simulaciones tiene la culata plana, incluso cuando las válvulas están cerradas.

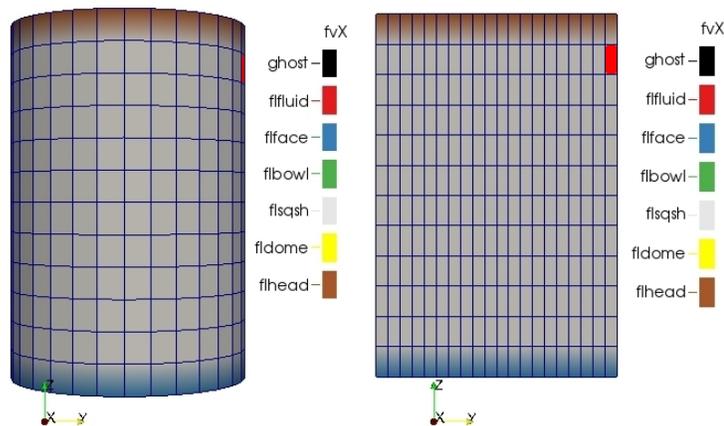


Figura 6: Mallado con condiciones de frontera del motor CFR (der.) y un corte longitudinal (izq.). La celda coloreada de rojo indica la ubicación de la chispa en el encendido.

6.3.1. Resultados Motor SI

La independencia de malla de la solución ha sido probada usando 3 mallas diferentes. La Figura 7 muestra las mallas gruesa, intermedia y fina con 3600, 9000 y 28000 celdas respectivamente. Estas mallas no incluyen la cavidad encerrada por la pared del pistón, el anillo del pistón y la pared del cilindro.

Tipo de Motor	Motor CFR, monocilíndrico
Velocidad angular [rpm]	900
Relación de compresión []	7:1
Temperatura de admisión [K]	355
Presión absoluta en la admisión [bar]	1.062163
Razón de equivalencia	1.0 (13% gases quemados)
Razón de giro <i>Swirl ratio</i>	8.0
Desplazamiento [cm ³]	709.5
Diámetro [mm] X carrera [mm]	88.9 X 11.43
Longitud de la biela [mm]	200
<i>Intake valve closure</i> IVC [deg]	-150 ATDC
<i>Exhaust valve opening</i> EVO [deg]	140 ATDC
Encendido de la chispa [ATDC]	-15
Apagado de la chispa [ATDC]	-7

Tabla 1: Datos del motor CFR [34]

Tipo de Motor	Motor CFR, monocilíndrico
Temp. superficial del pistón [K]	350
Temp. superficial de la culata [K]	373
Temp. superficial de la camisa [K]	373
Densidad de energía cinética turbulenta en la celda (tkei)[cm ² /s ²]	0.02
Escala de longitud inicial de la turbulencia(scli) [cm]	0.311
Mecanismo químico	Liu: Mecanismo esquelético de 41 especies y 124 reacciones [32]
Modelo de turbulencia	RNG- <i>k-ε</i> modificado para motores [25]

Tabla 2: Datos de simulación del motor CFR [34]

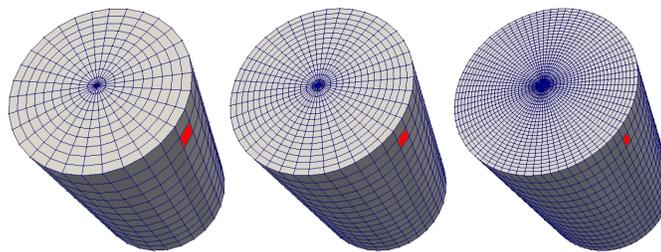


Figura 7: Mallas gruesa a fina empleadas en la convergencia de malla del motor CFR. De izquierda a derecha 3600, 9000 y 28000 celdas respectivamente. La celda coloreada de rojo indica la ubicación de la chispa en el encendido.

La independencia malla para la variable presión es observada en la Figura 8 y se obtuvo con un dominio numérico de prueba. Se observa que entre más gruesa sea la malla, la ignición se da con mayor facilidad. Esto se da por que

el método de ignición es dependiente de la malla. Nótese la celda coloreada de rojo que indica la ubicación de la chispa en el encendido. Esto se explicará en detalle cuando se muestre la curva de presión. El mecanismo empleado fue el de Liu. Éste es del tipo esquelético con 41 especies y 124 reacciones [32].

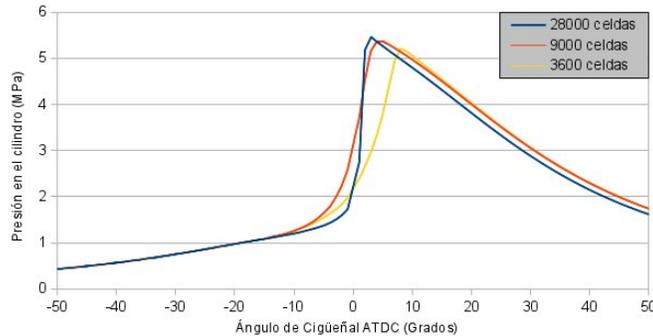


Figura 8: Comparación de la presión calculada para la malla gruesa, intermedia, y fina.

El método de validación consistió en hacer una búsqueda sistemática del valor de encendido de la chispa. Para disminuir el tiempo de búsqueda se optó por usar la malla gruesa. Como se mencionó en la Sección 3.2.3 la ignición por chispa es proveída durante una ventana de tiempo y en un espacio del dominio definido por el usuario. Luego de diversas pruebas se disminuyó el volumen de ignición de la chispa dado que si éste aumenta generaba una alta sobrepredicción de los valores de encendido. Sin embargo, si se sigue disminuyendo el tamaño de la región de la ignición después de cierto valor se tiene una influencia despreciable sobre la presión máxima para la malla probada. Esto se da por que el volumen de influencia puede ser menor que la de la celda coloreada de rojo en 7. Cuando el volumen es menor al tamaño de la celda sólo la que contiene el volumen de encendido incrementa su energía. Nótese que a medida que la malla es más fina el volumen de encendido puede afectar diferentes celdas y por tanto cambia la cantidad de energía agregada si sólo se refina la malla. Esto confirma que el método de ignición es dependiente de la malla [8, p. 81]. En consecuencia se procedió a modificar la adición de energía de las celdas para tratar de encontrar un valor que se ajustara a los datos experimentales.

La comparación de la presión y la tasa de liberación de calor en la cámara con los datos experimentales se muestra en las Figuras 9 y 10 respectivamente. Es importante anotar que los casos I y K están superpuestos. Esta superposición de las pruebas se explicará en el próximo párrafo. No se muestra una buena concordancia en la curva de presión para las diferentes pruebas.

En la Figura 9 se muestran diferentes pruebas donde se ajusta la rata **xignit** a la cual KIVA incrementa la energía interna específica de las celdas junto con

los resultados experimentales. Además se muestra los resultados de KIVA en su forma original solucionando un pequeño mecanismo incorporado a las rutinas por defecto de KIVA. Adicional a lo anterior la Tabla 3 muestra los valores que se cambiaron en cada simulación, la rata de adición de energía interna xignit y los lados del prisma que encierra el área de encendido.

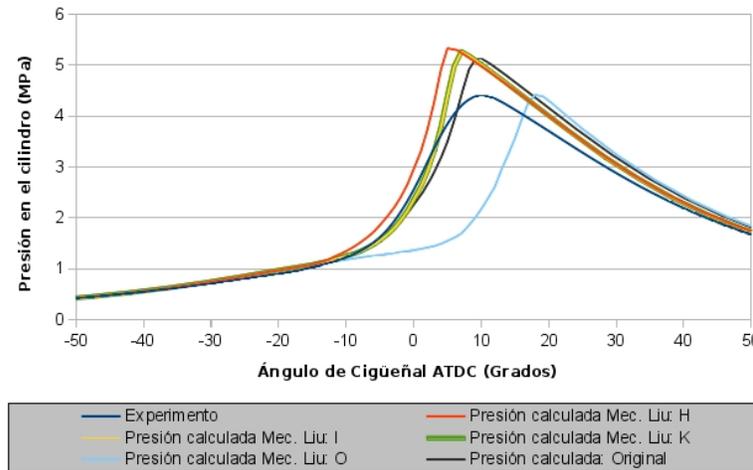


Figura 9: Presión de gas en el cilindro de resultados experimentales frente a dos numéricos con malla gruesa.

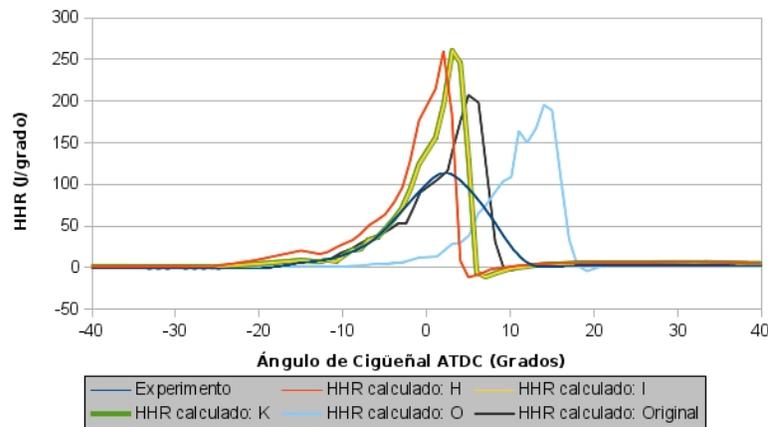


Figura 10: Rata de liberación de energía en el cilindro de resultados experimentales frente a los numéricos con malla gruesa.

Las pruebas I y K están superpuestas en la Figura 9 debido a la dependencia de malla del modelo de ignición por chispa. En las pruebas I y K se añade la

energía a la misma rata pero en regiones de diferente tamaño, ver Tabla 3. Dado que el tamaño del cubo que encierran es inferior a la discretización del dominio el algoritmo de KIVA enciende sólo una celda en cualquiera de los dos casos (la malla es idéntica en ambos casos). De este modo estos casos son indistintos para KIVA a pesar de tener diferentes parámetros de la región espacial que ha sido encendida. El caso inverso sucede para la convergencia de malla detallada en 8 donde se ha dejado la región de ignición constante y se ha disminuido el tamaño de la discretización. Se observa que la malla gruesa enciende primero que la más fina. Esto se debe a que al incrementar la energía interna específica de la celda, si se tiene una celda más grande la energía incorporada es mayor para todo el dominio. Cosa que no sucede con la malla fina que incorpora celdas más pequeñas que no introducen tanta energía pues tienen poca masa y además no se encienden porque no interceptan con el volumen donde se da la chispa.

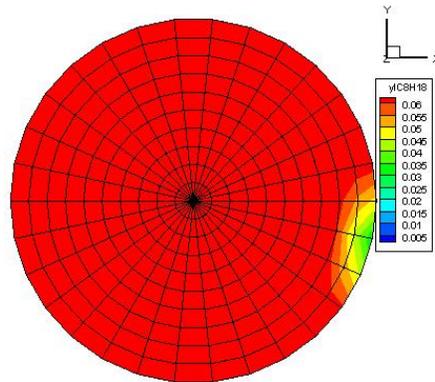
Prueba	xignit [s^{-1}]	Dimensiones del prisma $X * Y * Z$ [cm ³]
H	$1.0e + 4$	$0.075 * 0.0595 * 0.1875$
I	$1.0e + 4$	$0.0375 * 0.02975 * 0.09375$
K	$1.0e + 4$	$0.009375 * 0.0074375 * 0.0234375$
O	$2.812e + 3$	$0.009375 * 0.0074375 * 0.0234375$
Original (KIVA sin modificar)	$1.0e + 4$	$0.009375 * 0.0074375 * 0.0234375$

Tabla 3: Cambios a los valores de ignición en las simulaciones del motor CFR.

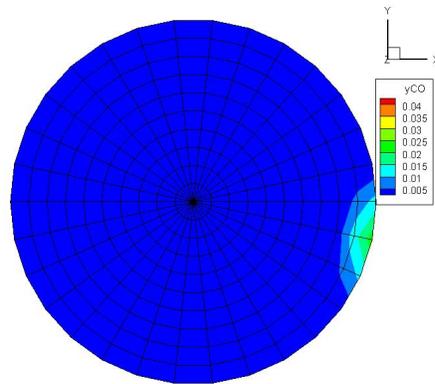
Los resultados H, I, K y Original comparados con O muestran que a medida que aumenta dicha rata, el motor se demora más en encender y en menor medida influye en la presión máxima. Con otras pruebas se determinó que al disminuir esta rata el motor simplemente no enciende. En concordancia con lo anterior, la Tabla 10 muestra que un aumento de la energía añadida por la chispa tiene poca influencia sobre el pico de energía liberada. En la figura también se aprecia que al emplear un mecanismo se generan diferencias en la liberación de energía frente a la cinética Original. Para terminar, el emplear una región menor de ignición tiene el efecto de retardar el inicio de la liberación de energía mas no parece tener un efecto importante en el área bajo la curva de liberación de energía. Es decir, que el método de encendido acá empleado no aumentó de forma significativa la energía dentro del motor. El grueso de la energía es liberada por los pasos del mecanismo químico, sean ellos simples o complejos. Dadas las discrepancias e inconsistencias ya expuestas se encuentra que el modelo de ignición no es adecuado como ya fue notado por D'Errico y Tomasso [33].

Además de la validación con la curva de presión experimental se procedió a revisar el modelo con las características generales de la combustión en el dominio 3D. En la Figura 11a la chispa se encuentra en el borde de la pared del pistón en $x = 44.45, y = 0$. A partir de ese punto se puede observar cómo la llama se desplaza del origen de la misma en la chispa. Este desplazamiento

se debe al movimiento de *swirl* impartido desde las condiciones iniciales. Cabe recordar que el *swirl* de este motor es un movimiento giratorio alrededor del eje del cilindro a favor de las manecillas del reloj. Las especies siguen este comportamiento y se desplazan con el flujo consumiendo el combustible de forma significativa un tiempo después de que la mezcla fresca ha pasado por la chispa o fuente de ignición. También se puede observar el consumo del combustible a un ritmo muy rápido pues las regiones de formación de CO de la Figura 11b son prácticamente idénticas a las ya mencionadas para IC8H18. Este comportamiento es típico de los motores encendidos por chispa y por esto mismo muchos modelos asumen equilibrio químico, también llamada cinética de rata infinita.



(A) Fracción másica IC8H18 en -7.8 ATDC



(B) Fracción másica CO en -7.8 ATDC

Figura 11: Evolución de la combustión del motor CFR: Fracción másica de combustible frente a la de CO.

En la Figura 12a se puede ver una zona de gases sin quemar, una zona de calentamiento, una zona de combustión y una zona de gases quemados. Vale la pena aclarar que la zona de combustión no corresponde a una llama pues es demasiado gruesa. Sin embargo queda para futuros trabajos encontrar si con un modelo de ecuación G o celdas de menor tamaño se podría encontrar una superficie de llama con este nuevo programa computacional. Se puede ver que el campo del flujo arrastra la llama en el sentido de las manecillas del reloj. En este punto la chispa ha cesado desde $-7ATDC$, ver Tabla 1 y por lo tanto se puede apreciar que la combustión del IC8H18 es autosostenible y ocurre en virtud de los fenómenos del flujo y las especies y no por el modelo de encendido o inyección artificial de energía.

En cuanto a la fracción de CO de la Figura 12b se puede observar que la rápida transformación de combustible en CO se mantiene pues la destrucción de combustible tiene el mismo perfil que la creación de CO. Adicional a lo anterior se encuentran pequeños bolsillos donde la fracción másica de CO es menor. Estos bolsillos muestran que la suposición de cinética de rata infinita no se cumple siempre y que hace falta hacer uso de cinética de rata finita como se muestra con este caso. Como curiosidad vale la pena anotar que donde se encuentra la bujía ya apagada no hay un desplazamiento de la llama. Esto quiere decir que hay una sección de la llama que avanza en contra del flujo como es de esperar cuando el encendido se da en todas las direcciones como en un bujía. Resulta curioso que la velocidad de avance de estas reacciones es similar a la del flujo que avanza en contra.

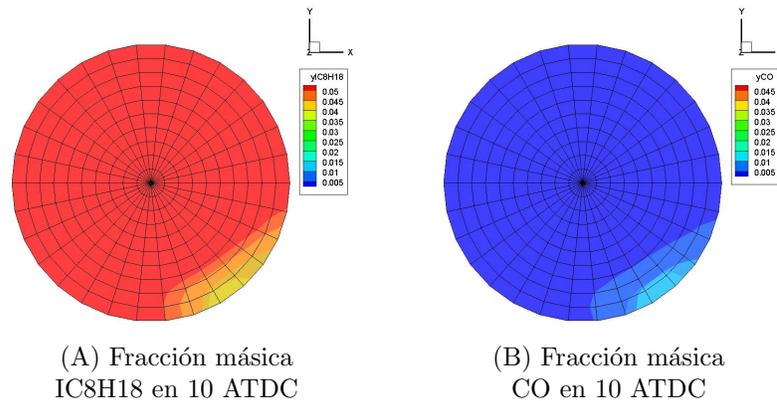


Figura 12: Evolución de la combustión del motor CFR: Fracción másica de combustible frente a la de CO.

Cuando está a punto de consumirse la mayor parte del combustible como se muestra en la Figura 13a se encuentran que las bolsas de CO Figura 13b se han diferenciado más. Por ejemplo la bolsa de CO que se encuentra en la mitad de la zona quemada en la Figura 12b ahora es mucho más grande en la

Figura 13b. También se puede observar que las bolsas originadas en las paredes se han desprendido e incluso están sobre la zona de combustión. Esto puede indicar que el modelo de cinética de rata infinita aplica sobre el volumen de control mientras que el de rata finita influye sobre las paredes. Otros autores han llegado a la misma conclusión tanto para este mismo motor [35] como para otros casos [31]. Sin embargo hay que tener en cuenta que para el caso de los modelos de equilibrio se tuvieron que modificar constantes al modelo [31, 35] el cual no es el caso de Kiva-Cantera-UN.

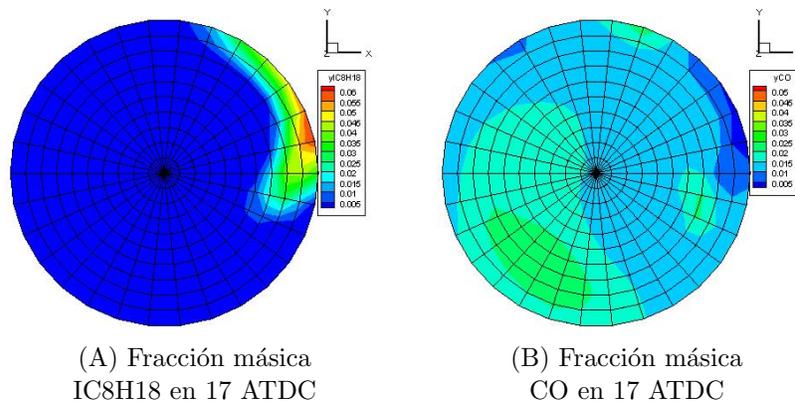


Figura 13: Evolución de la combustión del motor CFR: Fracción másica de combustible frente a la de CO.

Los resultados de la evolución de la zona quemada coinciden con los resultados obtenidos por otros autores en el software comercial Converge usando solamente cinética de rata infinita [35]. Kiva-Cantera-UN sigue la misma tendencia que Converge con resultados de la curva de presión como se muestra en la Figura 14. Es muy prometedor que mientras la solución comercial requirió 300000 celdas, la solución acá descrita tomó 3600 celdas. Esta diferencia en el número de celdas implica además que la solución comercial requiere de 24 procesadores durante una semana frente a un sólo procesador durante unas horas que requiere Kiva-Cantera-UN.

Las pruebas llevadas a cabo se compararon frente a la curva de presión experimental en Figura 15. Se puede observar que el promedio error es cercano al 3.3% en el mejor caso de KIVA-Catera-UN que es similar a KIVA con un 3.5% de promedio de error e inferior a Converge con -6.9%. Sin embargo los parámetros de encendido hacen que el error de KIVA-Cantera-UN oscilen entre 3.4% y 10.7%. Para el caso SI las predicciones logradas varían fuertemente con los parámetros de ignición empleados. Si bien con el sistema anterior se podría ajustar la curva, para este ajuste se requiere un proceso manual y repetitivo que consume mucho más tiempo.

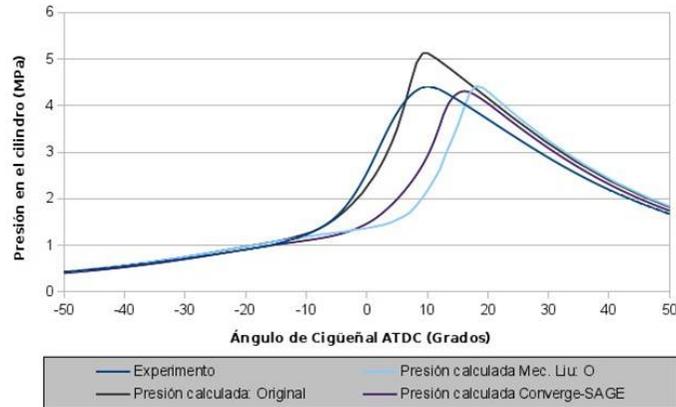


Figura 14: Comparación del Experimento, Kiva, Kiva-Cantera-UN y Converge.

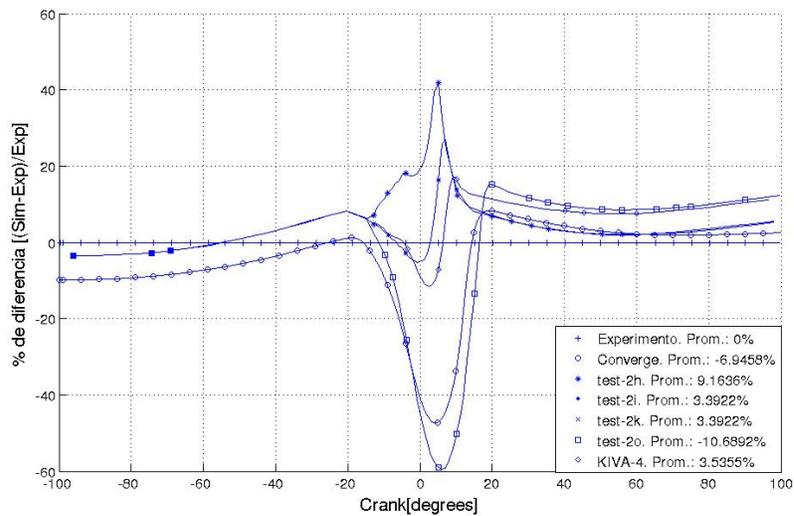


Figura 15: Comparación de las diferencias porcentuales al calcular la presión, caso SI.

7. Conclusiones

En este trabajo se modeló el Reactor a Volumen Constante como acople entre cinética química y dinámica de fluidos para simular un motor encendido por chispa. Se hizo una codificación en software del reactor en forma de un módulo

de Cantera que interactúa con KIVA-4. Finalmente se procedió a validar el funcionamiento del software desarrollado obteniendo resultados mixtos.

La aplicación de la implementación explota el legado del código KIVA empleando los mismos criterios de paso de tiempo adaptativo incluidos por defecto en KIVA. El uso de ecuaciones diferenciales permite emplear pasos de tiempo más pequeños para la cinética química. De este modo, los efectos turbulentos se dejan a las demás ecuaciones constitutivas de KIVA. El paso de tiempo químico separado aumenta la eficiencia y sin intervención del usuario produce simulaciones más estables. En esta implementación se obtiene para los casos presentados la posibilidad de emplear un mecanismo arbitrario (desde cientos hasta miles de especies). Se conserva el encendido por chispa ya incorporado en Kiva. Para el caso estudiado, el modelo de encendido no resultó suficiente y se requiere otro modelo de ignición adicional, en parte por el mecanismo químico esquelético empleado.

Dado que este modelo se ha probado el caso HCCI [45] y con motor a gasolina; se tiene una implementación versátil que es capaz de simular diferentes tipos de acoples físicos. La implementación del modelo también resultó robusta pues no se requiere que el usuario manipule la malla o el paso de tiempo para obtener simulaciones completas. Esto último mejora dramáticamente la facilidad de uso del programa. Esta nueva implementación también resultó muy eficiente computacionalmente.

A futuro, este modelo se debe mejorar con un mecanismo de encendido apropiado e incrementar su eficiencia computacional. También se recomienda emplear este programa como base para implementar modelos de encendido basados en la ecuación G.

Referencias

- [1] *Favre averaged navier-stokes equations*, 05 2015.
- [2] *Favre averaging*, 05 2015.
- [3] *Reynolds averaging*, 05 2015.
- [4] A. Kociszewski M. Sosnowski A. Jamrozik, W. Tutak, *Numerical simulation of two-stage combustion in SI engine with prechamber*, Applied Mathematical Modelling **37** (2013), 2961–2982.
- [5] A. A. Amsden, *KIVA-3 manual*, Tech. report, Los Alamos National Lab., NM (United States), 1993.
- [6] ———, *Kiva-3v: A block-structured kiva program for engines with vertical or canted valves*, Tech. report, Los Alamos National Lab., NM (United States), 1997.

- [7] A. A. Amsden, T. Butler, P. O'Rourke, and J. Ramshaw, *KIVA-A comprehensive model for 2-D and 3-D engine simulations*, Tech. report, SAE Technical Paper, 1985.
- [8] A. A. Amsden, P. J. Orourke, and T. D. Butler, *KIVA-2: A computer program for chemically reactive flows with sprays*, NASA STI/recon technical report N **89** (1989), 27975.
- [9] B. A. Cantrell, H.-W. Ge, R. D. Reitz, and C. J. Rutland, *Validation of advanced combustion models applied to two-stage combustion in a heavy duty Diesel engine*, SAE paper **1** (2009), 01–0714.
- [10] N. Chakraborty and N. Swaminathan, *Influence of the Damköhler number on turbulence-scalar interaction in premixed flames. I. Physical insight*, Physics of Fluids (1994-present) **19** (2007), no. 4, 045103.
- [11] C. Chan, D. Unat, M. Lijewski, W. Zhang, J. Bell, and J. Shalf, *Software Design Space Exploration for Exascale Combustion Co-design*, Supercomputing, Springer, 2013, pp. 196–212.
- [12] J. H. Chen, *Combustion Co-Design Center: Exascale Simulation of Combustion in Turbulence Application/Proxy Deep Dive*, Tech. report, Sandia National Laboratories, 2012.
- [13] T. Chung, *Computational fluid dynamics*, Cambridge university press, 2010.
- [14] S. D. Cohen and A. C. Hindmarsh, *CVODE, a stiff/nonstiff ODE solver in C*, Computers in physics **10** (1996), no. 2, 138–143.
- [15] R. den Braembussche, *Optimization and Computational Fluid Dynamics*, Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [16] U. E. P. A. EPA, *Multipollutant comparison*, 9 2011.
- [17] ———, *Health effects of air pollution*, 5 2013.
- [18] A. Favre, *The equations of compressible turbulent gases*, Tech. report, DTIC Document, 1965.
- [19] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer Berlin, 1999.
- [20] V. Golovitchev and N. Nordin, *Detailed chemistry spray combustion model for the KIVA code*, User's Group Meeting at the SAE Congress, 2001.
- [21] V. Golovitchev, N. Nordin, R. Jarnicki, and J. Chomiak, *3-D diesel spray simulations using a new detailed chemistry turbulent combustion model*, SAE transactions **109** (2000), no. 4, 1391–1405.

- [22] H. M. David Goodwin, N. Malaya, and R. Speth, *Cantera 2.1.1 documentation*, Web page, 3 2014.
- [23] ———, *Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. ver. 2.1.1*, Software repository, 3 2014.
- [24] D. Gray, *Why the Balance Principle Should Replace the Reynolds Transport Theorem*, American Society for Engineering Education, 2008.
- [25] Z. Han and R. D. Reitz, *Turbulence modeling of internal combustion engines using RNG κ - ϵ models*, *Combustion Science and Technology* **106** (1995), no. 4-6, 267–295.
- [26] J. B. Heywood, *Internal combustion engine fundamentals*, vol. 930, McGraw-Hill New York, 1988.
- [27] M. J. Holst, *Notes on the KIVA-II software and chemically reactive fluid mechanics*, Numerical Mathematics Group Computing & Mathematics Research Division Lawrence Livermore National Laboratory, 1992.
- [28] S.-C. Kong, C. D. Marriott, R. D. Reitz, and M. Christensen, *Modeling and experiments of HCCI engine combustion using detailed chemical kinetics with multidimensional CFD*, *Development* **2013** (2001), 04–08.
- [29] L. L. N. Laboratory, *High-level overview of CVODE stepping*, 05 2015.
- [30] ———, *Overview of SUNDIALS and its solvers*, 05 2015.
- [31] L. Liang and R. D. Reitz, *Spark ignition engine combustion modeling using a level set method with detailed chemistry*, Tech. report, SAE Technical Paper, 2006.
- [32] Y.-D. Liu, M. Jia, M.-Z. Xie, and B. Pang, *Enhancement on a skeletal kinetic model for primary reference fuel oxidation by using a semidecoupling methodology*, *Energy & Fuels* **26** (2012), no. 12, 7069–7083.
- [33] G. D. Tommaso Lucchini, *Personal communication*, 2015.
- [34] J. M. Mantilla et al., *Modelado de la combustión de mezclas gasolina-etanol en motores de combustión interna*, Ph.D. thesis, Universidad Nacional de Colombia, 2010.
- [35] J. M. Mantilla and D. A. Mora, *Estudio del proceso de combustión en un motor de alto swirl empleando mecánica de fluidos computacional*, (Submitted) **1** (2015), 12.
- [36] C.-F. L. Hassan A Mazi, *Coupling of chemical kinetics with computational fluid dynamics in a three-dimensional engine model*, Master's thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2009.

- [37] F. Perini, *High-dimensional, unsupervised cell clustering for computationally efficient engine simulations with detailed combustion chemistry*, *Fuel* **106** (2013), 344–356.
- [38] F. Perini, B. D. Adhikary, J. H. Lim, X. Su, Y. Ra, H. Wang, and R. Reitz, *Improved chemical kinetics numerics for the efficient simulation of advanced combustion strategies*, Tech. report, SAE Technical Paper, 2014.
- [39] F. Perini, G. Cantore, and R. Reitz, *An analysis on time scale separation for engine simulations with detailed chemistry*, Tech. report, SAE Technical Paper, 2011.
- [40] F. Perini, E. Galligani, G. Cantore, and R. Reitz, *Validation of a sparse analytical Jacobian chemistry solver for heavy-duty diesel engine simulations with comprehensive reaction mechanisms*, Tech. report, SAE Technical Paper, 2012.
- [41] F. Perini, E. Galligani, and R. Reitz, *An analytical Jacobian approach to sparse reaction kinetics for computationally efficient combustion modeling with large reaction mechanisms*, *Energy & Fuels* **26** (2012), no. 8, 4804–4822.
- [42] ———, *A study of direct and Krylov iterative sparse solver techniques to approach linear scaling of the integration of chemical kinetics with detailed combustion mechanisms*, *Combustion and Flame* **161** (2014), no. 5, 1180–1195.
- [43] T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and numerical combustion*, RT Edwards Incorporated, 2005.
- [44] C. Reid, *Cantera Structure*, 5 2015.
- [45] C. F. F. Rodríguez and J. Mantilla, *Modeling HCCI Engine Combustion Coupling Cantera to KIVA 4*, Tech. report, SAE Technical Paper, 2015.
- [46] H. Simon, T. Zacharia, R. Stevens, et al., *Modeling and simulation at the exascale for energy and the environment*, Tech. report, Department of Energy, 2007.
- [47] S. Subramaniam and P. Orourke, *Numerical Convergence of the KIVA-3 Code for Sprays and its Implications for Modeling Report UR-98-5465*, Tech. report, Los Alamos National Laboratory, 1998.
- [48] D. J. Torres and M. F. Trujillo, *Kiva-4: An unstructured ale code for compressible gas flow with sprays*, *Journal of Computational Physics* **219** (2006), no. 2, 943–975.
- [49] S. R. Turns et al., *An introduction to combustion*, vol. 499, McGraw-Hill New York, 1996.

- [50] D. Veynante and L. Vervisch, *Turbulent combustion modeling*, Progress in energy and combustion science **28** (2002), no. 3, 193–266.
- [51] F. M. White, *Fluid mechanics*, McGraw-Hill, 1998.
- [52] V. Yakhot and S. Orszag, *Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory*, Journal of Scientific Computing **1** (1986), no. 1, 3–51.
- [53] V. Yakhot and L. M. Smith, *The renormalization group, the ϵ -expansion and derivation of turbulence models*, Journal of Scientific Computing **7** (1992), no. 1, 35–61.