

MODELADO DE LAS COLISIONES DE PARTÍCULAS PRIMARIAS DE HOLLÍN DENTRO DE LA CÁMARA DE COMBUSTIÓN DE UN MOTOR DIESEL

MARTOS RAMOS, Francisco Javier ⁽¹⁾; LAPUERTA AMIGO, Magín ⁽²⁾

MARTÍN GONZÁLEZ, Gema ⁽¹⁾; PÉREZ SERRANO, Alberto ⁽¹⁾

fjmartos@uma.es

⁽¹⁾Universidad de MÁLAGA, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales

⁽²⁾Universidad de CASTILLA-LA MANCHA, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales

RESUMEN

En la formación de los aglomerados de hollín dentro de la cámara de combustión de un motor diésel se pueden distinguir tres fases predominantes. La primera es la de formación de las partículas primarias, la segunda la del crecimiento neto de estas partículas y la última es la de la aglomeración de las partículas primarias, dando como resultado el aglomerado que es expulsado por el tubo de escape. Este trabajo solo analiza esta última fase. El modelo planteado utiliza como semilla un delta de Dirac de la función de tamaños de partículas, en la que sólo hay partículas primarias completamente formadas con igual tamaño característico. El resultado del modelo es la obtención de la evolución temporal de la función de distribución de tamaños medios de aglomerados. Se han analizado los fenómenos fluidodinámicos que más afectan a la función de frecuencia de colisiones de los aglomerados en formación. Se observa que los fenómenos más predominantes son el derivado del movimiento browniano y el del movimiento turbulento inercial. El modelo es de tipo semi-experimental, ya que utiliza como variables de entrada, datos experimentales obtenidos en banco de ensayo de motores, y resultados de modelos de diagnóstico de la combustión.

Palabras clave: Dimensión fractal, hollín, motor diésel.

1. Introducción

Los motores diésel tienen importantes ventajas en rendimiento y emisiones de CO₂ frente a los de encendido provocado pero tienen el hándicap de su tendencia a formar y emitir partículas al desarrollarse la combustión sobre una mezcla no homogénea. Originalmente dichas partículas se forman (nucleación) al pirolizar las moléculas de combustible sin acceso al oxígeno, formando compuestos aromáticos policíclicos que, a partir de un cierto tamaño condensan. Estos núcleos siguen creciendo superficialmente manteniendo una forma esférica hasta que, alcanzado un cierto tamaño (entre 20 y 30 nm), solidifican. A partir de ese instante el crecimiento de las partículas tiene lugar por aglomeración entre las partículas primarias aproximadamente esféricas formadas en la etapa anterior, como consecuencia de las colisiones que tienen lugar entre ellas. La descripción morfológica de los aglomerados emitidos, tiene, por tanto, una relación directa con la frecuencia de colisiones y con el régimen de aglomeración. Dicha descripción morfológica se puede cuantificar por medio del tamaño del aglomerado y de su dimensión fractal, estando ambas variables relacionadas por medio de la ley de potencias, [1]:

$$n_{po} = k_f \left(\frac{d_p}{d_{po}} \right)^{D_f} \quad (1)$$

donde n_{po} es el número de partículas primarias que compone el aglomerado, k_f es el prefactor de la ley de potencias, d_p es el tamaño característico del aglomerado, d_{po} es el diámetro de las partículas primarias y D_f es la dimensión fractal que caracteriza el aglomerado. La dimensión fractal cuantifica el grado de irregularidad del aglomerado a través del exponente al que debe elevarse su diámetro característico para obtener su masa (o lo que es proporcional, el número de partículas primarias que lo componen). A igualdad de masa, la capacidad de colisionar de un aglomerado con baja dimensión fractal es mayor que la de uno de alta, ya que éste se encuentra menos expuesto espacialmente. Por tanto, no solo el tamaño, sino también la dimensión fractal, afectan a la frecuencia de colisiones y por tanto a la distribución de tamaños finalmente emitida por un motor.

El modelado de las distribuciones de tamaños de partículas a partir de las condiciones locales en las que se produce la combustión en un motor diésel tiene gran interés para diagnosticar las causas que contribuyen a la formación de partículas y para adoptar medidas para evitar la formación de las más peligrosas en función de su morfología. Este interés no es solo medioambiental o sanitario sino que también puede ayudar a cumplir las normas que regulan la contaminación de los motores, en las que recientemente se ha limitado la emisión en concentración numérica (desde la normativa Euro 5, [2]) y se plantea limitar también el tamaño en el futuro.

El modelo propuesto resuelve las ecuaciones que expresan los balances de número de partículas para cada tamaño de una función de distribución discretizada en función de la frecuencia de colisiones a las que se vería sometida una población inicial de partículas primarias homogénea sometida a los movimientos browniano y turbulento inercial, [3]. A la espera de integrar este modelo con otros modelos de análisis fractal, se ha utilizado provisionalmente una correlación exponencial para relacionar la dimensión fractal de los aglomerados con su tamaño, dejando abierta dicha correlación para lograr un ajuste con los resultados de distribución de tamaños medidos en el escape de un motor.

2. Modelo planteado

2.1. Hipótesis

- Aerosol inicialmente monodisperso. El aerosol considerado al comienzo de la simulación está compuesto por partículas sólidas en suspensión, todas esféricas con diámetro, d_{po} , y homogéneamente distribuidas.
- Conservación de masa. La masa de la partícula formada tras una colisión es igual a la suma de las masas de las partículas que colisionaron.
- Pérdida de identidad de las partículas que colisionan. La partícula formada tras una colisión de dos partículas tiene dimensión fractal diferentes a sus progenitoras.

- Tiempo de coalescencia interna instantáneo: El proceso de colisión y la recombinación hasta obtener la nueva partícula es nulo.
- La dimensión fractal media se ha considerado que evoluciona de manera exponencial con respecto al tamaño de las partículas.

2.2. Propuesta de la evolución de la dimensión fractal

Es conocido que la dimensión fractal del aglomerado tiende a disminuir conforme el tamaño aumenta. Con el objetivo de realizar un estudio preliminar se ha utilizado una función exponencial entre la dimensión fractal y el tamaño de los aglomerados, en la que existe un coeficiente de forma, K_{Df} que se ha ajustado para que el resultado de la simulación convergiera a los resultados experimentales.

$$D_f = 3 - \left(3 - D_{f_{ref}}\right) \exp\left(-\frac{K_{Df}}{n_{po}-1}\right) \quad (2)$$

Donde $D_{f_{ref}}$ es la dimensión fractal de referencia que es el valor promedio que tienen los aglomerados más grandes. Esta evolución de la dimensión fractal puede ser mejorada utilizando modelos geométricos como los que se muestran en [4] y [5] o modelos fractales basados en el Box-Counting, [6]

2.3. Ecuación dinámica de colisión

El número de colisiones entre partículas de tamaño i y j , N_{ij} , por unidad de tiempo y por unidad de volumen de gas portador depende de la frecuencia con la que colisionan las partículas de tamaño i y j , descrito en [7].

$$N_{ij} = \beta(i, j)n_i n_j \quad (3)$$

Donde $\beta(i, j)$ es la función de frecuencia de colisión, la cual depende de la morfología de las partículas a colisionar y de las propiedades del gas. Por otro lado n_i y n_j son la concentración de partículas de tamaño i y j por unidad de volumen. La tasa de formación de partículas de tamaño k ($k=i+j$) por la colisión de partículas ij tiene que ser afectada por un factor de $1/2$ para evitar duplicidad en la formación.

Por otro lado, para determinar la tasa neta de partículas de tamaño k en un instante dado hay que tener en cuenta la desaparición de partículas de tamaño k que colisionan con otras formando una partícula de mayor tamaño. Así que, la tasa neta de generación de partículas de tamaño k en un instante dado es el balance entre la creación o aparición y desaparición de partículas.

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} N_{ij} - \sum_{i=1}^{\infty} N_{ik} \quad (4)$$

Sustituyendo ahora la ecuación (3) en la ecuación (4) se obtiene la ecuación que modela la dinámica de colisiones:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \beta(i, j)n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{\infty} \beta(i, k)n_i \quad (5)$$

La función de frecuencia de colisiones depende del tipo de movimiento que tengan las partículas. Dentro de la cámara de combustión de un motor diésel los dos movimientos predominantes para este tipo de partículas submicrométricas son el movimiento browniano y el movimiento inercial debido a la turbulencia.

El aerosol en el que se desarrollan las colisiones de partículas de hollín es discreto con un número de Knudsen mucho mayor a uno. En este caso, la ecuación que modela la función de frecuencia de colisiones debidas al movimiento browniano, β_{br} , se obtiene a partir de la teoría cinética de gases [7] y [8] y en el que el tamaño medio de las partículas se determina mediante la ley de potencias, ecuación (1).

$$\beta_{br}(i, j) = \left(\frac{3d_{po}kT}{16\rho_p} \right)^{1/2} \left(\left(\frac{n_{po_i}}{k_{fi}} \right)^{\frac{1}{D_{fi}}} + \left(\frac{n_{po_j}}{k_{fj}} \right)^{\frac{1}{D_{fj}}} \right)^2 \left(\frac{1}{n_{po_i}} + \frac{1}{n_{po_j}} \right)^{1/2} \quad (6)$$

Donde k es la constante de Boltzmann, T es la temperatura y ρ_p es la densidad del hollín. Se ha tomado el valor de 1850 kg/m^3 , [9].

La función de frecuencia de colisiones debidas al movimiento inercial turbulento, β_T , se modela mediante el análisis de las velocidades relativas entre las partículas confinadas en los vórtices.

$$\beta_T(i, j) = 1.43d_{po}^2 \left(\left(\frac{n_{po_i}}{k_{fi}} \right)^{\frac{1}{D_{fi}}} + \left(\frac{n_{po_j}}{k_{fj}} \right)^{\frac{1}{D_{fj}}} \right)^2 \left| \frac{1}{\gamma_i} - \frac{1}{\gamma_j} \right| \frac{\varepsilon_d^{3/4}}{\nu^{1/4}} \quad (7)$$

Donde γ_i es un tiempo característico de movimiento de la partícula i , y es la relación entre el coeficiente de fricción de la partícula i y su masa. El coeficiente de fricción de la partícula i se determina mediante el coeficiente difusivo de las partículas en el aerosol. Los coeficientes difusivos de las partículas se han tomado de [10]. Además, ε_d es la tasa de disipación energética dentro de los vórtices con dimensiones características menores a la microescala de Kolmogorov y ν es la viscosidad cinemática del gas portador, en este caso, los productos de la combustión.

2.4. Desarrollo de la simulación

Se ha desarrollado un código en Matlab que parte de unas condiciones iniciales de operación del motor, como son el régimen del motor, el perfil térmico medio y la presión media dentro de la cámara de combustión. Para iniciar la ejecución del código, y según las hipótesis consideradas, se parte de una distribución de tamaños de partículas que responde a un delta de Dirac, en la que todas las partículas primarias están completamente formadas y tienen el mismo diámetro. Como núcleo de la simulación está la ecuación dinámica de colisión que, a partir de la distribución de tamaños de partículas y la función de frecuencia de colisión de los movimientos físicos, permite simular la colisión de las partículas. Por último, se resuelve para cada paso de tiempo el sistema de ecuaciones diferenciales planteado, de tal manera que se obtiene la distribución de tamaños de partículas a lo largo del tiempo.

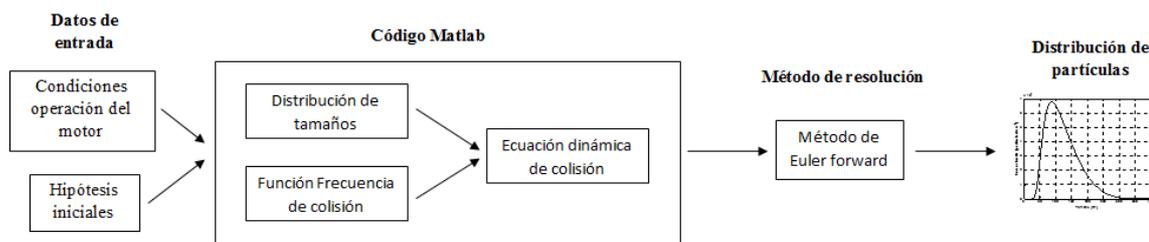


Figura 1: Desarrollo de la simulación.

3. Técnicas experimentales

El motor elegido para los ensayos es un Nissan YD2.2, diésel de inyección directa, sobrealimentado y con *intercooler*. El sistema de inyección es mediante una bomba, modelo VP44, contralada electrónicamente. El freno utilizado es eléctrico, de la marca Schenck, modelo Dynas III LI250, consistente en una máquina asíncrona. Los valores de presión media en la cámara de combustión han sido medidos mediante un transductor piezoeléctrico Kistler modelo Z17090sp149. El ángulo de giro del cigüeñal ha sido medido con un codificador angular óptico AVL364. Estas dos señales han sido recogidas mediante un osciloscopio Yokogawa OR1400. Para la medida de la función de distribución de tamaños de partículas en el tubo de escape se ha utilizado un SMPS (*Scanning Mobility Particle Sizer*) con el que se clasifican las partículas en función del tamaño de

movilidad de éstas. El SMPS utilizado es de la empresa TSI, modelo 3936L10, y el contador de partículas es el CPC modelo 3010S.

Se ha tomado como punto de funcionamiento del motor uno representativo de la conducción urbana del ciclo de homologación de vehículos ligeros. Los datos más representativos de este punto de funcionamiento se resumen en la tabla 1.

Tabla 6: Datos experimentales de ensayo del motor.

Régimen del motor (rpm):	1525
Par medio (N·m):	45.4
Relación Aire/Combustible, A/F :	32
Tasa de recirculación de gases de escape, EGR (%):	20

La presión media experimental se obtiene en el ensayo de motor. A partir de esta presión media experimental y mediante el uso de un modelo termodinámico cero-dimensional dentro de la cámara de combustión se puede obtener la temperatura media dentro de la cámara de combustión. Para el punto de funcionamiento del motor, los resultados se muestran en la figura 2. El punto inicial se ha situado en el instante en el que la combustión empieza dentro de la cámara de combustión.

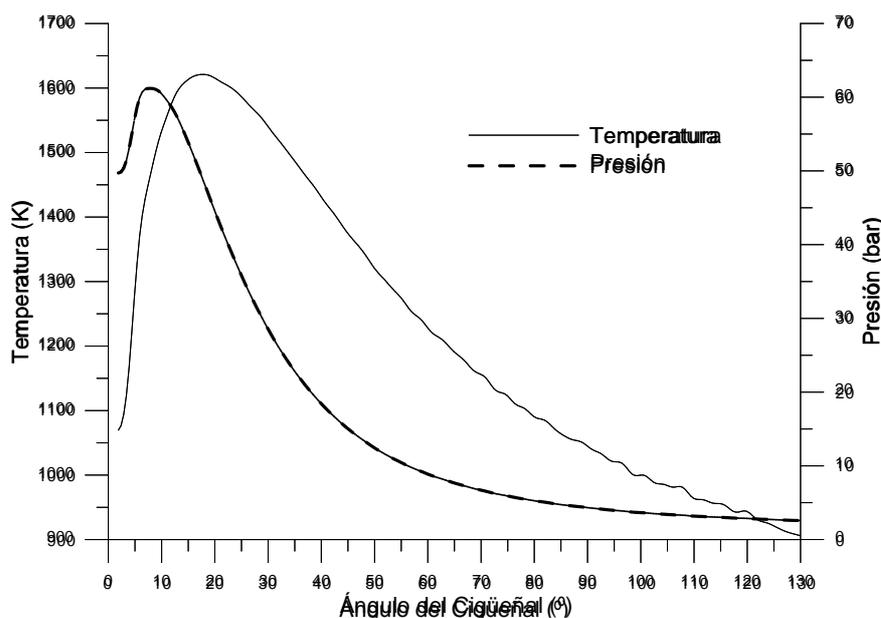


Figura 2: Presión media y temperatura media dentro de la cámara de combustión.

4. Resultados

4.1. Relativos a la función de la frecuencia de colisiones

Para un aerosol discreto dentro de la cámara de combustión los dos movimientos predominantes de las partículas son los debidos al movimiento browniano y el inercial turbulento. En la figura 3 se muestra los valores de la función de frecuencias de colisiones para una temperatura de 1600 K, y una dimensión fractal de referencia, en el modelo exponencial, de 1.8.

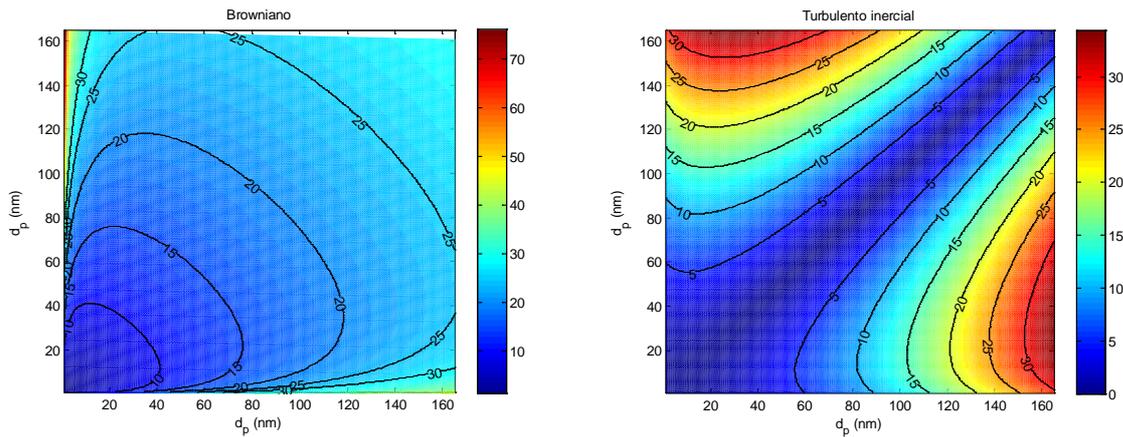


Figura 3: Valores de la función de frecuencias de colisiones ($\mu\text{m}^3/\text{ms}$) para movimientos browniano (izquierda) y turbulento inercial (derecha) en función del tamaño promedio de las partículas que colisionan.

Se puede comprobar como para el caso browniano, las colisiones predominantes suceden entre partículas muy pequeñas y partículas mucho mayores, es decir cuando existe una diferencia muy significativa entre los tamaños de las partículas que colisionan. Cuanto mayor es el tamaño de las partículas menor es el movimiento de éstas debido al choque aleatorio de las moléculas del gas portador contra éstas. De esta manera, casi se pueden considerar que son estáticas desde un punto de vista del movimiento browniano. Justo sucede lo contrario cuando menor es el tamaño de las partículas.

Por otro lado, para el caso de turbulento inercial, las colisiones predominantes se dan entre partículas mayores con una diferencia significativa entre sus masas. Al ser un movimiento de tipo inercial, aquellas partículas con igual masa y en las mismas condiciones termo-fluidomecánicas tienen la misma inercia, por lo que el valor de la función de frecuencia de colisión entre ellas sería nula, (bisectriz de la figura 3 derecha).

Dentro de la cámara de combustión los movimientos que generan las colisiones de partículas no son aislados, sino que se suceden de manera simultánea. De tal manera que la función de la frecuencia de colisiones resultante, mostradas en la figura 4, es la combinación de las funciones de frecuencias de colisiones debidas al movimiento browniano y al movimiento turbulento inercial.

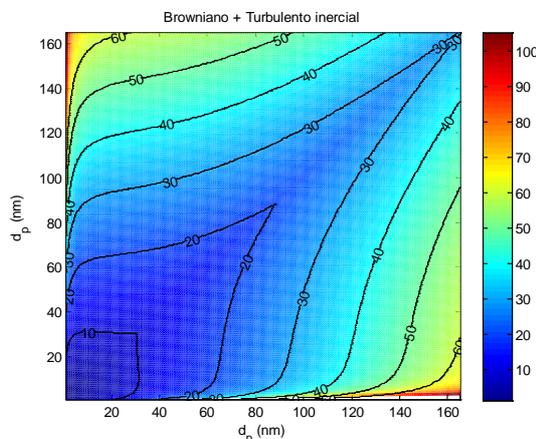


Figura 4: Valores de la función de frecuencias de colisiones ($\mu\text{m}^3/\text{ms}$) para movimientos browniano y turbulento inercial combinados.

4.2. Relativos a la distribución de tamaños

En la figura 5 se muestra la distribución de tamaños de partículas obtenida experimentalmente con el SMPS y normalizada con la máxima concentración de partículas para un tamaño dado. Además, con las condiciones operativas del motor y un tamaño de partículas primarias de 25 nm se muestran los resultados de la simulación del modelo de colisiones propuesto modificando la dimensión fractal de referencia que se utiliza en el modelo exponencial entre la dimensión fractal y el tamaño promedio de las partículas. El gráfico de la parte superior derecha de la figura 5 es la ampliación, marcado con un rectángulo, de las evoluciones alrededor del máximo de las curvas.

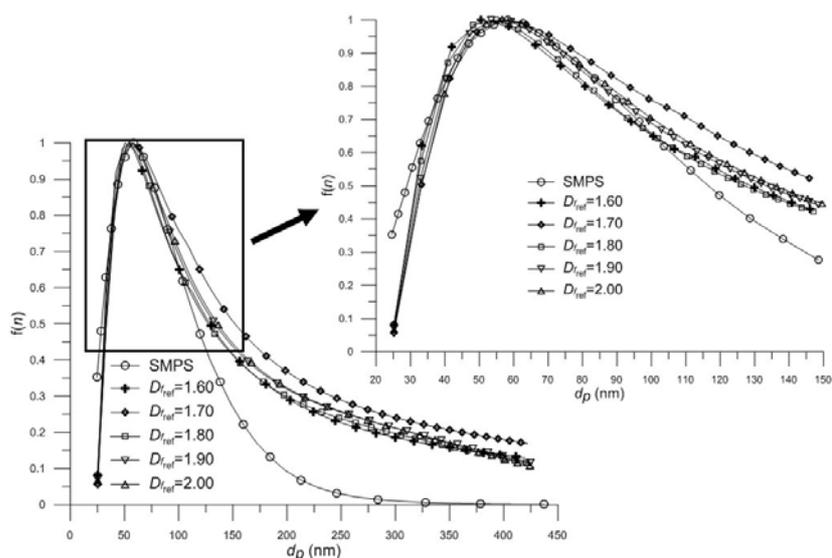


Figura 5: Distribución de tamaños normalizada obtenida con el SMPS y con el modelo propuesto con dimensiones fractales de referencia diferentes.

Se puede apreciar en la figura 5 que la media de tamaños obtenidos con la simulación es del orden de la media de los tamaños obtenidos experimentalmente. Además, se observa que las curvas resultantes de la simulación con dimensión fractal de referencia de 1.9 es la que más se acerca a la distribución de tamaños medida experimentalmente. Este resultado es del mismo orden que el que se obtiene de manera semiexperimental cuyo valor medio es de 1.876, [4].

5. Conclusiones

Se ha desarrollado un modelo semiexperimental con el que se pueden simular las evoluciones temporales de la función de distribución de tamaños de hollín que se producen dentro de la cámara de combustión de un motor diésel. Este modelo se ha aplicado a un motor moderno real trabajando en un punto del ciclo de homologación de vehículos ligeros. Se obtiene una función de distribución de tamaños del mismo orden que la función de tamaños obtenida experimentalmente.

Aunque el modelo está en su fase inicial de desarrollo, su aplicación podría extenderse al conjunto de ciclos de conducción o de homologación de vehículos para cuantificar la emisión tanto instantánea como acumulada al final del ciclo o de los subciclos que lo componen. De esta forma, el modelo, una vez validado, podría ser de utilidad, en sustitución de equipos experimentales de elevado coste, para el diseño o calibración de motores, al estimar las condiciones e instantes que más contribuyen a la emisión de partículas, a la peligrosidad de éstas (función de su tamaño) o a la saturación de los filtros.

6. Referencias

- [1] BONCZYK, P.A.HALL, R.J. *Fractal properties of soot agglomerates*. Langmuir, 1991, 7, 1274–1280.

- [2] 2008/692/EC. Implementing and amending regulation (EC) n. 715/2007 of the European parliament and of the council on type-approval of motor vehicles with respect to emissions from light passenger and commercial vehicles (EURO 5 and EURO 6) and on access to vehicle repair and maintenance information.
- [3] FUCHS, N.A. *The Mechanics of Aerosol*. New York: Dover Publications, 1989. 408 p.
- [4] LAPUERTA, M. BALLESTEROS, R. MARTOS, F.J. *The effect of diesel engine conditions on the size and morphology of soot particles*. International Journal of Vehicle Design, 2009, 50, 91-106.
- [5] LAPUERTA, M. MARTOS, F.J. MARTÍN-GONZÁLEZ, G. *Geometrical determination of the lacunarity of agglomerates with integer fractal dimension*. Journal of Colloid and Interface Science, 2010, 346, 23-31.
- [6] LIEBOVITCH, L.S. TOTH, T. *A fast algorithm to determine fractal dimensions by box counting*. Physics Letters A, 1989, 141, 386-390.
- [7] FRIEDLANDER, S.K. *Smoke, Dust, and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics*. New York: Oxford University Press, 2000. 407 p.
- [8] CAI, J. SORENSEN, C.M. *Diffusion of fractal aggregates in the free molecular regime*. Physical Review E, 1994, 50, 3397-3400.
- [9] LAPUERTA, M. MARTOS, F.J. HERREROS, J.M. *Effect of engine operating conditions on the size of primary particles composing diesel soot agglomerates*. Journal of Aerosol Science, 2007, 38, 455-466
- [10] TANDON, P. ROSNER, D.E. *Translational Brownian diffusion coefficient of large (multiparticulate) suspended aggregates*. Industrial and Engineering Chemistry Research, 1995, 34, 3265-3277.