



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA  
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO  
INSTITUTO CMT - MOTORES TÉRMICOS

---

DESARROLLO DE UN MODELO DE EMISIÓN DE PARTÍCULAS DE HOLLÍN EN  
MOTORES GDI: DISEÑO Y PRIMERA FASE DE IMPLEMENTACIÓN

Trabajo final del **Máster Universitario en Ingeniería Aeronáutica**

Realizado por **Iván Isabel Lumbreras**

Tutorizado por **José Javier López Sánchez**

Curso Académico: **2020/2021**

# Resumen

Para cumplir con la normativa medioambiental vigente, las emisiones contaminantes de los motores de gasolina de inyección directa están reguladas por leyes que se van haciendo más restrictivas con el paso del tiempo. Así, se va incrementando la complejidad de los ensayos experimentales y éstos se van alejando de los procesos estándar.

Por ello, el presente Trabajo Final de Máster aborda la primera fase de implementación de un modelo de simulación que sustituya a dichos procedimientos experimentales y permita la determinación del número, masa y distribución de tamaño de las partículas de hollín, implementado principalmente en *MATLAB* con la ayuda de otros programas informáticos.

El modelo se basa en una aproximación multizona en la que se detallan los procesos de formación de partículas y las reacciones de cinética química que tienen lugar en la cámara de combustión, tomando como principales fuentes de contaminación la película de combustible remanente tanto en el inyector como en las paredes de la cámara de combustión y la mezcla aire-combustible no homogénea.

A su vez, el modelo se divide en distintos submodelos conectados entre sí que pueden ser validados independientemente si se obtienen los datos de referencia correspondientes.

**Palabras clave:** emisión de partículas, modelo, hollín, motor GDI, PN, PM

# Abstract

In order to achieve current environmental regulations, the polluting emissions from direct injection gasoline engines are subject to regulations which are becoming more restrictive over time. Thus, the complexity of the experimental tests is increasing and they are moving away from the standard procedures.

For this reason, the present Master's Thesis tackles the first phase of implementation of a simulation model that replaces these experimental processes and allows the determination of soot particles mass, number and size distribution, implemented mainly in *MATLAB* with the help of other software.

The model is based in a multi-zone approach in which particles formation processes and chemical reaction kinetics that take place in the combustion chamber are detailed, with residual fuel film in the injector and in the combustion chamber walls and the inhomogeneous air-fuel mixture as principal contamination sources.

In turn, the model is divided into different interconnected submodels that can be independently validated if the corresponding reference data is obtained.

**Keywords:** particle emissions, model, soot, GDI engine, PN, PM

# Resum

Per a complir amb la normativa mediambiental vigent, les emissions contaminants dels motors de gasolina d'injecció directa estan regulades per lleis que es van fent més restrictives amb el pas del temps. Així, es va incrementant la complexitat dels assajos experimentals i aquests es van allunyant dels processos estàndard.

Per això, el present Treball Final de Màster aborda la primera fase d'implementació d'un model de simulació que substituïska a aquests procediments experimentals i permeta la determinació del número, massa i distribució de grandària de les partícules de sutge, implementat principalment en *MATLAB* amb l'ajuda de altres programari.

El model es basa en una aproximació multizona en la qual es detallen els processos de formació de partícules i les reaccions de cinètica química que tenen lloc en la cambra de combustió, prenent com a principals fonts de contaminació la pel·lícula de combustible romanent tant en l'injector com en les parets de la cambra de combustió i la mescla aire-combustible no homogènia.

Al seu torn, el model es divideix en diferents submodels connectats entre si que poden ser validats independentment si s'obtenen les dades de referència corresponents.

**Paraules clau:** emissió de partícules, model, sutge, motor GDI, PN, PM

# Índice general

Resumen	I
Abstract	II
Resum	III
Índice de figuras	VI
Índice de tablas	VIII
Nomenclatura	IX
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Fundamentos teóricos</b>	<b>3</b>
2.1. Motores de combustión interna alternativos (MCIA)	3
2.1.1. Motores de encendido provocado (MEP)	5
2.2. Fundamentos de formación de partículas	6
2.2.1. Pirólisis	6
2.2.2. Nucleación	7
2.2.3. Aglomeración	8
2.2.4. Coalescencia	8
2.2.5. Crecimiento superficial	8
2.2.6. Oxidación	9
2.3. Formación de partículas en motores GDI	10
2.3.1. Películas líquidas de combustible	10
2.3.2. Mezcla no homogénea	13
2.3.3. Fuentes adicionales de formación de partículas	15
2.4. Técnicas de simulación	16
<b>3. Estructura del modelo</b>	<b>18</b>
3.1. Software	18
3.1.1. GT-Suite	18
3.1.2. MATLAB	19
3.1.3. SWEEP	19
3.1.4. Cantera	19
3.2. Submodelos	19
3.2.1. Interacción entre los submodelos	20
3.3. Modelo de cinética química de las especies precursoras del hollín	21
3.3.1. Cinética química en fase gaseosa	21

3.3.2. Ecuaciones de conservación . . . . .	24
3.4. Modelo de la película de combustible en el inyector . . . . .	27
3.5. Modelo de evaporación . . . . .	28
3.5.1. Evaporación de la película en el inyector . . . . .	28
3.5.2. Evaporación de la película en la pared . . . . .	30
3.5.3. Homogeneidad de la mezcla . . . . .	33
3.6. Modelo del chorro . . . . .	35
3.6.1. Ecuaciones de conservación y condiciones de contorno . . . . .	37
3.6.2. Resolución . . . . .	38
3.6.3. Interacción con las paredes del cilindro . . . . .	39
3.7. Modelo de partículas de hollín . . . . .	43
3.7.1. Procesos de formación de partículas . . . . .	43
3.7.2. Distribución de densidad numérica . . . . .	45
3.7.3. Distribución de tamaños . . . . .	45
3.8. Modelo de inyección . . . . .	46
<b>4. Validación del modelo . . . . .</b>	<b>47</b>
4.1. Modelo de validación completo . . . . .	47
4.1.1. Sistema de medida . . . . .	49
4.2. Ejemplo de aplicación . . . . .	50
<b>5. Resultados obtenidos . . . . .</b>	<b>52</b>
5.1. Ley de Wiebe . . . . .	52
5.2. Fracciones másicas de combustible . . . . .	53
5.3. Gastos . . . . .	54
5.4. Temperatura adiabática de llama . . . . .	55
5.5. Factor de corrección . . . . .	58
<b>6. Conclusiones y estudios futuros . . . . .</b>	<b>60</b>
6.1. Conclusiones . . . . .	60
6.2. Estudios futuros . . . . .	62
<b>7. Bibliografía . . . . .</b>	<b>64</b>
<b>8. Presupuesto . . . . .</b>	<b>67</b>
8.1. Coste del personal . . . . .	67
8.2. Coste computacional . . . . .	68
8.3. Coste fungible . . . . .	68
8.4. Coste total . . . . .	69
<b>9. Anexos . . . . .</b>	<b>70</b>
9.1. Validación del modelo simplificado de temperatura adiabática de llama . . . . .	70
9.2. Código <i>MATLAB</i> principal de cálculo . . . . .	74
9.3. Función <i>MATLAB</i> para el cálculo de la temperatura de llama adiabática . . . . .	77
9.4. Función <i>MATLAB</i> para realizar las representaciones gráficas . . . . .	79

# Índice de figuras

2.1. Clasificación de los tipos de motores [13] . . . . .	3
2.2. Ciclo de trabajo de un motor de cuatro tiempos [29] . . . . .	4
2.3. Diagrama p-V en un ciclo de trabajo [30] . . . . .	5
2.4. Partículas de hollín [2] . . . . .	6
2.5. Proceso de pirólisis con formación de aromáticos [7] . . . . .	7
2.6. Aglomeración de partículas de hollín [4] . . . . .	8
2.7. Esquema reacciones HACA [6] . . . . .	9
2.8. Procesos de formación de partículas [1] . . . . .	10
2.9. Estudio óptico de la película líquida de combustible [8] . . . . .	11
2.10. Estudio de las emisiones de partículas para un motor GDI en condiciones de arranque en frío [9] . . . . .	12
2.11. Distribución de tamaños de las partículas [9] . . . . .	12
2.12. Emisiones de un motor de gasolina según la relación aire-combustible [29] . . . . .	13
2.13. Estudio de la homogeneidad de la mezcla para distintos SOI en simulaciones CFD [9] . . . . .	14
2.14. Número de partículas en función de la relación aire-combustible ( $\lambda$ ) [10] . . . . .	14
3.1. Esquema de los submodelos que forman la estructura del modelo . . . . .	18
3.2. Definición del número de zonas según la distribución de $\phi$ [1] . . . . .	21
3.3. Zonas en la cámara de combustión [1] . . . . .	22
3.4. Representación de las zonas quemadas y sin quemar [1] . . . . .	22
3.5. Forma aproximada de la ley de Wiebe y su derivada [13] . . . . .	24
3.6. Formación de película de combustible durante la inyección [1] . . . . .	27
3.7. Película de combustible en los agujeros del inyector [1] . . . . .	28
3.8. Número de partículas formadas para distintas geometrías del inyector [1] . . . . .	29
3.9. Simulaciones CFD del proceso de evaporación [1] . . . . .	29
3.10. Esquema de la película de combustible en la pared [45] . . . . .	30
3.11. Curva de vida de la gota y regímenes de ebullición asociados [47] . . . . .	31
3.12. Evolución del índice de homogeneidad con el tiempo de mezcla adimensional [27] . . . . .	33
3.13. Evolución del índice de homogeneidad con el número de Weber [27] . . . . .	34
3.14. Evolución del dosado relativo en la cámara de combustión [1] . . . . .	34
3.15. Esquema del modelo de chorro [19] . . . . .	36
3.16. Resumen del modelo del chorro [19] . . . . .	38
3.17. Regímenes de impacto del chorro en las paredes del cilindro [32] . . . . .	40
3.18. Proceso iterativo para el cálculo de $M_0$ [17] . . . . .	43
4.1. Esquema del proceso de validación [1] . . . . .	48
4.2. Dispositivo de medición de partículas de hollín [1] . . . . .	49
4.3. Validación del modelo de reparto de la temperatura [1] . . . . .	50

5.1. Ley de quemado de Wiebe . . . . .	53
5.2. Gasto de combustible . . . . .	54
5.3. Gasto total de la zona sin quemar . . . . .	55
5.4. Perfil de temperatura obtenido por <i>Cantera</i> . . . . .	56
5.5. Perfil de temperatura obtenido por simplificación . . . . .	57
5.6. Temperatura en cada una de las zonas de la cámara de combustión obtenida con modelo simplificado . . . . .	58
5.7. Evolución del factor de corrección en función del dosado relativo . . . . .	59
8.1. Diagrama de Gantt . . . . .	67
9.1. Comparación entre combustión pura y aire con EGR . . . . .	71
9.2. Comparación entre perfiles de temperatura adiabática de llama . . . . .	72
9.3. Error relativo entre perfiles de temperatura adiabática de llama . . . . .	72
9.4. Comparativa entre factores de corrección . . . . .	73
9.5. Error relativo entre factores de corrección . . . . .	74



# Índice de tablas

3.1. Composición del aire puro . . . . .	22
3.2. Valores adoptados por $G$ . . . . .	38
3.3. Parámetros para la ley de Arrhenius [34] . . . . .	45
4.1. Especificaciones de los motores del banco de trabajo [1] . . . . .	49
5.1. Parámetros orientativos de la Ley de Wiebe . . . . .	52
5.2. $Y_{f,j}$ obtenidos . . . . .	53
5.3. $p_j$ obtenidos . . . . .	54
5.4. Calores específicos, masas y temperaturas de combustible y aire . . . . .	57
5.5. Factores de corrección . . . . .	58
8.1. Costes del personal . . . . .	68
8.2. Coste computacional . . . . .	68
8.3. Coste fungible . . . . .	69
8.4. Coste total del proyecto . . . . .	69
9.1. Temperatura adiabática de llama de cada una de las zonas . . . . .	73

# Nomenclatura

## Por orden alfabético

### Abreviaciones

<i>aTDC</i>	—	Después del Punto Muerto Superior ( <i>After Top Dead Center</i> ) [°]
<i>CA</i>	—	Ángulo de giro del cigüeñal ( <i>Crank Angle</i> ) [°]
<i>CAD</i>	—	Ángulo de giro del cigüeñal en grados ( <i>Crank Angle Degree</i> ) [°]
<i>CFD</i>	—	Dinámica de Fluidos Computacional ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> )
<i>CPC</i>	—	Contador de Condensación de Partículas ( <i>Condensation Particle Counter</i> )
<i>DISI</i>	—	Inyección Directa por Encendido Provocado ( <i>Direct Injection Spark Ignition</i> )
<i>DQMOM</i>	—	Método de Momentos por Cuadratura Directa ( <i>Direct Quadrature Method Of Moments</i> )
<i>ECTS</i>	—	Sistema Europeo de Transferencia y Acumulación de Créditos ( <i>European Credit Transfer and Accumulation System</i> )
<i>EGR</i>	—	Recirculación de Gases de Escape ( <i>Exhaust Gas Recirculation</i> )
<i>EOI</i>	—	Fin De Inyección ( <i>End Of Injection</i> ) [°]
<i>EQR</i>	—	Dosado Relativo ( <i>Equivalence Ratio</i> )
<i>EVO</i>	—	Apertura de la Válvula de Escape ( <i>Exhaust Valve Opening</i> )
<i>GDI</i>	—	Inyección Directa por Gasolina ( <i>Gasoline Direct Injection</i> )
<i>HACA</i>	—	Extracción de Hidrógeno y Adición de Carbono ( <i>Hydrogen Abstraction Carbon Addition</i> )
<i>HCCI</i>	—	Ignición por Compresión de Carga Homogénea ( <i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i> )
<i>IMEP</i>	—	Presión Efectiva Media Indicada ( <i>Indicated Mean Effective Pressure</i> ) [bar]
<i>IVA</i>	—	Impuesto de Valor Añadido [%]
<i>LIF</i>	—	Fluorescencia Inducida por Láser ( <i>Laser-induced Fluorescence</i> )
<i>MCIA</i>	—	Motores de Combustión Interna Alternativos
<i>MEC</i>	—	Motores de Encendido por Compresión
<i>MEP</i>	—	Motores de Encendido Provocado
<i>MOMIC</i>	—	Método de Momentos con Cierre Interpolado ( <i>Method Of Moments with Interpolated Closure</i> )
<i>NEDC</i>	—	Nuevo Ciclo de Conducción Europeo ( <i>New European Driving Cycle</i> )
<i>OOP</i>	—	Programación Orientada en Objeto ( <i>Object-oriented Programming</i> )
<i>PAH</i>	—	Hidrocarburo Aromático Policíclico ( <i>Polycyclic Aromatic Hydrocarbon</i> )

<i>PM</i>	—	Masa de Partículas ( <i>Particle Mass</i> )
<i>PMI</i>	—	Punto Muerto Inferior [°]
<i>PMS</i>	—	Punto Muerto Superior [°]
<i>PN</i>	—	Número de Partículas ( <i>Particle Number</i> )
<i>PSD</i>	—	Distribución de Tamaño de Partículas ( <i>Particle Size Distribution</i> )
<i>QMOM</i>	—	Método de Momentos por Cuadratura ( <i>Quadrature Method Of Moments</i> )
<i>SMD</i>	—	Diámetro Medio de Sauter ( <i>Sauter Mean Diameter</i> ) [ <i>m</i> ]
<i>SOC</i>	—	Comienzo de Combustión ( <i>Start Of Combustion</i> ) [°]
<i>SOI</i>	—	Comienzo de Inyección ( <i>Start Of Injection</i> ) [°]
<i>TDC</i>	—	Punto Muerto Superior ( <i>Top Dead Center</i> ) [°]
<i>ECU</i>	—	Unidad de control de motor ( <i>Engine Control Unit</i> )
<i>WLTP</i>	—	Procedimiento Mundial Armonizado para el Ensayo de Vehículos Ligeros ( <i>World Harmonized Light-duty Vehicle Test Procedure</i> )

### Símbolos genéricos

$\dot{m}$	—	Gasto [ <i>kg/s</i> ]
$\dot{q}$	—	Flujo de calor [ <i>W/m<sup>2</sup></i> ]
<i>A</i>	—	Parámetro de ley exponencial
<i>a</i>	—	Grado de completitud
<i>a</i>	—	Valor aleatorio
<i>A<sub>s</sub></i>	—	Área de superficie activa [ <i>m<sup>2</sup></i> ]
<i>B</i>	—	Diámetro del cilindro [ <i>m</i> ]
<i>C</i>	—	Constante
<i>C</i>	—	Parámetro de ley exponencial
<i>c</i>	—	Calor específico [ <i>J/gK</i> ]
<i>c</i>	—	Concentración molar [ <i>mol/m<sup>3</sup></i> ]
<i>C<sub>A</sub></i>	—	Coste de amortización [€]
<i>C<sub>lld</sub></i>	—	Densidad lineal de las líneas de contacto en la película líquida [ <i>kg/m</i> ]
<i>c<sub>m</sub></i>	—	Velocidad media del pistón [ <i>m/s</i> ]
<i>D</i>	—	Coeficiente de difusión binario combustible/aire [ <i>m<sup>2</sup>/s</i> ]
<i>D</i>	—	Parámetro de ley exponencial
<i>d</i>	—	Diámetro [ <i>m</i> ]
<i>d'<sub>d</sub></i>	—	Diámetro medio de Sauter [ <i>m</i> ]
<i>E</i>	—	Energía de activación química [ <i>J/mol</i> ]
<i>E</i>	—	Parámetro que afecta al gradiente de la función
<i>F</i>	—	Dosado
<i>F</i>	—	Factor de corrección
<i>F</i>	—	Función
<i>f</i>	—	Función
<i>G</i>	—	Parámetro con diferentes valores en función de la variable
<i>H</i>	—	Flujo de entalpía [ <i>J</i> ]
<i>h</i>	—	Altura [ <i>m</i> ]
<i>h</i>	—	Entalpía [ <i>J</i> ]
<i>I</i>	—	Flujo de momento axial [ <i>Nm</i> ]
<i>I</i>	—	Número de especies reactivas
<i>I<sub>H</sub></i>	—	Factor de no homogeneidad

$J$	—	Número de propiedades de las partículas de hollín
$K$	—	Constante para el cálculo del perfil de temperatura con EGR
$k$	—	Constante del perfil gaussiano
$k$	—	Núcleo de coalescencia [ $m^3/s$ ]
$k_B$	—	Constante de Boltzmann [ $J/K$ ]
$Kn$	—	Número de Knudsen
$l$	—	Longitud [ $m$ ]
$L_{st}$	—	Relación aire-combustible estequiométrica
$La$	—	Número de Laplace
$M$	—	Masa molar [ $kg/mol$ ]
$M$	—	Momento
$m$	—	Masa [ $kg$ ]
$m$	—	Parámetro de forma
$n$	—	Densidad numérica [ $m^{-3}$ ]
$n$	—	Exponente de temperatura en ley de Arrhenius
$n$	—	Número de zonas
$n$	—	Régimen de giro [ $rpm$ ]
$N_A$	—	Número de Avogadro [ $mol^{-1}$ ]
$P$	—	Precio [€]
$p$	—	Fracción de combustible respecto al total en cada zona
$p$	—	Presión [ $Pa$ ]
$Pr$	—	Número de Prandtl
$Q$	—	Flujo de variable conservada
$Q$	—	Parámetro en la corrección de la tensión superficial
$q$	—	Variable conservada
$R$	—	Constante de los gases ideales [ $J/(mol \cdot K)$ ]
$R$	—	Ratio por unidad de volumen [ $1/m^3s$ ]
$r$	—	Coordenada radial [ $m$ ]
$Re$	—	Número de Reynolds
$S$	—	Penetración del chorro [ $m$ ]
$s$	—	Frente del chorro [ $m$ ]
$Sc$	—	Número turbulento de Schmidt
$Sh$	—	Número de Sherwood
$T$	—	Temperatura [ $K$ ]
$t$	—	Tiempo [ $s$ ]
$T_L$	—	Temperatura de Leidenfrost [ $K$ ]
$T_N$	—	Temperatura de Nukiyama [ $K$ ]
$U$	—	Conjunto de índices
$u$	—	Velocidad axial [ $m/s$ ]
$V$	—	Volumen [ $m^3$ ]
$W$	—	Peso [ $N$ ]
$We$	—	Número de Weber
$X$	—	Fracción molar
$X$	—	Parámetro de ley exponencial
$x$	—	Coordenada axial [ $m$ ]
$Y$	—	Fracción másica
$Y$	—	Parámetro de ley exponencial

**Símbolos griegos**

$\dot{\omega}$	—	Velocidad de reacción química [ $mol/m^3s$ ]
$\alpha$	—	Ángulo de giro del cigüeñal [ $^{\circ}$ ]
$\alpha_{dry}$	—	Fracción de secado
$\beta$	—	Núcleo de coagulación
$\beta$	—	Ratio característica para el intercambio de masa entre la zona de la pared y el resto
$\beta_1$	—	Función de la densidad lineal de las líneas de contacto del líquido
$\beta_2$	—	Función para la fracción de secado
$\Delta$	—	Incremento
$\delta$	—	Espesor de la película de combustible [ $m$ ]
$\Delta\alpha_c$	—	Duración de la combustión [ $^{\circ}$ ]
$\eta$	—	Eficiencia de la colisión
$\gamma$	—	Ratio de división
$\lambda$	—	Conductividad térmica [ $W/(m \cdot K)$ ]
$\lambda$	—	Relación aire-combustible relativa
$\mu$	—	Viscosidad dinámica [ $Pa \cdot s$ ]
$\nu$	—	Coefficiente estequiométrico
$\nu$	—	Viscosidad cinemática [ $m^2/s$ ]
$\phi$	—	Dosado relativo
$\rho$	—	Densidad [ $kg/m^3$ ]
$\sigma$	—	Tensión superficial [ $N/m$ ]
$\tau$	—	Tiempo adimensional
$\theta$	—	Ángulo del cono del chorro [ $^{\circ}$ ]
$\theta$	—	Propiedad de la partícula correspondiente
$\xi$	—	Coordenada adimensional
$\zeta$	—	Constante para el ángulo del cono del chorro

### Subíndices

0	—	Inicial
<i>ad</i>	—	Adiabática
<i>a, ∞</i>	—	Condiciones ambiente lejos del orificio del inyector
<i>b</i>	—	Quemado
<i>break</i>	—	Ruptura
<i>c</i>	—	Crítico
<i>chem</i>	—	Químico
<i>cl</i>	—	Sobre el eje
<i>comb</i>	—	Comburente
<i>cond</i>	—	Condensación
<i>cyl</i>	—	Cilindro
<i>d</i>	—	Gota
<i>dry</i>	—	Parte seca
<i>end</i>	—	Final
<i>estoc</i>	—	Estocástico
<i>evap</i>	—	Evaporación
<i>exh</i>	—	Escape
<i>f</i>	—	Combustible
<i>film</i>	—	Película líquida de combustible

<i>fm</i>	—	No molecular
<i>fs</i>	—	Superficie de la película
<i>g</i>	—	Gas
<i>i</i>	—	Especie química
<i>in</i>	—	Incidente
<i>inj</i>	—	Inyección
<i>j</i>	—	Zona según el dosado
<i>l</i>	—	Inferior
<i>l</i>	—	Líquido
<i>lv</i>	—	Fase intermedia entre líquido y vapor
<i>m</i>	—	Medio aritmético
<i>max</i>	—	Máximo
<i>mix</i>	—	Mezcla
<i>n</i>	—	Normal
<i>noz</i>	—	Tobera
<i>par</i>	—	Partículas
<i>pen</i>	—	Penetración
<i>prestage</i>	—	Zona previa al final del inyector
<i>rail</i>	—	Conducto
<i>ref</i>	—	Referencia
<i>sat</i>	—	Saturación
<i>sf</i>	—	Flujo de deslizamiento
<i>st</i>	—	Estequiométrico
<i>surf</i>	—	Crecimiento superficial
<i>tip</i>	—	Zona final del orificio del inyector
<i>TOT</i>	—	Total
<i>tr</i>	—	Media armónica
<i>u</i>	—	Superior
<i>ub</i>	—	Sin quemar
<i>v</i>	—	Vapor
<i>vl</i>	—	Película de vapor
<i>w</i>	—	Pared del cilindro
<i>wet</i>	—	Parte mojada

**Superíndices**

<i>i</i>	—	Índice de sumatorio
<i>j</i>	—	Instante temporal

# Capítulo 1

## Introducción

El cambio climático es una de las problemáticas más importantes de la actualidad. Para lidiar con ello, continuamente se ponen en vigor nuevas normativas que son cada vez más restrictivas con la contaminación. En lo referente a automóviles, en septiembre de 2015 entró en vigor la norma europea Euro 6 con la que los fabricantes de este tipo de vehículos están obligados a diseñar coches menos contaminantes en partículas (que se analizan en este trabajo) y óxidos de nitrógeno ( $NO_x$ ). De hecho, durante 2020 se impuso una nueva norma aún más restrictiva: la Euro 6d, que pretende reducir en un 80% las emisiones de gases de efecto invernadero en el año 2050 respecto 1990 [36]. Además, como alternativa a los vehículos propulsados por motores de combustión interna, durante los últimos años se ha intensificado el uso de automóviles híbridos o totalmente eléctricos.

Para cumplir con las especificaciones detalladas por las normas anteriormente explicadas, se llevan a cabo una serie de ensayos sobre los vehículos, como por ejemplo el procedimiento WLTP [21]. Debido a que la normativa se va volviendo más restrictiva con el paso de los años, dichos ensayos son cada vez más complejos y se van distanciando de los procesos estándar. Esto lleva a que en la actualidad se opte por los métodos de simulación para reducir los costes y los inconvenientes de los procedimientos de medida experimentales, a la vez que se cumple con las leyes medioambientales.

Entre las fuentes de contaminación previamente citadas, este estudio se centra en la emisión de partículas de hollín. Como se ha explicado previamente, es de vital importancia su reducción debido a que están catalogadas como la segunda causa más importante del cambio climático [38]. Además, suponen un grave peligro para la salud pública, ya que puede causar diferentes enfermedades respiratorias en el ser humano que, con una exposición prolongada, derivan en cáncer de pulmón [39]. Por último, cabe destacar que las partículas más peligrosas para el ser humano son las de menor tamaño.

Por lo tanto, en este estudio se lleva a cabo una investigación sobre la simulación de los procesos de formación de partículas de hollín en motores de gasolina de inyección directa en comparación con datos recogidos experimentales. Así, se desarrolla un modelo, que constará de distintos submodelos, implementado principalmente en el software de programación matemática *MATLAB*, que podrá interactuar con otros programas necesarios para el correcto funcionamiento del modelo. Además, dicho modelo se diseñará con una estructura orientada a objetos (OOP) [37], lo que permitirá activar o desactivar los diferentes submodelos en función de lo que se requiera calcular para ahorrar coste computacional.

Previo a la explicación del modelo, se desarrollarán las principales características de funcionamiento de los motores de combustión interna alternativos (MCIA), con especial hincapié en los de gasolina de inyección directa (GDI), que son los que se tratan en este estudio. Además, se detallará todo el fundamento teórico de los procesos de formación de partículas y las principales vías que dan lugar al hollín: películas líquidas de combustible en las paredes de la cámara de combustión, mezcla aire-combustible no homogénea y combustible restante en el inyector.

Los capítulos anteriores se detallarán para el modelo completo, pero al ser la primera fase de implementación como se indica en la portada, tanto el proceso de validación como los resultados obtenidos se ceñirán al submodelo de distribución de temperatura adiabática. Posteriormente, se extraerán las principales conclusiones del trabajo en general y los estudios futuros donde se detallarán las líneas de investigación posibles a partir de este proyecto.

Por último, se desarrollará la bibliografía utilizada durante el trabajo, una estimación del presupuesto del proyecto y los anexos de los que consta el mismo, entre los que se incluyen los códigos de programación utilizados.



# Capítulo 2

## Fundamentos teóricos

Antes de pasar al modelo en sí, se detallan los fundamentos teóricos de los procesos de formación de partículas de hollín en los motores de gasolina de inyección directa (GDI). Para una mejor comprensión de dichos procesos, se realizará un estudio previo de las principales características de los motores de combustión interna alternativos (MCIA) con una mayor profundidad en el tipo de motor que se trata en este trabajo.

### 2.1. Motores de combustión interna alternativos (MCIA)

Un motor se define como un dispositivo que permite transformar cualquier tipo de energía en energía mecánica. A su vez, Payri y Desantes [13] realizan una clasificación de los diversos tipos de motores:

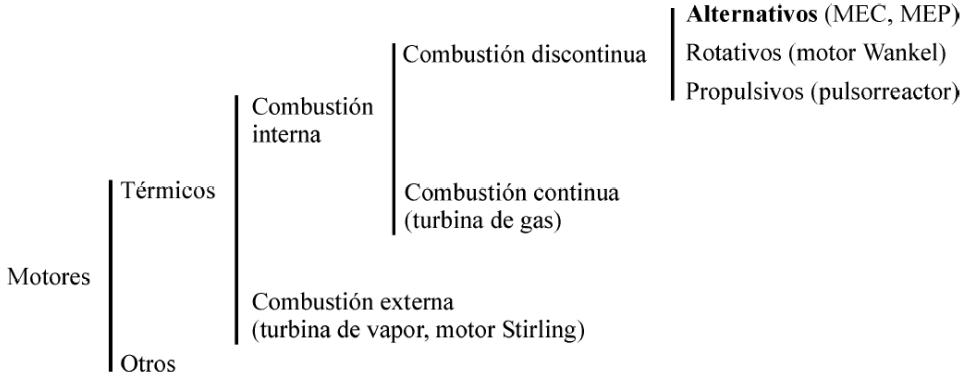


Figura 2.1: Clasificación de los tipos de motores [13]

En el caso del trabajo que se lleva a cabo en este estudio, se analiza un motor térmico de combustión interna alternativo. El motor térmico obtiene la energía mecánica a partir de la energía térmica contenida en un fluido compresible. La combustión es interna al tener lugar en el propio fluido de trabajo con una mezcla de aire y el combustible correspondiente. Además, el proceso de combustión es discontinuo al ocurrir de forma intermitente como se va a estudiar más adelante cuando se analice el ciclo de trabajo del motor. Por último, al desarrollar el fluido el trabajo sobre una superficie móvil, en este caso el pistón, en forma de movimiento rectilíneo, se dispone de un motor alternativo.

Las características más importantes de un MCIA son las siguientes:

- Rendimiento: depende del tipo de motor y las condiciones de operación que lleve en ese momento concreto. Puede alcanzar valores máximos en torno al 55 % en motores de gran tamaño (45 % en diésel y 40 % en gasolina), lo que podría parecer una cifra pequeña, comparada con otro tipo de motores (como por ejemplo, los eléctricos), si bien no lo es tanto considerando las limitaciones termodinámicas.
- Potencia: los MCIAs poseen un amplio rango que puede abarcar desde decenas de Watios hasta varias decenas de Megawatios.
- Combustibles: uno de los puntos fuertes de los MCIAs es que pueden emplear combustibles tanto en fase líquida como en gaseosa o, incluso, en fase sólida si se pulveriza finamente. Cabe destacar que los combustibles líquidos serán más ventajosos debido a su mayor densidad energética.
- Geometría: el conjunto cilindro-pistón que caracteriza este tipo de motores se puede construir en tamaños muy dispares para adaptarse a cada aplicación concreta. Además, se pueden emplear materiales de bajo coste debido a que las temperaturas de trabajo son relativamente bajas.

Aun así, los MCIAs presentan una serie de inconvenientes como son la emisión de gases contaminantes (tema en el que se profundiza en este estudio), la limitación en la potencia máxima, la potencia específica máxima (en este aspecto han sido desplazados por la turbina de gas) y la dependencia del petróleo a la hora de obtener el combustible, al ser la gran mayoría de ellos de origen fósil. Sin embargo, el balance global entre ventajas e inconvenientes se mantiene muy favorable para el MCIAs, ya que no pueden sustituirse de forma amplia excepto en el campo de la aviación.

El ciclo de trabajo de los motores alternativos puede ser de cuatro tiempos o de dos tiempos. En este caso se estudia el primero de ellos, que se ilustra en la siguiente figura:

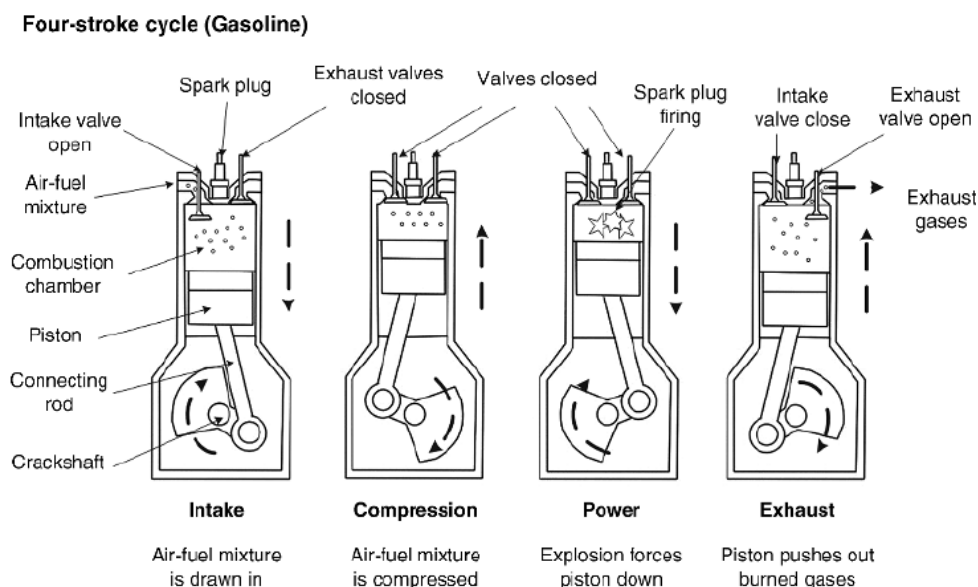


Figura 2.2: Ciclo de trabajo de un motor de cuatro tiempos [29]

A continuación se explican los procesos que tienen lugar en la Figura 2.2:

- Admisión: con las válvulas de admisión abiertas y las de escape cerradas, el pistón se desplaza desde el punto muerto superior (PMS, también conocido en la literatura como TDC) al inferior (PMI) haciendo que disminuya la presión en el interior del cilindro, por lo que se produce la entrada de gases a través del conducto de admisión. Cuando el émbolo llega al PMI, las válvulas de admisión se cierran y se pasa a la siguiente fase.
- Compresión: el pistón se desplaza desde el PMI al PMS con las válvulas cerradas, por lo que, al contrario de la fase anterior, la presión se eleva y el fluido se comprime. Al final de este proceso tiene lugar la combustión con la chispa producida por la bujía, al ser un motor de encendido provocado (MEP) que se explicará en el siguiente apartado.
- Expansión: con la combustión se produce un aumento tanto en la temperatura como en la presión de los gases contenidos en el cilindro, provocando que el pistón se desplace del PMS al PMI, obteniendo trabajo.
- Escape: al alcanzar el émbolo el PMI se abre la válvula de escape y el pistón se desplaza hacia el PMS de tal forma que va expulsando los gases quemados al exterior del cilindro. Al llegar al PMS, se cierra la válvula de escape y tiene lugar un nuevo ciclo.

Además, se representa el ciclo de trabajo presión-volumen que tiene lugar durante los procesos enumerados anteriormente:

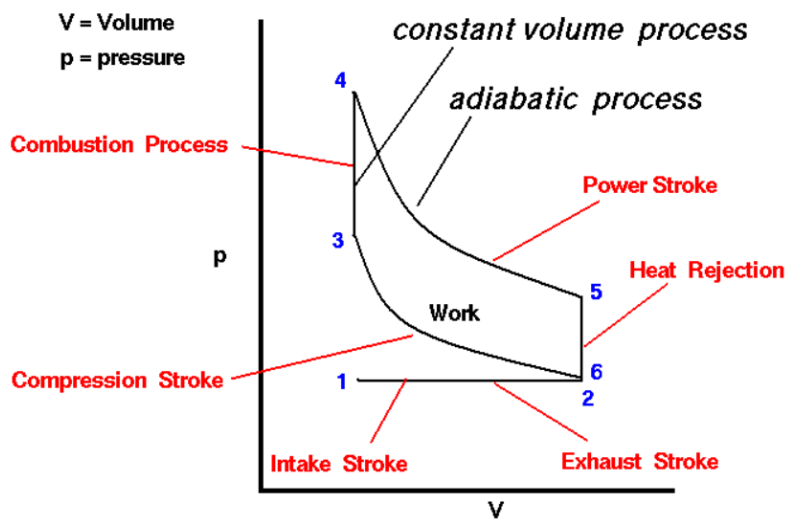


Figura 2.3: Diagrama p-V en un ciclo de trabajo [30]

Lo más destacable de la Figura 2.3 son las variaciones en la presión que se han comentado anteriormente debido a los procesos de compresión y expansión que tienen lugar en las fases que conforman el ciclo de trabajo.

### 2.1.1. Motores de encendido provocado (MEP)

Como ya se ha comentado anteriormente, en el caso de estudio se trata un motor de gasolina de inyección directa (GDI). En primer lugar, cabe destacar que, en contraposición con los motores de encendido por compresión (MEC), la combustión se lleva a cabo por una chispa producida por la bujía, mientras que en los otros motores es debida al aumento de la temperatura por la compresión del movimiento ascendente del pistón, que provoca un

autoencendido de la mezcla.

Por otro lado, la inyección directa permite conseguir que la distribución espacial de la mezcla aire-combustible en la cámara de combustión sea distinta en función de si el motor opera a plena carga o a carga parcial. En el primer caso, el combustible se inyecta durante la fase de admisión, formando una mezcla homogénea en toda la cámara de combustión. Por otro lado, a carga parcial se inyecta el combustible durante la propia combustión buscando una mezcla estratificada con una composición rica en combustible cerca de la bujía y pobre en las zonas alejadas, llegando a conseguir un dosado nulo en la periferia de la cámara. En cambio, en la inyección indirecta se busca una mezcla homogénea en todo el volumen de la cámara de combustión, por lo que para modificar la potencia del motor, es necesario cambiar la cantidad de mezcla (aire y combustible) que se introduce en el cilindro, generalmente a través de una pérdida de carga producida por una válvula de mariposa.

## 2.2. Fundamentos de formación de partículas

Una partícula consiste en un objeto de reducido tamaño que consta de propiedades físicas y químicas. Pueden estar englobadas en cualquier campo científico, pero en el caso de estudio de este trabajo se refiere al material recogido al pasar los gases de escape a través de un filtro [1]. Dichas partículas estarán formadas por una combinación de hollín y líquido. El hollín está compuesto por átomos de carbono e hidrógeno con una ratio de 8 a 1 (por cada átomo de hidrógeno hay ocho de carbono) y un tamaño de, aproximadamente, entre 25 y 700 nm.

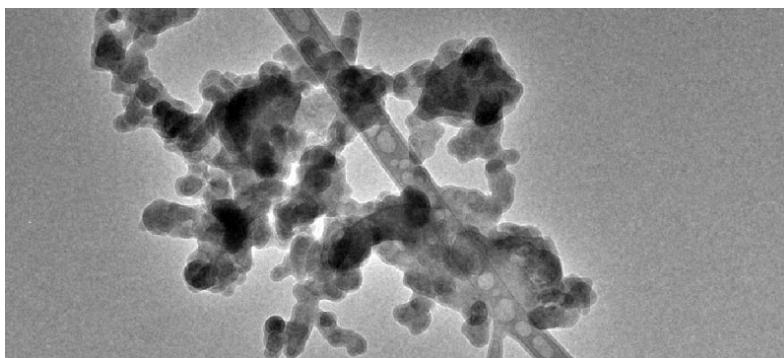


Figura 2.4: Partículas de hollín [2]

En el caso de los motores de inyección directa de encendido provocado que se analizan, el hollín se forma en las zonas ricas en combustible por las altas temperaturas mediante el paso del combustible que no se ha quemado de fase gaseosa a fase sólida. Ese proceso se compone de una fase previa de formación de especies precursoras del hollín seguida de otras seis fases: pirólisis, nucleación, aglomeración, coalescencia, crecimiento superficial y oxidación. Cada una de ellas se explica con más detalle a continuación.

### 2.2.1. Pirólisis

La pirólisis es una degradación térmica de una sustancia en ausencia de oxígeno, por lo que dichas sustancias se descomponen mediante calor, sin que se produzcan las reacciones de combustión [3]. Generalmente, puede ser de dos tipos: *pura* (el oxígeno no está presente en la reacción) y *oxidante* (existe una pequeña parte de oxígeno presente). Este segundo tipo es el

que tiene lugar en las llamas premezcladas ricas en combustible.

La temperatura a la que se realiza la pirólisis se encuentra en un rango entre 300 y 800 °C. Como resultado del proceso, se obtienen las siguientes especies químicas:

- Gas, cuyos componentes básicos son  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$ ,  $CH_4$  y compuestos más volátiles procedentes del craqueo de las moléculas orgánicas, como pueden ser alcanos, alquenos, alquinos y poliacetilenos.
- Residuo líquido, compuesto básicamente por hidrocarburos de cadenas largas como alquitranes, aceites, fenoles, ceras, etc. formados al condensar a temperatura ambiente.
- Residuo sólido, compuesto por todos aquellos materiales no combustibles, los cuales o bien no han sido transformados o proceden de una condensación molecular con un alto contenido en carbón, metales pesados y otros componentes inertes de los residuos.

Si el combustible no es aromático, los productos obtenidos de la pirólisis se ven sometidos a una ciclación o ciclización, que consiste en una serie de reacciones químicas que producen el cierre de estructuras moleculares, lineales y ramificadas formando anillos y, en consecuencia, compuestos aromáticos como, en un primer caso, el benceno. Posteriormente, este primer anillo aromático creado va creciendo y desarrollándose en hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAH) como, por ejemplo, el naftaleno. Este proceso se puede representar de la siguiente manera, donde se han introducido ejemplos de las especies que intervienen en él:

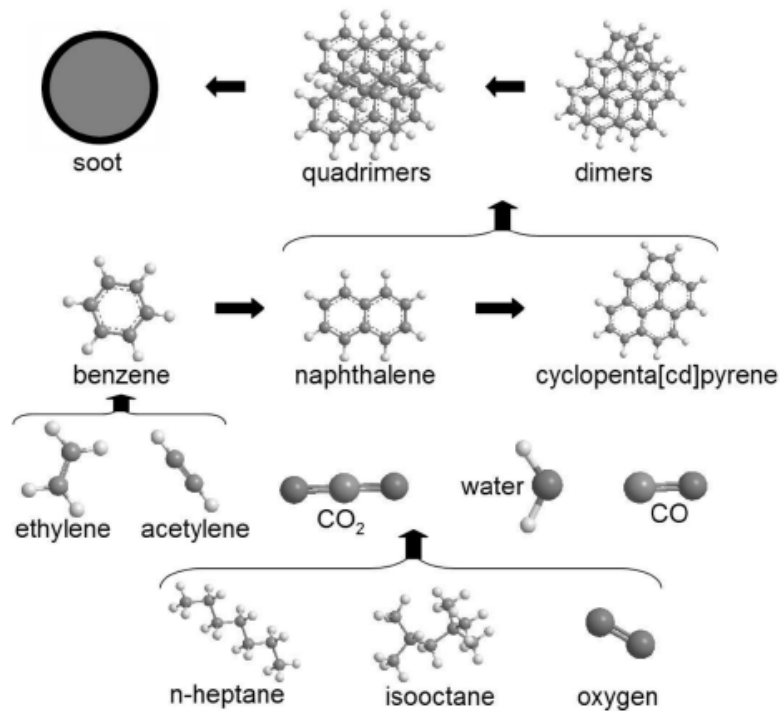


Figura 2.5: Proceso de pirólisis con formación de aromáticos [7]

### 2.2.2. Nucleación

Es el proceso por el que una molécula en estado gas se transforma en una partícula en estado sólido. Es uno de los pasos más complejos en la formación de partículas. Mediante

investigaciones de llamas de difusión de metano llevadas a cabo por Lahaye [4], se llega a la conclusión que el núcleo de carbono que forma las partículas de hollín es el resultado de la deshidrogenación de hidrocarburos poliaromáticos.

En esta etapa se produce un crecimiento del número y la masa de las partículas de hollín, con un mayor incremento del primero.

### 2.2.3. Aglomeración

En este proceso, dos o más partículas se unen dando lugar a una única partícula manteniendo su identidad originaria, de tal forma que su tamaño aumenta a la vez que el número de partículas decrece enormemente.

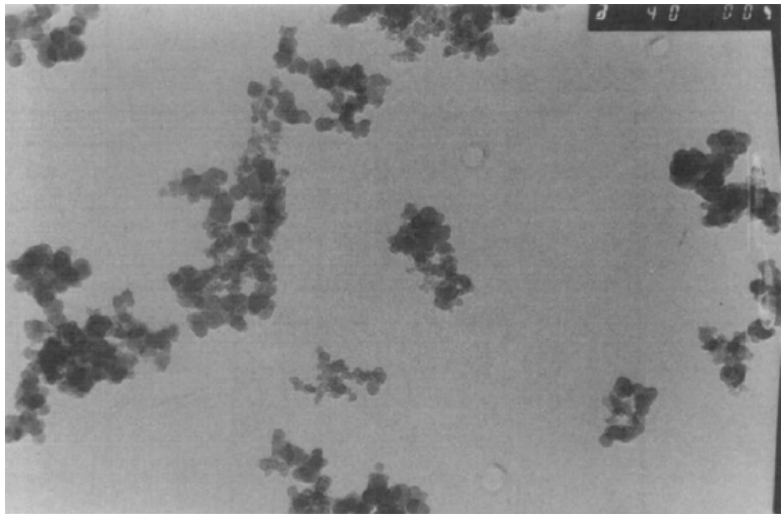


Figura 2.6: Aglomeración de partículas de hollín [4]

La ecuación que describe esta fase es la de Smoluchowski y se puede representar de la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt}n(x) = \sum_{y=1}^{x-1} \beta(x-y, y)n(x-y)n(y) - \sum_{y=1}^{\infty} \beta(x, y)n(x)n(y) \quad (2.1)$$

donde  $n(x)$  es la densidad de las dos partículas  $(x,y)$  que se fusionan y  $\beta(x, y)$  es el núcleo de coagulación, que depende del número de Knudsen. Cabe destacar, que es un proceso irreversible en el que el tamaño de las partículas es de entre 20 y 70 nm.

### 2.2.4. Coalescencia

Se trata de un proceso similar al descrito en el apartado anterior pero, en este caso, al unirse las dos partículas y formar una mayor se pierde la identidad que poseían las dos partículas originales. Al igual que en la aglomeración, aumenta el tamaño pero disminuye el número de partículas por ese proceso de fusión que se acaba de explicar.

### 2.2.5. Crecimiento superficial

Es el proceso por el cual se añade masa a la superficie de una partícula de hollín después de la nucleación. Según diversos estudios [5] [6], no existe una distinción clara entre el fin de

la nucleación y el principio del crecimiento superficial, por lo que se puede considerar que ambos procesos son simultáneos.

Las reacciones que caracterizan esta fase de la formación de partículas de hollín son de tipo HACA (extracción de hidrógeno y adición de carbono). A continuación, se presenta un esquema de dicho tipo de reacciones:

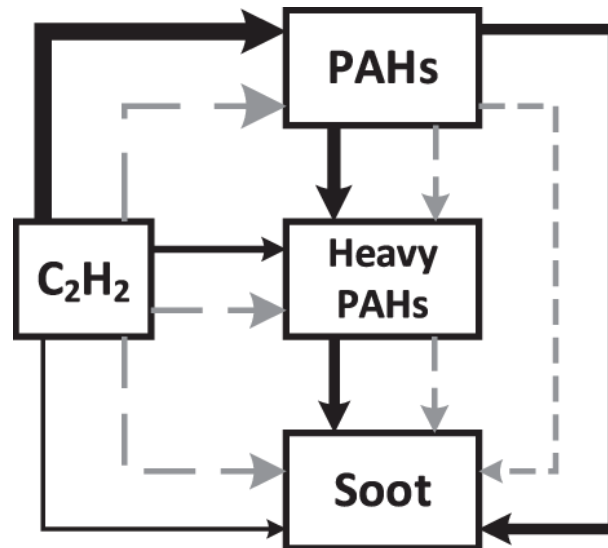


Figura 2.7: Esquema reacciones HACA [6]

Así, en la figura anterior, se observa la adición de acetileno junto con hidrocarburos aromáticos policíclicos que da lugar a este proceso en el que se incrementan tanto la masa como el tamaño de las partículas de hollín manteniendo el número constante, siendo la etapa en la que se produce el mayor crecimiento de masa en el proceso de formación de las partículas de hollín.

### 2.2.6. Oxidación

La oxidación es una reacción química en la que un elemento pierde electrones por la presencia de un agente oxidante. En el caso de estudio, las partículas de hollín pierden masa y tamaño debido a la formación de  $CO$  y  $CO_2$  con  $OH$ ,  $O$  y  $O_2$ . En las zonas ricas en combustible predomina el  $OH$  y en las pobres el propio oxígeno  $O_2$ . El primero es muy reactivo y oxida uniformemente la superficie de la partícula, manteniendo estables las partículas y reduciendo la masa. El  $O_2$  oxida posiciones específicas de las partículas, incrementando la porosidad y, finalmente, rompiendo la estructura, pero con una pérdida menor de masa que en el caso del  $OH$ .

A modo de resumen de los procesos que se han descrito en este apartado, se presenta el siguiente esquema:

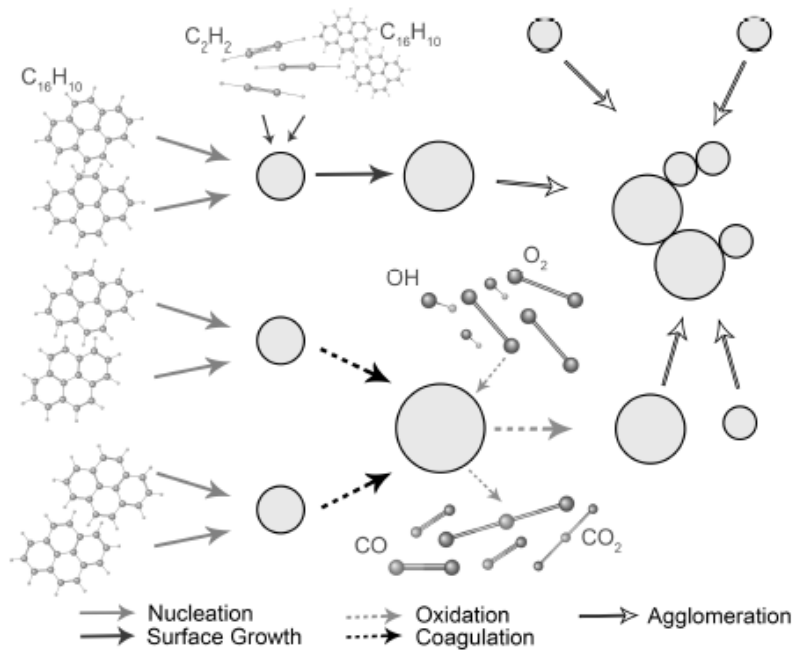


Figura 2.8: Procesos de formación de partículas [1]

## 2.3. Formación de partículas en motores GDI

Las partículas en los motores de inyección directa de gasolina pueden proceder, fundamentalmente, de las películas líquidas de combustible que se forman en las paredes del cilindro o en el inyector o de una mezcla aire-combustible no homogénea. Además, existen otros procesos menos relevantes que se van a explicar brevemente.

### 2.3.1. Películas líquidas de combustible

Se han realizado múltiples estudios con investigaciones ópticas en los procesos de combustión de los cuales se ha extraído que las películas líquidas de combustible están causadas por el impacto del propio combustible. En dichas investigaciones, se observa cómo las partículas de hollín emiten una luz amarilla brillante, de tal forma que son visibles.

De las investigaciones de Stevens y Steeper [8] se extrae que las emisiones de partículas se forman a partir del combustible restante en la superficie del pistón durante la combustión premezclada. Como técnica de visualización, se escoge la fluorescencia inducida por láser (LIF). Así, se va a estudiar el combustible restante en dicha superficie durante el proceso de ignición para diferentes ángulos de giro del cigüeñal (CAD) en los que comenzará la inyección del combustible (SOI) en la Figura 2.9. En ella, se observará la superficie del pistón vista desde abajo de manera que cuando se presente una *mancha negra* se indicará la presencia de la película líquida de combustible sobre la pared del pistón.



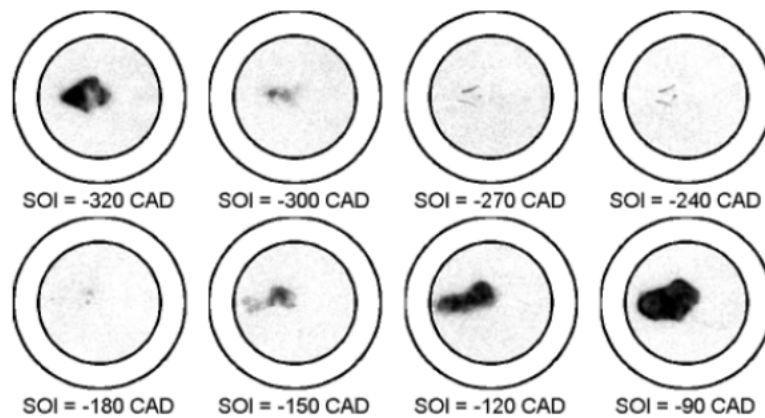


Figura 2.9: Estudio óptico de la película líquida de combustible [8]

Con ese mismo estudio, se llega a la conclusión que dicha película se forma al tener lugar una pirólisis *pura*, al no haber oxígeno suficiente para llegar a una llama de difusión (dosado estequiométrico), que produce la llama brillante que se ha explicado anteriormente y un *charco de fuego* ("pool fire").

Además, con estas investigaciones se han analizado los diversos parámetros que pueden influir en la película de combustible que se está analizando. Así, éstos son:

- Carga y presión en el motor: afectan al tiempo total de inyección, la masa de combustible que se inyecta y el tiempo de evaporación.
- Presión en el conducto de admisión: si se incrementa se mejora la evaporación del chorro debido al reducido diámetro de las gotas de combustible, lo que da lugar a una menor película de combustible líquido.
- Arranque del motor: si se lleva a cabo en frío, la temperatura de la pared no es la suficiente para evaporar el combustible hasta que empiece la ignición, por lo que aumenta la emisión de partículas.
- Geometría del inyector y de la pared de la cámara de combustión.
- Localización del pistón y del revestimiento respecto al inyector y el tiempo de evaporación restante, que depende de la geometría del propio motor y del tiempo de inyección.
- Tipo de chorro: si se trata de un sistema guiado por pared ("wall-guided") se forman más películas de combustible líquido que si se trata de un sistema guiado por aire ("air-guided") o por chorro ("spray-guided") [13].

De los parámetros que se acaban de enumerar, Ketterer y Cheng [9] realizan un estudio para un motor GDI en condiciones de arranque en frío (régimen de giro de 1200 rpm y 2 bar IMEP) para obtener el número de partículas emitidas en función del tiempo de inyección y la posición del pistón y del chorro:

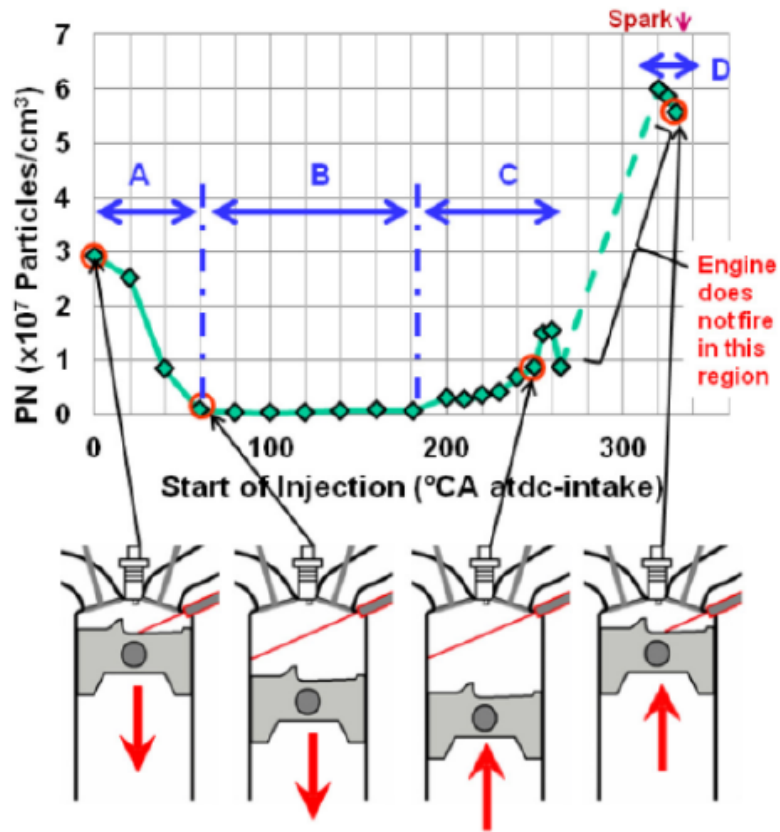


Figura 2.10: Estudio de las emisiones de partículas para un motor GDI en condiciones de arranque en frío [9]

Analizando la figura anterior se observa que la emisión de partículas es mayor en los puntos de funcionamiento A y D del motor. Esto es debido a que en dichos puntos el pistón y la cabeza del cilindro se encuentran más impregnados por el combustible. En B y C ya se ha evaporado parte del combustible antes de que alcanzase las paredes del cilindro.

Además, estos mismos autores también estudian la distribución de tamaños de las partículas para distintos tiempos de comienzo de la inyección, dividiéndolo en dos figuras para tiempos reducidos y moderados:

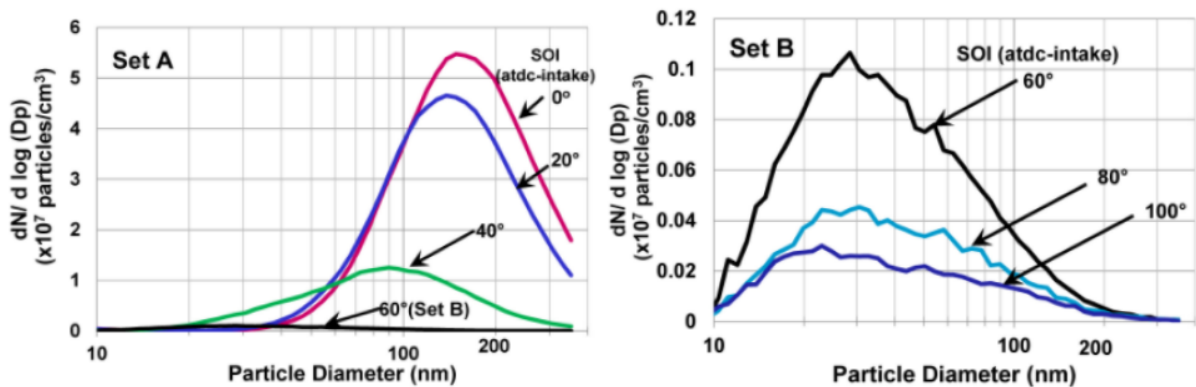


Figura 2.11: Distribución de tamaños de las partículas [9]

En primer lugar, se observa como el tamaño máximo de las partículas se reduce al retrasar

el tiempo de inyección. Además, en el caso de la figura de la izquierda se obtiene un tamaño máximo de aproximadamente 100 nm mientras que en la derecha éste es de 30 nm.

### 2.3.2. Mezcla no homogénea

La mezcla incompleta del combustible evaporado y el aire da lugar a emisiones de partículas de hollín en los motores de inyección directa de encendido provocado [1]. Esto es debido a las zonas subestequiométricas de la cámara de combustión, donde tiene lugar una reacción de premezcla rica en combustible que forma dichas partículas. El estudio de la contaminación emitida en función de la relación aire-combustible es llevado a cabo por S. Fallah [29] y da lugar a los siguientes resultados:

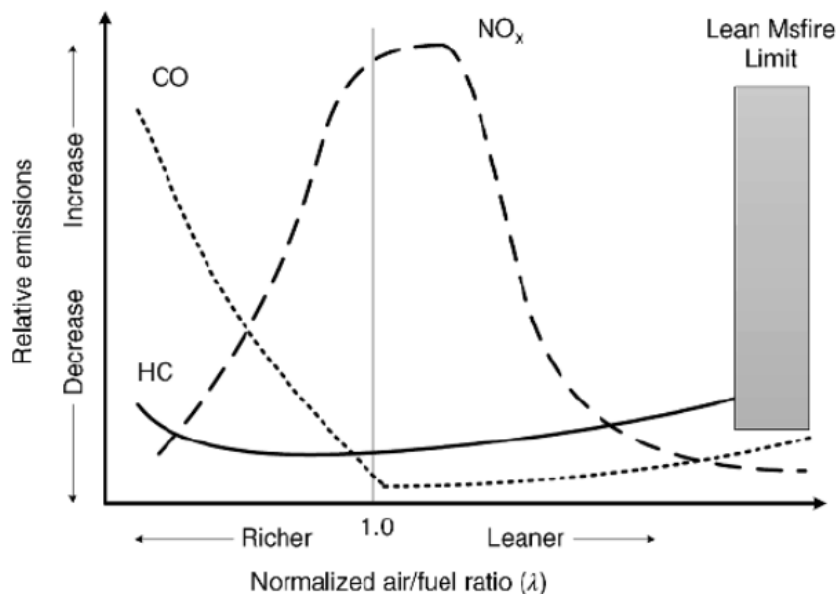


Figura 2.12: Emisiones de un motor de gasolina según la relación aire-combustible [29]

En la Figura 2.12 se observa cómo en la zona pobre en combustible se producen menos emisiones que en la rica. Sin embargo, en dicha zona pobre se puede producir detonación y pérdida de potencia. Además, las emisiones de carbono son bastante más elevadas en la zona rica, lo que dará lugar a las partículas de hollín.

Por otro lado, Ketterer y Cheng [9] realizan una simulación 3D-CFD para estudiar la homogeneidad de la mezcla al principio de la combustión, distinguiendo entre diferentes tiempos de comienzo de la inyección. Dicha homogeneidad se estudia gracias al parámetro  $\lambda$ , que se define como la relación aire-combustible relativa, es decir, la inversa de  $\phi$ .

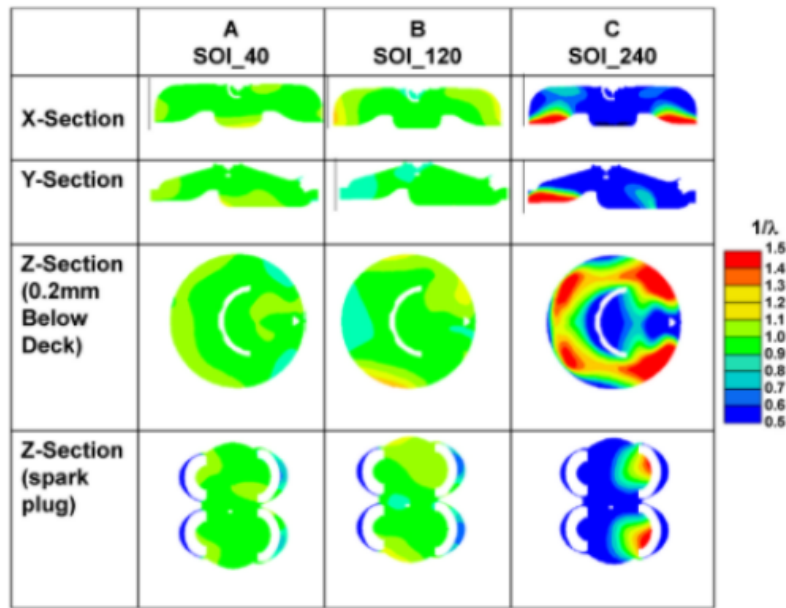


Figura 2.13: Estudio de la homogeneidad de la mezcla para distintos SOI en simulaciones CFD [9]

Se observa en la figura anterior que si se incrementa el SOI (expresado en aTDC, grados después del punto muerto superior, también conocido como PMS), es decir, si se retrasa la inyección, la mezcla se hace menos homogénea al haber menos tiempo disponible para la formación de dicha mezcla.

Por otro lado, Sabathil et al. [10] analizan la evolución del parámetro  $\lambda$  en función del número de partículas (PN) tal y como se observa en la Figura 2.14.

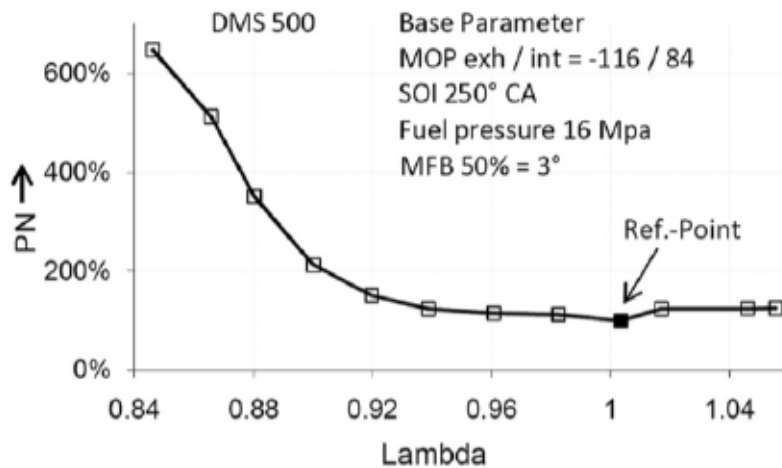


Figura 2.14: Número de partículas en función de la relación aire-combustible ( $\lambda$ ) [10]

Como se había comentado previamente, se obtiene un número mayor de partículas en la zona rica en combustible (donde  $\lambda$  es menor), lo que da lugar a una duración de la inyección mayor y un menor tiempo para la formación de la mezcla, como también mencionan Ketterer y Cheng [9].

Así, la principal conclusión que se extrae es que es necesaria una mezcla homogénea para

reducir las emisiones de partículas de hollín en los motores GDI. Los parámetros que influirán en dicha mezcla son los siguientes:

- Tiempo de mezcla: si se incrementa se mejora la homogeneidad.
- Velocidad y masa de combustible inyectada: si aumentan, se reduce la homogeneidad.
- Movimiento de la carga en el cilindro: si se incrementa se mejora la homogeneidad.
- Modo de operación estratificado: incrementa las emisiones de partículas desde las zonas ricas en combustible.
- Tiempo de evaporación del chorro: las gotas de combustible necesitan evaporarse antes de que comience el proceso de mezcla.

De estos estudios realizados, también se concluye que las partículas formadas por las películas líquidas de combustible (explicadas en la Sección 2.3.1) son de mayor tamaño que las formadas por la mezcla no homogénea. Además, estos dos procesos están relacionados ya que, durante la evaporación, las zonas ricas en combustible se crean sobre la película líquida de combustible, que puede reaccionar durante la combustión si existe suficiente tiempo de mezcla. Por último, una gran cantidad de películas líquidas de combustible influye sobre la relación aire-combustible.

### **2.3.3. Fuentes adicionales de formación de partículas**

Además de los procesos de formación de partículas de hollín en motores GDI explicados en las Secciones 2.3.1 y 2.3.2, existen otras fuentes de formación de dichas partículas menos relevantes que se describen brevemente para una mejor comprensión del problema a tratar en este trabajo.

#### **2.3.3.1. Composición del combustible**

Los compuestos aromáticos (como por ejemplo el benzopireno) son los que más incrementan la formación de partículas mientras que el oxígeno ligado al propio combustible reduce la relación C/O e incrementa la oxidación de las partículas que se puedan formar.

Además de la composición química, también influyen las propiedades termodinámicas del combustible, como puede ser la entalpía de vaporización: cuanto mayor sea ésta, mayor es la emisión de partículas y la heterogeneidad en la mezcla.

#### **2.3.3.2. Aceite lubricante**

Las partículas formadas por el lubricante no están estudiadas al completo y, hoy en día, siguen siendo objeto de investigación. La influencia de dicho lubricante se basa en los siguientes aspectos:

- Las gotas formadas por los aceites volátiles se consideran emisiones de partículas, pero no de hollín y son eliminadas internamente por el sistema de medida.
- Los componentes inorgánicos del aceite son emitidos como partículas sólidas.
- El combustible absorbido por el propio aceite, sobre todo en la pared del cilindro, puede verse sometido a un proceso de pirólisis durante la combustión.

- La película formada por el lubricante forma partículas sólidas debidas a la pirólisis durante la combustión.

Como principal conclusión, se obtiene que las fuentes de formación de partículas procedentes del combustible son procesos dominantes, por lo que las emisiones provocadas por el aceite lubricante no son relevantes [11].

### 2.3.3.3. Combustión del chorro

Las gotas de combustible pueden ser una fuente de emisión de partículas debido a las películas de dicho combustible en las paredes que aún no se han volatilizado por completo. Así, la evaporación incompleta lleva a una combustión del chorro que se convierte en una fuente de emisión de partículas.

Normalmente, el combustible inyectado se evapora completamente antes de que empiece la combustión. Sin embargo, si se incrementa el diámetro de las gotas de combustible o si el motor se encuentra en condiciones frías, se forma una pared líquida de combustible en la pared debido al propio chorro antes de la combustión. Las características de las gotas dependen fundamentalmente de la presión en el conducto de admisión.

### 2.3.3.4. Propiedades termodinámicas

Propiedades termodinámicas como la presión o la temperatura en el cilindro afectan a las reacciones químicas de formación de partículas y a los procesos de oxidación, crecimiento superficial, etc. Si se aumenta tanto la temperatura como la presión, se incrementa la emisión de partículas [12].

Además, estas propiedades termodinámicas se pueden ver afectadas si se varían algunos parámetros del motor como el tiempo de ignición. Así, se llega a la conclusión que retrasar dicho tiempo de ignición reduce las emisiones de partículas debido al incremento en las temperaturas de escape. Por último, dicho incremento aumenta la oxidación y decrece el crecimiento superficial de las partículas [10].

## 2.4. Técnicas de simulación

Durante las últimas décadas, se han desarrollado numerosos modelos de simulación para obtener el proceso de formación de partículas de hollín en los distintos tipos de combustión [1]. Dichos modelos se pueden clasificar en función del nivel de detalle que alcancen describiendo los procesos físicos y químicos:

- Modelos empíricos: usan datos experimentales obtenidos mediante ensayos. Son fáciles de implementar y requieren poco coste computacional, pero no son capaces de describir con mucha profundidad los procesos de formación de partículas de hollín.
- Modelos semiempíricos: además de los datos experimentales en los que se basan los empíricos, también necesitan ecuaciones que describan los procesos. La principal desventaja es que no se aplican fácilmente a diferentes combustibles o presiones debido a dichos datos experimentales introducidos en las ecuaciones.
- Modelos químicos detallados: incluyen un gran nivel de detalle a la hora de describir los procesos de formación de partículas de hollín, lo que implica un coste computacional

mayor que el de los modelos explicados en los puntos anteriores. Sin embargo, este tipo de modelo es el más utilizado debido a la elevada velocidad de cálculo de los ordenadores actuales.

En el estudio que se lleva a cabo en este trabajo se opta por utilizar el método de los momentos, el cual calcula la distribución de tamaños de las partículas mediante las ecuaciones de transporte de sus momentos [16]. A pesar de que la descripción exacta de dicha distribución se lleva a cabo con un número infinito de momentos, normalmente se usan los de orden bajo.

La principal ventaja de esta técnica de simulación es que con pocas ecuaciones es capaz de describir el cambio en los primeros momentos. Por otro lado, tiene el inconveniente que dichas ecuaciones no están cerradas y, en consecuencia, se necesitan aproximaciones para poder cerrarlas. Una de la más usadas es el método de momentos con cierre interpolado (MOMIC), que utiliza una interpolación con un polinomio logarítmico. Su principal ventaja es su simplicidad y que dicha interpolación es realizada numéricamente sin ningún tipo de problema independientemente del orden de interpolación que se esté usando, a pesar de que éste sea de alto orden. Sin embargo, diferentes estudios [31] sugieren que el MOMIC no puede representar la naturaleza bimodal de la función de distribución normal de las partículas de hollín, ya que el primer modo se corresponde con una nucleación persistente y el segundo con las partículas más grandes.

Otro tipo es el método de momentos por cuadratura (QMOM), que describe la distribución de tamaños mediante una serie de funciones delta y aproxima los momentos con una cuadratura de Gauss. El método de momentos por cuadratura directo (DQMOM) es una generalización del QMOM para distribuciones multivariantes en la que las ecuaciones de transporte se resuelven directamente por los pesos y las localizaciones de las funciones delta anteriormente mencionadas. Además, este tipo de método de momentos es capaz de capturar el modo de nucleación persistente.

Otra forma de realizar una aproximación a la función de distribución normal es utilizar el método de Montecarlo, que es un método estocástico para obtener la evolución de una población representativa [31]. Se trata de un método más preciso que los explicados anteriormente, ya que obtiene una mejor predicción de una función de distribución normal completa. Sin embargo, esta precisión conlleva un mayor coste computacional y su aplicación se limita a configuraciones simples como reactores homogéneos o llamas premezcladas laminares 1D.

## Capítulo 3

# Estructura del modelo

Para definir la estructura del modelo, se tienen en cuenta los diferentes fenómenos involucrados en el proceso de formación de las partículas de hollín que se han descrito en secciones anteriores y se divide el modelo en consecuencia a ello, con las distintas interacciones entre dichos procesos.

Además, se necesita un compromiso entre el diseño y la parametrización de las variables más interesantes del estudio. Por ello, se escoge como software principal *MATLAB*, ya que también es capaz de integrar los diferentes submodelos que se van a ir explicando e interactúa con *GT-Power*, que es el software en el que se obtiene la termodinámica del motor.

Finalmente, el modelo se diseña con una estructura orientada a objetos (OOP), es decir, los distintos submodelos mencionados anteriormente podrán activarse o desactivarse en función de si son necesarios o no para una optimización del tiempo de cálculo. Esto que se acaba de mencionar, se ilustra con la siguiente figura:

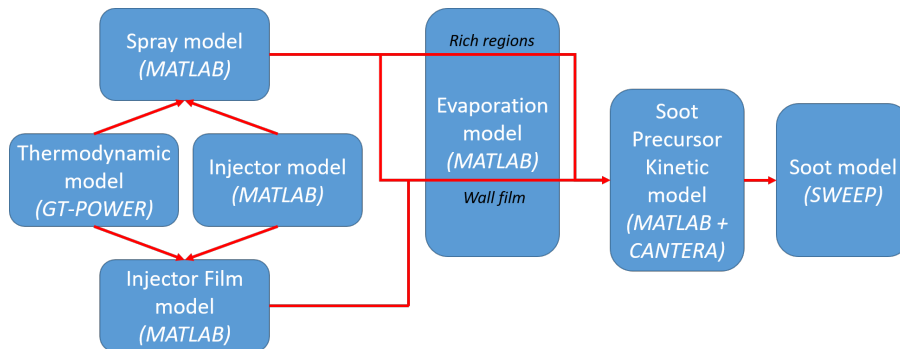


Figura 3.1: Esquema de los submodelos que forman la estructura del modelo

### 3.1. Software

Además del ya mencionado *MATLAB*, existen otros programas que intervienen para llevar a cabo el correcto desarrollo del programa.

#### 3.1.1. GT-Suite

*GT-Suite* es una plataforma multiusos con diversas librerías físicas que contiene componentes fundamentales y de alto nivel [14]. Con dichos componentes, los ingenieros son



capaces de construir modelos de sistemas (como el que se lleva a cabo en este trabajo) con una gran variedad.

Es el encargado de realizar el proceso de simulación del motor y, por consiguiente, el modelo termodinámico. Además, permite la implementación de rutinas de *Fortran*. Otras aplicaciones de este software pueden ser los sistemas integrados, la gestión térmica, las mecánicas multicuerpo, etc.

### 3.1.2. MATLAB

Es una plataforma de programación y cálculo numérico utilizada por millones de ingenieros y científicos para analizar datos, desarrollar algoritmos y crear modelos [15]. Es el encargado de incorporar la estructura completa de la simulación y todos los submodelos que la conforman.

Su principal ventaja es que es capaz de interactuar con el resto de programas que se explican en esta sección. Además, puede resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, que serán fundamentales en las ecuaciones de continuidad que se detallarán más adelante.

### 3.1.3. SWEEP

Es un programa que utiliza métodos estocásticos para modelar la distribución de las partículas que están dispersas en la fase gaseosa [17]. Se basa en el método de los momentos explicado en la Sección 2.4 y en rutinas de *Fortran*. Además, obtiene los perfiles de número, masa y tamaño de dichas partículas.

### 3.1.4. Cantera

Es el encargado de resolver la cinética química, la termodinámica y las ecuaciones de transporte, de tal forma que modela eficazmente las reacciones que tienen lugar en el motor y que dan lugar a las partículas de hollín [18]. Además, consta de la programación orientada a objeto que ya se ha comentado anteriormente.

El software está desarrollado en el lenguaje de programación C++ y en *Fortran*. Por último, es de gran utilidad porque se puede incorporar como herramienta en el propio *MATLAB*, que será el programa en el que estarán integrados todos los submodelos.

## 3.2. Submodelos

Como se ha comentado previamente en la Figura 3.1, la estructura del modelo estará dividida en los siguientes submodelos:

- Modelo de inyección: es el encargado de determinar la ratio de inyección junto con los parámetros más importantes de dicho proceso que serán relevantes para el resto de submodelos. Será desarrollado en *MATLAB* y constará con datos experimentales como *inputs*.
- Modelo termodinámico: obtiene las condiciones termodinámicas en el cilindro. Se desarrolla en *GT-Power* y, concretamente, en *GT-Suite*.

- Modelo del chorro: se utiliza la aproximación 1D propuesta por Pastor et al. [19]. Dicho modelo calculará la evolución temporal de la cantidad de combustible que impregna las paredes del cilindro y la distribución del parámetro  $\lambda$  de la mezcla que se encuentra en el interior del cilindro. Se desarrolla en *MATLAB*.
- Modelo de la película de combustible en el inyector: determinará la cantidad del combustible inyectado que se queda en la parte final de dicho inyector, ya que también será una fuente de emisión de partículas de hollín. Se desarrolla en *MATLAB*.
- Modelo de evaporación: se aplica a las partes en las que se forman películas líquidas de combustible y a la parte del chorro que no impregna las paredes del cilindro. Se desarrolla en *MATLAB*.
- Modelo de cinética química de las especies precursoras del hollín: lleva a cabo todas las transformaciones químicas explicadas en el Capítulo 2 en las regiones que contribuyen a la formación de hollín. Se desarrolla en *MATLAB*, pero integrando *Cantera* como herramienta.
- Modelo de partículas de hollín: se encargará de obtener la distribución del número, masa y tamaño de dichas partículas. Se desarrolla en *SWEEP*.

### 3.2.1. Interacción entre los submodelos

Según lo analizado en la Figura 3.1, se pueden extraer las diferentes conexiones que existen entre los submodelos descritos anteriormente:

- *GT-Power* será el programa donde se desarrolle toda la termodinámica que se produce en el interior del cilindro, basándose en datos experimentales. Así, se obtendrán distintos parámetros como presiones, temperaturas, gastos, etc. Una vez se haya desarrollado, *GT-Power* se podrá usar también de forma predictiva, es decir, sin necesidad de disponer de unos datos de entrada.
- El modelo de inyección determina las características en las que el combustible se inyecta en el cilindro independientemente de *GT-Power*. Además, como se ha indicado previamente, se introducirán datos experimentales para hacerlo funcionar de forma correcta. Por último, una vez se haya desarrollado el modelo, se podrá usar de forma predictiva.
- El modelo de la película de combustible en el inyector estará alimentado por los dos modelos previos para determinar la cantidad de masa de combustible que queda en la parte final del inyector: modelo de inyección y las condiciones termodinámicas en el interior del cilindro.
- El modelo del chorro usa información de *GT-Power* y del modelo de inyección para calcular la evolución del chorro. Estará conectado al modelo de evaporación, a la distribución del parámetro  $\lambda$  y se podrá determinar el tamaño de la película líquida de combustible formada en las paredes del cilindro.
- El modelo de cinética química de las especies formadoras de hollín calculará las reacciones químicas en las regiones donde se formen las películas líquidas de combustible y en las zonas con mezcla rica en combustible.
- El modelo de partículas de hollín obtendrá la información del modelo indicado en el punto anterior y, analizando la evolución de las partículas de hollín, será capaz de desarrollar la distribución de la masa total y el tamaño de dichas partículas.

### 3.3. Modelo de cinética química de las especies precursoras del hollín

Este modelo es el encargado de estudiar las reacciones que tienen lugar en la cámara de combustión con las especies precursoras del hollín. Para ello, en primer lugar se analiza la cinética química en fase gaseosa y después las ecuaciones de conservación. Se desarrolla en *MATLAB* integrando el software *Cantera* como herramienta.

#### 3.3.1. Cinética química en fase gaseosa

Para analizar la cinética química que tiene lugar en la simulación del chorro en el interior del cilindro de forma detallada, se emplea una aproximación multizona [20]. En ella, la cámara de combustión se divide en varias zonas que son tratadas como reactores homogéneos en los que tienen lugar los distintos procesos químicos.

La aproximación multizona obtiene resultados precisos en los motores de ignición por compresión de carga homogénea (HCCI) con un coste computacional muy bajo. Además, en los motores GDI como el que se estudia en este trabajo también se puede utilizar dicha aproximación para el cálculo de las emisiones contaminantes.

La definición de las zonas que se han descrito anteriormente se realiza con la ayuda de la distribución de la relación combustible-aire relativa ( $\phi$ ) en función de la fracción en masa integral en la cámara de combustión [1]. En el caso de una mezcla perfecta homogénea, se dispondría de una única zona. De otro modo, el número de zonas es variable como se muestra en forma de ejemplo en el siguiente gráfico:

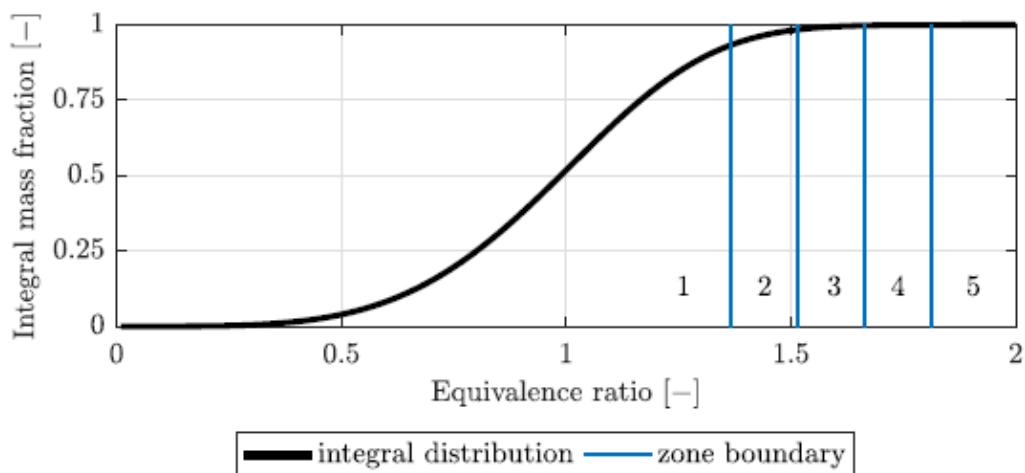


Figura 3.2: Definición del número de zonas según la distribución de  $\phi$  [1]

Como se observa en la Figura 3.2, una zona predomina sobre las demás hasta un valor de 1.4 aproximadamente. Dicha zona no se estudiará ya que al ser pobre en combustible no será una fuente de emisión de partículas de hollín al poseer un dosado inferior al valor umbral de formación de dichas partículas. El resto de zonas a partir de ese valor umbral sí se analizarán acorde a las ecuaciones que se detallarán más adelante. Además, en la siguiente ilustración se muestra la distribución de las zonas rica y pobre en una cámara de combustión:

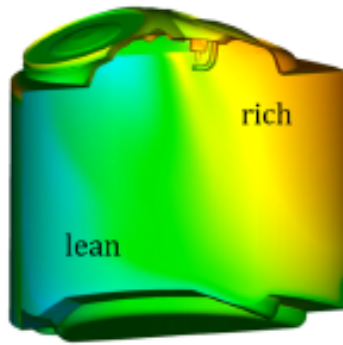


Figura 3.3: Zonas en la cámara de combustión [1]

A su vez, cada zona se dividirá en dos regiones (quemada y sin quemar) conectadas por un gasto de masa. Las reacciones de cinética química tendrán lugar en la zona quemada, ya que en la zona sin quemar las temperaturas no son lo suficientemente altas para que se lleven a cabo los procesos de formación de partículas. Esto que se acaba de explicar, se puede esquematizar en la siguiente figura:

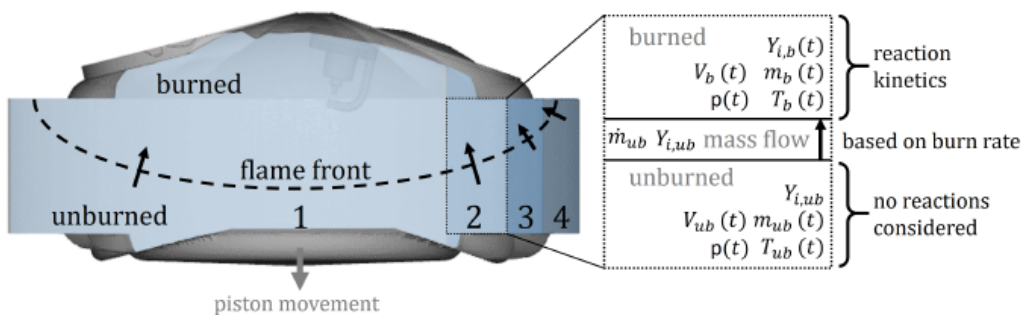


Figura 3.4: Representación de las zonas quemadas y sin quemar [1]

En teoría, el volumen de la zona quemada debería ser nulo cuando se produce la ignición. Sin embargo, para evitar errores en el cálculo, se inicializa la zona quemada con un volumen de  $10^{-30} m^3$ . Además, la zona sin quemar se inicializa con la presión y la temperatura en el momento de la ignición.

Por otro lado, a la hora de realizar la combustión, se toma en consideración la siguiente composición química para el aire:

Elemento	Fracción másica (Y)
$O_2$	0.2302
$N_2$	0.7555
$CO_2$	0.0005
$Ar$	0.0138

Tabla 3.1: Composición del aire puro

Así, habrá que tener en cuenta que la masa de cada uno de los componentes mencionados en la Tabla 3.1 será la suma de las cantidades presentes en las zonas quemadas y sin quemar. Además, a la hora de realizar la combustión hay que tener en cuenta la estimación de la composición de los gases residuales (EGR), que en este caso se establece en 1/9 en fracción

másica ( $Y_{EGR}$ ).

Con la fracción másica ( $Y_j$ ) y el dosado de oxígeno ( $F_{O_2}$ ) de cada zona extraídas de la Figura 3.2, se puede obtener la fracción másica de combustible respecto a la masa de cada zona  $Y_{f,j}$ :

$$Y_{f,j} = \frac{F_{O_2} \cdot Y_{O_2,comb}}{F_{O_2} \cdot Y_{O_2,comb} + 1} \quad (3.1)$$

donde  $Y_{O_2,comb}$  es la fracción másica de  $O_2$  en el comburente correspondiente, que será la misma para todas las zonas en las que se divida la región quemada y debe ser menor a la proporción de oxígeno presente en aire puro. El dosado de oxígeno se obtiene de la siguiente forma:

$$F_{O_2} = \frac{F_j}{Y_{O_2,aire}} \quad (3.2)$$

donde  $F_j$  es el dosado absoluto de cada zona e  $Y_{O_2,aire}$  la proporción de oxígeno en aire puro recogida en la Tabla 3.1.

A partir de  $Y_{f,j}$  se obtiene la fracción de masa de combustible en cada zona respecto a la masa de combustible inyectado total  $p_j$ :

$$p_j = \frac{m_{f,j}}{m_{f,TOT}} = \frac{Y_{f,j} \cdot Y_j}{F_{TOT}} \quad (3.3)$$

donde  $F_{TOT}$ :

$$F_{TOT} = \frac{m_{f,TOT}}{m_{TOT}} \quad (3.4)$$

Una vez obtenidas las fracciones másicas del combustible inyectado en cada una de las zonas, se pueden calcular los gastos que interactúan entre las zonas quemada y sin quemar para cada una de las zonas que se han mencionado anteriormente:

$$\frac{dm_{f,j}}{dt} = \frac{dY_{f,b}(t)}{dt} \cdot m_{f,TOT} \cdot p_j \quad (3.5)$$

$$\frac{dm_{comb,j}}{dt} = \frac{1}{F_{O_2st}} \cdot \frac{1}{Y_{O_2,comb}} \cdot \frac{dm_{f,j}}{dt} \quad (3.6)$$

$$\frac{dm_{ub,TOT,j}}{dt} = \frac{dm_{comb,j}}{dt} + \frac{dm_{f,j}}{dt} \quad (3.7)$$

donde  $F_{O_2st}$  se obtiene:

$$F_{O_2st} = \frac{1/L_{st}}{Y_{O_2,aire}} \quad (3.8)$$

siendo  $L_{st}$  el dosado estequiométrico, fijado en 15.2. Además, en la Ecuación 3.5  $Y_{f,b}$  representa la ley de quemado que, en este caso, se asumirá que es la de Wiebe, la cual viene dada por la siguiente expresión:

$$Y_{f,b} = 1 - \exp \left[ -a \left( \frac{\alpha - \alpha_0}{\Delta\alpha_c} \right)^m \right] \quad (3.9)$$

Recurriendo a la literatura [13], la representación de la ley de quemado junto con la de su derivada se aproxima a esta forma:

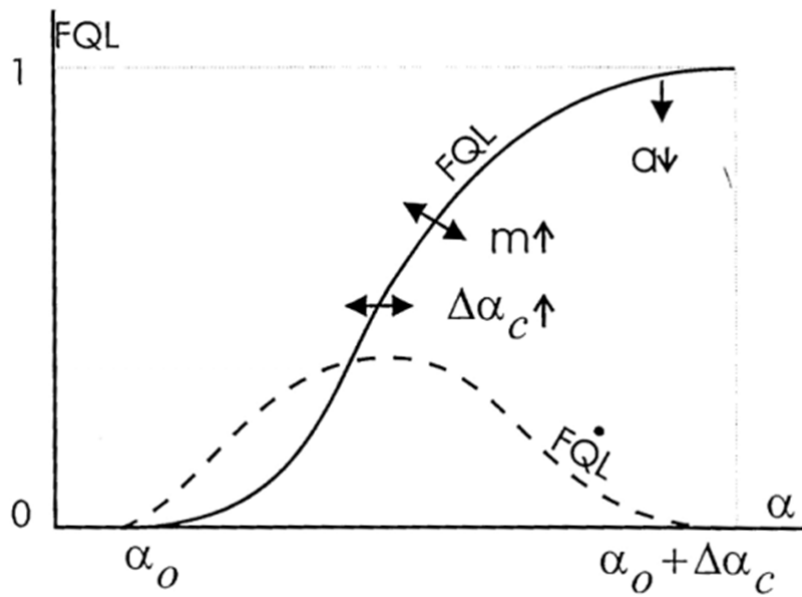


Figura 3.5: Forma aproximada de la ley de Wiebe y su derivada [13]

$FQL$  es el equivalente a  $Y_{f,b}$  en la Ecuación 3.9. En el Capítulo 5 se obtendrá una representación más exacta en *MATLAB*. Cabe destacar que en la Figura 3.5 la derivada es respecto  $\alpha$  y en la Ecuación 3.5 es respecto al tiempo, por lo que habrá que realizar la siguiente transformación:

$$\frac{dY_{f,b}}{dt} = \frac{dY_{f,b}}{d\alpha} \cdot n \quad (3.10)$$

donde  $n$  es el régimen de giro.

### 3.3.2. Ecuaciones de conservación

#### 3.3.2.1. Conservación de energía

Para resolver la conservación global de energía en la cámara de combustión hay que tener en cuenta la capacidad calorífica del combustible, los efectos de transferencia de calor en las paredes del cilindro y el trabajo del pistón. Por lo tanto, en las distintas zonas que se han explicado anteriormente, se aplica la temperatura global de la región quemada sin necesidad de resolver las ecuaciones de conservación. Así, se asume que las reacciones de cinética química que tienen lugar durante el proceso de formación de partículas no afectan significativamente al perfil de temperatura resultante en la zona quemada.

El perfil de temperatura adiabática de llama de una combustión de isoctano ( $C_8H_{18}$ ) con aire se puede obtener gracias al software *Cantera* implementado como herramienta en un código de programación en *MATLAB*, en el caso de este estudio, es el que se encuentra en el Anexo 9.3. Cabe destacar que los mecanismos de reacción escogidos han sido los desarrollados por Blanquart et al. [22].

Por otra parte, se propone una simplificación a este modelo que permita llevar a cabo un ahorro importante en el coste computacional. Dicha simplificación consiste en construir un "triángulo" a partir de los valores de la temperatura inicial (que es la de la mezcla), temperatura máxima y temperatura para la fracción másica máxima. La comparación entre

este modelo y el realizado con *Cantera* se desarrolla con más profundidad en el Anexo 9.1. Sin embargo, a pesar de parecer muy trivial, se opta por este método simplificado para proseguir con el estudio que se lleva a cabo en este trabajo por los errores despreciables perfectamente asumibles y el gran ahorro en coste computacional.

Tras la división de la cámara de combustión, se tiene que distribuir la temperatura media entre las distintas zonas, por lo que se define un factor de corrección que relaciona la temperatura adiabática de cada una de ellas con la temperatura adiabática global:

$$F_j = \frac{T_{b,ad,j}}{T_{b,ad,global}} \quad (3.11)$$

donde  $T_{b,ad,j}$  es la temperatura adiabática en cada una de las zonas y  $T_{b,ad,global}$  es la temperatura adiabática global definida con el dosado global  $F_{TOT}$ .

Con la ayuda del factor explicado anteriormente, se puede determinar el perfil de temperatura en la región quemada para las distintas zonas del motor definidas en la Figura 3.2:

$$T_{b,j}(t) = \max(T_{b,global}(t) \cdot F_j, T_{exh}) \quad (3.12)$$

donde  $T_{b,global}(t)$  será la distribución de temperatura global en la zona quemada y  $T_{exh}$  la temperatura de escape del motor, que lo limita inferiormente al ser la temperatura a la que circulan los gases por el conducto de escape.

### 3.3.2.2. Conservación de especies químicas

Como se ha explicado anteriormente, las ecuaciones de conservación de las especies químicas sólo tienen lugar en la región quemada para cada una de las zonas debido a que las reacciones se deben producir a elevadas temperaturas. Los cambios en las fracciones másicas de las especies se calculan con la siguiente ecuación:

$$\frac{d(m_b \cdot Y_{i,b})}{dt} = Y_{i,b} \cdot \frac{dm_b}{dt} + m_b \cdot \frac{dY_{i,b}}{dt} = \dot{m}_{i,chem} + \dot{m}_{ub} \cdot Y_{i,ub} \quad (3.13)$$

De la Ecuación 3.13 interesa desarrollar el término que da los cambios en las fracciones másicas de las especies  $dY_{i,b}/dt$  que se puede escribir como:

$$\frac{dY_{i,b}}{dt} = \frac{\dot{m}_{i,chem}}{m_b} + \frac{\dot{m}_{ub}}{m_b} (Y_{i,ub} - Y_{i,b}) \quad (3.14)$$

donde el cálculo del gasto de la zona sin quemar  $\dot{m}_{ub}$  se detallará más adelante. El término  $\dot{m}_{i,chem}$  que resulta de las reacciones químicas se obtiene como:

$$\dot{m}_{i,chem} = \dot{\omega}_i \cdot \frac{M_i}{\rho_b} \cdot m_b \quad (3.15)$$

donde  $\dot{\omega}_i$  es la velocidad de reacción química,  $\rho_b$  la densidad de la mezcla quemada y  $M_i$  la masa molar. De estas variables que se acaban de enumerar, las dos primeras se obtendrán en *Cantera*, que se ha explicado en la Sección 3.1.4. Por último, sustituyendo las Ecuaciones 3.14 y 3.15 en la Ecuación 3.13 se obtiene:

$$\frac{dY_{i,b}}{dt} = \dot{\omega}_i \cdot \frac{M_i}{\rho_b} + \frac{\dot{m}_{ub}}{m_b} (Y_{i,ub} - Y_{i,b}) \quad (3.16)$$

En este apartado se realizan una serie de simplificaciones, una de ellas es que la mezcla de las especies químicas se realiza de forma perfecta e instantánea, lo que lleva a un error despreciable al sobrestimar el estado de dicha mezcla. Sin embargo, el error puede crecer si la zona se hace mayor y la velocidad de quemado decrece. Por otro lado, si se aumenta el tiempo de mezcla puede reducirse dicho error.

La otra simplificación que se lleva a cabo es no considerar las reacciones en el frente de llama, sino que la zona quemada se alimenta con una mezcla fresca. Además, se asume que tanto las escalas temporales de los precursores como los procesos de formación son más lentos que el avance de la llama, por lo que se formarán partículas detrás de dicha llama en la región quemada.

### 3.3.2.3. Conservación de masa

La conservación de la masa en la zona quemada se define por la transferencia de masa que llega de la región sin quemar. Así, y teniendo en cuenta la Ecuación 3.7, se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{dm_b}{dt} = \dot{m}_{ub,TOT}(t) \quad (3.17)$$

Al igual que en el anterior, en este apartado también se llevan a cabo una serie de simplificaciones como, por ejemplo, la no consideración de transferencia de masa entre las diferentes regiones quemadas de cada una de las zonas distinguidas en la Figura 3.2.

Además de la conservación de la masa en la zona quemada, la masa total comprendida en la cámara de combustión se toma como constante hasta después del final de la inyección. Esto es de especial interés cuando se produce la apertura de la válvula de escape (EVO) y los gases residuales son expulsados de la cámara de combustión.

### 3.3.2.4. Fracciones molares

El estado de la región quemada va cambiando en cada paso temporal, de tal forma que el estado de la zona quemada abarca desde la ignición hasta que el pistón se posiciona en el punto muerto superior. Se escoge esta duración porque la mezcla completa luego se sitúa en el sistema de escape en valores de presión cercanos a la presión ambiente y, en consecuencia, temperaturas demasiado bajas que inhiben los procesos de formación de partículas.

Además, se supone que el frente de llama pasa por todas las zonas a la vez debido a que el comienzo del proceso es el mismo en todas ellas. Después de calcular las ecuaciones diferenciales, se conocen las fracciones másicas y las masas molares de cada una de las especies. Así, se puede obtener la fracción molar de dichas especies ( $X_i$ ) de la siguiente forma:

$$X_i = \frac{Y_i}{M_i} \cdot \frac{1}{\sum_{i=1}^{i=n_{especies}} \frac{Y_i}{M_i}} \quad (3.18)$$



### 3.4. Modelo de la película de combustible en el inyector

Como se ha comentado en la Sección 3.2, este submodelo es el encargado de determinar la cantidad de combustible que quedará en forma de película en la parte final de dicho inyector a través de la plataforma *MATLAB*.

Siguiendo la teoría detallada por Frommater [1] junto con observaciones ópticas y simulaciones CFD, al final del proceso de inyección (EOI) permanece en el propio inyector una película líquida de combustible que no se evapora completamente hasta el comienzo de la combustión (SOC), dando lugar a la formación de partículas debida a la poca cantidad de oxígeno en esa parte del motor. Además, dicha cantidad de combustible será proporcional a la duración de la inyección, y se supone que la cantidad de los depósitos formados en el inyector y la emisión de partículas no varía significativamente en condiciones de operación constante.

Por otro lado, se observa la evolución de la película de combustible durante el proceso de inyección mediante un microscopio introducido en la cámara de combustión, obteniéndose la siguiente figura:

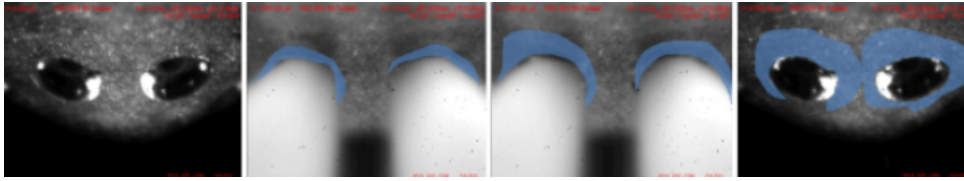


Figura 3.6: Formación de película de combustible durante la inyección [1]

Analizando la Figura 3.6, se extrae como principal conclusión que el área mojada se va haciendo mayor a medida que avanza el proceso y, en consecuencia, alcanza su máximo tamaño al final de la inyección. Así, se obtiene la masa de la película de combustible en ese instante final:

$$m_{film,EOI} = C_{inj,1} \cdot t_{inj}^{C_{inj,2}} \quad (3.19)$$

donde  $C_{inj,1}$  y  $C_{inj,2}$  son dos parámetros específicos del inyector y  $t_{inj}$  es el tiempo que dura el proceso de inyección. Cabe destacar que, de estas magnitudes que se acaban de explicar, las dos primeras vienen dadas y calibradas para una geometría del inyector dada, mientras que la tercera puede ser calculada si se supone conocida la masa total inyectada ( $m_{inj}$ ):

$$t_{inj} = \frac{\frac{360 \cdot m_{inj} \cdot n}{1000}}{\dot{m}_{ref} \cdot \sqrt{\frac{p_{rail} - p_{cyl}}{p_{rail,ref} - p_{cyl,ref}}}} \quad (3.20)$$

donde  $n$  es el régimen de giro,  $\dot{m}_{ref}$  el gasto de referencia, y  $p_{rail}$  y  $p_{cyl}$  las presiones en el conducto y en el cilindro respectivamente con sus correspondientes valores de referencia proporcionados por el fabricante.

Además, hay que tener en cuenta que no solo se pueden formar películas de combustible en la parte final de los orificios del inyector, sino que también pueden tener lugar en el interior de los propios agujeros de dicho inyector, como se ilustra en la siguiente figura:

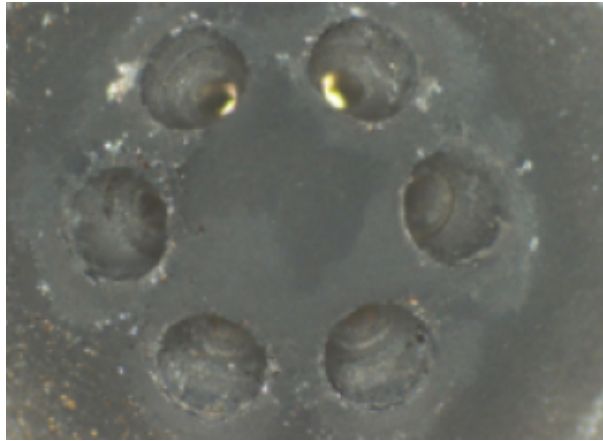


Figura 3.7: Película de combustible en los agujeros del inyector [1]

Así, a diferencia de lo expuesto en la Ecuación 3.19, la masa de la película de combustible se divide entre la parte final del orificio del inyector (*tip*) y una zona previa al mismo (*pre-stage*):

$$m_{film,tip,EOI} = m_{film,EOI} \cdot C_{tip} \quad (3.21)$$

$$m_{film,prestage,EOI} = m_{film,EOI} \cdot (1 - C_{tip}) \quad (3.22)$$

donde  $C_{tip}$  es una constante específica del inyector que define la cantidad de combustible en la parte final del orificio del inyector. Cabe destacar que las constantes que se aplican a este modelo serán válidas únicamente para una geometría del inyector dada.

### 3.5. Modelo de evaporación

Como se ha comentado anteriormente, modela las emisiones provocadas por la evaporación de las películas líquidas de combustible tanto en la parte final del orificio del inyector como en cualquier otra pared de la cámara de combustión, además de la parte del chorro que no impacta en dicha pared.

#### 3.5.1. Evaporación de la película en el inyector

En el caso de la parte final del orificio del inyector, Karwa et al. [23] determinan que la cantidad de combustible que se forma en esa zona depende de la temperatura del inyector, la velocidad del aire circundante, las propiedades del combustible y la presión del sistema. Además, Frommter [1] realiza una serie de medidas del número de partículas que se forman para las distintas geometrías de un inyector:

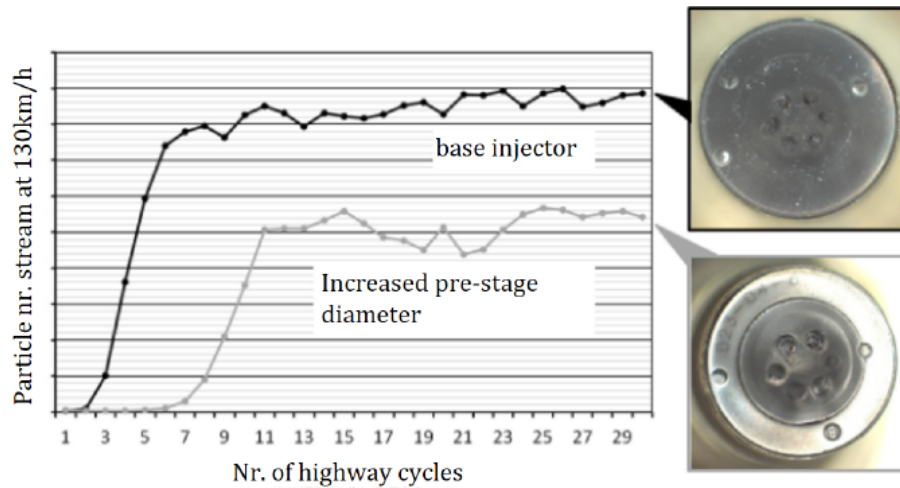


Figura 3.8: Número de partículas formadas para distintas geometrías del inyector [1]

La principal conclusión que se puede extraer de la Figura 3.8 es que la ratio de evaporación de la parte anterior al final del orificio del inyector está claramente por debajo del correspondiente al final de dicho orificio debido a que la velocidad del aire es más reducida y existe una mayor saturación del combustible en esa parte previa.

Este mismo autor [1] realiza una serie de simulaciones CFD del proceso de evaporación desde el final de la inyección hasta el comienzo de la combustión a un régimen de giro de 1500 rpm, obteniendo los siguientes resultados:

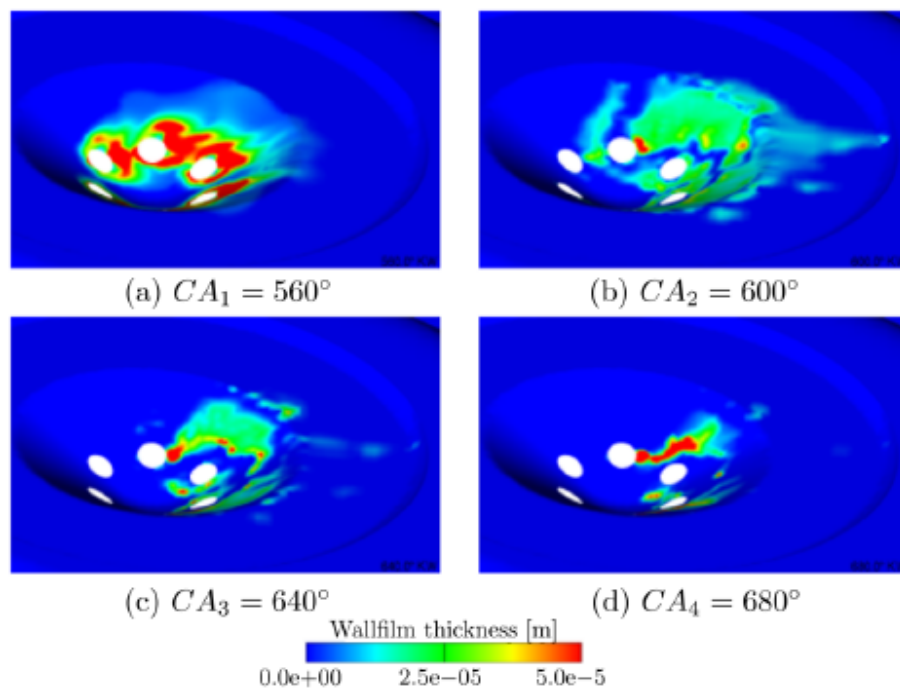


Figura 3.9: Simulaciones CFD del proceso de evaporación [1]

En la Figura 3.9 se puede observar el área mojada de la parte final del orificio del inyector y el correspondiente espesor de la película de combustible de la pared para diferentes ángulos de giro del cigüeñal.

Con los experimentos y las simulaciones que se acaban de describir, se puede desarrollar una función exponencial basada en el tiempo de evaporación que permita calcular la fracción másica de combustible en este proceso:

$$Y_{film} = \exp [-C_{evap} \cdot (t - t_{EOI})] \quad (3.23)$$

donde  $C_{evap}$  es una constante de evaporación medida en  $s^{-1}$ . Además, también se puede obtener la masa de la película de combustible que permanece en la pared al principio de la combustión con la ayuda de la correspondiente al principio de la inyección (calculada en la Ecuación 3.19) y la fracción másica de dicha película al comienzo de la combustión ( $Y_{film,SOC}$ ):

$$m_{film,SOC} = m_{film,EOI} \cdot Y_{film,SOC} \quad (3.24)$$

### 3.5.2. Evaporación de la película en la pared

Como explican Yan et al. [45], la película líquida de combustible formada en las paredes de la cámara de combustión está influenciada tanto por la fase gaseosa circundante como por la propia pared en términos de transferencia de calor y masa. Así, estos autores presentan un esquema de la evaporación de dicha película de combustible y los procesos que están involucrados:

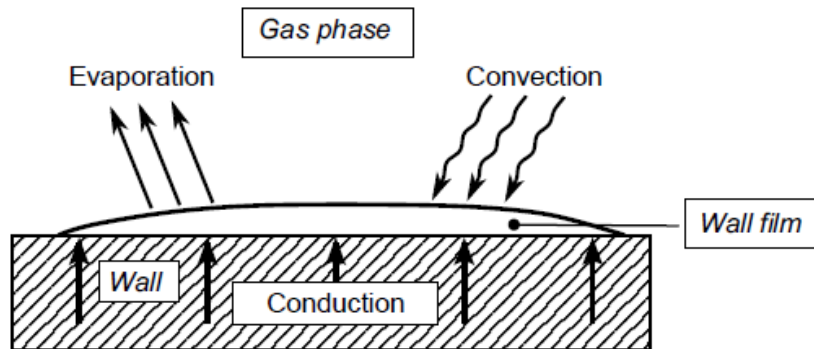


Figura 3.10: Esquema de la película de combustible en la pared [45]

Cabe destacar que en la cámara de combustión no existe una película líquida claramente definida, sino que su espesor, área y volumen cambian continuamente a lo largo del ciclo de trabajo. Así, este proceso resulta complejo y necesita hipótesis simplificadoras para llevarse a cabo:

- Las fases gaseosa y líquida se tratan de forma separada con un acoplamiento entre ambas en la superficie de la película, donde se aplican condiciones de saturación.
- Se asume que las propiedades físicas y termodinámicas siempre se encuentran en un estado de equilibrio.
- La película de combustible está a temperatura constante.
- Se supone que la superficie de la película es lisa.
- La masa de la película líquida ( $m_{film}$ ) forma un cilindro con altura  $h_{film}$  y diámetro  $d_{film}$ .

Asumiendo esa forma de cilindro y siguiendo la aproximación desarrollada por Nagaoka et al. [46], se obtiene el área de la película líquida de combustible ( $A_{film}$ ):

$$A_{film} = \frac{m_{film}}{\rho_l h_{film}} \quad (3.25)$$

donde  $\rho_l$  es la densidad del líquido. La altura de la película líquida se puede obtener como:

$$h_{film} = 2 \frac{\sigma_{lv}}{\rho_l u_{n,0}^2} \quad (3.26)$$

donde  $\sigma_{lv}$  es la tensión superficial en la fase intermedia entre líquido y vapor y  $u_{n,0}$  la velocidad normal de impacto de la gota. Además, también se obtiene el valor medio del espesor de la película ( $\bar{h}_{film}$ ), que se usará para hallar la ratio de evaporación:

$$\bar{h}_{film} = 2 \frac{\sigma_{lv} (\bar{T}_{d,0})}{\rho_l (\bar{T}_{d,0}) \bar{u}_{n,0}^2} \quad (3.27)$$

donde  $\bar{T}_{d,0}$  es la temperatura media de las gotas incidentes y  $\bar{u}_{n,0}$  la velocidad normal de impacto.

Acorde al trabajo desarrollado por Habchi [47], existen cuatro regímenes de ebullición en función de la temperatura de la pared ( $T_w$ ), la temperatura de saturación ( $T_{sat}$ ), la temperatura de Leidenfrost ( $T_L$ ) y la de Nukiyama ( $T_N$ ). En la siguiente figura se representan dichos regímenes en función de la vida de la gota de combustible:

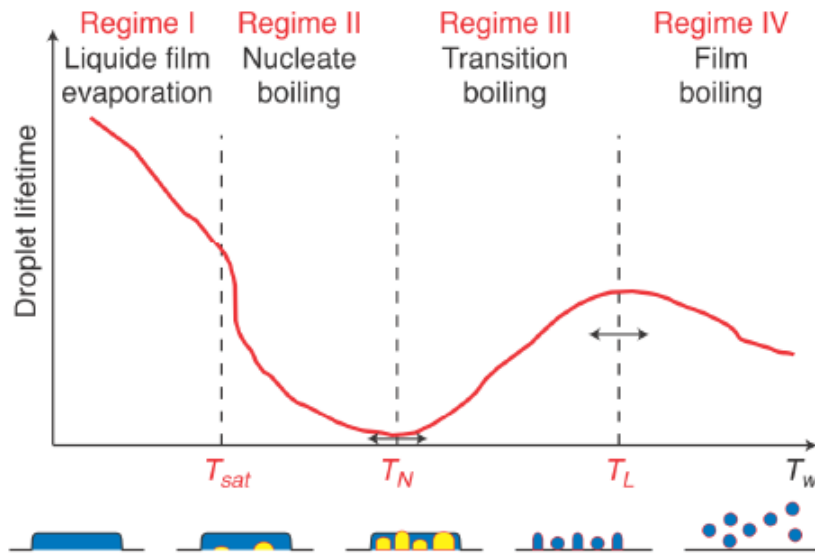


Figura 3.11: Curva de vida de la gota y regímenes de ebullición asociados [47]

A continuación, se explica cada uno de ellos de forma detallada:

- I. Evaporación de la película líquida con  $T_w < T_{sat}$ . La tasa de vaporización depende de la transferencia de calor por parte de la fase gaseosa, llevada a cabo por procesos de convección.

- II. Ebullición con formación del núcleo con  $T_{sat} < T_w < T_N$ . Se forman pequeñas cavidades de vapor que provocan una excelente transferencia de calor y acelera la vaporización de la película líquida de combustible. Además, se alcanza la temperatura de Nukiyama mientras que la vida de la gota disminuye.
- III. Ebullición de transición con  $T_N < T_w < T_L$ . Las cavidades anteriormente citadas forman grandes columnas de vapor que evitan el contacto entre la película y el líquido. La tasa de vaporización decrece y aumenta la vida de la gota. Se alcanza la temperatura de Leidenfrost.
- IV. Ebullición de la película líquida con  $T_w > T_L$ . La película se cubre completamente con una banda de vapor y la vida de la gota se sitúa en valores altos, ya que la transferencia de calor es mucho más lenta que por el líquido. Si se sigue aumentando la temperatura, la vida de la gota va disminuyendo.

Habchi [47] identifica dos parámetros que influyen en la vaporización entre los regímenes II-IV mostrados en la Figura 3.11: fracción de secado ( $\alpha_{dry}$ ) y la densidad lineal de las líneas de contacto de la película líquida ( $C_{lld}$ ). El primero se obtiene de la siguiente forma:

$$\alpha_{dry} = \frac{A_{dry}}{A_{wet}} \quad (3.28)$$

donde  $A_{dry}$  es el área de la parte seca y  $A_{wet}$  el de la mojada. El valor de este parámetro está comprendido entre 0 y 1, correspondiéndose con el aumento de la temperatura desde  $T_{sat}$  hasta  $T_L$ .

El segundo va a ser proporcional al sumatorio de los perímetros de las zonas secas, se incrementa en el régimen de ebullición con formación de núcleo y alcanza su máximo al llegar a la temperatura de Nukiyama. En el régimen de ebullición de transición esta variable decrece mientras que las cavidades de vapor coalescen formando una banda continua de vapor.

Con dichos parámetros, se puede obtener la tasa de vaporización ( $\dot{m}_{film,w}$ ) con la siguiente ecuación:

$$\dot{m}_{film,w} = A_{film} \frac{\beta_1 (1 - \alpha_{dry}) \dot{q}_{film,l} + \beta_2 \alpha_{dry} \dot{q}_{film,vl}}{\Delta H_{v,sat}} \quad (3.29)$$

donde  $\beta_1$  es una función de  $C_{lld}$ ,  $\beta_2$  de la fracción de secado,  $\Delta H_{v,sat}$  la entalpía de vaporización en el estado saturado y  $\dot{q}_{film,l}$  y  $\dot{q}_{film,vl}$  los flujos térmicos de la pared al líquido en contacto directo y de la pared al líquido a través de la capa de vapor, respectivamente. Estas dos últimas variables se calculan de la siguiente forma:

$$\dot{q}_{film,l} = \lambda_{l,sat} \frac{T_w - T_{sat}}{h_{film}} \quad (3.30)$$

$$\dot{q}_{film,vl} = \lambda_v \frac{T_w - T_l}{h_v} \quad (3.31)$$

donde  $\lambda_{l,sat}$  es la conductividad térmica del combustible líquido a la temperatura de saturación y  $\lambda_v$  la correspondiente al vapor.

### 3.5.3. Homogeneidad de la mezcla

Como se ha comentado anteriormente, la mezcla no homogénea de los componentes de la cámara de combustión es una de las fuentes principales de emisión de partículas de hollín. Este fenómeno se ha demostrado tanto con medidas experimentales como con simulaciones CFD en la literatura para motores GDI [9]. Por ello, es fundamental identificar las zonas con mezcla suficientemente rica en combustible, ya que es donde se produce este fenómeno. Por ejemplo, en la Figura 3.2 las zonas ricas que se han considerado como influyentes para el fenómeno son a partir de un umbral de  $EQR \approx 1.4$ .

Gong y Rutland [27] desarrollan un modelo para calcular las emisiones de hollín debido a la mezcla no homogénea. En primer lugar, se define el índice de no homogeneidad  $I_H$ :

$$I_H = \exp\left(-C_2 \cdot \tau_{mix} \cdot Re^{-3/2} \cdot We^{2/3}\right) \quad (3.32)$$

donde  $C_2$  es un factor ajustable y  $\tau_{mix}$  es el tiempo adimensional de mezcla, que se obtiene de la siguiente forma:

$$\tau_{mix} = \frac{t_{SOC} - t_{EOI}}{\Delta t_{inj}} \quad (3.33)$$

Por otro lado, el número de Reynolds se calcula:

$$Re = \frac{c_m \cdot B}{\nu} \quad (3.34)$$

donde  $c_m$  es la velocidad media del pistón,  $B$  el diámetro del calibre y  $\nu$  la viscosidad cinemática. Por último, el número de Weber se obtiene:

$$We = \frac{\rho_f \cdot u_{inj}^2 \cdot d_{noz}}{\sigma} \quad (3.35)$$

donde  $\rho_f$  es la densidad del combustible,  $u_{inj}$  la velocidad de inyección,  $d_{noz}$  es el diámetro de la tobera y  $\sigma$  la tensión superficial.

Con la Ecuación 3.32, estos autores representan la variación del índice de homogeneidad con el tiempo de mezcla adimensional:

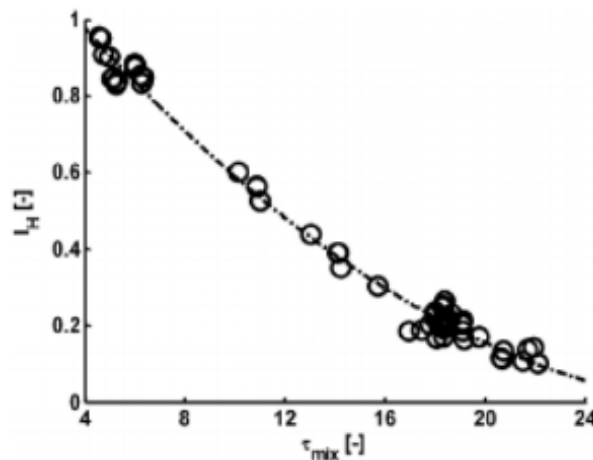


Figura 3.12: Evolución del índice de homogeneidad con el tiempo de mezcla adimensional [27]

En la Figura 3.12 se observa que con el paso del tiempo el índice de homogeneidad tiende a cero, lo que implica que la carga va siendo más homogénea. Además, Gong y Rutland [27] también estudian la variación de dicho índice con respecto al número de Weber, señalando tres puntos con presiones de inyección distintas:

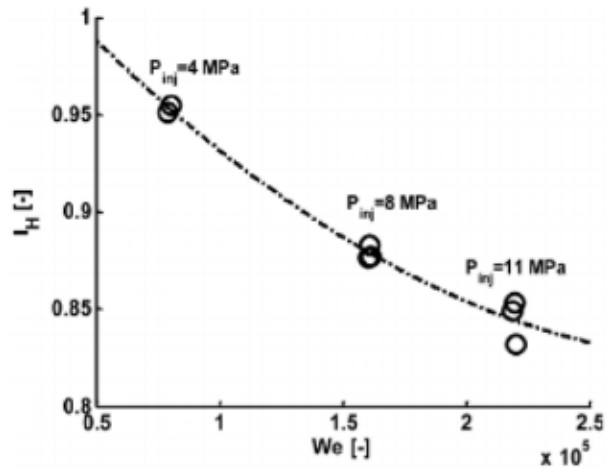


Figura 3.13: Evolución del índice de homogeneidad con el número de Weber [27]

En la Figura 3.13 se observa que a grandes presiones de inyección, la interacción entre el chorro y el gas es fuerte, lo que incrementa la mezcla y da lugar a una carga más homogénea.

A su vez, Frommter [1] realiza una serie de simulaciones CFD para estudiar la evolución del dosado relativo desde las zonas pobres a las ricas tanto con información local como con una función de distribución de frecuencia:

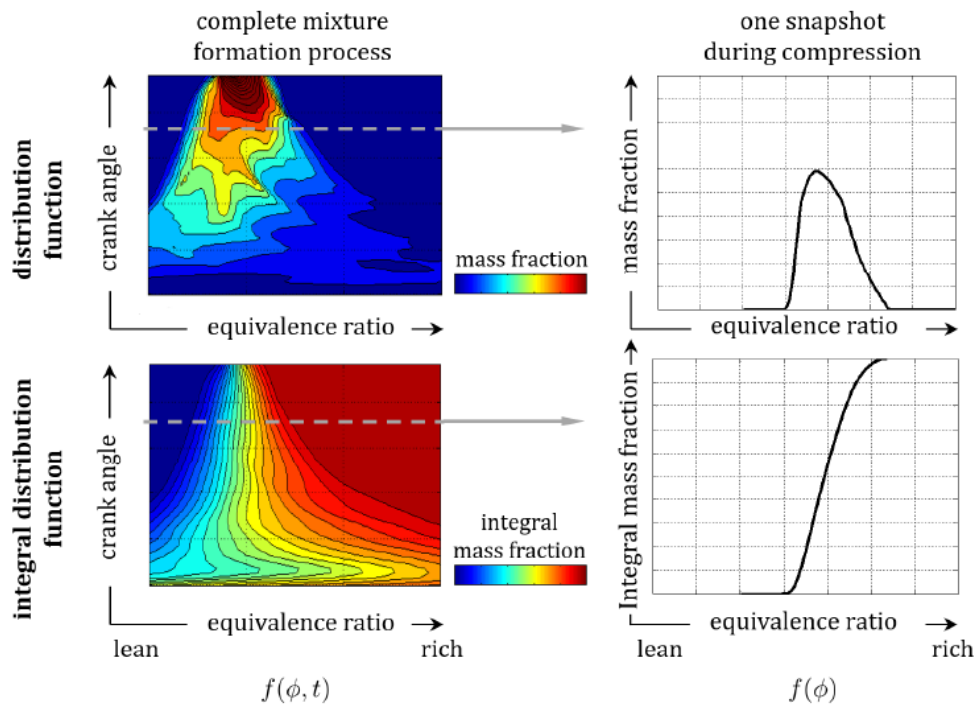


Figura 3.14: Evolución del dosado relativo en la cámara de combustión [1]



Así, analizando la Figura 3.14, se extrae como conclusión que la función de distribución integral del dosado relativo se puede representar con una exponencial en función del ángulo de giro de cigüeñal ( $\alpha$ ):

$$F(\phi, \alpha) = 1 - \exp \left[ -A \cdot \phi^{E(\alpha)+1} \right] \quad (3.36)$$

donde  $A$  es un coeficiente que se puede obtener con métodos numéricos y  $E$  es un parámetro que afecta al gradiente de la función que se calcula de la siguiente manera:

$$E(\alpha) = \exp \left[ C \cdot \tau_{mix}(\alpha)^D \cdot Re^X \cdot We^Y \right] \quad (3.37)$$

donde  $C$ ,  $D$ ,  $X$  e  $Y$  son parámetros que caracterizan la ley exponencial. Además, habrá que modificar ligeramente la expresión 3.33 para recalcular el tiempo de mezcla adimensional:

$$\tau_{mix}(\alpha) = \frac{t(\alpha) - t_{SOI}}{t_{EOI} - t_{SOI}} = \frac{t(\alpha) - t_{SOI}}{\Delta t_{inj}} \quad (3.38)$$

Para el cálculo de la tensión superficial, Brock y Bird [28] introducen una correlación que presenta la siguiente estructura:

$$\sigma = p_c^{2/3} \cdot T_c^{1/3} \cdot Q \cdot \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)^{11/9} \quad (3.39)$$

donde  $p_c$  y  $T_c$  son la presión y temperatura críticas respectivamente. Además, el parámetro  $Q$  se obtiene de la siguiente forma:

$$Q = 0.1196 \cdot \left( 1 + \frac{T_{evap}}{T_c} \cdot \log \frac{p_c}{1.01325} \right) - 0.279 \quad (3.40)$$

donde  $T_{evap}$  es la temperatura de evaporación.

### 3.6. Modelo del chorro

Para este submodelo se seguirá la teoría detallada por Pastor et al. [19], con el que se busca obtener la evolución del dosado de la mezcla en el cilindro, es decir, la distribución de dosados, utilizando como herramienta el software *MATLAB*. Cabe destacar que este modelo está implementado para motores diésel pero la física es la misma que para los motores de gasolina GDI como en el caso que se trata en este estudio, por lo que se puede aplicar de forma idéntica.

Al tener lugar la mezcla del aire con el combustible, este modelo no tiene en cuenta ningún tipo de movimiento inducido por dicho aire. Además, el volumen escogido es lo suficientemente grande como para que la evolución del chorro no modifique las condiciones del aire que se encuentra lejos del orificio del propio inyector. El modelo se puede ilustrar con la siguiente figura:

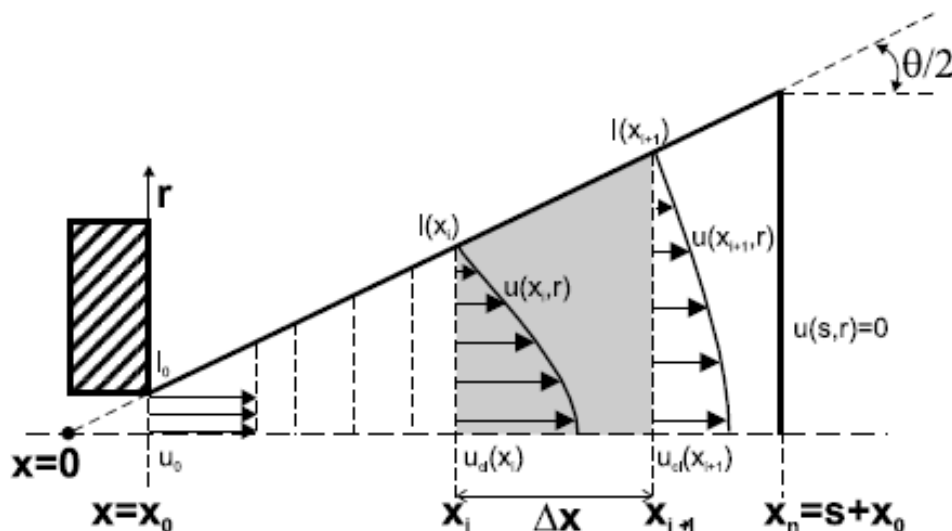


Figura 3.15: Esquema del modelo de chorro [19]

El ángulo del chorro ( $\theta$ ) define, junto con el diámetro del orificio ( $d_0$ ), el origen virtual del propio chorro de tal forma que a la salida del inyector se cumple:

$$x = x_0 = \frac{d_0}{2 \cdot \tan(\frac{\theta}{2})} \quad (3.41)$$

Además, acorde a la Figura 3.15, el dominio se divide axialmente en un número de celdas con espesor  $\Delta x$  de forma que cada una de ellas está limitada por la sección de entrada ( $i$ ) y salida ( $i + 1$ ). La última celda cuyas velocidades de entrada y salida sean no nulas se define como frente del chorro ( $s$ ).

Por otro lado las hipótesis que caracterizan el modelo para cada instante temporal son:

- Simetría en el eje del chorro.
- Se asume un flujo turbulento completamente desarrollado, es decir, la ratio de las variables conservadas divididas por su valor en la línea central no depende de la coordenada axial. Esta hipótesis es de las más fuertes que se hacen, aunque está aceptada para flujos de un chorro como el caso de estudio. Además, se utiliza una función de distribución radial gaussiana, válida en las condiciones típicas de operación de motores de automoción tanto diésel como gasolina.
- El ángulo del chorro se define como el lugar donde el perfil autosimilar de velocidad axial alcanza el valor de la constante definida para el ángulo del cono del chorro ( $\zeta$ ), que Pastor et al. [19] fijan en 0.01. Por último, se puede establecer una relación entre el ángulo del cono del chorro y la constante  $k$  de los perfiles gaussianos autosimilares:

$$k = \frac{\ln(1/\zeta)}{\tan^2(\theta/2)} \quad (3.42)$$

- El flujo es homogéneo localmente al existir un equilibrio local en las condiciones de temperatura y velocidad.
- Se desprecian los efectos de compresibilidad y, por lo tanto, la presión se asume constante.

- La densidad local se calcula bajo la hipótesis de mezcla ideal de la siguiente forma:

$$\rho(x, r) = \frac{1}{\sum \frac{Y_i(x, r)}{\rho_i(x, r)}} \quad (3.43)$$

### 3.6.1. Ecuaciones de conservación y condiciones de contorno

Las ecuaciones diferenciales de conservación del momento axial, masa de combustible y entalpía son las siguientes:

$$I(x_i, t) - I(x_{i+1}, t) = \frac{d}{dt} \left[ \int \rho(x, r, t) \cdot u(x, r, t) \cdot dV \right] \quad (3.44)$$

$$m_f(x_i, t) - m_f(x_{i+1}, t) = \frac{d}{dt} \left[ \int \rho(x, r, t) \cdot Y_f(x, r, t) \cdot dV \right] \quad (3.45)$$

$$H(x_i, t) - H(x_{i+1}, t) = \frac{d}{dt} \left[ \int \rho(x, r, t) \cdot [h(x, r, t) - h_{a, \infty}] \cdot dV \right] \quad (3.46)$$

El término de la izquierda de las Ecuaciones 3.44, 3.45 y 3.46 corresponde a la diferencia entre el valor de esas magnitudes a la entrada ( $x_i$ ) y a la salida ( $x_{i+1}$ ) de la celda mientras que el de la derecha representa sus variaciones temporales, con el momento, combustible y entalpía acumulados en la celda correspondiente. Así, se puede realizar una discretización espacial en la parte de la izquierda (subíndices  $i$  e  $i + 1$  de tal forma que  $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ ) y una temporal en la de la derecha (superíndices  $j$  y  $j + 1$  de tal forma que  $t^{j+1} = t^j + \Delta t$ ) resultando en las siguientes expresiones:

$$I_i^{j+1} - I_{i+1}^{j+1} = \frac{\int \rho(x, r, t^{j+1}) \cdot u(x, r, t^{j+1}) \cdot dV - \int \rho(x, r, t^j) \cdot u(x, r, t^j) \cdot dV}{\Delta t} \quad (3.47)$$

$$m_{f,i}^{j+1} - m_{f,i+1}^{j+1} = \frac{\int \rho(x, r, t^{j+1}) \cdot Y_f(x, r, t^{j+1}) \cdot dV - \int \rho(x, r, t^j) \cdot Y_f(x, r, t^j) \cdot dV}{\Delta t} \quad (3.48)$$

$$H_i^{j+1} - H_{i+1}^{j+1} = \frac{\int \rho(x, r, t^{j+1}) \cdot [h(x, r, t^{j+1}) - h_{a, \infty}] \cdot dV - \int \rho(x, r, t^j) \cdot [h(x, r, t) - h_{a, \infty}] \cdot dV}{\Delta t} \quad (3.49)$$

Para la resolución de las Ecuaciones 3.47, 3.48 y 3.49 son necesarias condiciones de contorno que se obtienen de forma experimental. Éstas son:

- Flujos de momento  $I_0$ , masa de combustible  $m_{f,0}$  y entalpía  $H_0$  a la salida del inyector. Todos ellos se consideran constantes o función del tiempo, y los dos primeros se pueden obtener experimentalmente para un tipo particular de tobera.
- El ángulo del cono del chorro ( $\theta/2$ ) se considera constante con el tiempo. Es muy difícil obtenerlo experimentalmente.
- La densidad local debe ser una función explícita del resto de variables de la forma  $\rho = \rho(f)$ . La función se supone conocida y dependerá de condiciones de contorno adicionales tanto a la salida del inyector como ambientales lejos de la boquilla.

### 3.6.2. Resolución

Para obtener la solución se reescriben las Ecuaciones 3.47, 3.48 y 3.49 de tal forma que serán los parámetros sobre el eje  $u_{cl}, m_{f,cl}$  y  $h_{cl}$  los que son resueltos tanto a la entrada como a la salida de cada una de las celdas para cada instante temporal y espacial. Así, para cualquier variable conservada  $q$  y su flujo correspondiente  $Q$  se cumple la siguiente ecuación:

$$Q_i^{j+1} = \int_0^\infty \rho(x_i, r, t^{j+1}) \cdot u_{cl}(x_i, t^{j+1}) \cdot q_{cl}(x_i, t^{j+1}) \cdot \exp(-Gk\xi^2) \cdot 2\pi r dr \quad (3.50)$$

donde  $\xi$  es una coordenada adimensional que se define como  $\xi = r/x$ ,  $G$  es un parámetro que tiene diferentes valores dependiendo de la variable conservada que se evalúe:

<b>q</b>	<b>G</b>
u	2
$m_f$	1+Sc
$h - h_{a,\infty}$	1+Pr

Tabla 3.2: Valores adoptados por  $G$

donde  $Sc$  es el número turbulento de Schmidt y  $Pr$  es el número de Prandtl. Por último, la Ecuación 3.50 se puede reescribir como:

$$Q_i^{j+1} = 2\pi x_i^2 \cdot u_{cl,i}^{j+1} \cdot q_{cl,i}^{j+1} \cdot F(Y_{f,cl,i}^{j+1}, Sc, G, k) \quad (3.51)$$

donde  $F$  es la función que contiene la integral:

$$F(Y_{f,cl}(x, t), Sc, G, k) = \int_0^\infty \rho(\xi, Y_{f,cl}(x, t), Sc) \cdot \exp(-Gk\xi^2) \cdot \xi d\xi \quad (3.52)$$

Todo el proceso que se ha descrito a lo largo de esta sección se resume en el siguiente esquema:

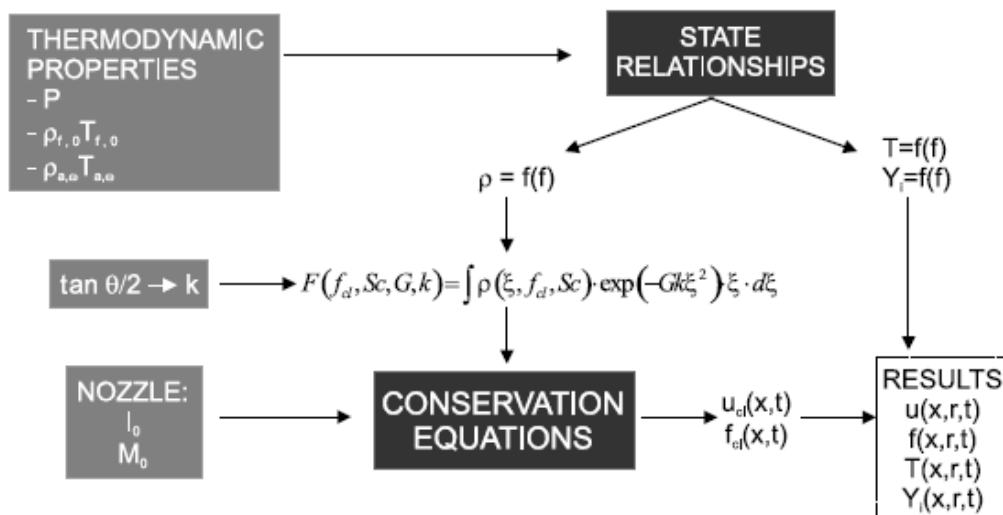


Figura 3.16: Resumen del modelo del chorro [19]

### 3.6.3. Interacción con las paredes del cilindro

Además del modelo que se está describiendo en este apartado, habrá que tener en cuenta la interacción del chorro con las paredes del cilindro a la hora de la emisión de las partículas de hollín. Para ello, se hace uso de la teoría desarrollada por Wang et al. [24], en la que se describen las ecuaciones de balance de población para los procesos de formación y oxidación de hollín, siendo resueltas en *SWEEP* [17], que se basa en el método de los momentos explicado en la Sección 2.4.

Este modelo monitoriza el área de la superficie y el número y diámetro de las partículas primarias de cada agregado. Además, también puede rastrear el número de átomos tanto de carbono como de hidrógeno y las moléculas de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH) para dichos agregados. Para ahorrar coste computacional, se emplea una representación estadística en lugar de rastrear cada molécula con el método de los momentos [16].

A la hora de modelar los efectos de las películas de combustible que se pueden formar en las paredes del cilindro, el conjunto estocástico de partículas se divide en dos zonas: pared y el resto. Las pertenecientes al primer grupo son las que se ven envueltas en los procesos de impacto del chorro y evaporación de la película. Además, su masa inicial es mucho menor que la masa de la segunda de las zonas debido a la poca cantidad de combustible presente en la propia película. Por último, existen procesos de mezcla entre ambas zonas con los distintos modelos.

La película de combustible de las paredes del cilindro se forma debido al impacto del chorro sobre dichas paredes. Para modelar ese impacto, se recurre a la teoría desarrollada por Bai y Gosman [25]. Acorde a estos autores, existen distintos regímenes para las gotas del combustible después del impacto en función del número de Weber ( $We$ ):

- Pegado (*stick*): La gota que impacta en la pared se adhiere a ésta en una forma casi esférica. Esto es debido a que la energía de impacto es muy baja por la reducida temperatura de la pared ( $T_w$ ). Además, se cumple que  $We \leq 2$ .
- Rebote (*rebound*): La gota rebota después del impacto. Este proceso puede tener lugar por dos fenómenos distintos: una película de vapor impide el contacto entre la propia gota y la superficie o, si la pared está mojada, la energía de impacto es baja y la película de aire atrapada entre la gota y la película líquida causa pérdida de energía y, en consecuencia, el rebote. Se cumple que  $2 < We \leq 20$ .
- Extendido (*spread*): La gota impacta a velocidad moderada en la pared seca o mojada. En el primer caso, forma una película de combustible sobre la pared y en el segundo se une con la película existente. Se cumple que  $20 < We \leq We_c$ , siendo  $We_c$  el número de Weber crítico.
- Salpicadura (*splash*): El impacto de la gota en la pared se produce con una energía muy alta, se forma una cima en cuya periferia el chorro se desarrolla volviéndose inestable y dividiéndose en muchos fragmentos. Se cumple que  $We_c \leq We$ .

$We$  y  $We_c$  se definen de la siguiente forma:

$$We = \frac{\rho_l d_d u_{in}^2}{\sigma} \quad (3.53)$$

$$We_c = 1320 La^{-0.18} \quad (3.54)$$

donde  $\rho_l$  es la densidad del líquido,  $d_d$  el diámetro de la gota,  $u_{in}$  la velocidad incidente,  $\sigma$  la tensión superficial y  $La$  el número de Laplace. Este último se obtiene de la siguiente forma:

$$La = \frac{\rho_l \sigma d_d}{\mu^2} \quad (3.55)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica. Los regímenes que se acaban de explicar se pueden ilustrar con la siguiente figura:

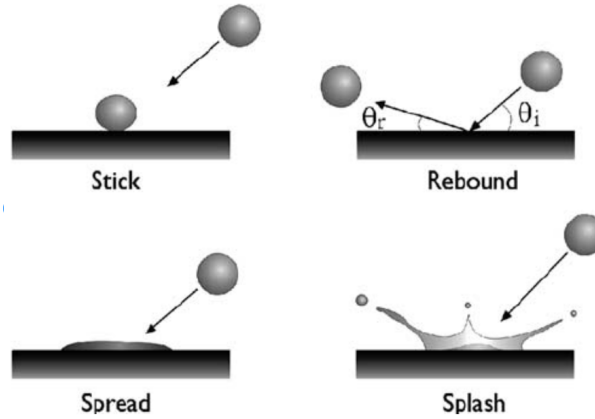


Figura 3.17: Regímenes de impacto del chorro en las paredes del cilindro [32]

Cabe destacar que en el régimen de rebote ninguna de las gotas del chorro se quedará pegada a la pared y las gotas reflejadas tienen el mismo tamaño que las que han impactado previamente. En el extendido todas las gotas formarán parte de la película. Por último, en el régimen de salpicadura algunas de las gotas se unirán a la película mientras que otras rebotarán, denominándose a estas últimas gotas secundarias. La ratio de división ( $\gamma$ ) de la masa de las gotas entre las dos partes se define como:

$$\gamma = \frac{\Delta m_w}{\Delta m_w + \Delta m_{film}} = 0.2 + 0.9a \quad (3.56)$$

donde  $\Delta m_w$  y  $\Delta m_{film}$  son las masas de las gotas rebotadas y transferidas a la película, respectivamente, mientras que  $a$  es un valor aleatorio distribuido uniformemente entre 0 y 1.

Para obtener el tamaño de las gotas secundarias se utiliza el modelo desarrollado por Han et al. [26]. Entonces, se calcula el diámetro medio de Sauter (SMD)  $d'_d$ :

$$d'_d = 2.16d_m \quad (3.57)$$

donde  $d_m$  es el diámetro medio aritmético:

$$d_m = \left[ \frac{\gamma}{30 \left( \frac{We}{We_c} - 1 \right)} \right]^{1/3} d_d \quad (3.58)$$

Además, se puede calcular el gasto de masa que va desde la película de combustible a la zona de la pared:

$$\dot{m}_{film} = \frac{Sh \rho_g D (Y_\infty - Y_{fs})}{l (1 - Y_{fs})} \quad (3.59)$$

donde  $Sh$  es el número de Sherwood,  $\rho_g$  la densidad del gas,  $D$  el coeficiente binario de difusión combustible/aire,  $Y_{fs}$  la fracción másica de combustible en la superficie de la película e  $Y_\infty$  la fracción másica de combustible del gas circundante sobre la superficie. El número de Sherwood se puede calcular de la siguiente manera:

$$Sh = 0.332Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad (3.60)$$

donde  $Re$  es el número de Reynolds y  $Sc$  el de Schmidt. Además, la longitud  $l$  se puede obtener como:

$$l = \frac{l_0}{\delta_0} \delta \quad (3.61)$$

donde  $\delta$  es el espesor de la película de combustible que se determina de la siguiente manera:

$$\delta = \frac{2\sigma}{\rho u_{in}^2} \quad (3.62)$$

Una vez se han terminado de describir todos los regímenes posibles, se pasa a explicar el algoritmo de cálculo detallado por Wang et al. [24], que está formado por los siguientes pasos:

1. En primer lugar, se calcula la penetración del chorro  $S(t)$ :

$$S(t) = \begin{cases} \text{si } t < t_{break} & 0.39 \left( \frac{2\Delta p}{\rho_l} \right)^{1/2} t \\ \text{si } t > t_{break} & 2.95 \left( \frac{\Delta p}{\rho_g} \right)^{1/4} (d_0 t)^{1/2} \end{cases} \quad (3.63)$$

donde  $t$  es el tiempo desde el comienzo de la inyección,  $\Delta p$  es la caída de presión a través del orificio del inyector,  $d_0$  es el diámetro de dicho orificio,  $\rho_l$  es la densidad del combustible líquido y  $\rho_g$  la del combustible gas y  $t_{break}$  el tiempo de ruptura del chorro. Éste último se puede obtener:

$$t_{break} = \frac{28.65\rho_l d_0}{(\rho_g \Delta p)^{1/2}} \quad (3.64)$$

Por último, con la Ecuación 3.63 se puede obtener el volumen de penetración:

$$V_{pen} = \frac{\pi}{3} \sin^2 \left[ \left( \frac{\theta}{2} \right) S(t)^3 \right] \quad (3.65)$$

2. Se escoge una serie estocástica de partículas en las que va a incidir el chorro, de tal manera que su volumen se obtendrá de la siguiente forma:

$$V_{par} = \sum_i V^{(i)} \quad \forall i \in U \quad (3.66)$$

siendo  $U$  el conjunto de índices de las partículas que se han escogido desde el comienzo de la inyección. Se debe cumplir la condición  $V_{par} \geq V_{pen}$ .

3. Se asigna a cada una de las partículas escogidas un valor de masa líquida ( $m_l^{(i)}$ ) proporcional al peso estadístico  $W^{(i)}$  con la siguiente expresión:

$$m_l^{(i)} = \frac{W^i}{\sum_j W_j} \dot{m}_f \Delta t \quad (3.67)$$

donde  $\dot{m}_f$  es el gasto de combustible inyectado e  $\Delta t$  el paso temporal. Además, se puede obtener el número de gotas:

$$n_d^{(i)} = \frac{6m_l^{(i)}}{\pi \rho_l d_d^{(i)3}} \quad \forall i \in 1, \dots, n_{par} \quad (3.68)$$

4. Si:

$$S(t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) > \frac{B}{2} \quad \text{ó} \quad S(t) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) > \frac{4V(t)}{\pi B^2} \quad (3.69)$$

siendo  $V(t)$  el volumen del cilindro en ese instante y  $B$  el diámetro del cilindro, el chorro impacta en las paredes de éste y se procede a realizar el paso siguiente. En el caso que no se cumplan las condiciones de la Ecuación 3.69, se procede al paso 6.

5. Las partículas involucradas en el impacto son las que se encuentran en la parte final del chorro. Al igual que se ha visto previamente, se puede obtener el régimen en el que se encuentran dichas partículas acorde al número de Weber tras el impacto:

$$We = \frac{\rho_l d_d [u(t) \cos(\frac{\theta}{2})]^2}{\sigma} \quad (3.70)$$

donde  $u(t)$  es la velocidad en la parte final del chorro. Si corresponde al régimen extendido, la gota se añade a la película de combustible de la pared. Si, por el contrario, rebota, todo el combustible involucrado en el impacto se transfiere a la zona de la pared con un nuevo diámetro:

$$d_{d,w}^{(i)} = \left[ \frac{6 \left( m_{l,w}^{(i)} + \Delta m_{l,w}^{(i)} \right)}{\pi \rho_l \left( n_{d,w}^{(i)} + \Delta n_{d,w}^{(i)} \right)} \right]^{1/3} \quad (3.71)$$

donde  $\Delta m_{l,w}^{(i)}$  y  $\Delta n_{d,w}^{(i)}$  son la masa y el número de gotas añadidas a cada partícula y se obtendrán con Ecuaciones similares a 3.67 y 3.68, respectivamente. Por último, para el régimen de salpicadura la masa de las gotas incidentes se distribuye por la película de combustible de la pared.

6. Se actualiza la composición y temperatura de las partículas que se encuentran en la zona de la pared calculando  $\Delta m_f^{(i)}$ :

$$\Delta m_f^{(i)} = \frac{W^{(i)}}{\sum_j W^{(j)}} \dot{m}_{fil} \Delta t \quad \forall \text{ partículas } i \text{ en la zona de la pared} \quad (3.72)$$

Además, también se deberían actualizar los valores de entalpía, peso estadístico, la masa de las partículas y las fracciones másicas de las especies en fase gaseosa.

7. Se actualiza la masa líquida de combustible, el peso estadístico, las fracciones másicas de las especies en fase gaseosa y la entalpía de las partículas en ambas zonas después del proceso de evaporación.



Por último, se puede calcular una ratio característica para el intercambio de masa entre la zona de la pared y el resto ( $\beta$ ) definido como:

$$\beta = \frac{\text{Intercambio de ratio de gasto}}{m_{TOT,w}} \quad (3.73)$$

donde  $m_{TOT,w}$  es la masa total de la zona de la pared.

### 3.7. Modelo de partículas de hollín

Es el encargado de obtener la distribución del número, masa y tamaño de las partículas de hollín emitidas, tomando como base los fundamentos teóricos explicados anteriormente. El software en el que se desarrollará será *SWEEP* [17].

#### 3.7.1. Procesos de formación de partículas

En primer lugar, se transforma la fracción molar ( $X_i$ ) calculada en la Ecuación 3.18 en concentración molar de la siguiente manera:

$$c_i = \frac{X_i \cdot p}{R \cdot T_b} \quad (3.74)$$

donde  $R$  es la constante de los gases ideales con un valor de  $8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ .

Se ha comentado anteriormente que la herramienta *SWEEP* se basa en el método de los momentos [16] y para su correcto funcionamiento requiere un valor estimado del momento inicial máximo ( $M_0$ ) de cada zona. Para ello, los autores de *SWEEP* [17] recomiendan un proceso iterativo que conlleva ejecutar el software múltiples veces. Dicho proceso se ilustra en la siguiente figura:

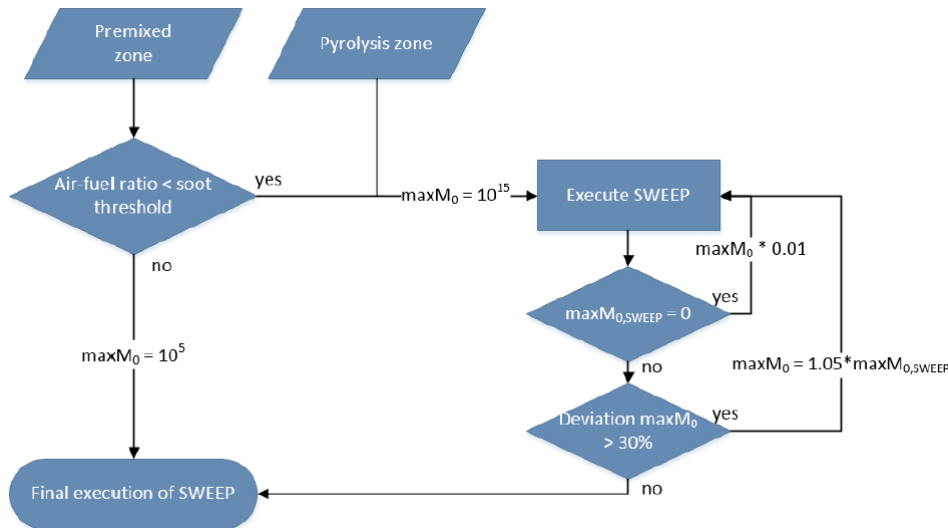


Figura 3.18: Proceso iterativo para el cálculo de  $M_0$  [17]

En la figura anterior se observa cómo en cada iteración, si se sobreestima el valor máximo de  $M_0$ , dando lugar a  $maxM_{0,SWEEP} = 0$ , se reduce dicho valor máximo de  $M_0$  en un 10%. Si la desviación entre el valor estimado y el calculado es mayor del 30%, la siguiente estimación se realiza aumentando el valor de  $M_0$  un 5%. Según los autores [17], suelen ser necesarias dos

iteraciones para obtener un valor correcto. Es fundamental fijar un momento adecuado, dado que, en el caso contrario, surgirían inestabilidades numéricas o una completa eliminación del conjunto de partículas estocásticas escogido. Además, este proceso iterativo incrementa el tiempo de cálculo y sólo debe llevarse a cabo en las zonas en las que se espere una cantidad significativa de partículas.

A continuación, se pasa a la modelización de los procesos de formación de partículas siguiendo la teoría desarrollada por Celnik et al. [33]. Como hipótesis, se asume que la forma de las partículas será una esfera perfecta y no se tendrán en cuenta los procesos de conjunto. La nucleación de las partículas de hollín primarias se modela únicamente con la coalescencia de pireno ( $C_{16}H_{10}$ ), obteniendo la ratio por unidad de volumen al principio del proceso ( $R_{origen}$ ):

$$R_{origen} = 0.5 \cdot k_{tr} N_A^2 c_{pireno}^2 \quad (3.75)$$

donde  $c_{pireno}$  es la concentración molar del pireno,  $N_A$  el número de Avogadro ( $6.023 \cdot 10^{-23} mol^{-1}$ ) y  $k_{tr}$  el núcleo de coalescencia definido como la media armónica de los correspondientes núcleos de flujo de deslizamiento  $k_{sf}$  y de flujo no molecular  $k_{fm}$ :

$$k_{tr} = \frac{k_{fm} k_{sf}}{k_{fm} + k_{sf}} \quad (3.76)$$

$k_{fm}$  se obtiene como:

$$k_{fm} = 2.2 \sqrt{\frac{\pi k_B T}{m_{pireno}}} \cdot 4 d_{pireno}^2 \quad (3.77)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann, de valor  $1.381 \cdot 10^{-23} J/K$ ,  $T$  la temperatura local y  $m_{pireno}$  y  $d_{pireno}$  la masa y el diámetro del pireno, respectivamente. Por otro lado,  $k_{sf}$  se calcula:

$$k_{sf} = \frac{4k_B T}{3\mu} (2 + 2.514 Kn_{pireno}) \quad (3.78)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica y  $Kn_{pireno}$  es el número de Knudsen del pireno, que se obtiene:

$$Kn_{pireno} = 4.74 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{T}{p \cdot d_{pireno}} \quad (3.79)$$

donde  $p$  es la presión local. El diámetro del pireno ( $d_{pireno}$ ) mostrado en las anteriores ecuaciones se calcula:

$$d_{pireno} = \left( \frac{m_{pireno} \cdot 6}{\rho_{pireno} \cdot \pi} \right)^{1/3} \quad (3.80)$$

donde  $\rho_{pireno}$  es la densidad del pireno. El proceso de coalescencia se modela usando la expresión de Smoluchowski representada por la Ecuación 2.1. Así, se obtiene el núcleo de coalescencia  $\beta(x, y)$  de dos partículas  $x$  e  $y$  para hallar la densidad numérica  $n(x)$  de la partícula formada.

Por otro lado, los procesos de crecimiento superficial y oxidación explicados anteriormente se describen con ecuaciones de Arrhenius, tal y como desarrollan Appel et al. [34]. Estos autores consideran la adición de acetileno ( $C_2H_2$ ) y la oxidación con  $O_2$  y  $OH$ . La ley general de

Arrhenius para calcular la ratio por unidad de volumen en el proceso de crecimiento superficial ( $R_{surf}$ ) es:

$$R_{surf} = AT^n \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \prod_{j=1}^J \theta_j^{p_j} \prod_{i=1}^I c_i^{\nu_i} \quad (3.81)$$

donde  $A$  es un factor de la ley exponencial,  $n$  un exponente de la temperatura,  $E$  la energía de activación química,  $J$  el número de propiedades de las partículas de hollín,  $\theta$  la propiedad correspondiente de la partícula,  $I$  el número de especies reactivas,  $c$  la concentración molar y  $\nu$  un coeficiente estequiométrico. Appel et al. [34] detallan los valores de  $A$ ,  $n$ ,  $E$  y  $\theta$  para las tres especies químicas que se han comentado anteriormente. Así, se recogen en la siguiente tabla para poder aplicarse en la Ecuación 3.81:

Especie química	A	n	E	$\theta$	p
$C_2H_2$	$8 \cdot 10^7$	1.56	-3.8	As	1
OH	$1 \cdot 10^{10}$	0.734	-1.43	d	2
$O_2$	$2.2 \cdot 10^{12}$	0	-7.5	As	1

Tabla 3.3: Parámetros para la ley de Arrhenius [34]

donde  $As$  es el área de superficie activa y  $d$  el diámetro.

Finalmente, la adición del pireno a la partícula se describe como un proceso de condensación, del que se puede calcular la ratio por unidad de volumen como se hizo anteriormente:

$$R_{cond} = 2.2\eta c_{pireno} \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2m_{pireno}}} \left( d_{pireno}^2 + 2d_{pireno}d_{par} + d_{par}^2 \right) \quad (3.82)$$

donde  $\eta$  es la eficiencia de la colisión y  $d_{par}$  el diámetro de las partículas.

### 3.7.2. Distribución de densidad numérica

Se puede obtener la densidad numérica total con la ayuda del volumen y la densidad numérica de cada una de las zonas en las que se divide la cámara de combustión:

$$N_{d,TOT} = \frac{\sum_{j=1}^n (N_{d,j} \cdot V_j)}{\sum_{j=1}^n V_j} \quad (3.83)$$

Para ello, se ha considerado que la composición es constante para todos los cilindros que forman el motor.

### 3.7.3. Distribución de tamaños

La densidad numérica global se puede obtener como:

$$N_d = \frac{n_{par,estoc}}{n_{SWEEP} \cdot V_{muestra}} \quad (3.84)$$

donde  $n_{par,estoc}$  es el número de partículas estocásticas,  $n_{SWEEP}$  el número de veces que se va a ejecutar *SWEEP* definido de forma previa y  $V_{muestra}$  un volumen de muestra. A la Ecuación 3.84 se le pueden aplicar logaritmos para comparar los resultados con los correspondientes

medidos experimentalmente. Esto se lleva a cabo utilizando los diámetros de partículas superiores (*upper*,  $d_{par,u_i}$ ) e inferiores (*lower*,  $d_{par,l_i}$ ) de la siguiente manera:

$$\frac{dN_{d,i}}{d \log d_{par,i}} = \frac{N_{d,i}}{\log(d_{par,u_i}) - \log(d_{par,l_i})} \quad (3.85)$$

### 3.8. Modelo de inyección

Es el encargado de determinar los parámetros más importantes del proceso de inyección para suministrarlos a otros submodelos como el de la película de combustible en el inyector (explicado en la Sección 3.4) o el de mezcla. Está desarrollado, al igual que la mayoría de los submodelos explicados anteriormente, en *MATLAB*.

Consiste en, a partir de una serie de datos obtenidos de forma experimental, ser capaces de predecir la ley de inyección o tasa de inyección, es decir, la evolución de la masa por unidad de tiempo que entrega el inyector en cada instante de tiempo.

Además, al igual que otros submodelos, se implementará de tal manera que pueda actuar de forma predictiva, es decir, que no necesite datos experimentales para llevar a cabo su función de forma correcta.

## Capítulo 4

# Validación del modelo

La validación es el procedimiento mediante el que se verifica la exactitud del modelo desarrollado durante el proyecto, comparando los resultados calculados por él mismo con datos de referencia. Éstos pueden ser, por un lado, datos experimentales obtenidos en un banco de ensayos de un motor de gasolina GDI (como por ejemplo, datos medidos de distribución de tamaños de partículas), o en una maqueta simplificada (como por ejemplo, datos de la tasa de inyección proporcionada por el inyector). Por otro lado, también pueden ser datos procedentes de modelos de cálculo más complejos, tipo CFD, como por ejemplo, los datos de distribución del dosado de la mezcla en la cámara de combustión en cada instante de tiempo. Según el tipo de datos se puede proceder a efectuar una validación del modelo en su conjunto, o de algún submodelo que lo compone.

Como se ha comentado en el Capítulo 1, únicamente se obtendrán resultados para el submodelo de distribución de temperatura adiabática entre zonas, por lo que en este trabajo se explica la validación de dicho submodelo quedando pendiente para futuras líneas de investigación (Sección 6.2) la validación del resto de submodelos. Aun así, se propone un modelo de validación completo basado en el propuesto por Frommater en su tesis doctoral [1].

### 4.1. Modelo de validación completo

El modelo de validación completo propuesto por Frommater [1], que se plantea como línea de investigación futura, se caracteriza por el siguiente esquema:

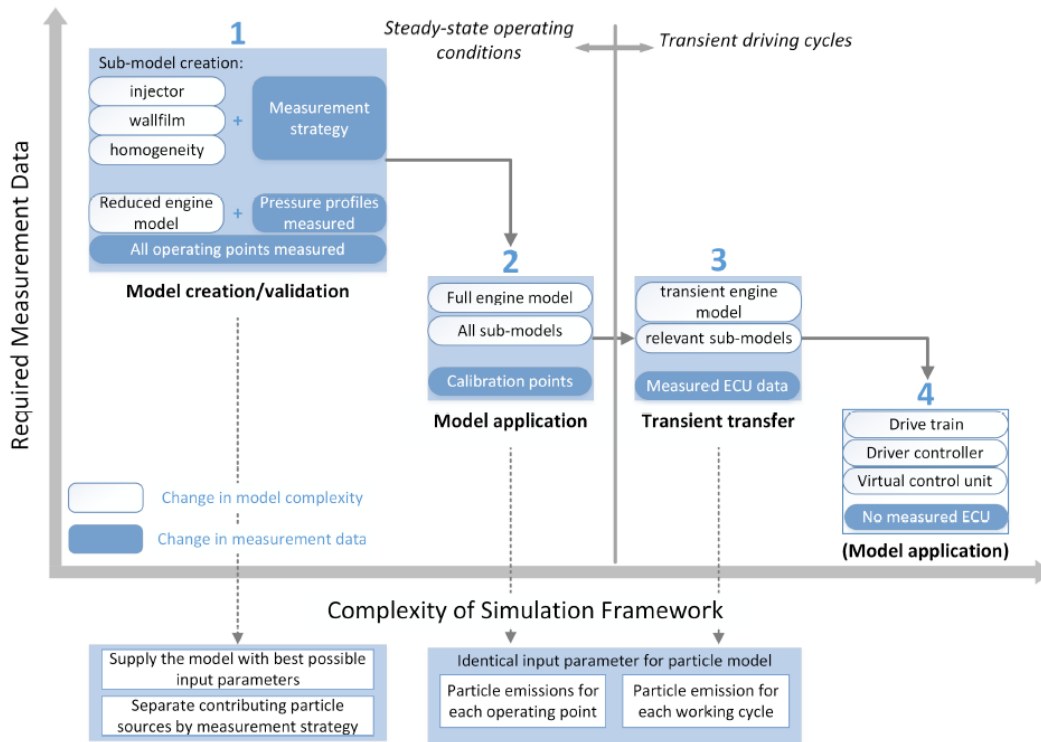


Figura 4.1: Esquema del proceso de validación [1]

Cabe destacar que en dicho modelo se va incrementando la complejidad de la simulación a la vez que se abastece de los datos de referencia. Así, se reduce la propagación del error y se asegura que los datos de entrada del modelo sean los mejores posibles. Además, con ese aumento de complejidad se reducen los datos de entrada requeridos y se analiza su influencia sobre los resultados obtenidos. El proceso de validación se puede dividir en cuatro fases principales:

1. Se aplica un modelo reducido de un motor y simulaciones 3D-CFD para estimar las propiedades termodinámicas de entrada de varios puntos de operación en régimen estacionario. Las medidas necesarias se llevarán a cabo en las fuentes de información mencionadas anteriormente. Así, se validarán los submodelos de forma independiente.
2. La complejidad del modelo se incrementa al aplicar un modelo del motor entero que incluye, a su vez, el fenómeno de la combustión y un modelo de turbulencia. Esto permite la simulación de los procesos del motor con solo unos datos más de la unidad de control de motor (ECU), lo que reduce la medida a unos pocos puntos de calibración. Al finalizar este paso, el marco de simulación se puede aplicar a las partículas emitidas en un estado estacionario.
3. Se transfiere el modelo de partículas a un ciclo de conducción, que representa la evolución de la velocidad del vehículo en función del tiempo, mediante una aproximación cuasi-estacionaria. Los efectos transitorios se combinan con los datos medidos en una ECU real, mientras que los ciclos de conducción se miden en el mismo banco de trabajo que se ha utilizado anteriormente. Este paso representa el modelo final de validación.
4. Se pueden realizar algunos ajustes para mejorar la calidad de los datos de entrada del modelo de simulación de partículas para el ciclo de conducción que se escoja. Así, el marco de simulación se puede acoplar a una ECU virtual y a un modelo completo de la transmisión mecánica, como proponen Dorsch et al. [40].

#### 4.1.1. Sistema de medida

Como se ha comentado previamente, los datos de referencia se obtienen de diversas fuentes como pueden ser un banco de ensayos, modelos CFD, etc. En su tesis doctoral, Frommater [1] utiliza las siguientes especificaciones en su banco de ensayos:

Característica	Motor A	Motor B	Motor C
Número de cilindros	4		
Carrera [mm]	94.6		89.6
Diámetro [mm]	82		89.6
Cilindrada [cm <sup>3</sup> ]	1998		2979
Relación de compresión	10.2:1		
Modo de combustión	Homogéneo		
Modo de inyección	"Spray-guided"		
Potencia máxima [kW]	170	185	225
Par máximo [Nm]	350	400	

Tabla 4.1: Especificaciones de los motores del banco de trabajo [1]

A su vez, este mismo autor, presenta la disposición del sistema de medición de las partículas emitidas respecto a la salida de dichas partículas de los motores descritos en la Tabla 4.1:

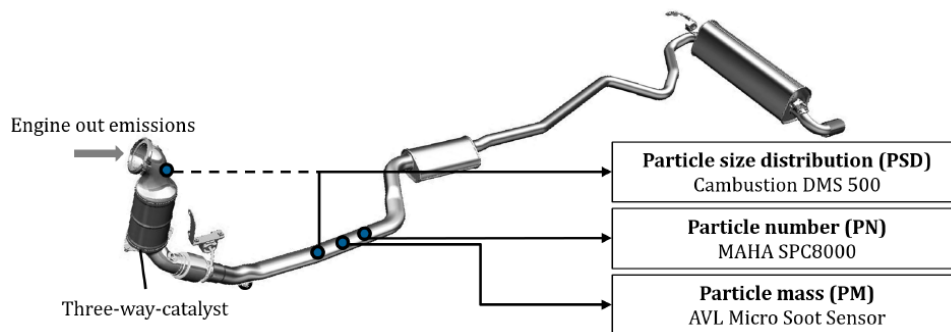


Figura 4.2: Dispositivo de medición de partículas de hollín [1]

Como se observa en la Figura 4.2, la medida de las emisiones contaminantes está formada por tres elementos distintos según la función que tengan:

- Número de partículas (PN): El dispositivo que lo lleva a cabo es un *MAHA SPC 8000* [41]. Consiste en un aparato de disolución y un contador de condensación de partículas (CPC), lo que permite que realice una medida continua de las partículas sólidas a la salida del motor. Además, cumple con los requisitos definidos en la normativa Euro 6d [36].
- Masa de partículas (PM): Esta función es llevada a cabo por un *AVL Micro Soot Sensor* [42]. La medición se basa en el efecto fotoacústico aplicado a las partículas de hollín, que se calientan periódicamente debido a un rayo de luz y luego disipan ese calor producido. Por este proceso, los resultados fluctúan pero son detectados por un micrófono, cuya señal es linealmente dependiente con la concentración de hollín en el volumen medido.
- Distribución de tamaño de partículas (PSD): Es realizada por un dispositivo *Cambustion DMS500* [43], que usa la señal de 22 electrómetros para obtener la distribución de tamaño según la movilidad eléctrica de las partículas. Además, dicha distribución se puede

utilizar para hallar tanto la masa como el número de partículas. Sin embargo, según Frommater [1], esos resultados no cumplirían la normativa vigente [36] y, por lo tanto, no serían válidos para el estudio que se lleva a cabo.

Como se ha comentado anteriormente, el procedimiento escogido para llevar a cabo las medidas de las emisiones contaminantes es el WLTP, que es el proceso europeo de homologación de vehículos. Entró en sustitución del NEDC (Nuevo Ciclo de Conducción Europeo) y consiste en realizar cuatro tipos de pruebas (baja, media, alta y muy alta) a diferentes velocidades. Cada una de dichas pruebas contiene, a su vez, etapas que pretenden simular situaciones reales: paradas, aceleración, frenada, etc. [44].

## 4.2. Ejemplo de aplicación

A modo de ejemplo y volviendo a la primera fase de implementación desarrollada en el trabajo, se procede a la validación del modelo de reparto de la temperatura entre las diferentes zonas en las que se dividió la cámara de combustión (Figura 3.2). Para ello, se resuelve un reactor para el cálculo de la temperatura adiabática con lo explicado en el modelo de cinética química de las especies precursoras del hollín (Sección 3.3).

Tras la división de la cámara de combustión por zonas, se tiene que distribuir la temperatura media entre todas ellas. Para ello se ha definido un factor de corrección (en la Sección 3.3.2.1), y es eso lo que se representa ahora para un caso de ejemplo. Dicho factor de corrección se obtiene con el modelo simplificado (Ecuación 3.11) y se compara, a falta de los datos de referencia correspondientes, con el factor de corrección extraído de la tesis doctoral de Frommater [1] en la siguiente figura:

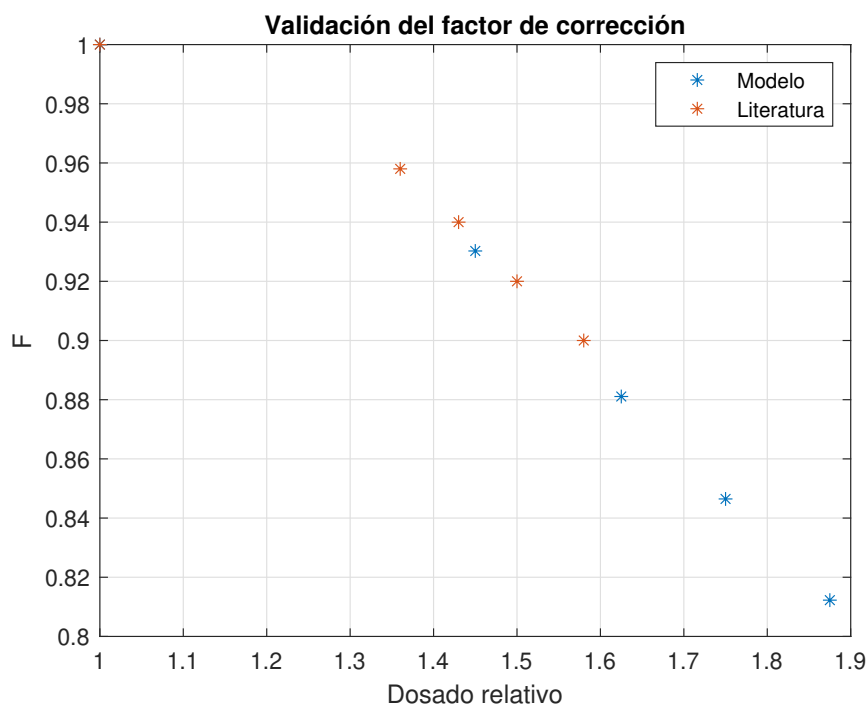


Figura 4.3: Validación del modelo de reparto de la temperatura [1]

Así, se observa que las tendencias entre las figuras anteriores son idénticas y los valores



numéricos son similares, cuyas diferencias se basan en los dosados relativos (EQR) escogidos para las distintas zonas en las que se divide la cámara de combustión. Por lo tanto, este submodelo se valida de forma correcta.

## Capítulo 5

# Resultados obtenidos

Al igual que el apartado anterior, este capítulo se focaliza en el submodelo de distribución de temperatura adiabática entre zonas, quedando pendiente para líneas futuras de investigación los resultados del resto de submodelos.

Así, se obtienen dichos resultados tanto en forma gráfica (figura) como en forma numérica (tablas). Además, se analizará cada uno de ellos en forma de un breve razonamiento para ver si concuerdan con lo estudiado en el apartado teórico correspondiente del proyecto.

Los códigos de programación utilizados para la obtención y representación de los siguientes resultados se muestran en los Anexos 9.2, 9.3 y 9.4.

### 5.1. Ley de Wiebe

A modo de ejemplo, se les asigna a los parámetros que caracterizan la ley de quemado de Wiebe unos valores orientativos para poder representarla gráficamente. Sin embargo, cabe destacar que cada punto de operación estará caracterizado por unos valores diferentes:

Parámetro	Valor
a	6.908
m	2.6
$\Delta\alpha_c$	30°
$\alpha_0$	-7°

Tabla 5.1: Parámetros orientativos de la Ley de Wiebe

Introduciendo los parámetros de la Tabla 5.1 en la Ecuación 3.9 se obtiene la siguiente ley de quemado:

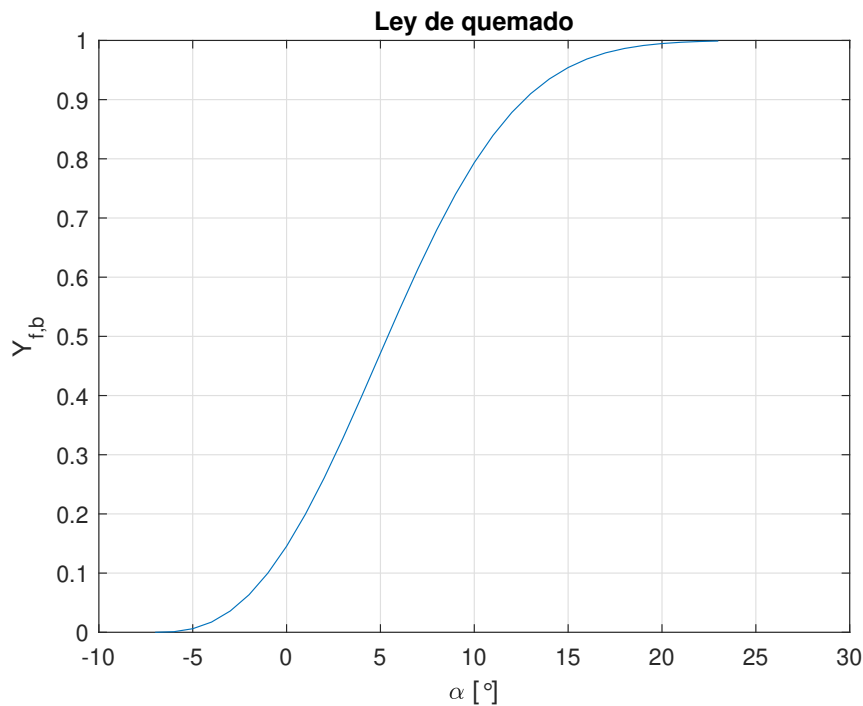


Figura 5.1: Ley de quemado de Wiebe

Se observa claramente la forma exponencial que se podía presuponer al estudiar dicha ley y se corresponde con lo analizado en la Figura 3.5. El quemado abarca desde  $\alpha_0$  hasta  $\alpha_0 + \Delta\alpha_c$ .

## 5.2. Fracciones másicas de combustible

Mediante la Ecuación 3.1, se obtiene la relación entre la masa de combustible y la total de cada zona ( $Y_{f,j}$ ). Teniendo en cuenta la distribución de zonas extraída de la Figura 3.2, se hallan los siguientes resultados:

Zona	EQR	$F_{O_2}$	$Y_{f,j}$
1	1	0.2858	0.0502
2	1.45	0.4144	0.0712
3	1.625	0.4644	0.0791
4	1.75	0.5001	0.0847
5	1.875	0.5359	0.0902

Tabla 5.2:  $Y_{f,j}$  obtenidos

La tendencia según se va pasando de zona es ascendente debido a que el dosado relativo (EQR) es mayor a medida que se avanza en las zonas en las que se ha dividido la cámara de combustión y, en consecuencia, el dosado de oxígeno ( $F_{O_2}$ ) también es mayor.

Una vez se ha obtenido  $Y_{f,j}$ , mediante la Ecuación 3.3 también se puede hallar la fracción másica de combustible en cada zona respecto al combustible total. Además, como se observa también en dicha ecuación, hay que tener en cuenta las fracciones másicas ( $Y_j$ ) obtenidas de la Figura 3.2:

Zona	$Y_j$	$p_j$
1	0.88	0.6717
2	0.055	0.0595
3	0.03	0.0361
4	0.02	0.0257
5	0.015	0.0206

Tabla 5.3:  $p_j$  obtenidos

Se observa una tendencia distinta a la descrita en la Tabla 5.2. Por un lado,  $p_j$  e  $Y_{f,j}$  son directamente proporcionales como se ha visto en la Ecuación 3.3, pero la primera de ellas también es directamente proporcional a la fracción másica  $Y_j$ , cuyos valores son semejantes en las zonas ricas en combustible pero muy dispares en comparación al obtenido en la zona pobre, de ahí las menores diferencias en las zonas 2, 3, 4 y 5 de la cámara de combustión. Cabe destacar que, como se vio en la explicación teórica, el dosado global  $F_{TOT}$  será constante independientemente de la zona.

### 5.3. Gastos

La ley de Wiebe calculada con los parámetros de la Tabla 5.1 se usa para hallar los gastos expresados en las Ecuaciones 3.5, 3.6 y 3.7, obteniendo los siguientes gastos de combustible y total sin quemar:

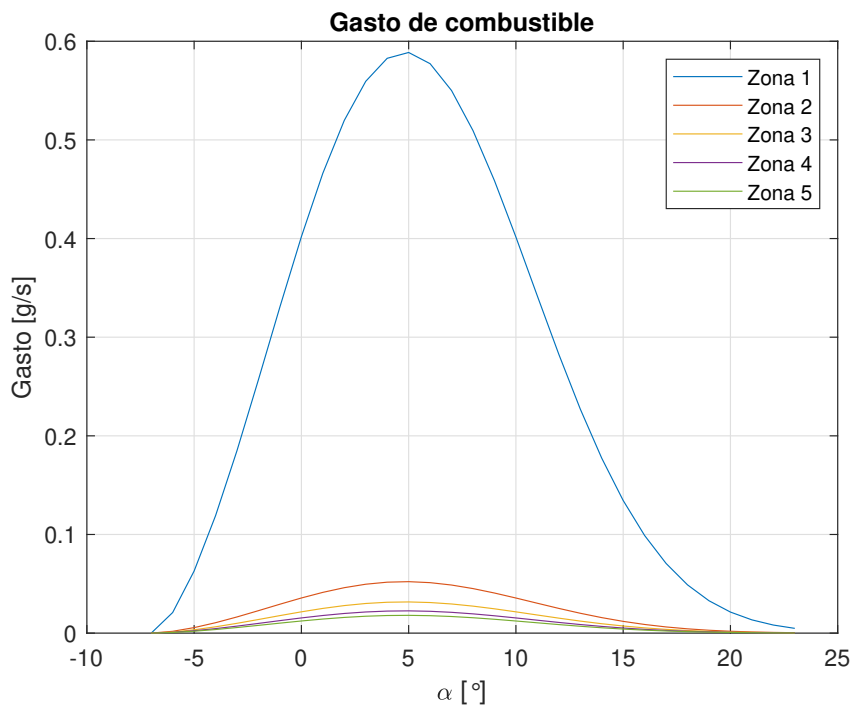


Figura 5.2: Gasto de combustible

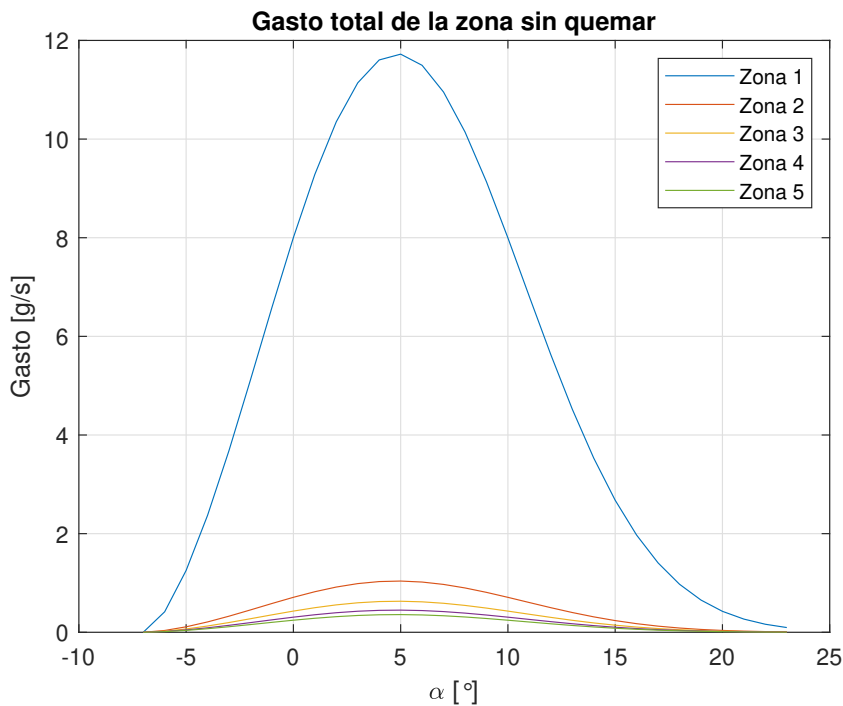
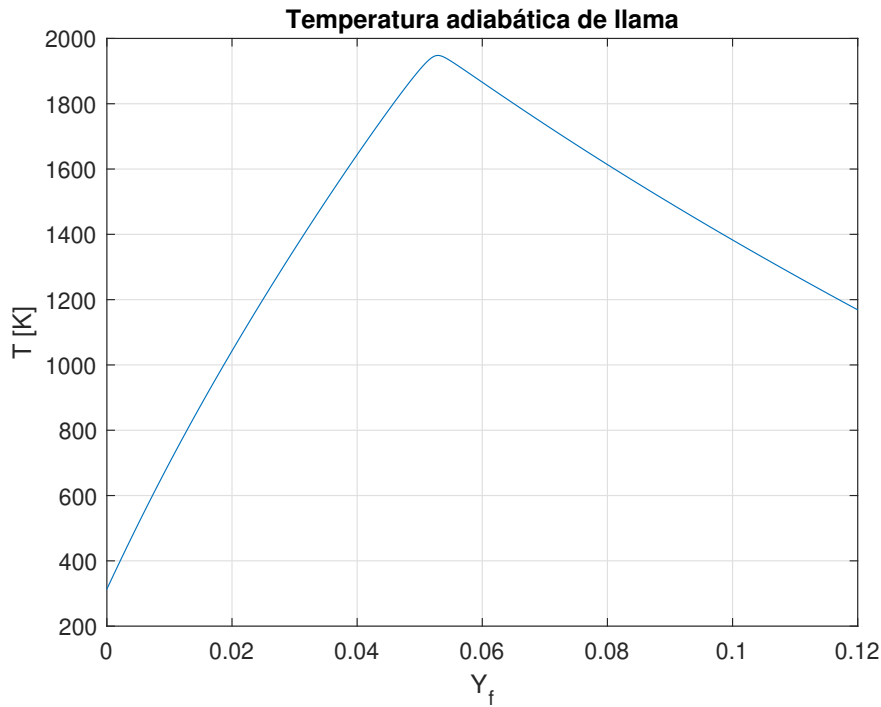


Figura 5.3: Gasto total de la zona sin quemar

En las Figuras 5.2 y 5.3 se observa cómo ambos gastos serán mayores en la primera zona de la cámara de combustión. Esto es debido a que el gasto de combustible es directamente proporcional a la fracción másica de combustible en cada zona respecto a la total de combustible ( $p_j$ ) como se ve en la Ecuación 3.5. A su vez, esta variable es directamente proporcional a la fracción másica de cada zona por la Ecuación 3.3 y dicha fracción másica será menor a medida que se va pasando de zona, cómo se observa claramente en la Figura 3.2. Cabe destacar que la forma de ambas gráficas es prácticamente idéntica en las cinco zonas de estudio y se debe a la dependencia directamente proporcional con la derivada temporal de la ley de Wiebe mostrada en la Figura 3.5. Además, para el cálculo de estos gastos se ha supuesto una masa de combustible total ( $m_{f,TOT}$ ) de 1 mg.

#### 5.4. Temperatura adiabática de llama

En primer lugar, se muestra el perfil de temperatura adiabática de llama obtenido mediante *Cantera* con los mecanismos de reacción desarrollados por Blanquart et al. [22]:


 Figura 5.4: Perfil de temperatura obtenido por *Cantera*

Cabe destacar que se delimita la fracción másica  $Y_f$  a los valores correspondientes de las zonas determinadas en la Figura 3.2, obtenidos en la Tabla 5.2. Además, la combustión se ha llevado a cabo teniendo en cuenta gases residuales (EGR), cuya comparación con la equivalente contando con aire puro se detalla en el Anexo 9.1.

La temperatura adiabática de llama obtenida mediante la simplificación llevada a cabo en la Sección 3.3.2.1 se ajustará con la equivalente calculada con *Cantera* de la Figura 5.4. Así, se escogerán los tres puntos característicos de dicha figura: al comienzo de la reacción (es decir, la temperatura de la mezcla  $T_{mix}$ ), el máximo de temperatura ( $T_{ad,max}$ ) y para el último valor obtenido ( $T_{end}$ ). Realizando el ajuste, la distribución de temperaturas presenta la siguiente ecuación en función de la fracción másica de combustible  $Y_f$ :

$$T_{ad} = \begin{cases} \text{si } 0 \leq Y_f \leq Y_{f,T_{ad,max}} & \frac{T_{ad,max} - T_{mix}}{Y_{f,T_{ad,max}}} \cdot Y_f + T_{mix} \\ \text{si } Y_f > Y_{f,T_{ad,max}} & \frac{T_{ad,max} - T_{end}}{Y_{f,T_{ad,max}} - Y_{f,max}} \cdot (Y_f - Y_{f,T_{ad,max}}) + T_{end} \end{cases} \quad (5.1)$$

donde  $Y_{f,T_{ad,max}}$  es la fracción másica correspondiente a  $T_{ad,max}$  e  $Y_{f,max}$  es la fracción másica máxima alcanzada en la Figura 5.4.

Para el cálculo de la temperatura a la que tiene lugar la mezcla entre combustible y aire ( $T_{mix}$ ), se lleva a cabo la siguiente ponderación:

$$T_{mix} = \frac{m_{aire} \cdot c_{aire} \cdot T_{aire} + m_f \cdot c_f \cdot T_f}{m_{aire} \cdot c_{aire} + m_f \cdot c_f} \quad (5.2)$$

donde  $c_{aire}$  y  $c_f$  son los calores específicos y  $m_{aire}$  y  $m_f$  las masas del aire y el combustible, respectivamente. En la siguiente tabla, se detallan los valores de estas magnitudes, junto con los dados a la temperatura para la obtención de los resultados de este capítulo:

Magnitud	Combustible	Aire
Masa [g]	0.001	0.014
Calor específico [J/gK]	2.22	1.012
Temperatura [K]	400	300

Tabla 5.4: Calores específicos, masas y temperaturas de combustible y aire

Cabe destacar que las masas se han calculado con la suposición inicial de  $m_f = 1 \text{ mg}$  y el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{m_f}{m_{TOT}} = F_{TOT} \quad (5.3)$$

$$m_f + m_{aire} = m_{TOT} \quad (5.4)$$

Entonces, el perfil de temperatura simplificado se representa:

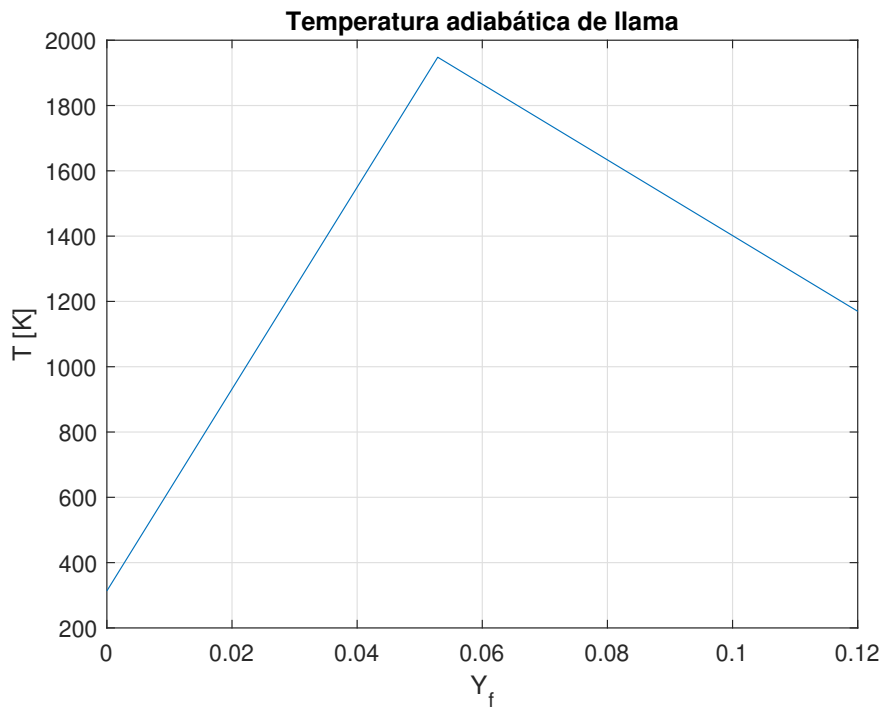


Figura 5.5: Perfil de temperatura obtenido por simplificación

Como se ha comentado anteriormente, el ajuste de la gráfica se ha llevado a cabo gracias a la Ecuación 5.1. En el Anexo 9.1 se muestra una comparación más detallada con el perfil obtenido por *Cantera*.

Para un mejor análisis, se estudia en profundidad la parte de la Figura 5.5 referente a las zonas en las que se ha dividido la cámara de combustión. Además, se extrapola la evolución del perfil obtenido en dicha figura en función del dosado relativo (EQR) en lugar de la fracción másica ( $Y_f$ ) para una mejor identificación de la zona correspondiente:

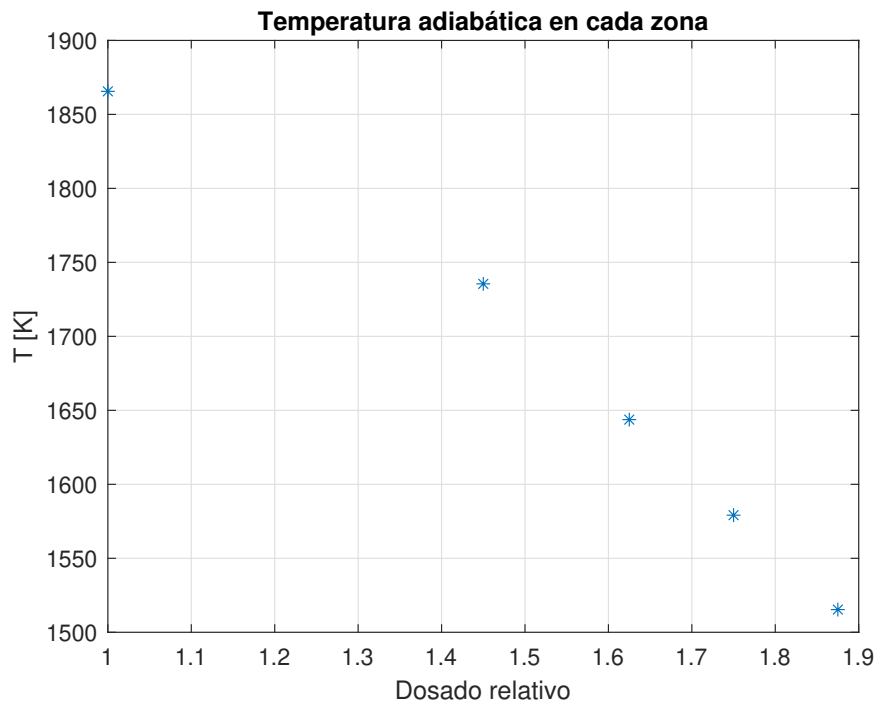


Figura 5.6: Temperatura en cada una de las zonas de la cámara de combustión obtenida con modelo simplificado

Excepto el primer valor, todos se sitúan en la zona rica en combustible de la cámara. Al estar más próximos los dosados relativos escogidos en dicha región rica según la Figura 3.2, las zonas 2, 3, 4 y 5 presenta diferencias menos notables entre sí. También, se aprecia una clara tendencia decreciente a partir del dosado relativo unidad debido a que en la Figura 5.5 la máxima temperatura se sitúa en ese valor.

## 5.5. Factor de corrección

El factor de corrección obtenido en la Ecuación 3.11 se representa de la siguiente manera tanto en forma de tabla, con sus valores numéricos, como gráficamente para observar mejor la tendencia de esta variable:

Zona	$F_j$
1	1
2	0.9303
3	0.8811
4	0.8465
5	0.8123

Tabla 5.5: Factores de corrección



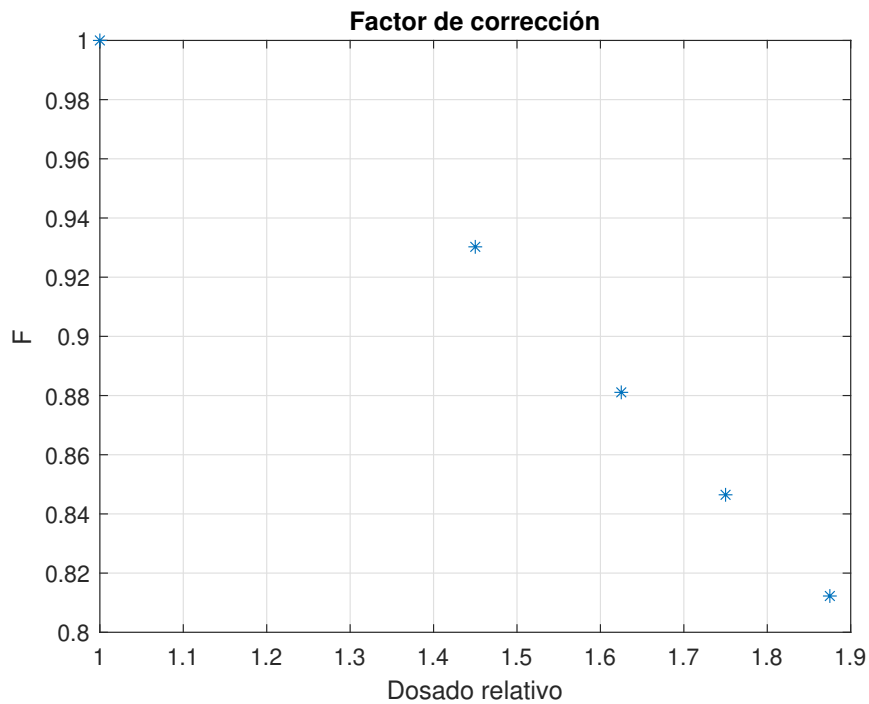


Figura 5.7: Evolución del factor de corrección en función del dosado relativo

Esta gráfica tiene una gran correspondencia con la Figura 5.5, ya que por la Ecuación 3.11 ambas magnitudes son directamente proporcionales. Además, la Figura 5.7 presenta una tendencia decreciente por las mismas razones que se han expuesto en el razonamiento de la Figura 5.6. También, como ya se mencionó en la Sección 4.1, esta gráfica se puede validar a partir de la Figura 4.3, obtenida de la tesis doctoral de Frommater [1].

## Capítulo 6

# Conclusiones y estudios futuros

En este capítulo se engloban tanto las principales conclusiones del trabajo como los estudios futuros que se pueden realizar tomando como punto de partida este proyecto.

### 6.1. Conclusiones

Las principales conclusiones que se extraen de este estudio son las siguientes:

- A modo de introducción se resalta la problemática actual del cambio climático, destacando la normativa vigente y el incremento en la complejidad e inflexibilidad de las leyes medioambientales a medida que pasa el tiempo. Por ello, los ensayos experimentales se van distanciando de los procesos estándar y es necesaria la creación de un modelo de simulación como el que se lleva a cabo en este proyecto.
- Se realiza una breve descripción de los motores de combustión interna alternativos (MCIA) con mayor profundidad en los de gasolina de inyección directa (GDI), que son el objeto de estudio. Así, se concluye que, en la actualidad, son la elección más viable a la hora de diseñar un motor de automoción a pesar de las múltiples alternativas existentes (motores eléctricos, de hidrógeno, etc.).
- El proceso de formación de las partículas de hollín se puede dividir en seis fases: pirólisis, nucleación, coalescencia, aglomeración, crecimiento superficial y oxidación. Cada una de ellas se explica con gran nivel de detalle revisando la literatura referente a este tema. Además, se estudian las conexiones entre los procesos químicos que se acaban de enumerar y cómo van a ir afectando al desarrollo final del hollín.
- Las principales fuentes de formación de partículas de hollín en los motores GDI son las películas líquidas de combustible en el inyector o en las propias paredes del cilindro y la mezcla no homogénea en las zonas ricas en combustible en la cámara de combustión. Recurriendo a los múltiples ensayos experimentales y simulaciones CFD que se llevan a cabo en la literatura, se exponen los principales factores que tienen influencia en cada una de dichas fuentes, llegando a la conclusión que son de mayor tamaño las partículas formadas por la mezcla no homogénea, lo que hace más peligrosas para la salud humana las partículas formadas por las películas de combustible. Además, los dos procesos se relacionan al crearse las zonas ricas en combustible sobre dicha película. Por último, hay otros mecanismos de formación de hollín que se describen brevemente, pero se llega a la conclusión que no son relevantes a la hora de realizar este estudio.

- Se pueden emplear múltiples técnicas de simulación para modelar los procesos de formación de hollín, en los que a mayor exactitud más se incrementará el coste computacional. En este trabajo se opta por el método de los momentos, al representar una solución de compromiso entre el nivel de detalle y el tiempo de cálculo. Este método es capaz de obtener buenos resultados con pocas ecuaciones, aunque éstas necesitan aproximaciones para poder cerrarlas, lo que abre otro abanico de opciones según el tipo de dicho cierre: MOMIC, QMOM, DQMOM. También se podría utilizar el método de Montecarlo, pero resulta demasiado complejo y su aplicación está muy limitada.
- El software principal escogido a la hora de desarrollar los códigos de programación es *MATLAB*, dado su amplio uso en el ámbito de ingeniería, sus múltiples y variadas herramientas y la posibilidad de integrar de forma adecuada los otros softwares que se van a emplear en el trabajo. El modelo en sí se divide en múltiples submodelos, estructurándolo a una programación orientada a objetos que permita activar o desactivar dichos submodelos en función de si son o no necesarios para el cálculo que se esté llevando a cabo y, así, ahorrar en coste computacional. Es de vital importancia tener claras las diferentes conectividades entre submodelos, ya que unos dependerán de los datos obtenidos en otros, aunque en la última aproximación del modelo trabajarán de forma predictiva.
- Las reacciones químicas de las especies precursoras del hollín se representan con un modelo en *Cantera*, que se puede incorporar como herramienta en *MATLAB*, distinguiendo entre zonas pobres y ricas en combustible, siendo de interés estas últimas. Con dichas reacciones durante el proceso de combustión se obtiene el perfil de temperatura adiabática de llama, que se puede simplificar de tal forma que la geometría sea un "triángulo" cometiendo un error despreciable en la zona rica en combustible. Por lo que, en este estudio, se adopta el modelo simplificado por el ahorro en coste computacional que implica, aunque hay que destacar que es necesario el uso de *Cantera* para su correcto ajuste.
- El modelo de la película de combustible en el inyector representa las emisiones producidas por los depósitos de combustibles remanentes en la zona final del orificio de dicho inyector o en la parte justamente anterior de una manera sencilla, ya que solo requiere de unas operaciones algebraicas sencillas en *MATLAB*. Sin embargo, este modelo es limitado, ya que las constantes que se aplican sólo tienen validez para una geometría dada.
- Con el desarrollo del modelo de evaporación se destaca la importancia de la homogeneidad en la mezcla aire-combustible y los parámetros que influyen en ella. Así, se concluye que es necesario un tiempo de mezcla elevado y grandes presiones de inyección para que la interacción entre el chorro (combustible) y el gas (aire) sea fuerte, se incremente dicha mezcla y la carga sea lo más homogénea posible, lo que evitaría la emisión de partículas contaminantes. Al igual que el modelo anterior, se lleva a cabo en *MATLAB* y no requiere de gran coste computacional al estar formado por operaciones algebraicas sencillas.
- El modelo del chorro será más complejo que los anteriores, pero se podrá abordar debido a las hipótesis simplificadoras llevadas a cabo. A pesar de dichas hipótesis, los resultados son lo suficientemente exactos y permite obtener la distribución de dosados y la interacción del propio chorro con la pared. Respecto a esto último, la principal conclusión que se extrae es la gran dependencia del régimen del chorro en el momento

del impacto con la pared del cilindro con el número de Weber, ya que esto definirá los pasos a seguir en el algoritmo de cálculo en *MATLAB*.

- Será necesario realizar un proceso iterativo en *SWEEP* para el modelo de partículas de hollín con el objetivo de calcular el momento inicial máximo. Sin embargo, este proceso no requerirá mucho coste computacional y permitirá obtener la distribución del número, masa y tamaño de las partículas emitidas mediante la modelización de los procesos de nucleación, coalescencia, crecimiento superficial y oxidación.
- Como ya se ha comentado, únicamente se puede validar de forma correcta el modelo de reparto de la temperatura entre las diferentes zonas en las que se dividió la cámara de combustión con los resultados extraídos de la literatura. Aun así y como se va a detallar posteriormente, se propone un modelo de validación completo que se puede llevar a cabo como línea de investigación futura, junto con unas especificaciones orientativas del banco de ensayos y su sistema de medida correspondiente.
- Los resultados obtenidos para el submodelo de reparto de temperatura adiabática entre zonas concuerdan con lo explicado en el apartado teórico correspondiente. Se puede destacar las grandes diferencias en cuanto a los gastos tanto de combustible como de comburente respecto a la zona pobre (1) y la zona rica (2, 3, 4 y 5). Esto se debe a la dependencia directamente proporcional con la fracción másica ( $Y$ ), mucho más elevada en la primera zona como ya se ha comentado. Además, se reafirma la exactitud del modelo simplificado de la temperatura adiabática de llama y su relación con el factor de corrección, que disminuye con dicha temperatura debido a su decrecimiento a partir del máximo que, como se podía presuponer, estará en el entorno del dosado relativo unidad. De los resultados anteriores, se ha podido validar acudiendo a la literatura la evolución del factor de corrección en función del dosado relativo, la validación del resto de resultados se propone como línea de investigación futura.

## 6.2. Estudios futuros

En este trabajo se presenta, sobre todo, la metodología para desarrollar un modelo de emisión de partículas de hollín en motores de gasolina de inyección directa (GDI). En cuanto a los resultados, se han obtenido los correspondientes al submodelo de reparto de la temperatura adiabática entre zonas, por lo que se podrían implementar dichos resultados en el modelo que toque según las interconexiones explicadas y obtener el resto de resultados de todos los modelos.

Además, a la hora de realizar la programación en *MATLAB*, los códigos disponibles (Anexos 9.2, 9.3 y 9.4) se podrían optimizar de forma que se trabaje con una programación orientada a una estructura a objetos (OOP) para una mayor comodidad de trabajo y un menor coste computacional al tener disponible la activación o desactivación de los distintos modelos según se requiera en el cálculo que se esté llevando a cabo.

Como se ha comentado anteriormente, en el Capítulo 4 se realiza la validación del submodelo de distribución de temperatura adiabática entre zonas, comparando los resultados obtenidos en el Capítulo 5 con los expuestos por Frommater en su tesis doctoral [1]. Como línea de investigación a realizar en el futuro, se propone un esquema de validación completo realizado por este mismo autor [1].

Para llevar a cabo dicho modelo completo de validación, será necesario, entre otras cosas, la creación de un banco de ensayos con diversos tipos de motores para la recogida de los datos de referencia correspondientes. Dichos motores deberán constar de unas especificaciones similares a las que detalla Frommater [1] en la Tabla 4.1.

## Capítulo 7

# Bibliografía

- [1] S. Frommater, PhD thesis, *Phenomenological modelling of particulate emissions in direct injection spark ignition engines for driving cycle simulations*, Technische Universität Darmstadt, 2018
- [2] Michigan Technological University, URL <https://cutt.ly/81D8Biv>
- [3] Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico, Calidad y evaluación ambiental URL <https://cutt.ly/q1FqWfI>
- [4] J. Lahaye, PhD thesis, *Mechanisms of soot formation*, Polymer Degradation and Stability, 1990
- [5] D. R. Tree & K. I. Svensson, *Soot processes in compression ignition engines*, Progress in Energy and Combustion Science, 2007
- [6] Pejpichestakul, Warumporn & Ranzi, Eliseo & Pelucchi, Matteo & Frassoldati, Alessio & Cuoci, Alberto & Parente, Alessandro & Faravelli, Tiziano, *Examination of a soot model in premixed laminar flames at fuel-rich conditions*, Proceedings of the Combustion Institute, 2018
- [7] G. Blanquart, PhD thesis, *Chemical and statistical soot modeling*, Stanford University, 2008
- [8] E. Stevens & R. Steeper, *Piston Wetting in an Optical DISI Engine: Fuel Films, Pool Fires, and Soot Generation*, SAE Technical Paper, Sandia National Laboratories, 2001
- [9] J. E. Ketterer & W. K. Cheng, *On the Nature of Particulate Emissions from DISI Engines at Cold-Fast-Idle*, Massachusetts Institute of Technology, SAE International, 2014
- [10] D. Sabathil, A. Koegnigstein, P. Schaffner, J. Fritzsche & A. Doehler, *The influence of DISI engine operating parameters on particle number emissions*, SAE Technical Paper, General Motors Company, 2011
- [11] A. Maier, U. Klaus, A. Dreizler & H. Rottengruber, *Fuel-Independent Particulate Emissions in an SIDI Engine*, SAE Int. J. Engines, 2015
- [12] M. Hageman & D. Rothamer, *Sensitivity Analysis of Particle Formation in a Spark-Ignition Engine during Premixed Operation*, University of Utah, 8<sup>th</sup> U. S. National Combustion Meeting, 2013
- [13] F. Payri & J. M. Desantes, *Motores de combustión interna alternativos*, Universitat Politècnica de València, 2011
- [14] Gamma Technologies Inc., URL <https://cutt.ly/MzPcxf3>

- [15] The MathWorks Inc., URL <https://cutt.ly/8zPm2in>
- [16] T. Blacha, M. Di Domenico, P. Gerlinger & M. Aigner, *Soot predictions in premixed and nonpremixed laminar flames using a sectional approach for PAHs and soot*, German Aerospace Center, Combustion and Flame, 2011
- [17] Sweep2: Cambridge Soot Simulator, *Computational Modelling Group*, University of Cambridge, URL <https://como.ceb.cam.ac.uk/>
- [18] Cantera, URL <https://cantera.org/>
- [19] J. V. Pastor, J. J. López, J. M. García & J. M. Pastor, *A 1D model for the description of mixing-controlled inert diesel sprays*, Fuel, CMT, Universitat Politècnica de València, 2008
- [20] D. Linse, PhD thesis, *Modeling and Simulation of Knock and Emissions in Turbocharged Direct Injection Spark Ignition Engines*, TU Bergakademie Freiberg, 2013
- [21] GreenChem Solutions S.L., URL <https://cutt.ly/Avr6mFA>
- [22] G. Blanquart, P. Pepiot-Desjardins & H. Pitsch, *Chemical mechanism for high temperature combustion of engine relevant fuels with emphasis on soot precursors*, Stanford University, Combustion and Flame, 2009
- [23] N. Karwa, P. Stephan, W. Wiese & D. Lejsex, *Gasoline direct injection engine injector tip drying*, 19<sup>th</sup> Australasian Fluid Mechanics Conference, 2014
- [24] B. Wang, S. Mosbach, S. Schmutzhard, S. Shuai, Y. Huang & M. Kraft, *Modelling soot formation from wall films in a gasoline direct injection engine using a detailed population balance model*, Applied Energy, 2016
- [25] C. Bai & A. Gosban, *Development of methodology for spray impingement simulation*, Imperial College of Science, 1995
- [26] Z. Han, Z. Xu & N. Trigui, *Spray/wall interaction models for multidimensional engine simulation*, International Journal of Engine Research, 2000
- [27] J. Gong & C. Rutland, *A Quasi-Dimensional NOx Emission Model for SparkIgnition Direct Injection (SIDI) Gasoline Engine*, University of Wisconsin-Madison, SAE International, 2013
- [28] J. R. Brock & R. B. Bird, *Surface tension and the principle of corresponding states*, AIChE Journal, 1955
- [29] S. Fallah, *Electric and Hybrid Vehicles - Technologies, Modeling and Control: A Mechatronic Approach*, 2014
- [30] NASA Glean Research Center, URL <https://cutt.ly/gbAaP7K>
- [31] M. E. Mueller, G. Blanquart & H. Pitsch, *Hybrid Method of Moments for modeling soot formation and growth*, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Combustion and Flame, 2009
- [32] M.R.O. Panão & A.L.N. Moreira, *Experimental study of the flow regimes resulting from the impact of an intermittent gasoline spray*, Experiments in fluids, vol. 37, pp. 834-855, 2004
- [33] M. Celnik, R. Patterson, M. Kraft & W. Wagner, *Coupling a stochastic soot population balance to gas-phase chemistry using operator splitting*, Combustion and Flame, 2006

- [34] J. Appel, H. Bockhorn & M. Frenklach, *Kinetic Modeling of Soot Formation with Detailed Chemistry and Physics: Laminar Premixed Flames of C2 Hydrocarbons*, Combustion and Flame, 2000
- [35] Ministerio de Educación y Formación Profesional, El sistema universitario español URL <https://cutt.ly/bb8FdjPL>
- [36] EUR-Lex, El acceso al Derecho de la Unión Europea URL <https://cutt.ly/UbBPwzT>
- [37] The MathWorks Inc., Object-oriented Programming URL <https://cutt.ly/Wb8JF5n>
- [38] T. C. Bond, *Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment*, Journal of Geophysical Research, 2013
- [39] Hollín - Instituto Nacional del Cáncer, URL <https://cutt.ly/JnqUiS2>
- [40] M. Dorsch, J. Neumann & C. Hasse, *Detailed Modeling of SI-Engines in Driving Cycle Simulation for Fuel Consumption Analysis*, FISITA World Automotive Congress, Maastricht, 2014
- [41] MAHA-AIP Umwelt-Management & PrimeOne Contracting, URL <https://cutt.ly/WnfBaFO>
- [42] AVL List GmbH, URL <https://cutt.ly/OnfN2cU>
- [43] Cambustion Limited, URL <https://cutt.ly/WnfMZ3N>
- [44] J. Demuynck, D. Bosteels, M. D. Paepe, C. Favre, J. May & S. Verhelst, *Recommendations for the new WLTP cycle based on an analysis of vehicle emission measurements on NEDC and CADC*, Energy Policy, 2012
- [45] Y. Yan, H. Liu, M. Jia, M. Xie & H. Yin, *A one-dimensional unsteady wall film evaporation model*, International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015
- [46] M. Nagaoka, H. Kawazoe & N. Nomura, *Modeling Fuel Spray Impingement on a Hot Wall for Gasoline Engines*, International Congress & Exposition, SAE Technical Paper Series, 1994
- [47] C. Habchi, *A comprehensive model for liquid film boiling in internal combustion engines*, Oil & Gas Science and Technology–Revue de l’Institut Français du Pétrole, 2010



# Capítulo 8

## Presupuesto

En el siguiente capítulo se calcula el presupuesto para la realización del trabajo llevado a cabo. Para ello, en primer lugar, se va a realizar un diagrama de Gantt con las principales fases del proyecto:

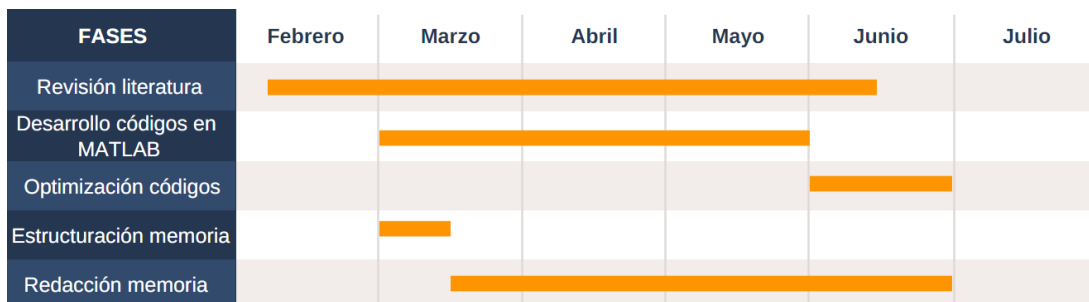


Figura 8.1: Diagrama de Gantt

En base a las actividades planeadas en la figura anterior, se divide el presupuesto entre el correspondiente a la mano de obra, el computacional y el de fungibles.

### 8.1. Coste del personal

Para el autor, el proyecto se compone de las horas dedicadas a las prácticas en empresa y al trabajo de fin de máster. Las primeras, a su vez, se dividen en curriculares y extracurriculares. Las curriculares al estar formadas por 13.5 ECTS tienen una duración total de 337.5 horas al estimarse en el Plan Bolonia una dedicación de 25 horas por cada ECTS [35]. Las extracurriculares, por su parte, constan de una duración de 75 horas. El trabajo fin de máster, al poseer los mismos ECTS que las prácticas en empresa curriculares, está previsto en una duración de 337.5 horas. Por lo tanto, la duración total del proyecto llevado a cabo es de 750 horas desglosado, principalmente, en las actividades enumeradas en el diagrama de Gantt de la Figura 8.1.

Cabe destacar que al autor del trabajo se le considera como ingeniero en prácticas (Graduado en Ingeniería Técnica Aeroespacial) y se le supondrá un sueldo de 15 €/h. Además de la mano de obra del autor, se tiene en cuenta el tiempo dedicado por el tutor del trabajo, al que se le supondrá un sueldo de profesor titular de universidad de 40 €/h y una dedicación de 40 horas. Así, se calculan los costes del personal:

Personal	Tiempo [h]	Sueldo [€/h]	Valor [€]
Autor	750	15	11250
Tutor	40	40	1600
Total	790	-	12850

Tabla 8.1: Costes del personal

Por lo tanto, el coste total del personal es de **DOCE MIL OCHOCIENTOS CINCUENTA EUROS (12850 €)**

## 8.2. Coste computacional

La principal herramienta que se ha empleado para el desarrollo del trabajo ha sido el ordenador portátil personal del autor, de modelo HP Pavilion 16-a0042ns adquirido por 800 € hace 3 meses. El coste de amortización ( $C_A$ ) se calcula de la siguiente manera:

$$C_A = 0.85 \cdot \frac{P}{\text{Años de uso}} \quad (8.1)$$

donde  $P$  es el precio por el que se ha comprado el ordenador en este caso. Cabe destacar que la anterior expresión se ha desarrollado teniendo en cuenta una depreciación del 15 % por año.

Por otra parte, se ha de tener en cuenta las licencias de los distintos programas empleados. El programa utilizado para la redacción del proyecto ha sido *LaTeX*, cuyo coste es nulo al ser software libre. Como se ha explicado a lo largo del estudio, el software de programación principal es *MATLAB*, pero también se han de recoger los precios de licencias de los demás programas desarrollados en la Sección 3.1:

Concepto	Valor [€]
Amortización portátil	680
<i>LaTeX</i>	0
<i>MATLAB</i>	500
<i>Cantera</i>	0
<i>GT-Suite</i>	164.25
<i>SWEEP</i>	0
Total	1344.25

Tabla 8.2: Coste computacional

Así, el coste total computacional es de **MIL TRESCIENTOS CUARENTA Y CUATRO EUROS CON VEINTICINCO CÉNTIMOS (1344.25 €)**

## 8.3. Coste fungible

Los bienes fungibles se definen como objetos de carácter mueble y reemplazable, que se agotan con su uso y, por lo tanto, no puede hacerse un uso correcto de ellos sin consumirlos. En el caso del proyecto, se refiere al material de oficina utilizado, que va a constar de una impresora Brother DCP-7055W (adquirida hace 7 años por un valor de 150 €) con su correspondiente tóner de tinta, una calculadora programable HP 50g (adquirida hace 6 años por un valor de 90

€) y un paquete de 500 folios formato A4 de 80 g. En la siguiente tabla se detalla el coste de amortización de los dos primeros (calculados con la Ecuación 8.1) y el valor del último, para obtener la suma total:

Concepto	Valor [€]
Amortización impresora	18.21
Tóner de tinta	20
Amortización calculadora	12.75
Paquete de folios	3
Total	53.96

Tabla 8.3: Coste fungible

El coste fungible total es de **CINCUENTA Y TRES EUROS CON NOVENTA Y SEIS CÉNTIMOS (53.96 €)**

#### 8.4. Coste total

Por último, se obtiene el coste total como la suma de los costes desglosados de personal, computacional y fungible de las Tablas 8.1, 8.2 y 8.3, añadiendo, además, un beneficio industrial del 6 % y un IVA del 21 %:

Tipo de coste	Valor [€]
Coste de personal	12850
Coste computacional	1334.25
Coste fungible	53.96
Beneficio industrial	854.29
IVA	3169.43
Coste total	18261.93

Tabla 8.4: Coste total del proyecto

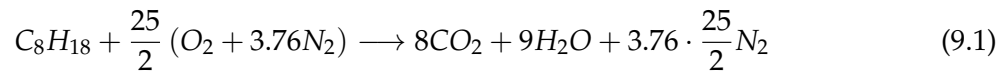
El coste total del proyecto es de **DIECIOCHO MIL DOSCIENTOS SESENTA Y UN EUROS CON NOVENTA Y TRES CÉNTIMOS (18261.93 €)**

# Capítulo 9

## Anexos

### 9.1. Validación del modelo simplificado de temperatura adiabática de llama

En primer lugar, se desarrolla el modelo detallado (*Cantera*) que se utilizará como referencia. Previo a la implementación del código, se tendrá que ajustar estequiométricamente la combustión del isooctano, de tal forma que se tiene la siguiente reacción:



Cabe destacar que la reacción mostrada en la Ecuación 9.1 se ha ajustado teniendo en cuenta que es una combustión con aire puro. Por otro lado, se considera que, además de  $O_2$  y  $N_2$ , dicho aire contiene gases de escape (EGR) compuestos principalmente por  $CO_2$  y  $H_2O$ . Para obtener el perfil de temperatura en *Cantera* teniendo en cuenta dicha variación en la composición, habrá que calcular una constante  $K$  con la ayuda de la fracción de  $O_2$  en el comburente considerado ( $Y_{O_2,comb}$ ) y los coeficientes estequiométricos de la Ecuación 9.1:

$$Y_{O_2,comb} = \frac{\frac{25}{2} \cdot M_{O_2}}{\frac{25}{2} \cdot M_{O_2} + \frac{25}{2} \cdot 3.76 \cdot M_{N_2} + 8K \cdot M_{CO_2} + 9K \cdot M_{H_2O}} \quad (9.2)$$

De esta última expresión se obtendrá  $K$  y se implementará en el código *MATLAB*, hallando esta comparativa entre una combustión con aire puro y otra teniendo en cuenta gases residuales con  $Y_{O_2,comb} = 0.185$ , inferior a la del aire puro extraído de la Tabla 3.1:

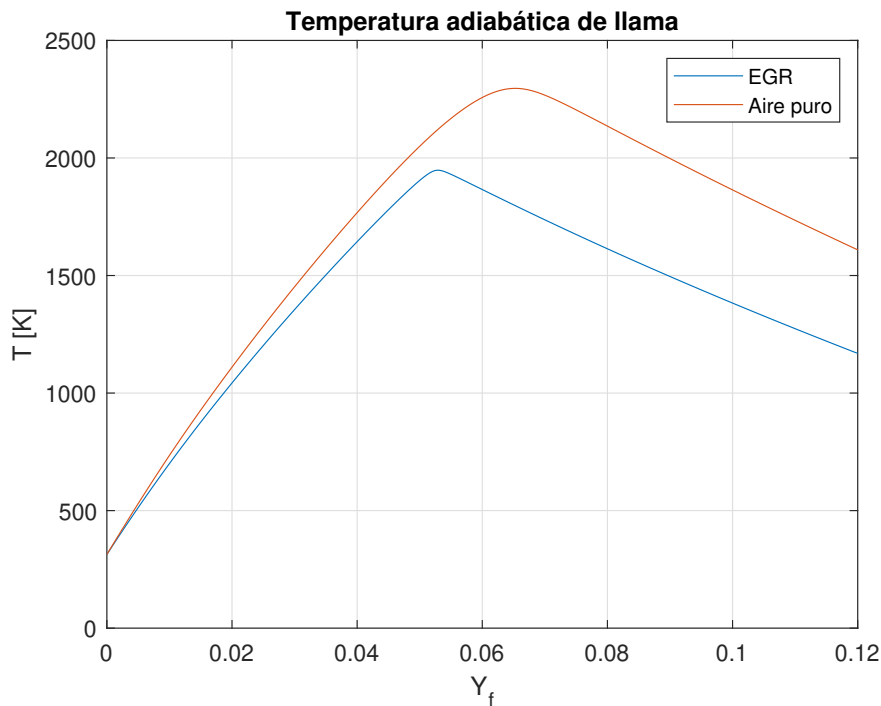


Figura 9.1: Comparación entre combustión pura y aire con EGR

Como se podía esperar, las temperaturas alcanzadas en la cámara de combustión son menores cuando el comburente deja de ser aire puro y contiene proporciones de otros elementos, debido a la disminución del valor de  $Y_{O_2,comb}$  por dicho fenómeno. Además, el máximo de temperatura adiabática se produce para una fracción másica menor por dichos gases residuales.

Los mecanismos de sendas reacciones se han obtenido de la bibliografía como se ha explicado en la Sección 3.3.2.1, pero, previo a su implementación, se ha tenido que realizar un cambio de formato entre *CHEMKIN* y *Cantera* para poder ser tratado de forma conveniente. Esto se ha llevado a cabo gracias a un fichero *.inp* con las reacciones químicas y otro en formato *.dat* que contenía los datos termodinámicos. Utilizando el comando *ck2cti* disponible en *Cantera* a través de *MATLAB*, se ha obtenido un único fichero en formato *.cti* con el que ya se podía trabajar directamente y con el que se han hallado los resultados mostrados.

Así, se realiza una comparativa de los perfiles de temperatura obtenidos por *Cantera* y el método simplificado (obtenido con la Ecuación 5.1) con el cálculo del error absoluto entre ellos:

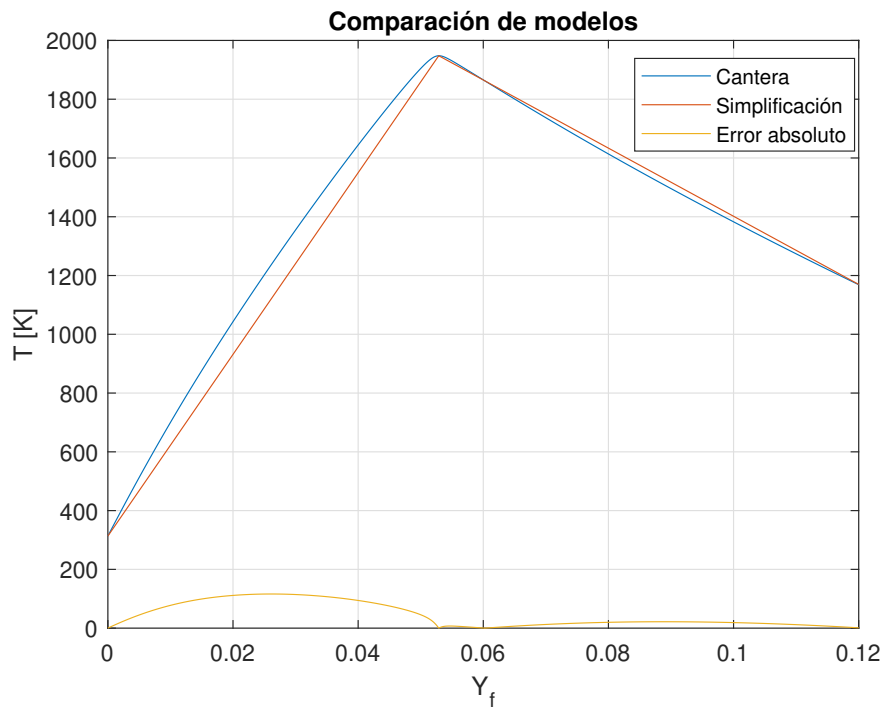


Figura 9.2: Comparación entre perfiles de temperatura adiabática de llama

Para un mejor estudio, también se calcula el error relativo expresado en %:

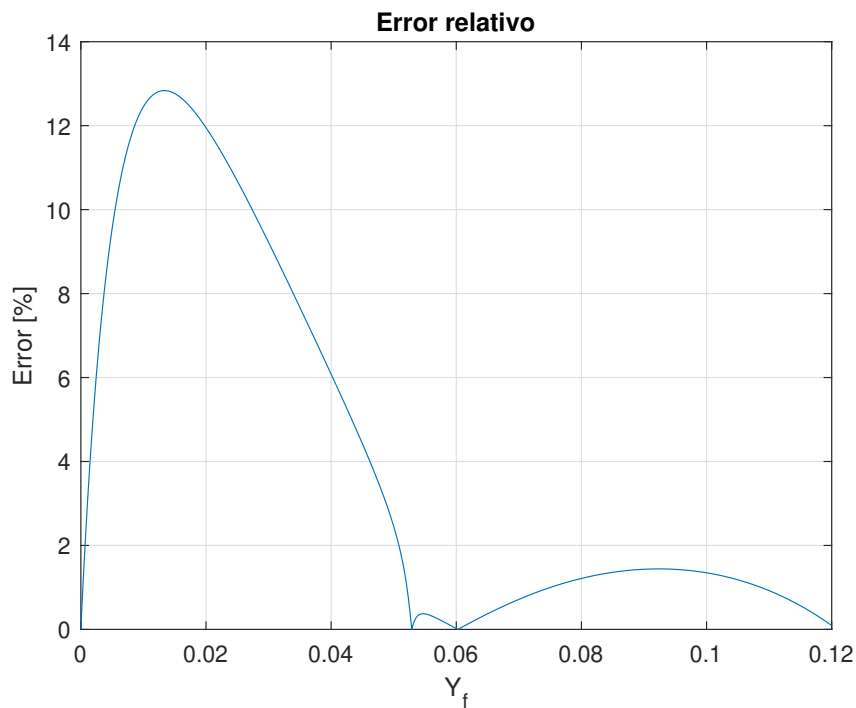


Figura 9.3: Error relativo entre perfiles de temperatura adiabática de llama

Analizando las Figuras 9.2 y 9.3 se observa que el error entre los dos métodos es bastante significativo en la zona pobre en combustible, sobre todo en el entorno del valor 0.015,

mientras que es prácticamente despreciable en la zona rica, que va a ser la de estudio en este trabajo al ser dónde se producen las emisiones de partículas de hollín. Por tanto, el modelo simplificado apunta a tener buena precisión en la zona de interés, donde realmente será usado posteriormente.

Mediante una interpolación realizada en base a los valores de dosados relativos obtenido de la Figura 3.2 y las fracciones másicas obtenidas en la Tabla 5.2, se obtiene la temperatura adiabática de llama de cada una de las zonas en las que se divide la cámara de combustión para ambos métodos. Así, se muestra la siguiente tabla de resultados:

Zona	EQR	$Y_f$	T (Cantera) [K]	T (simplificación) [K]
1	1	0.0502	1909.3	1865.6
2	1.45	0.0712	1721.8	1735.5
3	1.625	0.0791	1624.3	1643.7
4	1.75	0.0847	1557.8	1579.2
5	1.875	0.0902	1493.6	1515.3

Tabla 9.1: Temperatura adiabática de llama de cada una de las zonas

Observando los valores presentes en la anterior tabla, se confirma la hipótesis del error despreciable entre ambos métodos. Por último, se compara el factor de corrección entre ellos introduciendo las temperaturas de la Tabla 9.1 en la Ecuación 3.11 calculando los errores absoluto y relativo en función del dosado relativo como se hizo en la Figura 5.7:

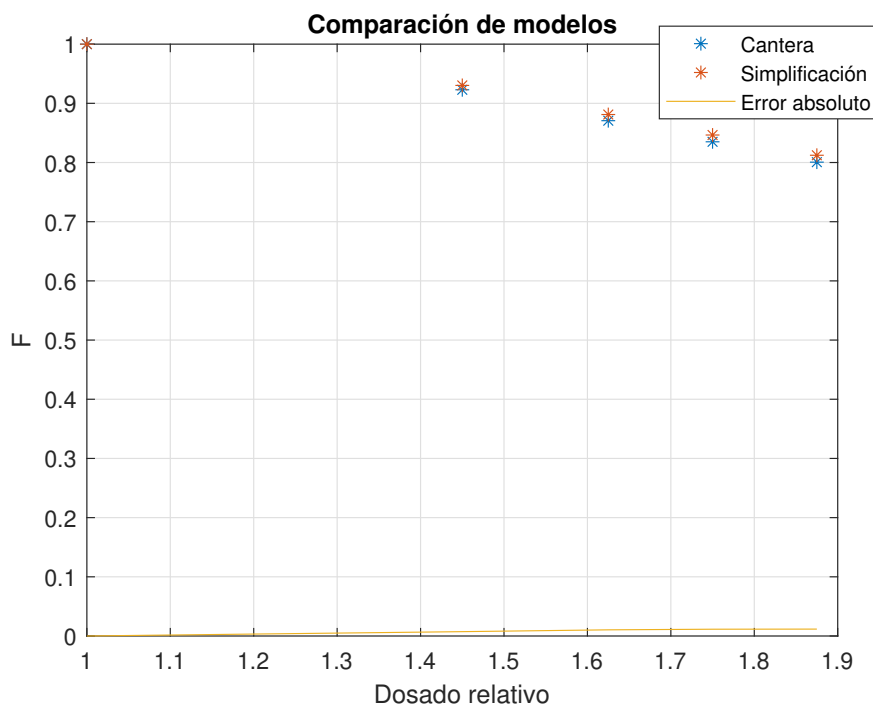


Figura 9.4: Comparativa entre factores de corrección

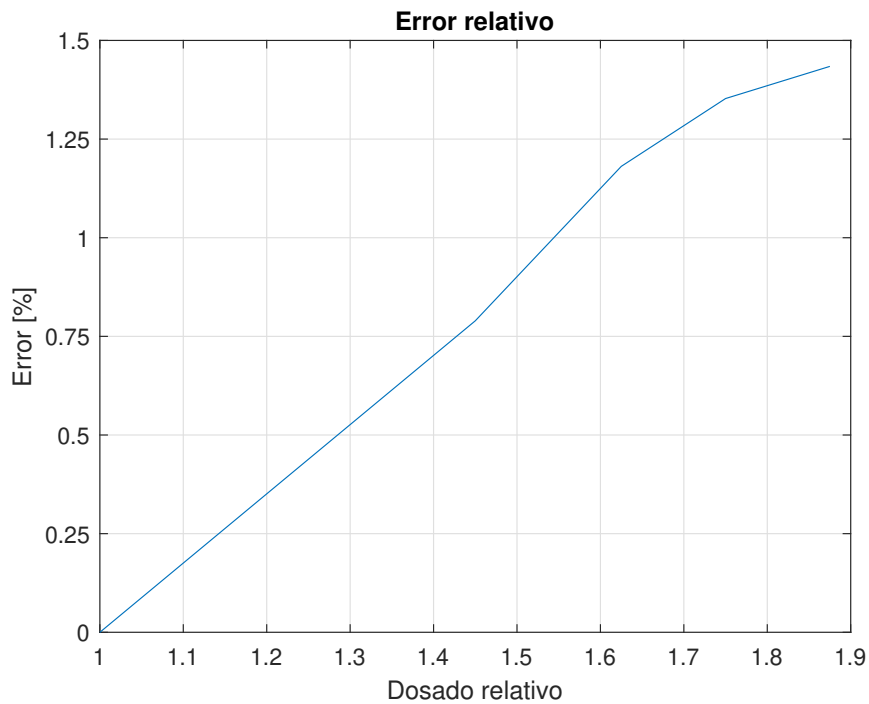


Figura 9.5: Error relativo entre factores de corrección

Se observa en las Figuras 9.4 y 9.5 que el error sigue siendo asumible a pesar del aumento que experimenta, lo que confirma en última instancia la idoneidad de esta simplificación. Cabe destacar que si se aumenta la tasa de EGR, se incrementa el error.

## 9.2. Código *MATLAB* principal de cálculo

Es el código principal de cálculo en el que se van introduciendo las ecuaciones vistas en el Capítulo 3.

```

1 %% Main code
3 clear all
4 clc
5 close all
7 %% INPUT
9 % ZONES NUMBER
10 n = 5;
11
12 % MASS FRACTIONS
13 Y1 = 0.88; % Mass fraction zone 1
14 Y2 = 0.055; % Mass fraction zone 2
15 Y3 = 0.03; % Mass fraction zone 3
16 Y4 = 0.02; % Mass fraction zone 4
17 Y5 = 1-Y1-Y2-Y3-Y4; % Mass fraction zone 5, their addition must be 1
18 Y = [Y1, Y2, Y3, Y4, Y5]; % Mass fraction zones vector
21 % O2 MASS FRACTIONS

```



```

23 Y_O2_comb = 0.185; %O2 Mass fraction in comburent, it must be lower
    % than O2 mass fraction in air
25 Y_O2_air = 0.2302; %O2 Mass fraction in air

27 %FUEL-AIR/AIR-FUEL RATIOS

29 phi_tot = 1/15.2; % Absolute Fuel-Air ratio , mfTOT/mTOT
    L_st = 15.2; % Stoichiometric Air-Fuel ratio
31 F_st = 1/L_st; % Stoichiometric Fuel-Air ratio
    F_O2_st = F_st/Y_O2_air; %O2 Stoichiometric Fuel-Air ratio , obtained from
33 % mf/mO2
    lambda_p = 1/(Y_O2_comb*F_O2_st); % Parameter that facilitates notation
35
    %EQR obtained from Fig 3.4 , EQR_tot and EQR_max
37 EQR1 = 1; %EQR zone 1
    EQR2 = 1.45; %EQR zone 2
39 EQR3 = 1.625; %EQR zone 3
    EQR4 = 1.75; %EQR zone 4
41 EQR5 = 1.875; %EQR zone 5
    EQR = [EQR1, EQR2, EQR3, EQR4, EQR5]; %EQR zone vector
43 EQR_tot = phi_tot*L_st; %EQR_tot (see theory)
    EQR_max = 2.5; %max EQR
45
    % phi obtained from EQR and L_st
47 phi_vector = EQR/L_st; %phi vector (see theory)

49 %O2 fuel ratio
    F_O2 = phi_vector/Y_O2_air; % mf/mO2
51
    % Air-Fuel ratio
53 lambda = 1./EQR; %lambda vector

55 %MASSES

57 mf_tot = 1e-3; % Total fuel mass injected (arbitrary value) [g]
    m_tot = mf_tot/phi_tot; % Total mass injected [g]
59 mair_tot = m_tot - mf_tot; % Total air mass injected [g]

61 %SPECIFIC HEATS
    c_air = 1.012; % Air [J/g K]
63 c_f = 2.22; % Fuel [J/g K]

65 %ANGULAR VELOCITY

67 ang_vel_rpm = 2000; %rpm
    ang_vel_degrees = ang_vel_rpm*6; % /s
69

    % WIEBE'S LAW
71
    a = 6.908; % Completeness grade
73 m = 2.6; % Form parameter
    Delta_alpha_c = 30; % Combustion duration [ ]
75 alpha_0 = -7; % Initial alpha [ ]
    syms alpha; % Variable
77 Yfb = 1-exp(-a*((alpha-alpha_0)/Delta_alpha_c)^m); % Wiebe's law
    dYfb_dalpha = diff(Yfb, alpha); % Wiebe's Law derivative alpha
79 dYfb_dt = dYfb_dalpha*ang_vel_degrees; % Wiebe's Law derivative time

81 %TEMPERATURES (random values , they will be calculated later)

```

```

83 T_air = 300; % Air temperature [K]
T_f = 400; % Fuel temperature [K]
85 T_exh = 700; % Exhaust temperature [K]
T_b_global = 1500; % Temperature profile in burned zone [K] (it should
87 % depend on time but at the moment it will be a fix value)
T_mix = (mair_tot*c_air*T_air+mf_tot*c_f*T_f)/(mair_tot*c_air+mf_tot*c_f);
89 % Air-isooctane mixture temperature [K]

91 %% MASS FLOWS
93
95 % With EQR vector, we can calculate Yf,j and, in consequence, pj
97
99 for i = 1:n % Zones
Yf(i) = F_O2(i)*Y_O2_comb/((F_O2(i)*Y_O2_comb)+1); % Yf (see theory)
pj(i) = Yf(i)*Y(i)/phi_tot; % pj (see theory)
end

101 % Once we know pj, with 3.18, 3.19 and 3.21 equations we obtain the
% different mass flows that represent the interactions between burned and
103 % unburned regions in the zones that we have defined at the beginning of
% the program
105
107 dmf_dt = dYfb_dt*mf_tot*pj; % Eq 3.18 [g/s]
dmcomb_dt = dmf_dt*(1/F_O2_st)*(1/Y_O2_comb); % Eq 3.19 modified [g/s]
dmub_total_dt = dmf_dt + dmcomb_dt; % Eq 3.21 [g/s]
109

111 %% ADIABATIC FLAME TEMPERATURE PROFILE
113
115 % Obtained from cantera:
117
119 comburent = 'EGR'; % If we choose 'Air', the combustion will be taken with
% pure air. If we choose 'EGR', we must count with residual gasses
fuel = Solution('chem.cti'); % .cti file with chemical reactions
[T_ad_cantera, Yf_vector, xeq, phi] = Ad_Flame_Temp(fuel, T_mix, EQR_max, ...
119 Y_O2_comb, comburent); % The function that contains the adiabatic flame
% temperature calculus and his inputs and outputs
121
123 % Obtained from simplification ("triangle")
125
127 T_ad_max = max(T_ad_cantera); % Maximum value of T_ad [K]
T_end = T_ad_cantera(end); % End value of T_ad [K]
Yf_max = max(Yf_vector); % Maximum Yf
129 maxposition = find(T_ad_cantera == T_ad_max); % Position vector
% corresponding with maximum T_ad
131 Yf_Tmax = Yf_vector(maxposition); % Yf value corresponding with maximum
% T_ad
133
135 % We build the "triangle"
137
139 for i = 1:length(Yf_vector) % As elements as Yf_vector
if (0<=Yf_vector(i))&&(Yf_vector(i)<=Yf_Tmax) % First section zone
T_ad_triangle(i) = ((T_ad_max-T_mix)/Yf_Tmax)*Yf_vector(i) + T_mix;
% First section equation
else % Second section zone
139 T_ad_triangle(i) = (T_ad_max-T_end)/(Yf_Tmax-Yf_max) * ...
(Yf_vector(i)-Yf_max) + T_end; % Second section equation
141 end
end
143

```

```

145 %Then, we have to obtain the adiabatic flame temperature of each zone,
%finding the position vector of each one with an interpolation
147 T_ad_vector_cantera = interp1(Yf_vector , T_ad_cantera , Yf); %1D
% interpolation
149 T_ad_vector_triangle = interp1(Yf_vector , T_ad_triangle , Yf); %1D
% interpolation
151 %We do the same for global T
153 T_ad_global_cantera = interp1(Yf_vector , T_ad_cantera , Yf(1)); %1D
155 % interpolation
157 T_ad_global_triangle = interp1(Yf_vector , T_ad_triangle , Yf(1)); %1D
% interpolation
159 %%CORRECTION FACTOR
161 % Applied correction factor is obtained (only in fuel-rich zones)
163 %and we can calculate temperature profile in burned region in each zone
165 for i = 1:n
    F_cantera(i) = T_ad_vector_cantera(i)/T_ad_global_cantera; %eq. 3.22
    % modified
    T_bj_cantera (i) = max(T_b_global*F_cantera(i),T_exh); %eq. 3.23
    F_triangle(i) = T_ad_vector_triangle(i)/T_ad_global_triangle; %eq.
    % 3.22 modified
    T_bj_triangle (i) = max(T_b_global*F_triangle(i),T_exh); %eq. 3.23
171 end
173 % Correction factor and EQR obtained from Frommater's PhD
175 F_thesis = [1, 0.958, 0.94, 0.92, 0.9]; % fig 3.6
177 EQR_thesis = [1, 1.36, 1.43, 1.5, 1.58]; % fig 3.6
179 %% Graphics
181 Graphics(T_ad_cantera , T_ad_triangle , T_ad_vector_cantera , dYfb_dalpha , ...
183     EQR, F_cantera , F_triangle , alpha_0 , Delta_alpha_c , Yfb , ...
    dmf_dt , dmcomb_dt , dmub_total_dt , Yf_vector , T_ad_vector_triangle , ...
185     EQR_thesis , F_thesis)
%Function , open to see possible plots

```

Codigo/Main.m

### 9.3. Función *MATLAB* para el cálculo de la temperatura de llama adiabática

Es la función que obtiene la distribución de la temperatura de llama adiabática en *MATLAB* gracias a que se ha implementado *Cantera* en forma de herramienta.

```

1 %% Isooctane adiabatic flame temperature function
3 % This code computes the adiabatic flame temperature and
% equilibrium composition for a isooctane/air mixture as a function of
5 % equivalence ratio.
7 function [tad , Yf_vector , xeq , phi] = Ad_Flame_Temp( fuel , T_mix , EQR_max , ...

```

```

    Y_O2_comb, comburent)
9
nsp = nSpecies(fuel); %Species number
11
% find isooctane, nitrogen, and oxygen indices
13 iisooctane = speciesIndex(fuel, 'I-C8H18'); %Isooctane index
io2 = speciesIndex(fuel, 'O2'); %Oxygen index
15 in2 = speciesIndex(fuel, 'N2'); %Nitrogen index
ico2 = speciesIndex(fuel, 'CO2'); %CO2 index
17 ih2o = speciesIndex(fuel, 'H2O'); %H2O index

19 nphi = 2000; %Phi number
phi = linspace(0, EQR_max, nphi); %Phi vector
21 tad(nphi) = 0; %Adiabatic flame temperature vector is initialized
xeq(nsp, nphi) = 0; %Molar fraction vector is initialized
23 M = molecularWeights(fuel); %Molecular weight vector
M_iiisooctane = M(iisooctane); %Isooctane molecular weight
25 M_o2 = M(io2); %O2 molecular weight
M_n2 = M(in2); %N2 molecular weight
27 M_co2 = M(ico2); %CO2 molecular weight
M_h2o = M(ih2o); %H2O molecular weight
29 c_o2 = 25/2; %O2 stoichiometric coefficient
c_n2 = 25/2*3.76; %N2 stoichiometric coefficient
31 c_co2 = 8; %CO2 stoichiometric coefficient
c_h2o = 9; %H2O stoichiometric coefficient
33
%We obtain adiabatic flame temperature
35
for i = 1:nphi %Number of phi
37
%We obtain Yf in two different cases: pure air and air with EGR
39
    if comburent == 'Air'
41        Yf_vector(i) = phi(i)*M_iiisooctane/((phi(i)*M_iiisooctane)+...
            (c_o2*M_o2)+(c_n2*M_n2)); %Yf with pure
43        % air
        K = 0; %K constant
45    elseif comburent == 'EGR'
        Yf_vector(i) = phi(i)*M_iiisooctane/((phi(i)*M_iiisooctane)+...
            (c_o2*M_o2)+(c_n2*M_n2)+(c_co2*M_co2)+(c_h2o)); %Yf with EGR
47        K = 1/((c_co2*M_co2)+(c_h2o*M_h2o))*(((c_o2*M_o2)/Y_O2_comb)-...
            (c_o2*M_o2)-(c_n2*M_n2)); %K constant (see theory)
49    end
51
    x = zeros(nsp,1); %x matrix
53    x(iisooctane,1) = phi(i); %x matrix isooctane
    x(io2,1) = c_o2; %x matrix oxygen
55    x(in2,1) = c_n2; %x matrix nitrogen
    x(ico2,1) = K*c_co2; %x matrix CO2 (if we consider EGR)
57    x(ih2o,1) = K*c_h2o; %x matrix h2o (if we consider EGR)
    set(fuel, 'Temperature', T_mix, 'Pressure', 101325.0, 'MoleFractions', x);
59    %We set temperature, pressure and mole fractions values
    equilibrate(fuel, 'HP'); %Enthalpy specfic and pressure equilibrate
61    tad(i) = temperature(fuel); %Adiabatic flame temperature vector
    xeq(:, i) = moleFractions(fuel); %Molar fraction vector
63 end

```

Codigo/Ad\_Flame\_Temp.m

## 9.4. Función *MATLAB* para realizar las representaciones gráficas

Es la función que permite obtener las representaciones gráficas expuestas en el Capítulo 5 y en el Anexo 9.1.

```

1 %% Graphics
3 % Function when we plot the results obtained in Main.m
5 function Graphics(T_ad_cantera, T_ad_triangle, T_ad_vector_cantera, ...
    dYfb_dalpha, EQR, F_cantera, F_triangle, alpha_0, Delta_alpha_c, Yfb, ...
7     dmf_dt, dmcomb_dt, dmub_total_dt, Yf_vector, T_ad_vector_triangle, ...
    EQR_thesis, F_thesis)
9
11 %% WIEBE'S LAW
13 alpha = alpha_0:alpha_0+Delta_alpha_c; % If we want to plot functions
14 plot(alpha, double(subs(Yfb))) %Syms to double
15 hold on
16 plot(alpha, double(subs(dYfb_dalpha))) %Syms to double
17 grid on
18 title('Ley de quemado')
19 ylabel('Y_{f,b}')
20 xlabel('\alpha [\circ]')
21 xlim([-10 30])
22
23 %% FLOWS
24
25 % FUEL FLOW
26
27 alpha = alpha_0:alpha_0+Delta_alpha_c; % If we want to plot functions
28 plot(alpha, double(subs(dmf_dt(1)))) %Syms to double
29 hold on
30 plot(alpha, double(subs(dmf_dt(2)))) %Syms to double
31 plot(alpha, double(subs(dmf_dt(3)))) %Syms to double
32 plot(alpha, double(subs(dmf_dt(4)))) %Syms to double
33 plot(alpha, double(subs(dmf_dt(5)))) %Syms to double
34 grid on
35 title('Gasto de combustible')
36 ylabel('Gasto [g/s]')
37 xlabel('\alpha [\circ]')
38 legend('Zona 1', 'Zona 2', 'Zona 3', 'Zona 4', 'Zona 5')
39
40 %% COMBURENT FLOW
41
42 alpha = alpha_0:alpha_0+Delta_alpha_c; % If we want to plot functions
43 plot(alpha, double(subs(dmcomb_dt(1)))) %Syms to double
44 hold on
45 plot(alpha, double(subs(dmcomb_dt(2)))) %Syms to double
46 plot(alpha, double(subs(dmcomb_dt(3)))) %Syms to double
47 plot(alpha, double(subs(dmcomb_dt(4)))) %Syms to double
48 plot(alpha, double(subs(dmcomb_dt(5)))) %Syms to double
49 grid on
50 title('Gasto de comburente')
51 ylabel('Gasto [g/s]')
52 xlabel('\alpha [\circ]')
53 legend('Zona 1', 'Zona 2', 'Zona 3', 'Zona 4', 'Zona 5')
54
55 %% TOTAL UNBURNED FLOW
56
57 alpha = alpha_0:alpha_0+Delta_alpha_c; % If we want to plot functions

```

```

57 plot(alpha , double(subs(dmub_total_dt(1)))) %Syms to double
hold on
59 plot(alpha , double(subs(dmub_total_dt(2)))) %Syms to double
plot(alpha , double(subs(dmub_total_dt(3)))) %Syms to double
61 plot(alpha , double(subs(dmub_total_dt(4)))) %Syms to double
plot(alpha , double(subs(dmub_total_dt(5)))) %Syms to double
63 grid on
title('Gasto total de la zona sin quemar')
65 ylabel('Gasto [g/s]')
xlabel('\alpha [\circ]')
67 legend('Zona 1', 'Zona 2', 'Zona 3', 'Zona 4', 'Zona 5')

69 %% ADIABATIC FLAME TEMPERATURES
71 % TRIANGLE
73
75 plot(Yf_vector , T_ad_triangle);
xlabel('Y_f');
ylabel('T [K]');
77 title('Temperatura adiabática de llama');
grid on
79 xlim([0 0.12])

81 %CANTERA
83 plot(Yf_vector , T_ad_cantera);
xlabel('Y_f');
85 ylabel('T [K]');
title('Temperatura adiabática de llama');
87 grid on
xlim([0 0.12])

89 %COMPARATION
91
93 plot(Yf_vector , T_ad_cantera) % Cantera
hold on
plot(Yf_vector , T_ad_triangle) % Simplification ("triangle")
95 plot(Yf_vector , abs(T_ad_cantera-T_ad_triangle)) % Error in absolute value
title('Comparación de modelos')
97 xlabel('Y_f')
ylabel('T [K]')
99 grid on
legend('Cantera', 'Simplificación', 'Error absoluto')
101 xlim([0 0.12])

103 %VECTOR (CANTERA)
105 plot(EQR, T_ad_vector_cantera , '*')
title('Temperatura adiabática en cada zona')
107 xlabel('Dosado relativo')
ylabel('T [K]')
109 grid on

111 %VECTOR (TRIANGLE)
113 plot(EQR, T_ad_vector_triangle , '*')
title('Temperatura adiabática en cada zona')
115 xlabel('Dosado relativo')
ylabel('T [K]')
117 grid on

```

```

119 %ERROR IN %
121 plot(Yf_vector ,(abs(T_ad_triangle-T_ad_cantera)./ T_ad_triangle)*100) % Error
122 title('Error relativo')
123 xlabel('Y_f')
124 ylabel('Error [%]')
125 grid on
126 xlim([0 0.12])
127
128 %%CORRECTION FACTOR
129
130 % TRIANGLE
131
132 plot(EQR, F_triangle , '*' ) %Plot
133 grid on
134 title('Factor de corrección')
135 xlabel('Dosado relativo')
136 ylabel('F')
137
138 %CANTERA
139
140 plot(EQR, F_cantera , '*' ) %Plot
141 grid on
142 title('Factor de corrección')
143 xlabel('Dosado relativo')
144 ylabel('F')
145
146 %COMPARATION
147
148 plot(EQR, F_cantera , '*' ) %Cantera
149 hold on
150 plot(EQR, F_triangle , '*' ) %Simplification ("triangle")
151 plot(EQR, abs(F_cantera-F_triangle)) %Error in absolute value
152 title('Comparación de modelos')
153 xlabel('Dosado relativo')
154 ylabel('F')
155 grid on
156 legend('Cantera','Simplificación','Error absoluto')
157
158 %ERROR IN %
159
160 plot(EQR, (abs(F_triangle-F_cantera)./ F_triangle)*100) % Error
161 title('Error relativo')
162 xlabel('Dosado relativo')
163 ylabel('Error [%]')
164 grid on
165
166 % VALIDATION (TRIANGLE)
167
168 plot(EQR, F_triangle , '*' )
169 hold on
170 plot(EQR_thesis , F_thesis , '*' )
171 title('Validación del factor de corrección')
172 xlabel('Dosado relativo')
173 ylabel('F')
174 grid on
175 legend('Modelo','Literatura')
end

```

Codigo/Graphics.m