

Resumen

Los motores de encendido por compresión (MEC) o diésel presentan mayor eficiencia que los motores de encendido provocado (MEP) o gasolina debido a su mayor relación de compresión y a la ausencia de pérdidas por estrangulamiento en la admisión. Sin embargo, sus elevadas emisiones de NO_x y hollín siguen siendo sus principales desafíos. Para abordar estos problemas, se han propuesto conceptos de combustión a baja temperatura. Estos conceptos de combustión resultan muy prometedores para lograr bajas emisiones de NO_x y hollín, así como para reducir las pérdidas de calor. Los MEC operando con mezcla homogénea (HCCI) se enmarcan en esta categoría. No obstante, estos conceptos no han logrado una implementación comercial amplia debido a las dificultades para controlar el inicio de la combustión y los gradientes de presión. En los últimos años, se ha propuesto el encendido por compresión controlado por reactividad (RCCI), que opera generando una mezcla de combustibles dentro del cilindro, con dos combustibles de diferente reactividad y dos inyectores (uno en el puerto de admisión con un combustible de alto octanaje y otro en el cilindro con un combustible de alto cetanaje) para controlar la tasa de liberación de calor y optimizar la fase y duración de la combustión. En los motores RCCI, las menores emisiones de NO_x y hollín, junto con una mayor eficiencia indicada bruta en comparación con los motores diésel convencionales, han generado un gran interés en su aplicación. Sin embargo, la simulación de la combustión en motores RCCI es muy compleja porque intervienen dos combustibles distintos en el proceso y se generan muchas especies intermedias durante el proceso de combustión, por lo que la cinética química debe analizarse en detalle. Pero la simulación con cinética química detallada es demasiado costosa, ya que implica resolver una ecuación de transporte para cada especie junto con el conjunto de ecuaciones diferenciales que modelan el progreso de la cinética química detallada. Estas ecuaciones diferenciales forman un sistema rígido, que representa un amplio espectro de escalas temporales. La integración de estas ecuaciones requiere algoritmos especializados y avanzados, y es muy costosa en tiempo. Dado que la mayoría de los métodos numéricos para el cálculo termo-fluidodinámico ya son muy exigentes en cuanto a tiempo de cálculo y requieren múltiples integraciones del sistema de ecuaciones correspondiente, una integración directa del campo termo-fluidodinámico y la cinética química detallada resulta, en general, impracticable. Además, como los mecanismos de cinética química detallada suelen incluir más de mil especies, simular estos motores RCCI con este método consume mucho tiempo. El enfoque basado en química tabulada ha sido, durante mucho tiempo, la única opción viable de incluir efectos de química detallada en simulaciones prácticas de sistemas de combustión turbulenta. La aproximación conocida como Flamelet-Generated Manifold (FGM) es un ejemplo de un método de tabulación de la química. En este enfoque, una llama multidimensional

turbulenta puede tratarse como un conjunto de llamas laminares unidimensionales (1D) denominadas flamelets. Las ecuaciones que gobiernan estas llamas se resuelven y sus soluciones se mapean a un nuevo sistema de coordenadas para construir un manifold de dimensión reducida. Esta tesis estudia la aplicabilidad del método FGM para la simulación de motores RCCI. Uno de los retos en el uso de FGM en esta aplicación es la definición de la variable de progreso (PV). La definición de PV afecta considerablemente la eficiencia y la precisión del modelo en la predicción de las características del proceso de combustión. Para superar esta limitación, se ha propuesto un enfoque generalizado basado en la optimización de la PV mediante algoritmos genéticos (GA), que encuentra automáticamente la definición más adecuada maximizando su monotonicidad a lo largo del dominio de fracción de mezcla. Los resultados muestran que este enfoque mejora significativamente la eficiencia del modelo en comparación con la implementación tradicional de FGM, eliminando el proceso manual de selección de la PV. Este nuevo enfoque ha sido validado con simulaciones que integran la cinética detallada y con los resultados experimentales correspondientes a la configuración conocida como Spray A de Engine Combustion Network (ECN). La validación muestra mejoras significativas en la predicción de las características más importantes de la combustión, como el tiempo de retraso al autoencendido, la longitud de despegue de la llama (lift-off) y la distribución espacial de especies bajo múltiples condiciones operativas. Además, esta tesis aborda otra limitación crítica de FGM, que es el uso excesivo de memoria, almacenamiento y errores de interpolación, especialmente cuando se aumenta la dimensión del manifold en algunas aplicaciones, como es el caso de la simulación de motores RCCI. Para abordar este problema, se combinan distintas técnicas de aprendizaje automático (ML), concretamente redes neuronales artificiales (ANN), bosques aleatorios (RF) y árboles potenciados por gradiente (GBT) con FGM. Estos modelos de ML se han entrenado para predecir directamente los parámetros clave de la combustión a partir de las variables de control, y presentan costes mucho menores de memoria y tiempo de ejecución que los asociados al enfoque FGM tradicional. Entre los métodos de ML objeto de estudio, las arquitecturas de ANN poco profundas muestran la mejor capacidad de predicción, especialmente para parámetros complejos como el término fuente de la PV. A pesar de que requieren más tiempo de entrenamiento que otros modelos de ML, las ANN ofrecen predicciones precisas que son esenciales para una modelización fiable de la combustión. Los cálculos muestran que el modelo ML-FGM ofrece una precisión similar a la obtenida con cinética detallada. Además, el enfoque ML se ha generalizado para predecir otras propiedades de transporte, como la conductividad térmica, la viscosidad y la difusividad, garantizando la compacidad y eficiencia del modelo FGM sin comprometer la precisión. El enfoque generalizado para la definición de PV y el modelo ML-FGM mejoran notablemente la aplicabilidad del modelo FGM para simular conceptos avanzados de combustión como el que se desarrolla en los motores RCCI. Estos métodos se confirman como opciones prometedoras para obtener simulaciones precisas y computacionalmente eficientes de procesos de combustión dual, fundamentales en el desarrollo de sistemas de combustión de nueva generación, de alta eficiencia y bajas emisiones.