

Modelo cinético para la simulación de la autoignición en un proceso de combustión homogénea de encendido por compresión (HCCI).

Torres García, Miguel; Chacartegui, Ricardo; Sánchez, David; Jiménez-Espadafor, Fco José; Sánchez Tomas; Muñoz, Antonio; Ricardo Chacartegui

Escuela Superior de Ingenieros. Camino de los Descubrimientos s/n. 41092-SEVILLA(ESPAÑA)

Tlf/Fax: 954486111/954486111. miguel_torres@esi.us.es

Resumen.

El conocimiento del punto de autoignición de los motores bajo combustión HCCI es un apartado fundamental en el futuro desarrollo de estos motores. En este trabajo tratamos de proporcionar una herramienta computacional, con un detallado estudio de la cinética química, la cual resulta imprescindible para la comprensión del fenómeno HCCI.

HCCI: Homogeneous compression combustion ignition.

Abstract.

This paper reviews some of the engine research results and available data from HCCI combustion kinetics studies. Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) combustion has recently emerged as a viable alternative combustion process to the conventional spark ignition or compression ignition process for internal combustion engines, owing to its potential for high efficiency and extremely low NO_x and particulate emissions.

Methods for automatic quasi-steady-state reduction of reaction mechanisms a life time measure to detect equilibrated species has been developed and applied to homogeneous model of HCCI engine fuelled with its two fuels.

1. Introducción

El proceso HCCI combina las principales características de los sistemas de combustión más comunes. Partimos de una premezcla supuesta homogénea de combustible–aire, como ocurre en un motor de encendido provocado (o gasolina), y por otra parte, la mezcla es comprimida hasta que comienza la autoignición y posterior combustión, que es propio de motores diesel. Las ventajas son numerosas y dependen del proceso de combustión con el que se comparen.

Comparándolo con los motores de gasolina, HCCI presenta un proceso de combustión mucho más efectivo, debido fundamentalmente a la eliminación de las pérdidas de carga, la utilización de mayores relaciones de compresión y al ser un proceso de combustión cuasi-instantaneo que no necesita la propagación del frente de llama.

Respecto a los motores de encendido por compresión, los motores HCCI minimizan las emisiones de NOx y de partículas, debido a la ausencia de altos gradientes de temperatura y una premezcla rica en aire.

2. Aspectos químicos

La cinética química juega un gran papel en la autoignición y oxidación del combustible que caracteriza el proceso de combustión en HCCI. Por lo que es necesario entender los mecanismos de reacción de la combustión de hidrocarburos, para una correcta interpretación de los datos experimentales y un buen desarrollo de los motores HCCI.

El combustible utilizado para este trabajo es una mezcla de iso-octano C_8H_{18} y n-heptano C_7H_{16} , por lo que es la oxidación de parafinas e iso-parafinas en lo que nos centramos, tanto el iso-octano y el n-heptano, se comportan de forma similar (enlaces simples de carbono) por lo que su desarrollo es paralelo. Desarrollamos un modelo cinético reducido, compuesto por 33 especies y 66 reacciones:

3 Modelo matemático

El objetivo es programar un modelo matemático bajo entorno MATLAB para el análisis de la combustión HCCI en un MCIA de cuatro tiempos.

Este modelo va a permitir determinar la evolución de la temperatura, presión, tasa de liberación de calor, pérdida de calor, potencia desarrollada, evolución de las especies y emisiones del motor, al variar parámetros como: diámetro del cilindro, relación de compresión, cilindrada unitaria, rpm, temperatura de entrada, cantidad y composición del combustible consumido, dosado.

Las hipótesis de partida son:

- *Los gases se comportan de forma ideal*
- *Modelo unidimensional*: Este modelo considera que las variables termodinámicas (P , T , V) dependen únicamente del tiempo, o lo que es lo mismo, del ángulo de giro del cigüeñal.
- *Geometría*

El recinto en el que esta confinado el gas, es un cilindro cuyo volumen varía con el tiempo.

4. Planteamiento

El modelo consta de 37 variables dependientes del tiempo, 33 de ellas corresponden a las especies presentes en la mezcla, y las otras cuatro son la presión, temperatura, volumen y pérdidas mecánicas.

Tenemos un sistema de 37 ecuaciones independientes (34 diferenciales y 3 ordinarias) no lineales y acopladas, para determinar la evolución de las 37 variables en el interior del cilindro.

5. Evolución del modelo

El modelo cinético (reacciones y constantes cinéticas) que se plantea se divide en 4 partes:

5.1-Oxidación del n-Heptano

Se produce un craqueo térmico que rompe el heptano en moléculas simples, debido a las altas temperaturas.

5.2-Oxidación del iso-octano

Tiene la misma estructura que la parte anterior.

Estas dos partes constan de 24 reacciones de las cuales 12 son reversibles.

5.3-Reacciones O_2-H_2

Los radicales formados aquí, son los precursores de la combustión.

Son reacciones rápidas e inestables en las que mediante distintas combinaciones obtenemos: OH, O_2H_2 , HO_2 . Se utilizaron los datos cinéticos encontrados en [Ref.1].

5.4 - Oxidación del CO

Aquí se considera la oxidación del CO a CO_2 , estas reacciones aportan más de la mitad del calor total liberado durante la combustión.

6. Estudio de la autoignición

Como definición del retraso de ignición vamos a tomar la utilizada en la [Ref. 3] en este documento se asume que la autoignición tiene lugar cuando la concentración de una determinada especie intermedia X, alcanza un valor crítico X_c . Se toma la concentración de un radical: como el H_2O_2 (Fig 1).

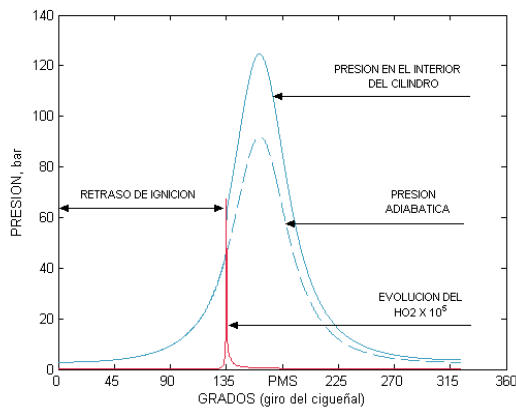


Figura 1

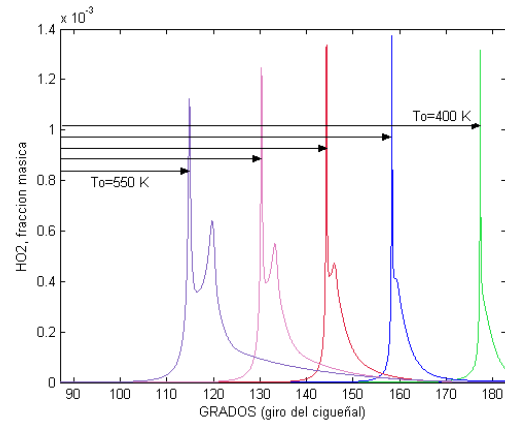


Figura 2

La figura 2, es un ejemplo, y representa el retraso de ignición para distintas temperaturas iniciales, disminuyendo al aumentar la temperatura.

6.1 Retraso de la ignición y composición de la alimentación

En la figura 3 se muestra, el efecto que tiene la composición del combustible sobre el retraso de ignición, para lo que la composición de la alimentación varía desde 100 % n-heptano hasta 100% de iso-octano. Se va a operar con una relación de compresión de 17, 2000 rpm un consumo de 3 litros/hora y un dosado de 0.3. La temperatura inicial se fija en 350 K.

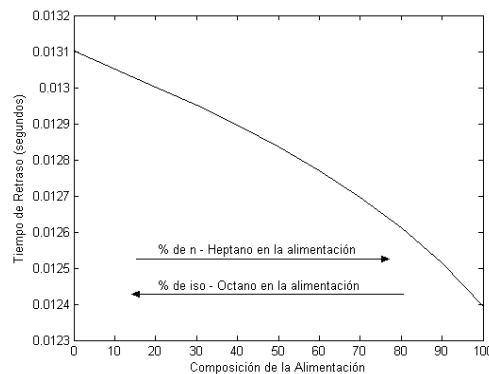


Figura 3

En las siguientes figuras se representan y comparan dos casos particulares, para una alimentación 100% n-heptano y para otra 100% iso-octano. El comienzo de la combustión se localiza en todas las evoluciones representadas, como el punto donde comienza el salto apreciable en la variable que se esté analizando.

En las figuras 4 y 5 el salto de la presión y temperatura en el momento que tiene lugar la combustión. En todas estas graficas se observa que la alimentación de n-heptano pura, autoigniciona antes que la de iso-octano pura.

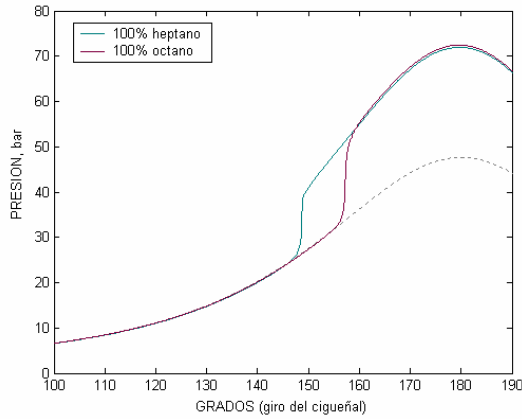


Figura 4

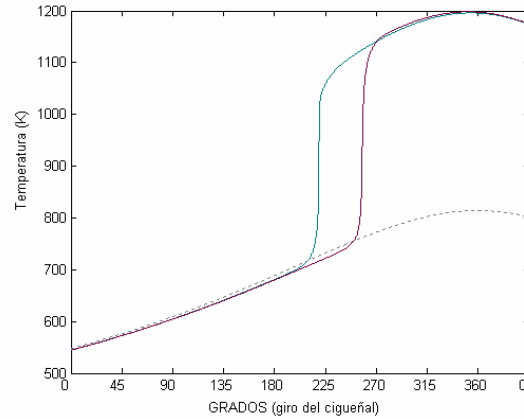


Figura 5

6.2 Retraso de ignición y temperatura inicial

La temperatura inicial es otro factor que influye de forma muy notoria en el punto de ignición, en este apartado se va a estudiar esta influencia. Par ello se va a operar con un motor de 705 c.c, una relación de compresión de 22 a 3000 rpm. Se alimentará con 5 litros /hora de una mezcla 50% octano - 50% heptano y un dosado de 0.8

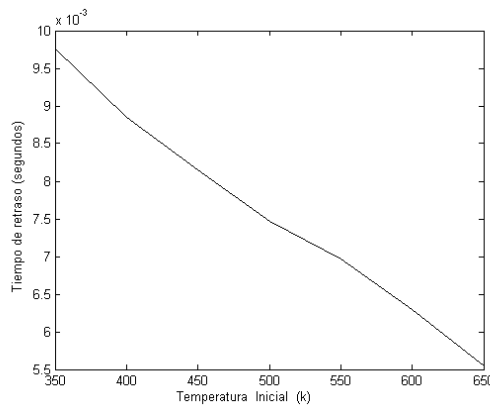


Figura 4

En la Fig. 6, se muestra como evoluciona el tiempo de retraso para distintas temperaturas iniciales.

6.3 Retraso de ignición y revoluciones por minuto

Se va a mostrar el retraso de ignición, para regímenes de giro variando entre 1000 y 3000 rpm. Se utilizará un motor de 705 c.c. alimentado con 3 litros/hora de una mezcla 50% heptano-50%-octano, un dosado de 0.5, una temperatura inicial de 400 k y una relación de compresión de 17

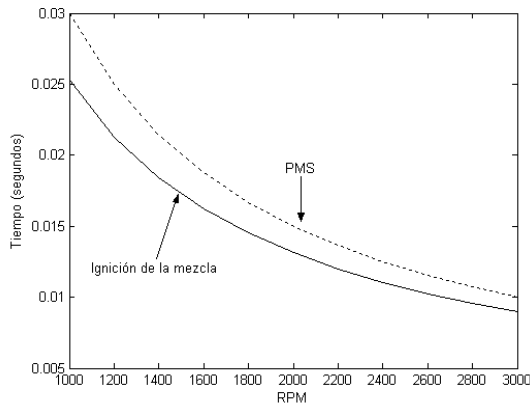


Figura 7

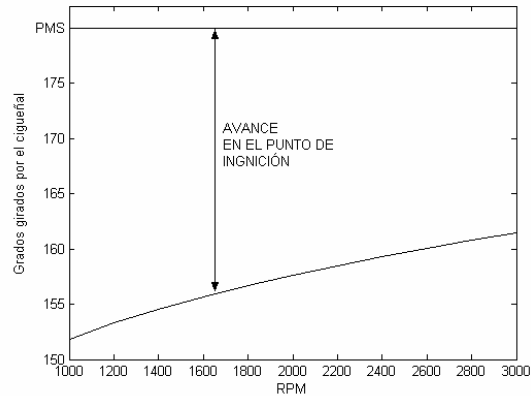


Figura 8

Al aumentar las RPM del motor, el tiempo del que se dispone para el proceso de combustión disminuye (Fig. 7), por lo que es necesario que también lo haga el punto de ignición, para que sea posible la combustión a altas revoluciones.

El punto de ignición sufre un retraso respecto del PMS, cuando aumentan las RPM, como se muestra en la figura 8.

6.4 Recirculación de los gases de escape (EGR)

La circulación de gases de escape al interior del cilindro, tiene un efecto importante tanto en la emisión de gases como en el proceso de combustión.

Existen dos tipos de recirculación: Cuando los gases recirculados tienen mayor temperatura que la alimentación fresca "hot EGR"(Fig 9) y cuando los gases se enfrían antes de introducirlos en el cilindro "cooled EGR"(Fig 10).

En Fig 9 y Fig 10, se compara el "hot EGR" y "cooled EGR", las condiciones de operación son: Motor de 705 cc, alimentación de 2 litros /hora de una mezcla del 95% n-heptano y 5% iso-octano. La relación de compresión es de 15 y el régimen de giro es de 1500 rpm. La temperatura inicial es de 420 K y dependiendo de que usemos cooled EGR o Hot EGR la temperatura de los gases recirculados será de 390 K o 550 k respectivamente.

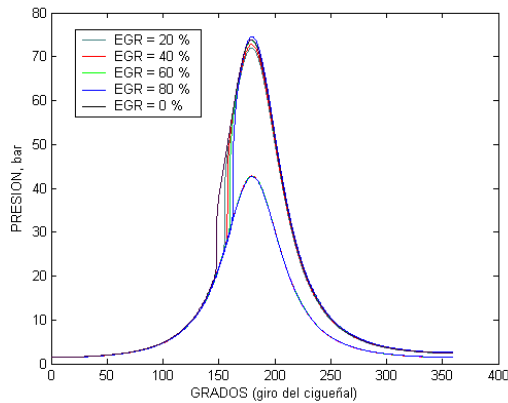


Figura 9

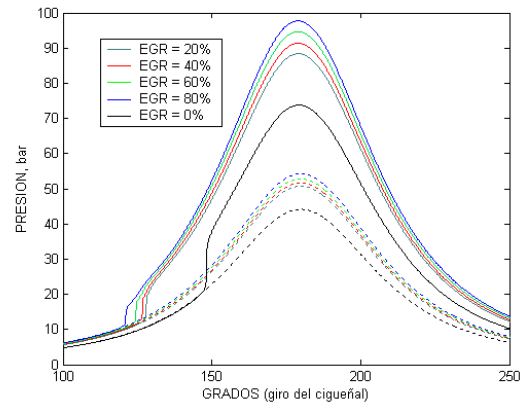


Figura 10

Estos dos métodos se utilizan para disminuir las emisiones de NO_x, ya que eliminan los altos gradientes de temperaturas locales.

7. Conclusiones

Con el modelo computacional presentado se dispone de una herramienta útil y cómoda para la simulación del tiempo de auto ignición de los motores bajo combustión HCCI estudiando la cinética del proceso la cual resulta fundamental para la comprensión de dicho modo de combustión.

8. Referencias

1. "A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine"; Shigeyuki Tanaka, James C. Keck; Combustion and flame 113(2003).
2. "Understanding HCCI Engine Combustion"; Sandia National Laboratories. March/April 2003, Volumen 25, N°2.
3. "HCCI Engines. Key research and development issues" ISBN 0-7680-1123-X PT94