

Resumen de tesis

José Pedro García Galache

17 de mayo de 2017

La emisión de contaminantes a la atmósfera por parte del parque móvil puede desembocar en graves problema de salubridad, especialmente en las grandes capitales mundiales. Éste hecho junto con una mayor concienciación ecológica fuerza a las autoridades a legislar con marcos regulatorios cada vez más restrictivos. Es por ello por lo que los fabricantes de automóviles van incorporando nuevas tecnologías capaces de reducir dichos contaminantes. Existen dos estrategias diferentes para reducir las emisiones. Por un lado se intenta evitar su aparición. Esto se consigue reduciendo la relación de compresión, modificando la ley de inyección de combustible, recirculando gases de escape, etc. La segunda opción es la de eliminar los contaminantes antes de que éstos salgan a la atmósfera. Ésta es la principal tarea de catalizadores y filtros. La presente tesis se centra en el estudio de éstos últimos.

Por lo general los dispositivos anticontaminantes reducen la eficiencia del motor y penalizan el consumo de combustible. Los filtros de partículas no son una excepción. La presencia del filtro en los conductos de escape supone un obstáculo para la libre circulación del aire originando una caída de presión. Ésto hace que la presión aguas arriba del filtro sea mayor en todo el conducto. Mayor presión a la salida de la turbina se traduce en menor relación de expansión y por tanto menor potencia útil para extraer. A su vez, altas presiones a la salida del cilindro dificultan la renovación de aire. Todo ello penaliza en la eficiencia del motor. Es por tanto vital que el filtro a la par de eficaz sea eficiente, definiendo eficiencia como la minimización de la caída de presión.

Para minimizar la caída de presión es necesario conocer los procesos fluidodinámicos a nivel de microestructura. Éste es el objetivo de la tesis. Se presente aportar el conocimiento necesario que permita optimizar la microestructura de un filtro. Para ello es necesario por un lado conocer la microestructura, simular el campo fluido que la rodea, calcular la trayectoria de las partículas en suspensión, ver dónde se depositan y por último observar como se regenera. Hacer un estudio completo es demasiado ambicioso para una sola tesis. Es por ello por lo que se planteó desde un primer momento desarrollar tanto como se pudiera. En este momento se han desarrollado de forma satisfactoria un generador para crear geometría por ordenador, el solver que calcula el campo fluido y los modelos de transporte de partículas. Queda pendiente por tanto para trabajos futuros los modelos de deposición y regeneración.

La geometría generada por ordenador imita filtros hechos con mulita acicular. La geometría resultante tiene un aspecto completamente realista y es la que se ha utilizado para los cálculos posteriores. Cada cristal que conforma el substrato es único e irrepetible, pues se ha creado a partir de múltiples factores que siguen distintas distribuciones aleatorias.

El campo fluido que rodea a los cristales de mulita a sido calculado con un solver del tipo Lattice-Boltzmann Method (LBM). Estos tipos de solvers presentan grandes ventajas en comparación con las técnicas clásicas basadas en volúmenes finitos. Son mucho más escalables, su formulación es local, lo que evita tener que invertir una matriz, no necesitan de bucle corrector de la presión, no necesitan adaptarse a la geometría, etc. Todas estas cualidades convierten a LBM en el método más adecuado para resolver este tipo de problemas. Durante el transcurso de la tesis se han desarrollado dos solvers. Por un lado, el entorno de test. El entorno de test está diseñado para funcionar sobre las tarjetas gráficas (GPU), lo que aumenta enormemente la velocidad de cálculo. Se usa para probar los avances en desarrollo antes de incorporarlos al solver principal. Debido a la escasa memoria que incorporan las GPU Labmoter, el solver principal, no ha podido ser acelerado con GPUs. Labmoter es un software desarrollado *ex proceso* durante esta tesis por CMT para el cálculo de medios porosos. Además de los dos solvers ya mencionados se ha utilizado también Walberla, un framework desarrollado por la Universidad de Erlangen, con la que se ha colaborado de forma cercana.

Una vez ya desarrollado el software toca poner a punto las simulaciones. La porción de filtro simulado ha de ser lo suficientemente grande como para ser representativa y contener varias de las mayores estructuras. Por otra parte la discretización ha de ser lo suficientemente fina como para capturar los detalles más pequeños y no influir en la solución. Y ya por último las condiciones de contorno empleadas han de estar lo suficientemente lejos del centro del dominio como para no modificar el resultado. Para conocer el tamaño de las estructuras mayores se han empleado técnicas estadísticas basadas en correlaciones. Para la discretización se ha calculado la dimensión fractal de la interfaz (2 por ser una superficie) y se ha hecho un estudio de independencia de malla. La posición de las condiciones de contorno se ha validado comparando la solución para paredes laterales periódicas con paredes simétricas.

El siguiente paso es calcular la trayectoria de las partículas. Desafortunadamente la mayor parte de las mediciones que hay acerca de partículas viene dada en magnitudes equivalentes. La principal de ellas es el diámetro aerodinámico equivalente. Esta magnitud describe a la perfección el comportamiento aerodinámico de la partícula. Sin embargo no explica ni el movimiento Browniano ni su geometría. Es por ello por lo que se ha desarrollado un generador de partículas Diesel. Las partículas Diesel se asemejan enormemente a aglomerados de partículas esféricas y por ello son así modelados. Se han creado multitud de partículas por colisión balística, sin intervención del fluido circundante. Se han realizado múltiples estudios sobre las poblaciones de partículas generadas.

El siguiente paso es calcular la aerodinámica de las partículas generadas para así poder correlacionarla con su geometría. Dado que el tamaño de las esferas que conforman las partículas es muy pequeño, del orden de la separación entre moléculas del aire, se ha tenido que desarrollar un nuevo software que tenga en cuenta estas circunstancias. El nuevo solver está basado en Simulación Directa Monte-Carlo. Sirve para calcular flujos rarificados. Por desgracia las condiciones de contorno necesarias para calcular la resistencia aerodinámica no han podido ser implementadas a tiempo para geometrías genéricas. Sin embargo sí se ha completado su desarrollo y validación.

Una vez se tiene conocimiento de cómo son las partículas y sus propiedades aerodinámicas éstas se pueden generar de acuerdo a su concentración. Después de ser generadas entran en el dominio y se puede calcular su trayectoria. Para el cálculo de la trayectoria se ha de tener en cuenta la aerodinámica, la inercia de la partícula, el movimiento Browniano si la partícula es pequeña y los efectos 3D si la partícula es muy grande (del mismo orden que la discretización aerodinámica).

Varias conclusiones se pueden extraer de los resultados de las simulaciones. La caída de presión se produce principalmente en los intersticios que comunican los poros del material. La presión en cada poro permanece más o menos constante. La velocidad en los intersticios es máxima, por ser éstos las secciones de menor área. En el interior de cada poro la velocidad decae formando en ocasiones grandes áreas de recirculación. La mayoría de las partículas cruzan el filtro por unos pocos intersticios. Suele haber unos pocos pasos dominantes que canalizan casi todo el flujo.