



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

REGENERACIÓN DE FILTROS MECÁNICOS  
CATALIZADOS PARA PARTÍCULAS DIESEL

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO MECÁNICO ELECTRICISTA  
(ÁREA MECÁNICA)

PRESENTAN

RODRIGO GARCÍA MORENO RODRÍGUEZ  
ROGELIO GUTIÉRREZ SALINAS

Director de Tesis: Dr. Alejandro F. Romero López

Instituto de Ingeniería  
Departamento de Ingeniería Mecánica,  
Térmica y de Fluidos

U.N.A.M. México, 1996



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**A todas las  
personas que, de  
alguna u otra  
forma, hicieron  
posible este trabajo.**

## **AGRADECIMIENTOS**

---

**Al Dr. Romero por su apoyo, orientación y paciencia**

**Al Instituto de Ingeniería, en el seno del cual se concibió y realizó  
este trabajo.**

<b>CAPÍTULO</b>	<b>Página</b>
<b>I. ANTECEDENTES</b>	1
IDENTIFICACIÓN DE LAS PARTÍCULAS DIESEL COMO CONTAMINANTES PELIGROSOS	1
DETERMINACIÓN DE REDUCIR LA EMISIÓN	7
<b>II. INTRODUCCIÓN</b>	9
GENERACIÓN DE LAS PARTÍCULAS DIESEL	9
CARACTERÍSTICAS GENERALES DE LAS EMISIONES	14
<b>III. SOLUCIONES PROPUESTAS</b>	18
DISMINUCIÓN EN LA GENERACIÓN DE PARTÍCULAS	19
SISTEMAS DE POST-TRATAMIENTO	22
<b>IV. EL FILTRO CATALIZADO</b>	27
<b>V. REGENERACIÓN DE LOS FILTROS</b>	32
REGENERACIÓN DIRECTA	32
REGENERACIÓN INVERSA	36
<b>VI. DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA</b>	38
INTRODUCCIÓN	38
ELEMENTOS DEL SISTEMA	39
FUNCIONAMIENTO DEL SISTEMA	44

<b>VII. EL DISPOSITIVO DE INERCIA TÉRMICA (DIT)</b>	47
CONSTRUCCIÓN	48
FUNCIONAMIENTO	50
MODELADO DE LA OPERACIÓN DEL DIT	51
RESULTADOS EXPERIMENTALES PRELIMINARES	55
<b>VIII. EL HOLLÍN Y SU COMBUSTIÓN EN LAS CONDICIONES ESPERADAS</b>	57
<b>IX. MODELADO MATEMÁTICO</b>	66
ANÁLISIS DIFERENCIAL	68
SOLUCIÓN NUMÉRICA	74
TEMPERATURA DEL AIRE DE REGENERACIÓN	79
SOLUCIÓN Y SIMULACIÓN	82
<b>X. DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS</b>	85
<b>XI. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN E INTERPRETACIÓN DE LOS MISMOS</b>	93
<b>XII. CONCLUSIONES</b>	104
<b>COMENTARIOS</b>	106
<b>APÉNDICE (LISTADO DEL PROGRAMA)</b>	108
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	116

## **CAPÍTULO I**

### **ANTECEDENTES**

---

#### **IDENTIFICACIÓN DE LAS PARTÍCULAS DIESEL COMO CONTAMINANTES PELIGROSOS**

En 1978 una serie de investigaciones biomédicas independientes detectaron mutaciones importantes en colonias de *Salmonella typhimurium* (estándar para la identificación de mutagénesis bacterial en la época) al ponerlas en contacto con extractos obtenidos del lavado con solventes orgánicos de material diesel particulado. Estos resultados generaron una polémica importante en torno a los riesgos a la salud humana debidos a las emisiones diesel. Esta polémica estuvo acompañada de nuevas y diversas investigaciones clínicas cuyos resultados

llevaron a la limitación de los niveles de emisión de este tipo de contaminante por parte de la Agencia de Protección al Medio Ambiente (EPA) en los EEUU.

Como una primera aproximación para averiguar si los efectos cancerígenos detectados en las colonias de bacterias serían extrapolables al hombre, se hicieron diferentes estudios utilizando mamíferos. Entre las especies utilizadas para las pruebas estuvieron cricetos, ratones y ratas. De manera independiente algunos de estos estudios demostraron que las ratas tienden a desarrollar tumores cancerígenos en los pulmones al obligarlas a respirar los gases de escape de motores a diesel. Esto ocurre después de muchas horas diarias de exposición a altas concentraciones de material particulado (por arriba de  $4 \text{ mg/m}^3$ ) por al menos veinticuatro meses (Hammerle). Esta evidencia experimental comprueba ineludiblemente que el mencionado efecto cancerígeno detectado en las bacterias sí es extrapolable a los mamíferos, más no significa necesariamente que esto aplique a todas las especies de mamíferos. Esto último se confirma con los resultados paralelos de los mismos estudios, en los que se observó que el efecto cancerígeno no se presenta --en condiciones semejantes de exposición-- en las poblaciones de cricetos o de ratones. Esto excluye de la discusión una afirmación tajante de que en los seres humanos se deba presentar la misma sensibilidad de las ratas, pero de ninguna manera elimina a las partículas diesel como cancerígeno potencial para el hombre.

La imposibilidad de repetir los experimentos mencionados sobre seres humanos excluye la determinación cierta y a corto plazo de los efectos de las emisiones diesel en el hombre. El intento de conocer estos efectos ha llevado a diferentes aproximaciones en la concepción de los estudios. Entre éstas predominan los estudios epidemiológicos, basados en la identificación de relaciones entre el contacto humano con las emisiones diesel debido a ocupaciones laborales y los historiales clínicos asociados, evaluados a lo largo de muchos años.

A manera de ejemplo, citamos uno de los primeros estudios de este tipo. En él, se tomó como universo de estudio a los trabajadores ferroviarios estadounidenses que comenzaron a trabajar entre 1939 y 1949. Éstos fueron agrupados según las actividades que realizaron durante sus años de servicio. Dentro del grupo más expuesto laboralmente a las emisiones diesel, se identificaron subgrupos según el tiempo de exposición implícito en el puesto de trabajo durante la jornada laboral. Así, se identificaron grupos de alto, mediano y bajo riesgo. Al estudiar los historiales



clínicos, se observaron más casos de cáncer pulmonar en los grupos de alto riesgo, tal y como se esperaba. Este resultado no pudo considerarse como contundente, por la dificultad de evaluar la influencia de otros factores (principalmente el tabaquismo) que podrían falsear los resultados. Sin embargo, en el mismo estudio se obtuvo un resultado paralelo que sirvió para justificar que la incidencia de casos en el grupo de alto riesgo sí se debía al contacto con las emisiones diesel. Este resultado fue el hecho sorprendente de que existía un patrón de distribución similar al de cáncer en el pulmón al analizar la incidencia de cáncer en la vejiga dentro del mismo grupo identificado como "de alto riesgo", lo que podría ser una confirmación del efecto indeseable de las emisiones, si se supone que las partículas acumuladas en el pulmón son removidas naturalmente y durante el proceso de limpieza pasan en algún momento por la vejiga (Hammerle).

Como este estudio, existen muchos otros, algunos de los cuales eliminan el factor del tabaquismo. Un ejemplo de esto es un estudio realizado sobre mujeres en la zona metropolitana de Tokio. El estudio relaciona los patrones de desarrollo de cáncer pulmonar en las mujeres (las cuales por razones culturales no forman parte considerable de la población de fumadores en el Japón) con el patrón de "crecimiento" poblacional de vehículos diesel en el área mencionada. El resultado demuestra un incremento en la tasa de mortalidad femenina debida a cáncer pulmonar en tres periodos que coinciden con tres periodos de incremento en el número de vehículos diesel activos en la zona metropolitana de Tokio (Kabuto).

Las consideraciones hechas por los diferentes estudios son generalmente distintas, pero --casi sin excepción-- todos llegan a las mismas conclusiones, señalando una probabilidad mayor de desarrollo de cáncer pulmonar de entre 20 y 50 por ciento mayor para las personas con exposición ocupacional importante al material particulado (Diesel Exhaust...). Los resultados no son categóricos en la mayoría de los casos y el aumento porcentual de riesgo identificado para los grupos cuyo contacto con las emisiones ha sido importante no es significativo según los resultados de muchos de estos estudios (Idem). Aún así, la coincidencia aparente de resultados ha sido considerada como argumento suficiente para continuar con la limitación de los niveles de emisión particulada. La identificación de este tipo de emisión como sustancia peligrosa para la salud por parte del Instituto Nacional de Salud y Riesgos Ocupacionales de los EEUU (NIOSH)

llevó al gobierno de los Estados Unidos a emprender un esfuerzo federal para reducir paulatinamente --hasta prácticamente eliminar-- las partículas de hollín generadas en la combustión de motores diesel. Este esfuerzo nació como iniciativa del gobierno estatal del estado de California, el cuál ha permanecido a la cabeza de este movimiento manteniendo las exigencias más estrictas a nivel mundial en legislación ambiental.

La identificación de las emisiones diesel como factor de riesgo a la salud se puede ver en la tabla siguiente (Nauss):

Año y Organización	Evidencia humana	Evidencia animal	Clasificación
National Research Council 1981	No demostrado convincientemente	Negativo	-----
National Institute for Occupational Safety and Health 1988	Limitado	Confirmativa	Carcinogénico ocupacional en potencia
International Agency for Research on Cancer 1989	Suficiente	Limitado	Probable carcinógeno humano
U.S. Environmental Protection Agency (DRA) 1990	Limitado	Suficiente	Probable carcinógeno humano
U.S. Environmental Protection Agency (DRA) 1994	Limitado	Suficiente	Probable carcinógeno humano
California Environmental Protection Agency (DRA) 1994	Suficiente	Suficiente	Carcinógeno humano

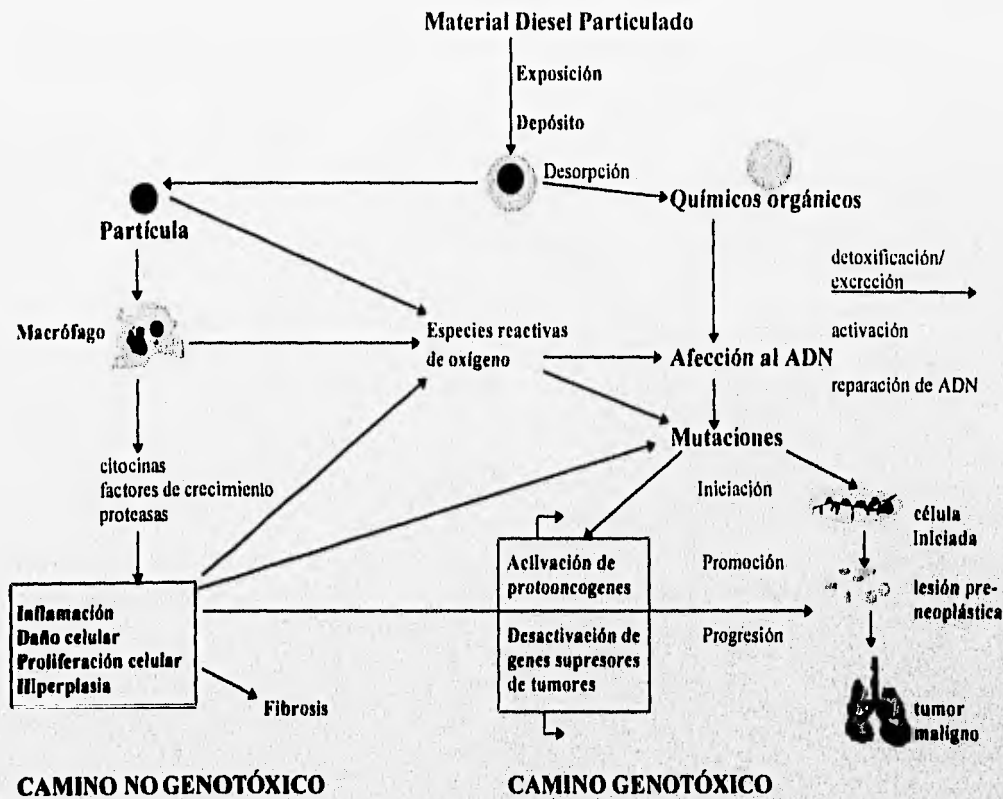
**Tabla 1.1. Evaluación de riesgos relacionados con las emisiones Diesel (DRA es la abreviación de Draft Risk Assessment).**

## **PAHs y hollín.**

El efecto cancerígeno del material diesel particulado se relacionó originalmente con los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs). Esto no es de sorprender, ya que los PAHs están clasificados entre las sustancias mutagénicas y cancerígenas más poderosas de acuerdo con la Agencia Internacional de Investigaciones Sobre el Cáncer (Naus). Estos compuestos fueron detectados desde la década de 1950 en las emisiones de vehículos a diesel y a gasolina como posibles cancerígenos, pero no fue sino hasta que se introdujeron al mercado vehículos ligeros a diesel en volúmenes importantes, que se les concedió importancia, generando una serie de investigaciones biomédicas más específicas para averiguar su efecto mutagénico y --en caso de confirmarlo-- saber qué tan seria sería la exposición a las concentraciones existentes en ambientes laborales o regionales. La caracterización química de los PAHs y sus derivados químicos (nitro-PAHs, principalmente), así como la investigación de sus efectos sobre los organismos vivos se ha desarrollado esencialmente alrededor de las emisiones diesel (aunque también existen en mucho menor proporción en las emisiones de los motores a gasolina). Estos compuestos tienen --en general-- bajas presiones de vapor y se condensan, junto con otros materiales orgánicos, en los núcleos carbonáceos (hollín) generados en el motor diesel antes de salir del escape (Hammerle). La combinación del hollín seco y estos compuestos orgánicos es estable a temperatura ambiente, y en conjunto constituyen, en su acepción más general, lo que se identifica como "material diesel particulado". (Las partículas diesel tienen en su mayoría diámetros menores a  $1\mu\text{m}$  y cientos de compuestos orgánicos adsorbidos en su superficie, algunos de los cuales son los PAHs mencionados anteriormente).

Los estudios que buscaban la relación entre las emisiones diesel y el cáncer pulmonar adjudicaban el efecto a la presencia de los PAHs y prácticamente todas las investigaciones se realizaron en torno a éstos, hasta que en 1986 se señaló la similitud entre los tumores inducidos por las emisiones diesel y los inducidos al respirar material particulado inerte (sin presencia de compuestos orgánicos, como por ejemplo óxido de titanio o negro de carbón) (Naus). Al hacer experimentos paralelos se observó que --efectivamente-- había desarrollo de tumores pulmonares similares a los anteriormente reportados en poblaciones de ratas sujetas a respirar los gases de

escape provenientes de motores diesel y poblaciones de ratas sujetas a respirar material carbonáceo particulado sin compuestos químicos adsorbidos (Hammerle). Este resultado parecía indicar que los compuestos orgánicos asociados al material particulado (incluyendo a los PAHs cuyo efecto cancerígeno está bien identificado) no tendrían una influencia relevante en el efecto mutagénico del material particulado como tal.



**Figura 1.1. Mecanismos posibles de carcinogénesis inducida por las emisiones diesel (Nauss).**

Aparentemente, un nivel tan grande de partículas rebasa la capacidad natural de limpieza del cuerpo, con la consiguiente acumulación de partículas en los pulmones, estado que se conoce "como sobrecarga pulmonar" y que podría ser el verdadero detonador oncogénico. Esta sospecha parece comprobarse por el hecho de que poblaciones de ratas sujetas a emisiones diesel filtradas

no desarrollan tumores pulmonares. La formación de tumores en los pulmones de las ratas se debería a la incapacidad fisiológica de limpiar los pulmones, así como a la inflamación y proliferación de células epiteliales de los alveolos. Los mecanismos involucrados no parecen afectar directamente el ADN (genotoxicidad), a diferencia de lo que ocurre por acción de los PAHs.

Así como no se puede afirmar categóricamente que el efecto apreciado en las ratas pueda extrapolarse a los seres humanos, tampoco queda excluida la posibilidad de que los PAHs y otros compuestos orgánicos presentes en las emisiones diesel y que --aparentemente no tienen efecto alguno en el desarrollo de tumores en los pulmones de las ratas-- tengan un efecto mutagénico y cancerígeno importante en el hombre, ya sea directamente o debido a efectos sinérgicos. Además, se sugiere que pueden existir diferentes mecanismos de carcinogénesis inducida por las emisiones diesel, bajo diferentes condiciones de exposición a las mismas (Nauss).

## **DETERMINACIÓN DE REDUCIR LA EMISIÓN**

### **EEUU**

En los EEUU se autorizó mediante la *Clean Air Act* a la Agencia de Protección del Medio Ambiente (EPA) a regular las emisiones provenientes de todo tipo de vehículos de combustión interna. Por el mismo conducto, se autorizó --además-- al estado de California a establecer estándares de emisión y de calidad de combustible mucho más estrictos a los del resto de la federación para poder cumplir con las exigencias de su legislación interna. La evolución de esta legislación se puede observar en la siguiente tabla de estándares para vehículos diesel "pesados":

	ÓXIDOS DE NITRÓGENO (g/bhp-hr)	DE MATERIAL PARTICULADO (g/bhp-hr)	MATERIAL PARTICULADO (g/bhp-hr)
MODELO (AÑO)	CAMIÓN Y AUTOBÚS	CAMIÓN	AUTOBÚS
1985	10.7	No disponible	No disponible
1988	10.7	0.6	0.6
1990	6	0.6	0.6
1991	5	0.25	0.25
1993	5	0.25	0.10
1994	5	0.10	0.07
1996	5	0.10	0.05 (se permite 0.07)
1998	4	0.10	0.05/0.07

**Tabla 1.2. Variación en la concentración permitida de emisiones de óxidos de nitrógeno y material particulado para motores nuevos de camiones y autobuses a diesel.**

### **México**

En México se adoptó virtualmente la legislación de la EPA en junio de 1993 con la publicación de la norma NOM-PA-CCAT-007-93 publicada por la Secretaría de Desarrollo Social (SEDESOL) bajo el encabezado de "Niveles de Emisión de Vehículos Diesel con Peso Bruto Superior a los 3875 kg" publicada en el Diario Oficial de la Federación el 23 de junio de 1993. La adopción de estándares tan estrictos se da en el seno de la integración comercial de América del Norte y su efecto como legislación vigente es de importancia capital para el sector de transporte nacional. Esto se entiende si se considera que cerca de un 90% de la carga que se mueve en todo el país se mueve utilizando motores diesel, al igual que prácticamente la totalidad del transporte de pasajeros foráneo (autobuses y trenes) y un porcentaje importante del transporte urbano.

## **CAPÍTULO II**

### **INTRODUCCIÓN**

---

#### **GENERACIÓN DE LAS PARTÍCULAS DIESEL**

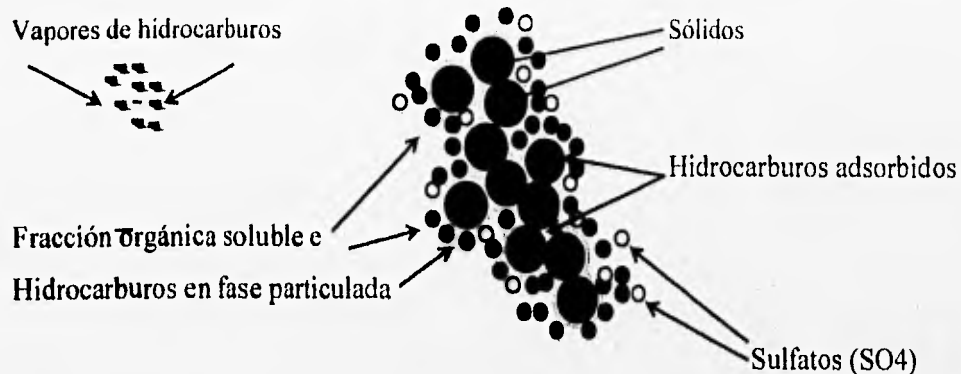
Las partículas de hollín son sólo uno de diferentes compuestos que se producen en la cámara de combustión de los motores diesel. Las emisiones diesel son mezclas complejas de compuestos orgánicos e inorgánicos. Estos compuestos se forman en la cámara de combustión y sus características son función del tipo de proceso dominante en la combustión que les da origen: pirólisis u oxidación. Las características de los componentes de la emisión así como las proporciones en que aparecen son también función de la composición del combustible, el tipo de motor utilizado, y los valores de los parámetros de operación del mismo.

Se denomina como "productos pirolíticos" a estos compuestos si se generan como efecto de una combustión incompleta en presencia de —o sobreviviendo a— la flama difusiva que se genera al momento de la ignición. Entre estos productos secundarios están principalmente la fracción sólida carbonácea u hollín y una fracción líquida constituida por hidrocarburos ligeros (*i.e.* acetileno, principalmente). Existen además otros compuestos secundarios cuya presencia es importante si bien su concentración es mínima comparada con las especies mencionadas anteriormente. Entre éstas se encuentran los hidrocarburos poliaromáticos o PAHs y otros compuestos orgánicos de alta masa molecular (HMWs).

En general, los componentes más importantes en cantidad (fracción molar) son los acetilenos y en no mucho menor cantidad, las partículas de hollín. En algunos casos, un orden de magnitud por debajo de las figuras representativas de hollín aparecen los HMWs y a su vez, un orden de magnitud por debajo de éstos, los PAHs (Ciajolo). Este último grupo comprende naftalenos, acenaftilenos, fenantrenos, fluorantenos y pirenos además de otros PAHs etilénicos y acetilénicos que se generan por la presencia de flamas. Este grupo de compuestos se encuentra mezclado con las partículas líquidas o bien, asociado por adsorción a los núcleos carbonáceos. Su existencia es importante en el estudio del material particulado, como se verá más adelante, pues además de intervenir en la formación del hollín, algunos de ellos están bien identificados como sustancias cancerígenas por si mismas.

En realidad, los mecanismos que intervienen en la formación de las partículas diesel son muy complejos y están poco entendidos. La generación de partículas diesel obedece a un gran número de diferentes factores, por lo que la definición exacta del papel que desempeña cada uno de éstos es labor imposible. No obstante estudios de diferentes investigadores señalan que la variación en los valores de cada uno de estos factores, manteniendo los valores de los otros parámetros constantes afecta directamente la concentración final de partículas generadas. Entre estos factores se encuentra el tipo de combustible utilizado; el tipo de reacción dominante durante la combustión (pirólisis u oxidación) y el régimen de trabajo del motor: carga, relación aire-combustible, velocidad, tiempo de inyección, etc.





- Esferas sólidas de carbón (0.01-0.08 $\mu$ m de diámetro) agrupadas para formar aglomerados sólidos de partículas
- Hidrocarburos adsorbidos
- Partículas de hidrocarburos (líquido condensado)
- Sulfatos con hidratación

**Figura 2.1. Constitución de los aglomerados de partículas**

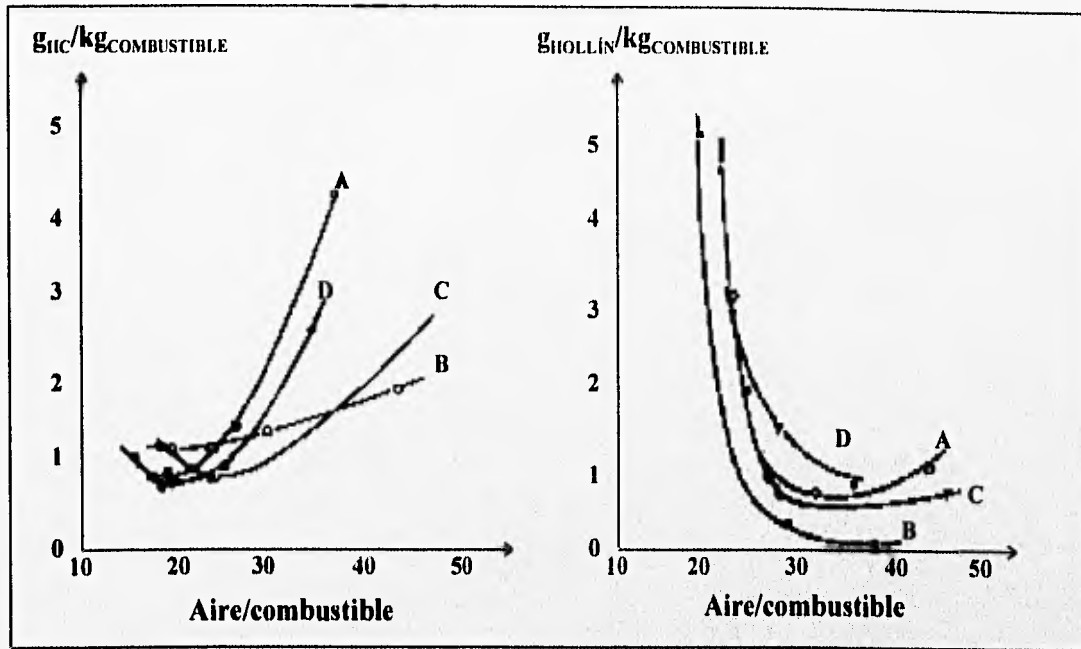
En lo que a régimen de trabajo del motor se refiere, se ha observado que el factor que afecta más notablemente en la generación de partículas es la carga. En términos generales, al disminuir ésta, aumenta la presencia de hidrocarburos líquidos en el escape del motor, pero la cantidad de hollín disminuye (sea inyección directa, o indirecta). En relación al combustible, se ha observado una baja generación de partículas cuando es bajo el contenido de compuestos aromáticos en el combustible, baja su temperatura de destilación y bajo su número cetónico.

Los compuestos aromáticos fomentan la generación de partículas mucho más que los compuestos parafínicos pero disminuyen el número cetónico. Esto último se traduce en un aumento en la proporción de combustible que se quema durante el ciclo de combustión en condiciones "pobres" (en proporción de combustible), situación en la que no se genera hollín. Así, paradójicamente,

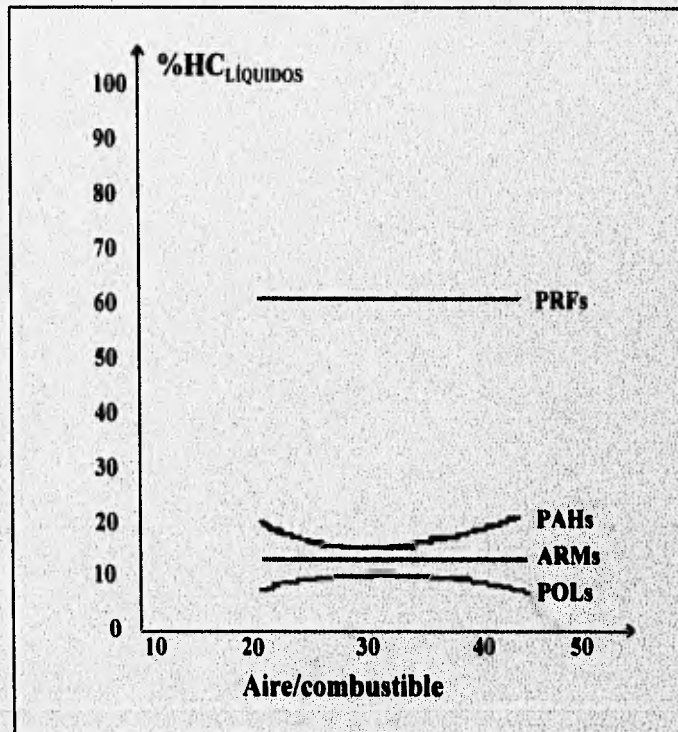
los compuestos aromáticos permiten una reducción global en la generación de partículas. (Ciajolo).

Por otra parte, una baja temperatura de destilación del combustible representa gran volatilidad del mismo. Esto implica una fácil evaporación y, consecuentemente, un buen mezclado del combustible con el aire en la cámara de combustión, lo que favorece una oxidación más completa. Además de estas características físicas del combustible *per se*, los cambios que éste sufre pueden influir en la forma como se lleva a cabo la combustión, retardando la ignición y alterando las reacciones asociadas. Del mismo modo, los cambios en las propiedades físicas y termodinámicas del combustible que ocurren con el cambio de temperatura y el calor liberado alteran la forma en que se realiza la combustión y con ello, la cantidad de material particulado y las características del mismo.

La formación de hollín en la cámara de combustión es un proceso de carbonización que se debe a reacciones de pirólisis en fase gaseosa, que ocurren a bajas concentraciones de oxígeno y altas temperaturas. Así, de manera general se puede decir que una baja proporción aire-combustible propicia pirólisis del combustible, lo que favorece la formación de hollín. Al aumentar la relación aire-combustible la emisión de hollín decrece dramáticamente hasta que se tiene demasiado aire (40 o más partes por una de combustible). En este caso hay un ligero aumento en la emisión de partículas para relaciones mayores, debido probablemente a las temperaturas de combustión involucradas, que se encuentran por debajo de las anteriores (Barbella).



**Figura 2.2. Relación aire/combustible y emisión de hidrocarburos y hollín para diferentes combustibles.**



**Figura 2.3. Porcentaje de hidrocarburos no quemados (parafinas, compuestos polares, mono y poliaromáticos) vs. relación aire/combustible.**

El efecto de la relación aire-combustible en la generación de partículas se aplica a todos los tipos de motor diesel, pues es independiente del sistema de combustión involucrado. No así las características de los combustibles. De acuerdo con Barbella, en los motores de inyección directa la emisión de partículas depende esencialmente del número cetónico tal y como se explicó en los párrafos anteriores, es decir que los compuestos aromáticos no parecen afectar de manera notable el volumen producido de material particulado en el rango de número cetónico de los aceites diesel representativos. En los motores de inyección indirecta la emisión de partículas (así como de hidrocarburos líquidos), depende tanto del contenido aromático del combustible, cuanto de la volatilidad del mismo. Entre mayor el contenido aromático y menor la volatilidad, mayor el volumen de emisión particulada.

Lo anterior se explica por las diferencias esenciales en los procesos de combustión que tienen lugar en los respectivos tipos de motor. En el motor de inyección directa, el combustible inyectado en la cámara de combustión se quema en condiciones de premezclado "pobres" al momento de la ignición y subsecuentemente, en un régimen difusivo. La cantidad relativa de la fracción premezclada (con dependencia directa y aproximadamente lineal a la volatilidad e inversa al número cetónico) determinará la cantidad de emisión de partículas e hidrocarburos. En el caso del motor de inyección indirecta, el combustible pasa a la precámara de combustión, donde se evapora y se quema en condiciones "ricas", lo que favorece la formación de hollín, independientemente del número cetónico del combustible. En este caso, es apreciable la influencia del contenido aromático que propicia la formación de hollín. En la misma precámara, la relación real aire-combustible disminuye al aumentar la volatilidad del combustible, lo que origina condiciones "ricas en combustible" con un aumento en las emisiones en general (acetilenos y hollín) como consecuencia inmediata (*Idem*).

### **CARACTERÍSTICAS GENERALES DE LAS EMISIONES**

La composición de las emisiones diesel varía considerablemente según el tipo de motor, condiciones de operación, combustible, aceite lubricante y, por supuesto, la utilización de algún dispositivo de post-tratamiento para el control de emisiones. La composición de las emisiones diesel ha cambiado dramáticamente en los últimos 30 años al igual que los otros parámetros

pertinentes enumerados. Este cambio en composición se refiere, más que a las especies componentes, a la proporción en las que éstas aparecen. La variación en las características de la emisiones implica una seria dificultad al intentar evaluar los efectos en la salud humana debidos a la exposición a las emisiones diesel en general. Hace diez años los combustibles eran muy diferentes de los combustibles de hoy, por lo que no se puede asegurar que los efectos en la salud debidos a las emisiones diesel de entonces sean los mismos que los debidos a las emisiones actuales.

Si bien las emisiones diesel no se pueden caracterizar con precisión, sobretodo debido a la variación en las proporciones de las especies asociadas, como se menciona en los párrafos anteriores, sí se puede identificar el grueso de dichas componentes. Las especies químicas que se enlistan a continuación son representativas para las emisiones diesel en general:

<b>COMPONENTE</b>	<b>PRODUCTOS ATMOSFÉRICOS DE REACCIÓN</b>	<b>IMPACTO BIOLÓGICO</b>
<b>EMISIONES EN FASE GASEOSA</b>		
<b>Dióxido de carbono</b>		<b>Efecto invernadero</b>
<b>Monóxido de carbono</b>		<b>Altamente tóxico; bloquea entrada de oxígeno a los alveólos</b>
<b>Oxidos de nitrógeno</b>	<b>Acido nítrico y ozono</b>	<b>NO<sub>2</sub> es irritante de las mucosas y precursor de ozono; HNO<sub>3</sub> contribuye a la lluvia ácida</b>
<b>Dióxido de azufre</b>	<b>Acido sulfúrico</b>	<b>Irrita tracto respiratorio; contribuye a la lluvia ácida</b>

Hidrocarburos alcanos (<C19)	Aldehídos,alquilnitratos y cetonas	Irritan tracto respiratorio. Los productos de reacción son precursores de ozono
Alquenos (<C5)	Aldehídos y cetonas	Irritan tracto respiratorio. Los productos de reacción son precursores de ozono. Algunos alquenos son mutagénicos y carcinogénicos
Aldehídos y Formaldehídos	Monóxidos de carbono y radicales hidroperóxiles	El formaldehído, además de ser precursor del ozono, es un probable carcinógeno humano.
Aldehídos altos v.g. acroleína	Peroxiacilnitratos	Irritan tracto respiratorio y producen irritación de los ojos. Daño a las plantas
Compuestos aromáticos monocíclicos	Derivados hidroxilados y nitrohidroxilados	El benceno es tóxico y carcinogénico en los humanos al igual que otros productos de reacción
PAHs (<5anillos) v.g. fenantreno, fluoranteno	Nitro PAHs (<5anillos)	Algunos son mutagénicos o carcinogénicos
Nitro-PAHs (2-3 anillos) v.g. nitronaftaleno	Quinones y derivados nitro- hidroxilados	Algunos productos de reacción son mutagénicos

EMISIONES EN FASE PARTICULADA		
Carbón elemental		Los núcleos adsorben compuestos orgánicos; por su tamaño pueden introducirse en los alveólos pulmonares
Sulfato inorgánico		Irrita tracto respiratorio
Hidrocarburos (C14-C35)	Aldehídos, cetonas y alquil nitratos	Desconocido
Nitro-PAHs (>2anillos) v.g. nitropirenos	Derivados nitro-hidroxilados	Muchos nitro-PAHs son mutagénicos o carcinógenos poderosos, así como algunos productos de reacción
PAHs (>3 anillos) v.g. pireno	Nitro-PAHs (>3 anillos)	PAHs de mayor masa molecular contribuyen notablemente a la carcinogénesis de las emisiones. Muchos nitro-PAHs son mutágenos o carcinógenos poderosos.

**Tabla 2.1. Composición general de las emisiones diesel, sus productos de reacción y el impacto biológico relacionado con ambos tipos de compuestos.**

### **CAPÍTULO III**

### **SOLUCIONES PROPUESTAS**

---

Debido a la estricta modificación de las normas para emisiones de motores diesel, tanto en México, como en Estados Unidos y la Comunidad Económica Europea, se han propuesto en el mundo un gran número de sistemas desarrollados para la misma finalidad; sin embargo, todos ellos, incluyendo el aquí presentado, difieren entre si en uno u otro aspecto, tratando de encontrar la solución óptima.

Como se pudo ver en el capítulo anterior los mecanismos que determinan la generación de partículas de hollín son sumamente complejos. En general hay dos acercamientos básicos para evitar la liberación de material diesel particulado a la atmósfera. El primer enfoque ataca directamente la generación de partículas en la cámara de combustión. En este sentido, existen a



la vez dos acercamientos que se complementan para lograr el objetivo. Uno se basa en la modificación física del motor; el otro, en el control de calidad del combustible. El segundo enfoque busca la recolección y posterior eliminación del material particulado y cobra vida en los sistemas de post-tratamiento de gases.

## **DISMINUCIÓN EN LA GENERACIÓN DE PARTÍCULAS**

Los primeros intentos de atacar la generación de partículas en el motor partieron de la identificación y el análisis de los modos de operación del motor en los que se detectaba menor emisión. De esta manera, se propusieron cambios en la inyección de combustible y sistemas de recirculación de los gases de escape para cumplir con las exigencias legales. La clave de este acercamiento es la correcta regulación en "timing" y cantidad de combustible inyectado, así como la determinación de la proporción óptima de gases a recircular según la velocidad del vehículo y del tipo de motor, así como de la posición del pedal de aceleración, caracterización de la entrada de aire al motor, presión manejada en los cilindros del motor y temperatura en los mismos (régimen de trabajo del motor).

Un primer acercamiento a esto fue la adaptación de sistemas complejos de control en la inyección de combustible y recirculación de gases de escape. La idea fue utilizar dispositivos electrónicos que monitorearan el funcionamiento del motor para ajustar inmediatamente el tiempo de inyección, el volumen de combustible inyectado y la proporción de gas de recirculación. Esto permitió tener flexibilidad en el sistema, a la vez que se garantizaba una notable reducción en los niveles de emisión. La preocupación de determinar la cantidad ideal de combustible a inyectar ha llevado a alteraciones físicas del motor tales como el aumento de área del canal de inyección en 40% para evitar el bloqueo del mismo por los depósitos debidos a la carbonización del combustible ; al diseño e implementación de nuevos inyectores ; y a la utilización de detergentes que evitan que los productos de carbonización se depositen en los conductos de salida de la cámara de combustión. La combinación de éstas y otras modificaciones han tenido como resultado una importante reducción en el volumen de emisiones en hasta 25% en comparación con los volúmenes de emisión detectados en un motor común, en el que típicamente se presenta taponamiento paulatino en los canales de inyección (Hammerle).

Existen muchos otros factores que favorecen la formación del material particulado, tal y como lo es el aceite de motor que pasa a las cámaras de combustión, la geometría de las cámaras de combustión, los materiales utilizados en la construcción del motor, etc. Cada uno de éstos implica precauciones adicionales. Por ejemplo, el aceite de motor constituye indirectamente una parte importante de la fracción orgánica soluble presente en las partículas de hollín que se forman en el motor. Para evitar su participación negativa es necesario disminuir las tolerancias en el sellado entre pistón y cilindro, lo que implica modificaciones en las tolerancias marcadas en los planos de construcción de los motores. Del mismo modo, otros factores conducen a aspectos diferentes en el diseño del motor, lo que lleva a una larga serie de modificaciones importantes a los diseños originales, con lo que ha nacido una generación verdaderamente nueva de este tipo de motores que se caracteriza por una notable reducción en los niveles de las emisiones.

Esta nueva generación de motores ha originado a su vez el advenimiento de nuevas formulaciones de combustibles. Se han producido nuevos combustibles con relaciones entre número cetónico y contenido de compuestos aromáticos tales que han demostrado una menor generación de emisiones. Paralelamente al desarrollo de éstos ha habido propuestas de formulaciones que sin evitar la formación del material particulado, permiten que éste sea eliminado posteriormente en combinación con algún sistema de post-tratamiento. De acuerdo con cierta publicación, al agregar pequeñísimas cantidades (0.05 g/l) de aditivos catalíticos al combustible (v.g. compuestos con hierro o cobre) éstos se queman en el motor y se emiten como pequeñas partículas metálicas. Si se usa un filtro cerámico en el escape del motor éstas se mezclan dentro del filtro con las partículas diesel, reduciendo la energía de activación dramáticamente, al grado que la temperatura de ignición de las partículas puede bajar hasta 300°C (*Idem*). Esto no se ha desarrollado más, debido al riesgo de liberar compuestos metálicos a la atmósfera, lo que sería contraproducente en el intento de salvaguardar la calidad ambiental para efectos de la salud humana. No obstante, el ejemplo es útil para ilustrar cómo --incluso más allá de las razones evidentes, como presión de escape, composición de emisiones, etc.-- siempre se debe tener en cuenta la relación entre las características del combustible, el motor y los sistemas de post-tratamiento en caso de ser utilizados.

La nueva generación de motores diesel, así como el desarrollo de nuevos combustibles implicó una inversión multimillonaria y un amplio espacio de tiempo y tuvo como primer fruto importante el alcance de los límites legales establecidos en los EEUU para 1991 sin mayor problema. Las mejoras continuaron y hacia finales de 1994, la combinación de estas modificaciones y el uso de los complejos sistemas de control habían permitido reducir la emisión de material particulado hasta en una tercera parte de las emisiones características antes de la cruzada tecnológica. Esto se se puede apreciar en la siguiente tabla :

<b>Vehículo</b>	<b>MP mg/km</b>	<b>FOS mg/km</b>
c.a. 1980 con Inyección Indirecta	246	124
1983 1.6 l IDI	200-250	no disponible
1983 1.6 l IDI turbocargado	150-200	no disponible
1986 3 l IDI turbocargado	231	18.5
1987 1.6 l IDI 1200kg	122	27.5
1989 1.8 l IDI turbocargado 1360 kg	82	16

***Tabla 3.1. Identificación de las concentraciones de material particulado y fracción orgánica soluble presentes en las emisiones diesel de diferentes modelos de motor (MP=material particulado, FOS=fracción orgánica soluble, IDI=inyección indirecta).***

En suma, se puede decir que las modificaciones al motor y el mejoramiento en la calidad de los combustibles ha permitido una mayor eficiencia en el consumo de combustible y una impresionante reducción en los niveles de emisión de contaminantes en general. No obstante, los estándares de emisión para 1998 impuestos por la EPA no han podido alcanzarse y no parecen poder tenerse a tiempo mediante la simple manipulación de los factores involucrados, sobretodo contemplando la meta de bajar los niveles de todos los contaminantes generados. Esto es especialmente preocupante cuando se analiza la relación entre el material particulado

y los óxidos de nitrógeno. Se ha observado que a partir de cierto punto, una disminución en la generación de NOx va acompañada de un aumento en material particulado y vice-versa, con lo que se ha entrado en un aparente callejón sin salida en el ataque directo a la generación de partículas.

Además de esta dificultad sustancial, el costo de este acercamiento es sumamente alto y no permite participar al individuo si no se cuenta con un alto grado de especialización en la materia y se forma parte de los grandes centros de investigación de las grandes compañías fabricantes de motores diesel, o bien, se tiene acceso a los grupos encargados de diseñar y controlar la calidad del combustible. Afortunadamente, el segundo enfoque al problema permite la generación de ideas que pueden desarrollarse independientemente.

## **SISTEMAS DE POST-TRATAMIENTO**

Los sistemas de post-tratamiento constituyen un acercamiento más sencillo a la solución del problema, al no participar directamente en el diseño del motor o la elaboración del combustible, aunque deben adaptarse a las características de éstos, pues en muchos casos éstos definen las condiciones de operación (v.g. contrapresión, presencia de azufre, etc.).

### **Convertidor catalítico**

Además de las limitantes en material particulado, los motores a diesel también tienen que cumplir con normas relativas a NOx, CO e hidrocarburos liberados. Así, es fácil entender que el primer dispositivo de tratamiento de gases de escape en motores diesel haya sido --al igual que con el motor a gasolina-- el convertidor catalítico. En éste, la presencia de ciertos compuestos metálicos permite disminuir la energía de activación de las moléculas que participan en la combustión, con lo que se puede llevar a cabo la oxidación de especies intermedias de la combustión tales como CO y NOx, así como del combustible no quemado y de los hidrocarburos secundarios generados por pirólisis en la cámara de combustión (entre los que se encuentra la fracción orgánica soluble o SOF).

El proceso descrito de oxidación secundaria ocurre a temperaturas muy por debajo de las requeridas en condiciones no catalizadas (entre 250°C y 300°C). Estas temperaturas existen en los gases de escape del motor sin importar el régimen de trabajo del mismo, con lo que prácticamente se elimina la emisión de esas especies indeseables con el uso del convertidor catalítico. Desgraciadamente, aunque la presencia de catalizadores también baja notablemente la energía de activación de las partículas de hollín, la temperatura de los gases de escape no siempre alcanza el valor necesario para activar la combustión de las mismas. Esto es especialmente cierto para las condiciones de trabajo de los motores en las ciudades (trabajo en vacío o a bajas rpm del motor). Lo anterior significa que con el uso exclusivo del convertidor catalítico, el grueso de las partículas escapa libremente a la atmósfera y una parte de ellas se acumula en el interior del convertidor. El depósito paulatino de éstas sobre la superficie de metal precioso da lugar a la ulterior inutilización del mismo, que se acelera por la presencia de azufre en el combustible (asociado tanto a los núcleos carbonáceos, cuanto a las partículas líquidas y los compuestos en fase gaseosa), que al reaccionar con los metales catalíticos forma compuestos sulfurosos. Esto último no sólo anula temporalmente el efecto positivo del convertidor, sino que lo inutiliza irreversiblemente, por lo que es evidente que por sí mismo el convertidor catalítico es ineficaz para el control de las emisiones globales de los motores diesel, lo que acentuó la necesidad de encontrar una solución más completa al problema.

<b>CONDICIONES DE OPERACIÓN DEL MOTOR</b>	<b>TEMPERATURA DE LOS GASES DE ESCAPE</b>
Altas rpm o carga grande	350-750
Ciudad	150-300°C
Vacío	100-150°C

**Tabla 3.2. Temperaturas en el escape asociadas al régimen de trabajo de un motor diesel típico (Gilot).**

## **Filtros**

Una solución evidente al problema del material particulado es la utilización de filtros adecuados. La idea es atrapar con un filtro a las partículas para después removerlo (cambiarlo) o limpiarlo de alguna manera. Aunque el concepto es elemental, su uso origina complicaciones importantes. La primera y más evidente de éstas surge como consecuencia del taponamiento del filtro después de cierto tiempo de uso. Con el paulatino taponamiento hay un aumento importante en la eficiencia de recolección del filtro, pero esta aparente ventaja origina directamente una disminución en la eficiencia del motor. A cierto nivel de taponamiento, el aumento en la resistencia para el flujo de los gases de escape origina una contrapresión que ahoga paulatinamente el escape, disminuyendo de manera importante la economía de combustible y el desempeño del motor, al grado que puede llegar a ahogarlo.

El uso exclusivo de los filtros podría implicar mayor riesgo a la salud que el representado por el material particulado original ya que según ciertos autores, el hollín no regenerado que se queda en el filtro podría tener mayor efecto cancerígeno que el emitido normalmente por el motor al interactuar con los gases de escape para formar hidrocarburos poliaromáticos nitrados.

Existen diferentes tipos de filtros, cuyas diferencias principales radican en la forma y los materiales utilizados para su fabricación. Entre los principales tipos se pueden señalar filtros de fibras metálicas compactadas, elementos metálicos porosos y materiales cerámicos con diferentes formas (principalmente espumas, fibras y "panales"). Los problemas asociados con el uso de filtros, así como la eficiencia de filtrado dependen en gran medida del tipo de filtro empleado. Existen diferentes estudios que evalúan cada uno de los tipos según la eficiencia inicial y la estabilidad física. La opinión general señala a los filtros cerámicos con estructura de panal como la mejor opción, al presentar algunas de las eficiencias iniciales más altas y una buena estabilidad física, aún cuando existe el riesgo de resquebrajamiento o fusión por arriba de ciertas temperaturas. Este tipo de filtro se seleccionó para este sistema, por lo que en lo sucesivo se hará referencia al mismo.

Existen diferentes maneras de destapar los filtros. Ejemplo de éstas son la aplicación de corrientes de aire en sentido inverso al depósito de partículas con la posterior recolección de las mismas en una charola, y el lavado del filtro con solventes orgánicos. No obstante, en la mayoría

de los casos, la regeneración de los filtros consiste en la incineración del hollín, que se realiza por medios térmicos. Si el filtro es metálico, la energía necesaria para incinerar las partículas se puede aportar directamente por la aplicación de una diferencia de potencial al filtro o mediante una envolvente resistiva del mismo. Esto representa una obvia ventaja respecto a otros medios de regeneración al reducir las pérdidas caloríficas en las corrientes de aire; sin embargo, hasta el presente momento, la eficiencia de filtración de los elementos metálicos es considerablemente más baja en comparación con la de los elementos cerámicos. En éstos, la energía necesaria para incinerar las partículas la proporciona una corriente de aire caliente. La corriente de aire se induce en la misma dirección de filtración o en dirección contraria: regeneración directa e inversa, respectivamente, siendo esta última la utilizada para el sistema presentado. Esto se explica a detalle en el capítulo correspondiente a la regeneración. Los medios para elevar la temperatura del aire de regeneración pueden ser quemadores o resistencias. Una desventaja que presentan los quemadores respecto a las resistencias es que introducen una cantidad adicional de contaminantes a los gases de escape.

### **Otros**

Existen otras alternativas para el control de las partículas. En realidad las alternativas son las mismas que las existentes para el control de material particulado en la industria. Esto incluye cámaras de sedimentación, paso de los gases a través de cortinas de agua, ciclones, etc. Existen algunas publicaciones que proponen o reportan el uso de tales sistemas aplicados a automóviles o camiones a diesel. Algunos de éstos no eliminan directamente a las partículas (v.g. cortinas de agua), por lo que aún eliminando la emisión a la atmósfera, no acaban con el potencial cancerígeno de las partículas; los otros sistemas presentan dificultades por las dimensiones requeridas para su funcionamiento óptimo, la adaptación del sistema de combustión de las partículas recolectadas y la integración de los sistemas en sí al chasis de los vehículos. Aunque su uso no queda de ninguna manera descartado, no serán discutidos aquí, pues en el grado de desarrollo en que se encuentran no representan alternativas importantes a la utilización de sistemas convencionales que hacen uso de filtros.

En fin, la combinación de las modificaciones al motor, la mejor calidad de los combustibles, el uso de agentes catalíticos y el uso de filtros ha permitido reducir notablemente la cantidad de emisión particulada, como se puede ver en la siguiente tabla.

Vehículo	MP mg/km	FOS mg/km	FOS/MP, %
1986 3 l IDI turbocargado 1900 kg	31	3.4	12.5
1987 1.6 l IDI 1200 kg	26	12	46.5
1987 3 l IDI turbocargado	8.75	no disponible	no disponible
1992 2.5 l IDI*	120	12	10

\*sin filtro particulado

**Tabla 3.3. Identificación de las concentraciones de material particulado y fracción orgánica soluble de los gases de escape de diferentes modelos de motor, filtrados en presencia de catalizadores.**

Como se menciona párrafos arriba, el atrapar el material particulado en los filtros no acaba con el riesgo a la salud asociado con él. De acuerdo con esto es insuficiente el cambio regular de filtros, (lo cual no es práctica ni económicamente rentable), así como su regeneración por medios mecánicos o por lavado con solventes ; la regeneración ideal del filtro exige la eliminación real del material particulado, lo que hace casi obligatoria su combustión. Esto exige altas temperaturas (>700°C) que si bien ocurren naturalmente cuando el motor gira a gran velocidad o carga, no se alcanzan en condiciones de manejo dentro de la ciudad, o en vacío, como se puede ver en la tabla 3.2. Así, en estas condiciones --que son las asociadas con el contacto humano más cercano a las emisiones-- no ocurre la regeneración libre ni siquiera utilizando catalizadores (T>450°C). La mayoría de las situaciones prácticas hace necesario utilizar una fuente de energía para alcanzar la temperatura requerida para la incineración de las partículas. Esta fuente de energía debe utilizarse periódicamente para no afectar de manera importante la eficiencia del motor, lo que obliga a establecer mecanismos de control adecuados. La regeneración del filtro se discute más adelante en el capítulo V.



## **CAPÍTULO IV**

### **EL FILTRO CATALIZADO**

---

Los filtros cerámicos de cordierita permiten la recolección de partículas diesel con eficiencias de hasta 95% -- considerablemente por arriba de la eficiencia de recolección de otro tipo de filtros (*i.e.* fibras metálicas sinterizadas)-- y permiten fácilmente la introducción de termopares para monitorear la temperatura durante su regeneración, por lo que son una excelente alternativa como mecanismo de control del material particulado. Aun así, existen problemas asociados a su uso. Uno de estos es su relativa fragilidad, que puede significar resquebrajamiento debido a vibraciones. Otro más importante surge durante su regeneración. Al llevarse a cabo la combustión de las partículas, se generan altas temperaturas dentro del filtro, lo cual lleva a

gradientes térmicos importantes dentro del mismo. Además, los filtros comerciales de cordierita tienen un recubrimiento de Gamma alumina. Esta sustancia sufre cambios en su estructura cristalina a partir de 750°C. Entonces se transforma en Delta-alumina, luego en Teta-alúmina y finalmente en Alfa-alumina. Lo alarmante de esta transformación es que a 1100°C el área específica del alúmina decrece violentamente de 100 m<sup>2</sup>/g a 40 m<sup>2</sup>/g (Noirot), lo cual representa el virtual resquebrajamiento e inutilización del filtro. Esto representa un obstáculo primario a la regeneración directa del filtro, pues la temperatura "normal" de combustión de las partículas diesel está por arriba de 700°C, con lo que no es difícil alcanzar la temperatura crítica de 1100°C debido al calor liberado durante la combustión.

Una variación importante en los filtros cerámicos es la utilización de recubrimientos catalíticos. Estos permiten reducir la temperatura de combustión del material particulado hasta cerca de 450°C. En filtros de este tipo, las temperaturas involucradas permiten un mayor rango de seguridad para mantener la integridad del filtro durante su regeneración. La temperatura máxima alcanzada durante la regeneración depende de la calidad de la combustión, a su vez función de la masa inicial de material depositada en el filtro, su distribución, la concentración de oxígeno en la corriente de aire de regeneración, la aplicación de éste, etc.

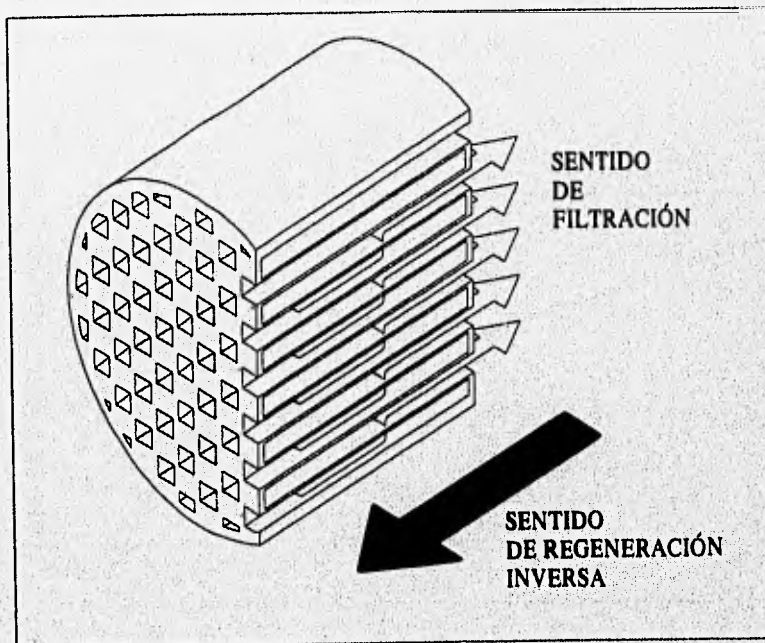
Para el sistema propuesto, se seleccionó un monolito cerámico marca Corning® tipo EX-80. El elemento cerámico cuenta con un baño catalítico propiedad industrial de Degussa®. Las características principales de estos monolitos son las siguientes :

<b>Características del elemento Corning® tipo EX-80</b>	
Tamaño medio del poro (µm)	13
Eficiencia inicial (%)	87
Eficiencia final (filtro cargado) (%)	92
Caída de presión (cmHg/g de hollín filtrado)	0.1
Porosidad (%)	48
Coefficiente de expansión térmica (x10 <sup>-7</sup> cm/cm/°C (25-800°C))	4.0

<b>Características del filtro Degussa®</b>	
Tipo	DF 345
Metal precioso (g/unidad)	23
Disposición física (celdas/cm <sup>2</sup> )	15.5
Pared cerámica (mm)	0.4
Diámetro exterior (m)	0.286
Longitud (m)	0.203

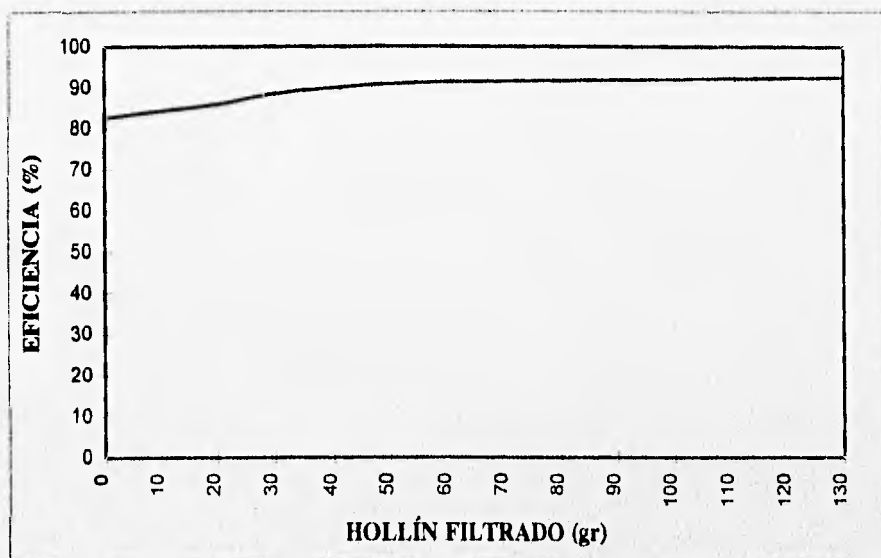
**Tabla 4.1. Características del elemento filtrante seleccionado.**

La figura 4.1 muestra un esquema del filtro, con la disposición de los ductos, así como el sentido de filtración y el sentido de regeneración inversa utilizado.

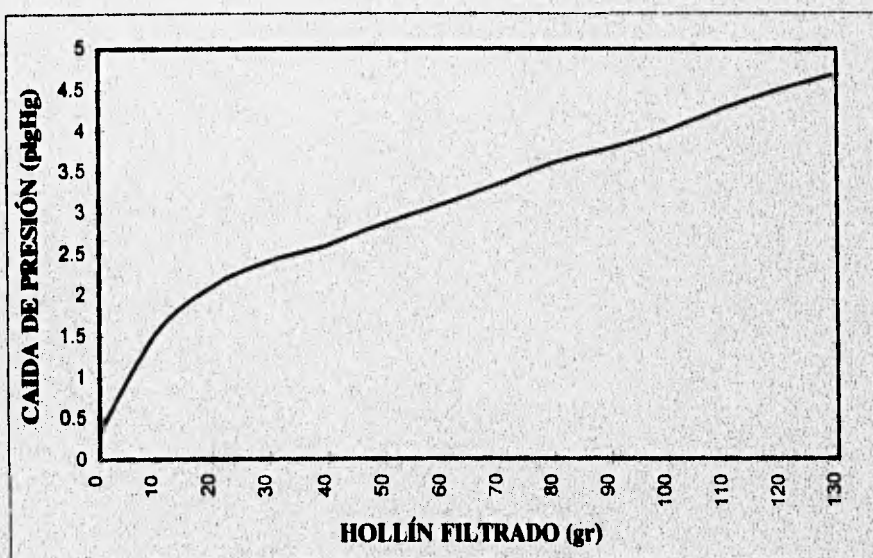


**Figura 4.1. Esquema del filtro cerámico utilizado. Sentido de filtración y regeneración inversa.**

Las figuras 4.2 y 4.3 muestran las gráficas de comportamiento del material cerámico para la caída de presión y la eficiencia de filtración en función de los gramos de hollín filtrados por el elemento.



**Figura 4.2. Eficiencia de filtración en función de los gramos de hollín filtrado para los elementos filtrantes.**



**Figura 4.3 Caída de presión en el filtro en función de los gramos de hollín filtrados.**

El elemento EX-80 de Corning® proporciona una excelente resistencia a la fatiga térmica debida a gradientes importantes de temperatura producidos durante su regeneración. Pruebas preliminares en elementos semejantes reportan una durabilidad del filtro de 300,000 millas cuando los gradientes térmicos involucrados no superan los  $\pm 35$  °C/cm (MacDonald). Esto se consigue disminuyendo el coeficiente de expansión térmica del material, manteniendo su resistencia mecánica y módulo de elasticidad. Pruebas de laboratorio realizadas por el fabricante mostraron que los esfuerzos térmicos provocados durante la regeneración, incluso cuando ésta no se controla, se encuentran por debajo del límite del 66 % de la resistencia del material.

La función del baño catalítico es disminuir la energía de activación de las partículas de hollín. Al disminuir la energía de activación, disminuye también la temperatura de ignición de las partículas de  $T \approx 700$  °C a  $T \approx 450$  °C, con lo que se facilita el proceso de regeneración de los filtros al manejar flujos de aire de menor temperatura.

## **CAPÍTULO V**

### **REGENERACIÓN DE LOS FILTROS**

---

#### **REGENERACIÓN DIRECTA**

La idea de regenerar el filtro mediante la introducción de una corriente de aire caliente no es nueva. Existen numerosos estudios al respecto. En éstos se considera un flujo de aire de regeneración que atraviesa el filtro en el mismo sentido que los gases de escape. Este flujo se calienta con resistencias eléctricas o por la combustión de pequeñas cantidades de combustible que son inyectadas oportunamente. El esquema general de este tipo de sistema de regeneración se aprecia en la siguiente figura:

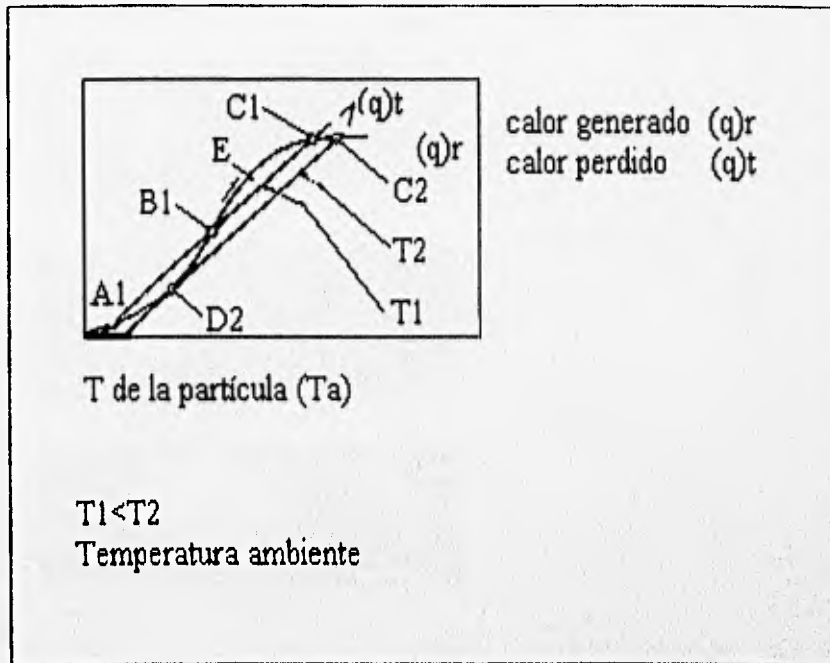


**Figura 5.1. Esquema de regeneración normal.**

La regeneración mediante este sistema puede considerarse compuesta por cuatro etapas: precalentamiento, ignición, combustión lenta y enfriamiento del filtro. El tiempo de regeneración, así como la temperatura máxima alcanzada depende de la carga inicial del filtro, área total de filtración y espesor de la pared de los canales del filtro (Pauli).

Existen diferentes estudios experimentales en torno a este esquema de regeneración. De acuerdo con los datos obtenidos, a partir de cierta temperatura que podemos identificar como "crítica" ocurre la ignición repentina del hollín en cierto punto del filtro. La ignición del material particulado depende esencialmente de la relación entre calor de combustión liberado y las pérdidas de calor para una temperatura ambiente determinada. Si se tienen pérdidas de calor mayores a la generación de calor, habrá un descenso en la temperatura del material particulado. Al manejar mayores temperaturas ambiente, el calor generado supera las pérdidas, con lo que hay un aumento en la temperatura de las partículas hasta el punto en el cual comienza la combustión violenta caracterizada por un aumento rápido de la temperatura hasta un punto de inflexión a partir del cual decrece la velocidad con la que aumenta la temperatura del material particulado. Ésta sigue un patrón asintótico a partir de una cierta temperatura  $C_2$  que caracteriza

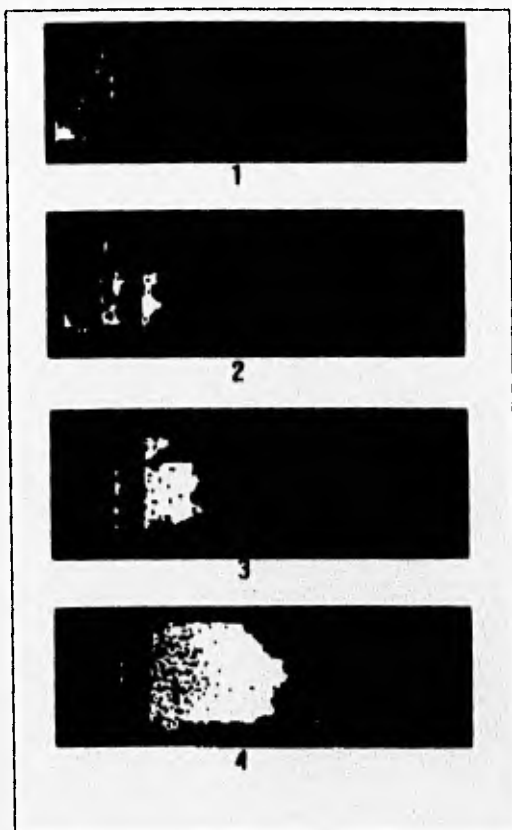
la combustión sostenida. Lo anterior se puede observar en la siguiente figura, donde se observan --para temperaturas ambiente distintas  $T_1$  y  $T_2$ -- las pérdidas relacionadas (consideradas lineales) y el calor generado.



**Figura 5.2. Relación de las características de combustión de material sólido.**

Así, a partir de cierto punto, la combustión se propaga debido al calor liberado en ella a lo largo del filtro haciendo innecesaria la continuación del flujo de aire caliente u otra fuente externa de energía. En otras palabras, la regeneración a partir de este punto se vuelve autosostenida mientras se mantenga un nivel mínimo de oxígeno. La velocidad de propagación de la combustión dentro del filtro consiste esencialmente en la propagación del frente de flama. Este fenómeno se puede observar en las fotografías que aparecen en la publicación de Takama y que reproducimos a continuación:





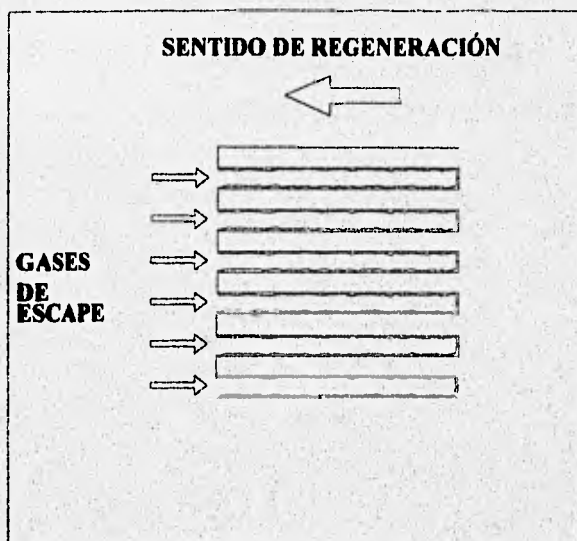
***Figura 5.3. Fotografía de la regeneración de un filtro cerámico: 1) filtro tapado antes de calentar; 2) ignición del filtro durante la etapa de calentamiento; 3) combustión espontánea de las partículas; 4) propagación espontánea de la combustión a lo largo del filtro.***

Los resultados obtenidos experimentalmente demuestran una regeneración incompleta del filtro y señalan una concentración mínima de 5% de oxígeno en el flujo de aire regenerante. Por otra parte, la propagación sostenida exige una concentración mínima de carga particulada. Esta no debe superar cierto valor, pues pondría en peligro la integridad del filtro debido a las temperaturas alcanzadas durante su combustión. La determinación del rango aceptable de carga de partículas para garantizar la regeneración completa del filtro es uno de los problemas más complejos en lo que se refiere al sistema de control. En un estudio particular, en el que se hace un by-pass de los gases de escape durante la regeneración del filtro se habla de un mínimo de 1.5 g/100 g de filtro

cerámico y una cota máxima de 2g/100 g de filtro cerámico (Takama). Estas concentraciones evitan valores elevados en la contrapresión ejercida en los gases de escape debido a la resistencia al flujo de los gases involucrada en el taponamiento paulatino del filtro.

## REGENERACIÓN INVERSA

El sistema de regeneración que nosotros proponemos podría resultar en una regeneración completa del filtro y un menor tiempo de regeneración que el sistema tradicional. En realidad se trata del mismo esquema anterior, en el que una corriente de aire caliente se hace pasar a través del filtro, aportando inicialmente a las partículas de hollín la energía necesaria para iniciar su combustión, que se sostiene y propaga gracias a la concentración de oxígeno en la corriente (suponiendo una concentración suficiente y una distribución adecuada de material particulado a lo largo del filtro, una vez comenzada la combustión, la temperatura del aire de regeneración ya no es determinante para completar la regeneración del filtro, siendo la fuente primaria de energía el calor liberado por las partículas en combustión). La diferencia esencial del esquema radica en que la corriente de aire se hace pasar en sentido inverso a la salida de los gases de escape del motor, como se puede observar en el siguiente esquema.



**Figura 5.4.** Esquema de regeneración inversa.

Las principales ventajas al inyectar la corriente de aire en sentido inverso son una mayor eficiencia en la captura del material particulado y disipación de calor del material cerámico. Así, mientras en un esquema con flujo regenerante directo las partículas de hollín que han reducido su diámetro podrían escapar antes de consumirse, ayudadas por la presión acrecentada en el escape, en el esquema de regeneración inversa, la corriente de aire evita esto, pues se opone a la salida de las partículas. El límite de esta oposición es el arrastre de las partículas disminuidas al filtro paralelo, donde deben quedar atrapadas en lugar de escapar a la atmósfera en caso de que no se quemem durante su arrastre por el gas caliente, cosa que es de esperar si se tiene la concentración mínima de oxígeno presente en el flujo. Por otra parte, el aire regenerante se lleva gran parte de la energía liberada en la combustión, evitando la concentración de energía en el material cerámico, como sucede en el esquema de regeneración directa.

Una diferencia sustancial con el sistema de regeneración directa es que suponiendo que no se alcance la regeneración completa del filtro en un ciclo (como sucede en el esquema de regeneración directa), la inyección inicial de la corriente de aire en sentido inverso tiende a destapar el filtro, favoreciendo más su limpieza total.

Entre las desventajas potenciales está la posibilidad de que si la presión del aire regenerante es muy grande, se arrastre el grueso de las partículas (que podrían llegar a no encenderse) al filtro paralelo y crezca la contrapresión en el escape del motor, con los inconvenientes antes mencionados. También existe la posibilidad de que algunas partículas minúsculas sean arrastradas y sean forzadas a través del filtro paralelo por efecto del mismo flujo, escapando a la atmósfera.

## **CAPÍTULO VI**

### **DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA**

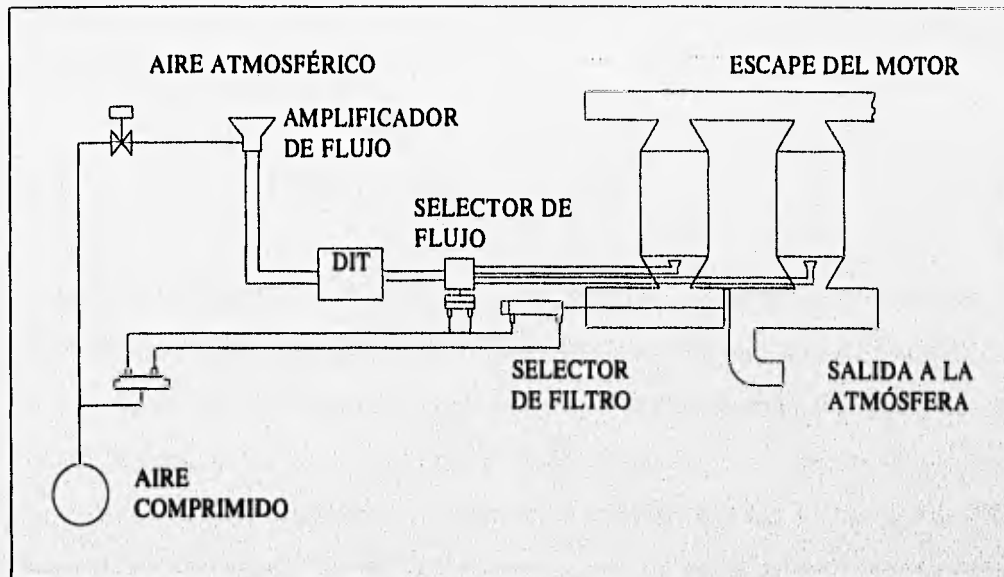
---

#### **INTRODUCCIÓN**

El sistema presentado tiene como finalidad llevar a cabo la filtración mecánica de las partículas de hollín presentes en los gases de escape de un motor diesel en todo momento, así como realizar la regeneración (limpieza) de los filtros de forma continua y automática. A lo largo de este capítulo se hace una descripción, tanto de los elementos que forman parte del sistema desarrollado, como del funcionamiento general del mismo.

## ELEMENTOS DEL SISTEMA

La figura 6.1 muestra un esquema general del sistema propuesto, con todos los elementos que lo forman.



**Figura 6.1. Esquema del sistema.**

El sistema consta de los siguientes elementos :

- Filtros cerámicos catalizados
- Dispositivo de inercia térmica (DIT)
- Válvulas selectoras
- Actuadores neumáticos
- Amplificador de flujo
- Electroválvula
- Cauce, tubería y ductos
- Sistema electrónico de control

### **Filtros cerámicos catalizados**

Se utilizaron dos filtros cerámicos catalizados donados por Degussa® cuyas características se especifican en el capítulo del filtro catalizado. Los filtros están colocados en paralelo, de manera que mientras uno de los filtros está regenerándose, los gases de escape pasan a través del otro elemento y el filtrado de partículas nunca se interrumpe. Esta configuración se puede apreciar en el esquema general del sistema.

### **Dispositivo de Inercia Térmica (DIT)**

La función del dispositivo de inercia térmica es calentar la corriente de aire inducida a través de él, utilizada posteriormente para realizar la regeneración de las partículas en el interior del filtro.

El DIT utiliza tres resistencias eléctricas asociadas a una envolvente metálica y a una superficie extendida formada por una serie de placas de acero inoxidable. El aire de regeneración pasa a través de la superficie extendida, para elevar su temperatura hasta los niveles necesarios para llevar a cabo la regeneración. El DIT cuenta además con una envolvente aislante que reduce al máximo las pérdidas de calor al ambiente.

Cada una de las resistencias cuenta con termopares de control. Los termopares se encuentran conectados al control electrónico del sistema, de forma tal que el sistema corta el suministro de energía a la resistencias cuando la temperatura de alguna de las resistencias alcanza los niveles máximos admisibles, e induce el flujo de aire de regeneración cuando el DIT alcanza su temperatura óptima de operación.

En el capítulo correspondiente al dispositivo de inercia térmica se hace una descripción completa de la construcción y funcionamiento del DIT.

## **Válvulas Selectoras**

El sistema cuenta con dos válvulas selectoras para su funcionamiento. Las válvulas pueden apreciarse en la figura 6.1, a la salida de los filtros y a la salida del dispositivo de inercia térmica. Ambas válvulas realizan su función a través de actuadores neumáticos.

La válvula ubicada a la salida de los filtros tiene como función desviar el flujo de gases de escape hacia uno u otro de los filtros durante el funcionamiento del sistema. La válvula está formada por un disco y un vástago que se desplazan entre dos posiciones ubicadas a uno y otro lado del ducto de escape de acuerdo a las necesidades del sistema.

La válvula ubicada a la salida del DIT tiene como función dirigir el flujo de aire de regeneración hacia uno u otro de los filtros dependiendo de las necesidades de regeneración de los mismos. Esta válvula está formada por dos válvulas de mariposa colocadas perpendicularmente, de forma tal que una de ellas permanece cerrada mientras la otra permanece abierta. Las válvulas cuentan con un eje acoplado a un mecanismo especial que realiza su función a través de un cilindro neumático.

## **Actuadores Neumáticos**

El sistema de regeneración de filtros requiere del uso de dos actuadores o cilindros neumáticos para su funcionamiento. Uno de ellos, acciona la válvula que dirige el flujo de gases de escape del motor hacia uno u otro de los filtros catalizados. El otro actuador controla la válvula que dirige el flujo de aire de regeneración hacia uno u otro de los filtros catalizados.

El cilindro neumático para los gases de escape es un cilindro de doble efecto de 125 mm de carrera. El actuador utilizado para el flujo de aire de regeneración es un cilindro de doble efecto de carrera corta (10 mm). En un trabajo previo, los actuadores fueron seleccionados de acuerdo a la carrera y a los diagramas de presión-fuerza, pandeo y consumo de aire proporcionados por el fabricante. Los cilindros utilizados son fabricados por la compañía SMC Corporation S.A. de C.V. En ambos casos, la fuerza necesaria para que los actuadores lleven a cabo su función es mínima, dado que las presiones del aire que actúan sobre las válvulas son pequeñas y en ambos

casos favorecen el movimiento de las mismas. La fuerza necesaria que ejercen los cilindros para vencer la fricción generada entre los diversos elementos es mínima.

Los dos actuadores neumáticos cuentan además con elementos magnéticos para final de carrera, que permiten asegurar la posición exacta de las válvulas acopladas a dichos actuadores.

### **Amplificador de flujo**

El sistema cuenta con un amplificador de flujo, cuya función es inducir el flujo de aire de regeneración a través del dispositivo de inercia térmica. El dispositivo seleccionado para esta aplicación es un amplificador de flujo tipo Transvector modelo 952 de la marca Vortec®. Este dispositivo tiene una capacidad de hasta 5 m<sup>3</sup>/min, bajo las condiciones a las que se espera operar. El dispositivo funciona por medio de aire comprimido y se encuentra controlado neumáticamente mediante una de las electroválvulas del sistema, a su vez accionada por el sistema electrónico de control.

### **Electroválvulas**

El sistema neumático usa dos electroválvulas para el control de los elementos utilizados. Una de las electroválvulas controla el accionamiento de los actuadores o cilindros neumáticos. La otra electroválvula se utiliza para el control del amplificador de flujo.

Para el control de los actuadores neumáticos se utiliza una electroválvula 5/2 vías, dado que se utilizan cilindros de doble efecto. La razón de utilizar una sola válvula es que ambos cilindros neumáticos actúan de forma simultánea, y pueden controlarse con el mismo dispositivo. Para el control del amplificador de flujo se utiliza una electroválvula 2/2 vías, dado que el funcionamiento del amplificador puede compararse al de un cilindro de simple efecto.

Ninguna de las válvulas fue adquirida, pero pueden utilizarse válvulas de la misma marca que los cilindros neumáticos, o de cualquier otra marca de productos neumáticos.



## **Circuitería, tubería y ductos**

Dentro del sistema de filtración y regeneración de partículas pueden distinguirse básicamente tres circuitos o sistemas, con características propias en cuanto al tipo de gases que manejan y a los ductos y tuberías que utilizan. Estos tres circuitos son : el de aire comprimido que alimenta los elementos neumáticos ; el de aire de regeneración para los filtros ; y el de gases de escape del motor. Todos los elementos mencionados hasta el momento forman parte de al menos uno de los tres sistemas de aire y gases mencionados.

El circuito de aire comprimido está formado por todas las mangueras que alimentan a las electroválvulas y otros elementos neumáticos. La alimentación de las electroválvulas en el sistema instalado se realizará a través del compresor del motor si esto no afecta el suministro de aire hacia el sistema de frenos del camión ; en este caso, se instalará un compresor adicional de aire de pequeña capacidad. La alimentación de las electroválvulas y del amplificador de flujo se realiza a través de manguera plástica reforzada de ½" de diámetro. La presión de operación en este caso es aproximadamente de 6 bares. La alimentación de los actuadores neumáticos se realiza a través de manguera plástica de ¼" de diámetro estandarizada para los actuadores utilizados.

El sistema de aire de regeneración incluye todos los ductos que van del amplificador de flujo al dispositivo de inercia térmica, y de éste a los filtros. En todos los casos, el sistema utiliza tubería de acero inoxidable de 1" de diámetro y ¼" de espesor. La razón de utilizar acero inoxidable en este caso es disminuir al máximo la corrosión del material debida a las altas temperaturas a las que circula el aire de regeneración.

Por último, el sistema de gases de escape incluye los ductos provenientes del escape del motor y que llegan a los filtros catalizados, y los ductos que van de los filtros a la atmósfera. En este caso, se utiliza tubería de acero de 4" de diámetro.

## **FUNCIONAMIENTO DEL SISTEMA**

El sistema funciona en forma cíclica para cada uno de los dos filtros de la siguiente manera. En un primer instante, los gases de escape provenientes del motor Diesel son obligados a pasar a través de uno de los filtros, de acuerdo a la posición de la válvula selectora ubicada a la salida de los mismos. Durante este período, este elemento realiza la filtración de las partículas, mientras el otro permanece en espera. Cuando la caída de presión debida a la acumulación de partículas en filtro alcanza los niveles máximos predeterminados, el sistema de control recibe una señal y envía el orden de desplazar la válvula selectora, con lo que el flujo de gases de escape es desviado hacia el otro filtro. La caída de presión máxima para evitar el ahogamiento de un motor como el utilizado está alrededor de 10 kPa (MacDonald).

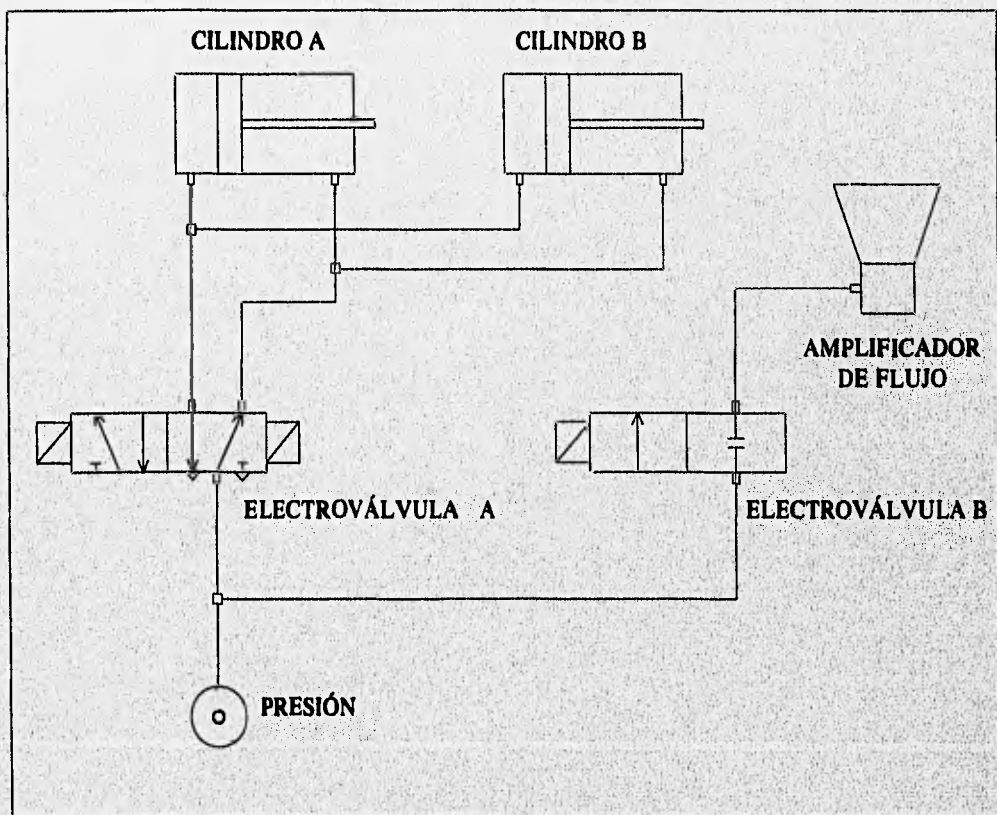
Al mismo tiempo, el cilindro neumático ubicado a la salida del DIT recibe una señal, desplazando la válvula y abriendo el ducto hacia el filtro cargado. Durante todo este tiempo, el DIT ha almacenado energía, y cuando la temperatura en el interior de éste alcanza su máximo valor, el sistema envía la señal al amplificador de flujo. El amplificador induce un flujo de aire a través del DIT; el aire eleva su temperatura y entra al filtro cargado para iniciar el proceso de regeneración. El flujo de aire se induce durante un tiempo determinado necesario para completar la regeneración del filtro, posterior al cual el filtro queda en espera y listo para volver a filtrar las partículas de hollín.

Cuando la caída de presión en el filtro que se encuentra trabajando alcanza los valores máximos permisibles, la válvula selectora ubicada a la salida de los mismos regresa a su posición inicial, repitiéndose el proceso descrito anteriormente.

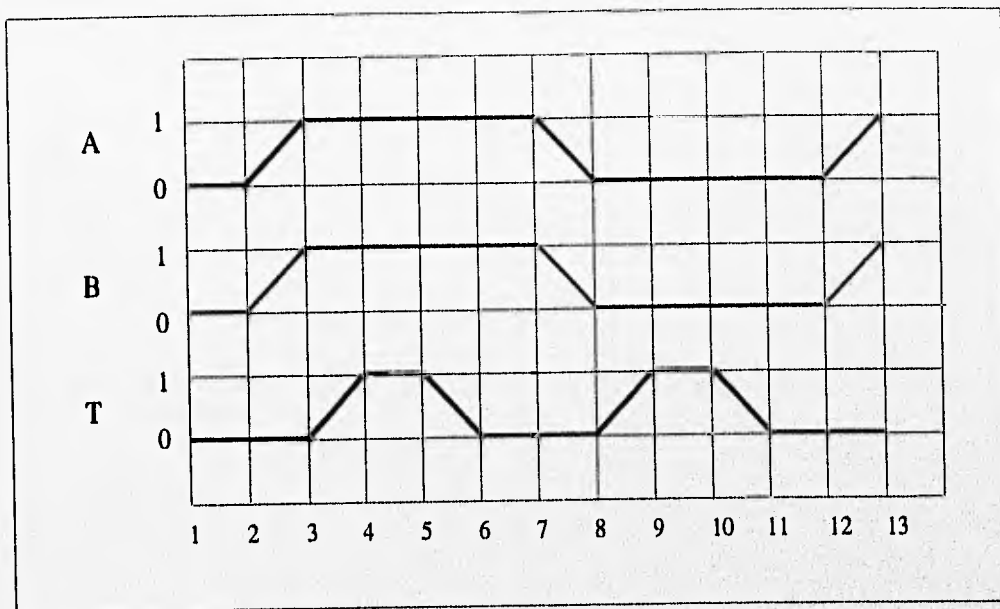
Tanto los actuadores neumáticos como el amplificador de flujo se encuentran controlados por dos electroválvulas, según fue mencionado, y deben funcionar de forma coordinada. Las figuras 6.2 y 6.3 muestran los diagramas de instalación y de fases de los elementos neumáticos del sistema.

El diagrama de instalación muestra todas las conexiones hechas entre los elementos neumáticos del sistema, es decir, desde la línea de presión proveniente del compresor, hasta las electroválvulas, los actuadores neumáticos y el amplificador de flujo. El diagrama de fases muestra, por otro lado, los períodos durante los cuales actúan cada uno de los tres elementos neumáticos controlados por las electroválvulas. Para el caso de los actuadores A y B, las

posiciones 1 y 0 del diagrama representan cualquiera de las dos posiciones que puede adoptar cada uno de los cilindros. En el caso del amplificador de flujo T, la posición 0 indica la condición en la que permanece desactivado, es decir, cuando no existe flujo de aire a través de él; por otro lado, la posición 1 representa la condición en la que se induce el flujo de aire de regeneración. El diagrama de fases no muestra, sin embargo, el tiempo real de permanencia de los elementos en cada una de sus posiciones. Un diagrama de tiempo, en este caso, sería básicamente el mismo diagrama de fases, pero mostrando tanto la permanencia de los elementos en sus posiciones, como el velocidad de aplicación de los actuadores; sin embargo, la velocidad de actuación de los elementos es irrelevante para esta aplicación, y la permanencia de los elementos en sus posiciones varía de un periodo a otro, dependiendo de las condiciones de operación del motor. Por esta razón, la realización de un diagrama de tiempos sería irrelevante y básicamente imposible de realizar.



**Figura 6.2. Diagrama neumático de instalación**



**Figura 6.3. Diagrama neumático de fases**

## **CAPÍTULO VII**

### **EL DISPOSITIVO DE INERCIA TÉRMICA (DIT)**

---

La regeneración del hollín capturado en los filtros cerámicos, ya sean catalizados o no, requiere en la mayoría de los casos, del uso de una corriente de aire con temperatura suficiente para calentar las partículas hasta su punto de ignición y con una concentración mínima de oxígeno para permitir la reacción de combustión. Para estos fines se diseñó y modeló --previo a la realización de este trabajo-- un Dispositivo de Inercia Térmica (DIT).

El DIT almacena energía en forma de calor hasta el momento en el que alguno de los filtros necesita regeneración; en dicho momento el sistema de control recibe una señal y se induce un flujo de aire mediante el amplificador de flujo a través del DIT. La energía almacenada en el DIT

se transfiere a la corriente de aire y ésta es enviada al filtro que la necesite para iniciar el proceso de regeneración.

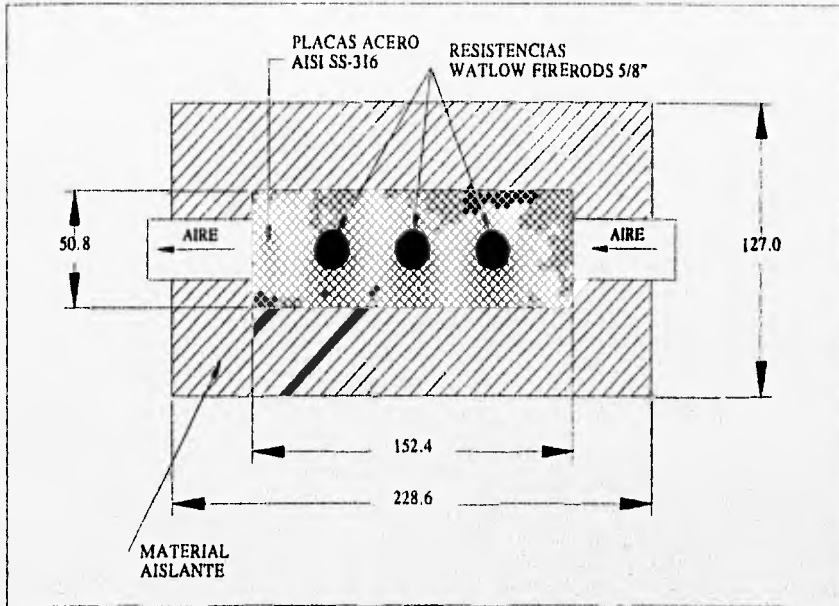
## CONSTRUCCIÓN

El dispositivo de inercia térmica consta de los siguiente elementos :

- Elementos calentadores
- Superficie extendida
- Material aislante
- Termopares de control

Los elementos calentadores utilizados para el DIT están formados por tres resistencias eléctricas tipo Firerods®, fabricadas por la empresa Watlow Electrical Engineering Corp., con capacidad de 600 W cada una. Las resistencias utilizadas pueden ser de cualquier otro tipo similar de fabricación nacional o importada. Con las tres resistencias, el DIT tiene una capacidad total de 1.8 kW, energizado con 24 V de CD, disponibles en un autobús de pasajeros o en un camión de carga de servicio pesado. Durante la etapa experimental, las resistencias se alimentan mediante líneas de potencia provenientes de un conjunto motor-generador instalado para este propósito. Al ser instalado en un camión de servicio pesado, la alimentación se obtiene del propio alternador del camión. En cualquiera de los casos, la alimentación de las resistencias se controla mediante un circuito de potencia controlado a su vez, por el microcontrolador del sistema.

Las resistencias utilizadas se encuentran encapsuladas en un cartucho de acero inoxidable que sirve de base a una superficie extendida (o aletas) para maximizar la transferencia de calor hacia el flujo de aire de regeneración. La superficie extendida está formada por 96 placas de acero inoxidable AISI SS-316 de 1.6 mm de espesor. Cada una de la placas mide 152.4 x 50.8 mm, y consta de tres perforaciones de 15.875 mm de diámetro por donde entran las resistencias eléctricas. La figura 7.1 muestra una vista lateral del dispositivo de inercia térmica en su interior.



**Figura 7.1. Vista lateral del DIT. Resistencias, placas y material aislante**

El conjunto de las tres resistencias con su superficie extendida, se coloca en el interior de una envoltura metálica de acero inoxidable. La envoltura cuenta en su exterior con una capa de material aislante de alta temperatura, con el fin de minimizar las pérdidas de calor hacia el exterior, puesto que el DIT debe alcanzar temperaturas de 1273 K en ciclos alternativos de calentamiento-enfriamiento.

Cada una de las resistencias Firerod® cuenta con dos termopares de control. Los termopares se encuentran conectados al circuito de control del sistema, de tal forma que, permiten evaluar la temperatura de las resistencias en todo momento durante la fase experimental, y permiten al circuito cortar la alimentación de la resistencias cuando éstas han alcanzado su temperatura óptima.

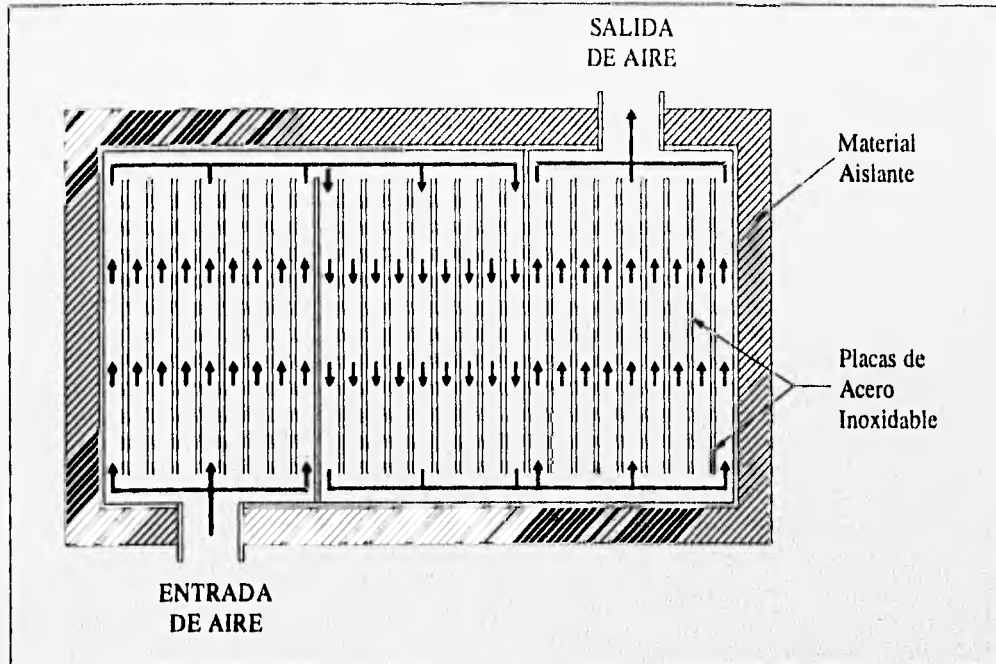
## **FUNCIONAMIENTO**

El dispositivo diseñado funciona en períodos cíclicos consistentes en :

1. Período de almacenamiento de energía térmica, durante el cual se produce el calentamiento de los elementos calentadores y de su superficie extendida. Durante esta parte del proceso, la superficie extendida puede alcanzar hasta 1000 °C , sin embargo, los elementos calentadores no deben exceder los 950°C debido a especificaciones del fabricante. Durante esta etapa, el sistema de control corta la alimentación de las resistencias cuando la señal enviada por los termopares indica que la temperatura en alguna de las resistencias ha alcanzado el valor mencionado.
2. Durante el período de calentamiento mencionado, no existe flujo de aire a través del dispositivo. El flujo de aire hacia el DIT proveniente del amplificador de flujo se induce únicamente cuando recibe la señal proveniente del control electrónico del sistema.
3. Una vez que se alcanza la temperatura óptima del DIT y alguno de los filtros necesita de limpieza, el suministro de aire se induce mediante el control electrónico, a fin de que el aire obtenga la temperatura necesaria para llevar a cabo el proceso de regeneración.

El aire inyectado al interior del DIT es obligado a recorrer tres veces la superficie extendida de las resistencias a fin de maximizar la transferencia de calor de las placas hacia el aire de regeneración. El recorrido del aire se consigue mediante la disposición especial que tienen las placas en el interior del DIT. La figura 7.2 muestra un esquema del recorrido del aire en el interior del dispositivo y de la disposición de las placas de acero que forman la superficie extendida.





**Figura 7.2.** Esquema del recorrido del aire y disposición de las placas en el interior del DIT.

### MODELADO DE LA OPERACIÓN DEL DIT

Un simple análisis de conservación de energía en algunas de las placas representativas conduce a la siguiente ecuación diferencial parcial ordinaria de segundo orden :

$$k A_k \nabla^2 T + h A_c (T - T_\infty) + \rho C V \frac{\partial T}{\partial t} = Q$$

donde :

- $k$  Coeficiente de conductividad térmica (W/mK)
- $A_k$  Área de conducción de calor ( $m^2$ )
- $\nabla^2 T$  Laplaceano de la distribución de temperatura en el sólido ( $K/m^2$ )
- $h$  Coeficiente de transferencia de calor por convección ( $W/m^2K$ )
- $A_c$  Área convectiva de transferencia de calor ( $m^2$ )
- $T - T_\infty$  Diferencia de temperatura entre el DIT y el aire (estacionario o regenerante)
- $\rho$  Densidad del acero inoxidable en el DIT ( $kg/m^3$ )

- C Calor específico de la masa metálica (kJ/kgK)
- V Volumen de la masa metálica (m<sup>3</sup>)
- $\partial T/\partial t$  Variación de la temperatura del DIT (proporcional a la energía interna) (K/s)
- Q Potencia eléctrica suministrada (W)

La ecuación anterior no tiene una solución analítica cerrada (Öçizik) razón por la cual debe intentarse una solución numérica aproximada.

Con el fin de facilitar el modelado matemático, se consideraron ciertas simplificaciones, que son válidas para los intervalos pre-especificados de variación de temperatura. Además para poder intentar una solución sencilla de la misma, primero se debe verificar que la resistencia interna pueda considerarse como despreciable; para ello, debe cumplirse que :

$$Bi = \frac{\text{Resistencia interna a la conducción de calor}}{\text{Resistencia térmica exterior}} \ll 0.1$$

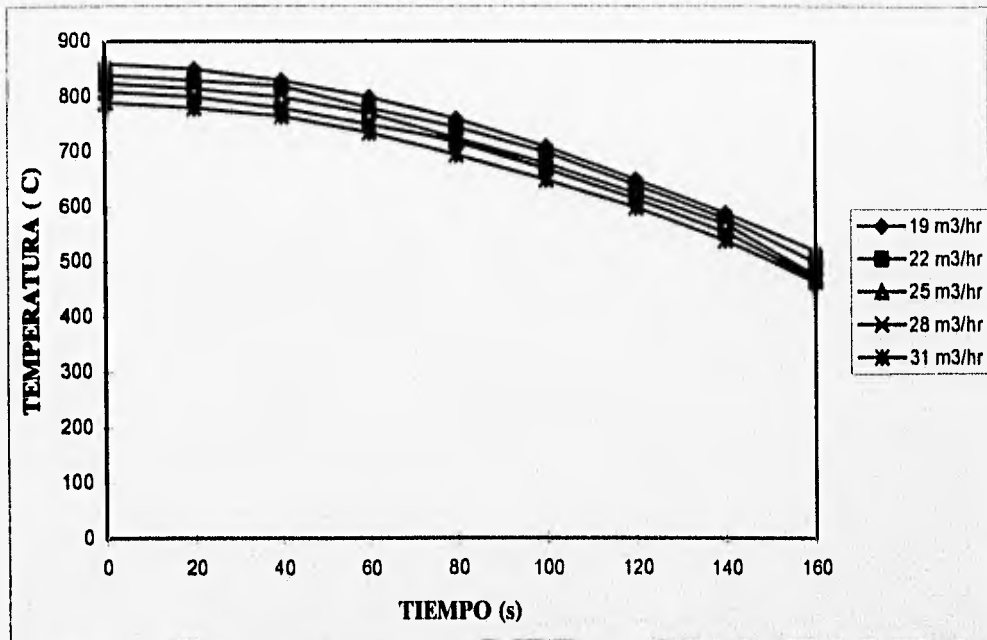
donde Bi es el número de Biot.

Es fácil verificar que el acero inoxidable AISI SS-316 cumple con la condición expresada en la ecuación anterior, por lo tanto, rigen las siguientes simplificaciones :

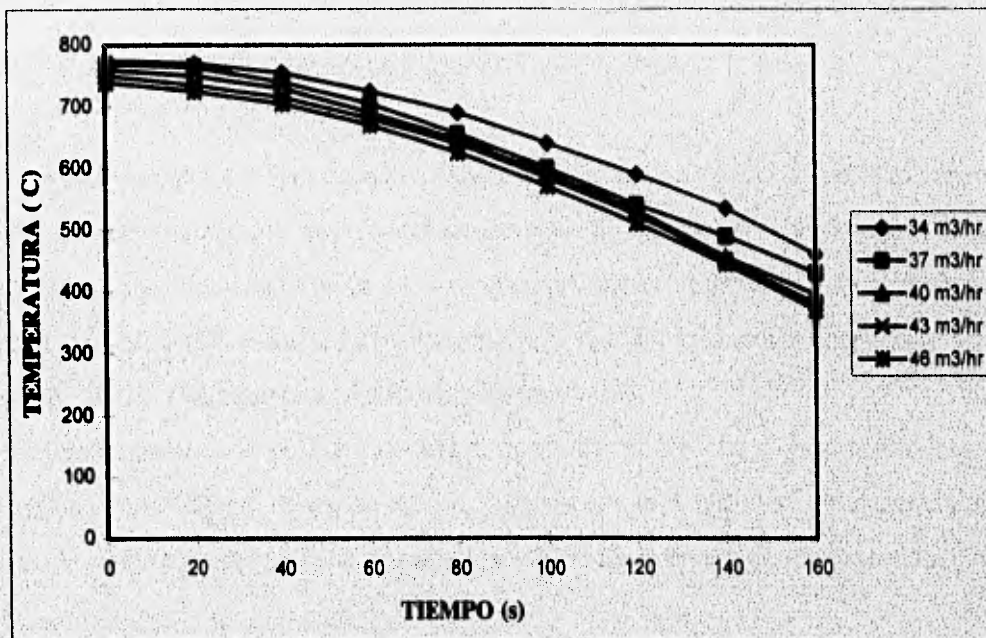
1. Propiedades constantes de los materiales
2. Se desprecian efectos de radiación. La simplificación es válida a pesar de que el DIT alcanzará temperaturas del orden de 1273 K, puesto que éste será la parte interior de una envolvente metálica aislada.
3. Durante el período de calentamiento el coeficiente de transferencia de calor por convección es despreciable, debido a cantidades muy pequeñas de aire estacionario contenidas en la cavidad.
4. Cuando se induce el flujo de aire a través del DIT, la transferencia de calor por convección es el modo dominante.

Una vez hechas las simplificaciones anteriores, se procede con los siguientes pasos para evaluar el comportamiento del DIT :

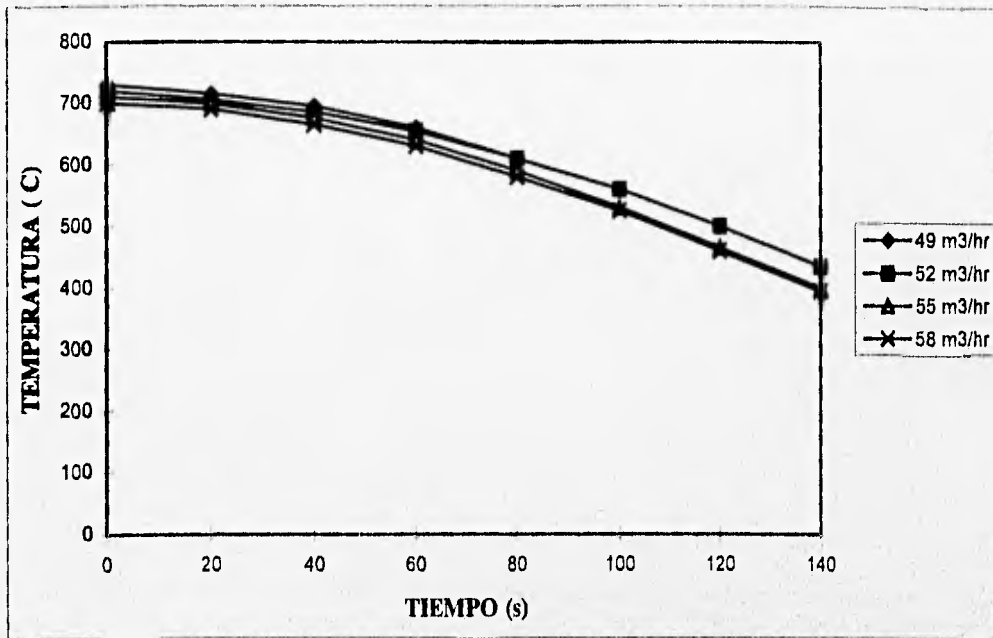
1. Se obtiene una solución numérica aproximada de la ecuación mostrada.
2. Con la solución anterior, se determina el tiempo necesario para que el DIT alcance su temperatura de operación con aire estacionario.
3. Con los resultados de los puntos 1 y 2, se genera una tabla de comportamiento de temperatura de aire de regeneración (a la salida del DIT) y se calcula el tiempo necesario en que la temperatura de salida del aire se mantiene por encima de los 450°C, valor mínimo de la temperatura del aire para alcanzar regeneración en los filtros con baño catalítico.
4. El cálculo anterior se lleva a cabo para distintos flujos de aire, empezando con 19 m<sup>3</sup>/h, con incrementos de 3 m<sup>3</sup>/h, hasta llegar a 58 m<sup>3</sup>/h. Esto se realiza con el objeto de predecir el comportamiento real del dispositivo, sujeto por supuesto aún a verificación experimental.
5. Para cada caso se gráfica la distribución de temperatura del aire de salida del DIT contra el tiempo. Los resultados se muestran en las figuras 7.3, 7.4 y 7.5 mostradas a continuación.



**Figura 7.3. Temperatura estimada del aire a la salida del DIT para flujos de 19,22,25,28 y 31 m³/hr**



**Figura 7.4. Temperatura estimada del aire a la salida del DIT para flujos de 34,37,40,43 y 46 m³/hr**

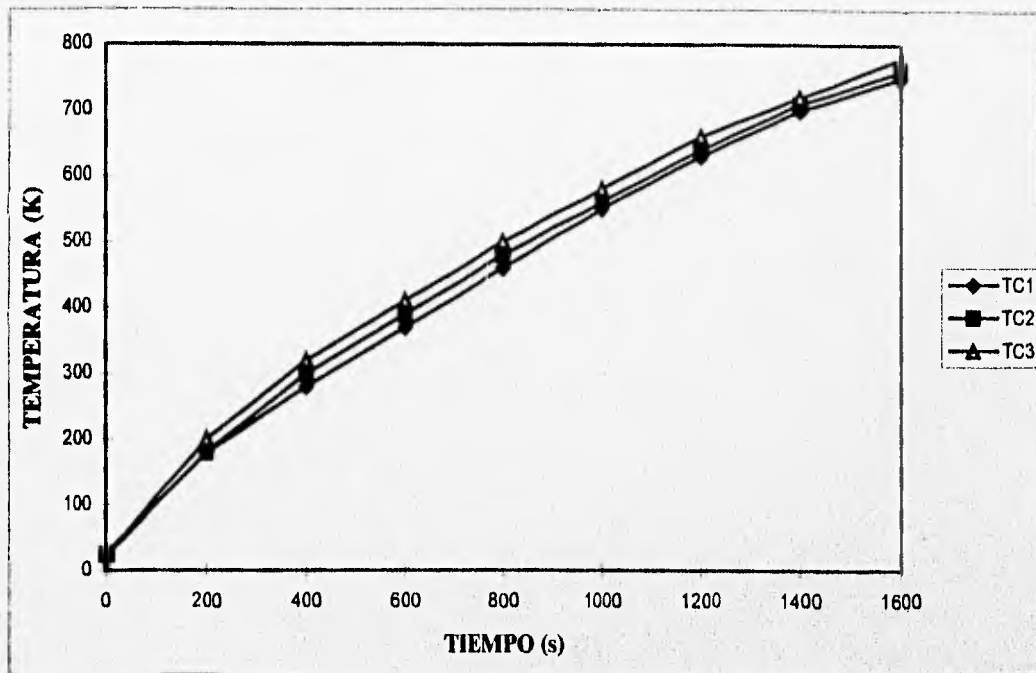


**Figura 7.5. Temperatura estimada del aire a la salida del DIT para flujos de 34, 37, 40, 43 y 46 m<sup>3</sup>/hr**

### RESULTADOS EXPERIMENTALES PRELIMINARES

Hasta este momento, se han llevado a cabo experimentos relacionados con el calentamiento del DIT, es decir, durante la fase de almacenamiento de energía, cuando no existe flujo de aire inducido a través del dispositivo. El experimento se llevó a cabo utilizando el microcontrolador diseñado, alimentando las resistencias con ayuda del conjunto motor-generator y un juego de baterías de 12 V semejantes a las utilizadas en un camión.

El microcontrolador fue programado para alimentar las resistencias y cortar la alimentación de las mismas cuando alguno de los termopares indique que la temperatura ha alcanzado 950°C. El sistema electrónico proporciona, además, la temperatura de las resistencias en todo momento.



**Figura 7.6. Calentamiento experimental del DIT**

Los resultados obtenidos en la prueba de calentamiento del DIT se muestran en la figura 7.6. La figura es una gráfica Tiempo-Temperatura para las lecturas obtenidas de los termopares conectados a cada una de las resistencias del dispositivo. Las variables marcadas en la figura corresponden a :

- TC1      Temperatura del aire estacionario a la entrada del DIT
- TC2      Temperatura media del metal dentro del DIT
- TC3      Temperatura del aire estacionario a la salida del DIT

En la figura anterior se observa una variación parabólica de pendiente a partir de 100°C. Dado la suavidad de la curva, ésta se puede aproximar por dos rectas, una entre 100 °C y 380°C y otra entre 380°C y 800°C. Dada la mínima variación de pendiente en ambos tramos de la curva, el calentamiento de las resistencias puede considerarse lineal.

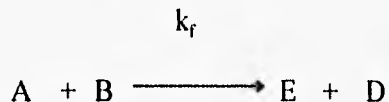
## **CAPÍTULO VIII**

### **EL HOLLÍN Y SU COMBUSTIÓN EN LAS CONDICIONES ESPERADAS**

---

Las características de las condiciones en las que ocurre el proceso de combustión definen los mecanismos que determinan la velocidad de reacción, en este caso, la oxidación de las partículas de hollín. La velocidad de reacción es una medida cuantitativa del número de moles de reactivo consumido por unidad de tiempo y por unidad de volumen, de manera que si se considera un volumen de estudio en particular, la velocidad de reacción no tiene más significado que el cambio en la concentración de los reactivos en el tiempo. Para una reacción química en general, la velocidad de reacción queda expresada por las siguientes expresiones diferenciales :

Sea la reacción general



donde A y B representan las especies reactivas; E y D las especies producidas en la reacción; y  $k_f$  una constante de la velocidad de reacción.

La velocidad de la reacción se puede expresar de tantas maneras como especies se identifiquen en la reacción, es decir que para la reacción anterior, la velocidad de reacción se puede expresar como

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = -\frac{dC_B}{dt} = \frac{dC_E}{dt} = \frac{dC_D}{dt} = k_f C_A C_B$$

En estas expresiones, C representa la concentración de la especie a la que se hace referencia en el volumen de estudio y está definida por  $C_j = n_j / V$ , donde  $n_j$  es el número de moles del reactivo  $j$  presentes en el volumen  $V$ , por lo que también se puede expresar la velocidad de reacción como :

$$r = -\frac{dn_A/V}{dt} = -\frac{dn_B/V}{dt} = \frac{dn_C/V}{dt} = \frac{dn_D/V}{dt}$$

Al manejar un volumen constante se puede eliminar el término de volumen de la expresión y si se manejan gases como reactivos, se puede recurrir --en las condiciones apropiadas-- a las relaciones de gas ideal, para medir el número de moles en función de la temperatura y la presión :  $n = PV/RT$ . Esto es importante para los fines del trabajo, pues de esta manera se puede obtener un valor para la velocidad con que se consume el hollín atrapado en el filtro, mediante un análisis de la velocidad con que se consume la otra especie reactiva, el oxígeno, que puede considerarse como gas ideal en las condiciones pertinentes, simplificando el cálculo de la fracción molar y la definición de la velocidad de reacción global.



Toda reacción química consiste en el intercambio de átomos de una sustancia a otra. En el caso de la combustión hay una disminución en la energía contenida en los lazos moleculares. Esta energía se libera en forma de calor al medio durante la reacción. La velocidad con la que se lleva a cabo una reacción dependerá de la concentración de reactivos en un volumen dado, la frecuencia con la que se encuentren (con la orientación adecuada), la cantidad de moléculas de las especies que están en condiciones de reaccionar (número que será función directa de la presión o concentración molecular) y el nivel de energía involucrado en estos choques (función a su vez de la temperatura, que determina la velocidad media aritmética).

El número de átomos o moléculas de las especies reactivas cuya concentración determina la velocidad de reacción corresponde al llamado orden de reacción. Éste permite cálculos de la velocidad neta de reacción sin tomar en cuenta los mecanismos moleculares involucrados. Si se mide la concentración de una especie reactiva en el transcurso del tiempo de reacción y se diferencia el resultado se obtiene una tasa o velocidad de reacción. Si ésta es directamente proporcional a la concentración instantánea se trata de una reacción de primer orden; si es proporcional al cuadrado de la concentración instantánea, se trata de una reacción de segundo orden, y así sucesivamente hasta identificar una reacción de orden n. Un caso particular --y no por ello poco común-- son las reacciones de orden cero, en las que la velocidad con que ocurren es independiente de la cantidad no consumida de los reactivos.

La combustión de carbón y por consiguiente de las partículas de hollín se puede considerar esencialmente como de primer orden (Noirot). Esto significa que la velocidad de combustión del carbón obedece a una relación como la siguiente :

$$-\frac{dC_c}{dt} = k_1 C_c$$

donde  $k_1$  es una constante única para una mezcla particular a una temperatura fija. A esta constante se le conoce como la constante de velocidad de reacción específica e identifica la velocidad de la reacción cuando la concentración del reactivo se considera unitaria.

Al integrar la ecuación anterior de un tiempo 0 al de interés tenemos que:

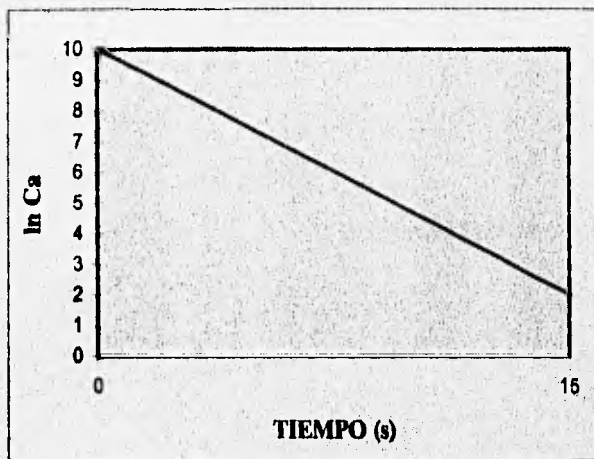
$$\ln CC - \ln CCo = -k_1 t \quad \text{o bien,}$$

$$\ln CC = \ln CCo - k_1 t$$

La vida media de un reactivo se define como el tiempo requerido para reducir a la mitad la concentración inicial de un reactivo. De la ecuación anterior se puede ver cómo la concentración del reactivo en una reacción de primer orden decrece exponencialmente con el tiempo :

$$CC = CCo \exp(-k_1 t)$$

En una reacción de primer orden, la vida media es independiente de la concentración inicial. Al evaluar  $t$  en la expresión anterior para  $CC = CCo/2$ , se obtiene la vida media :  $\ln 2 / k_1$ .



**Figura 8.1. Variación de la concentración en el tiempo en una reacción de primer orden.**

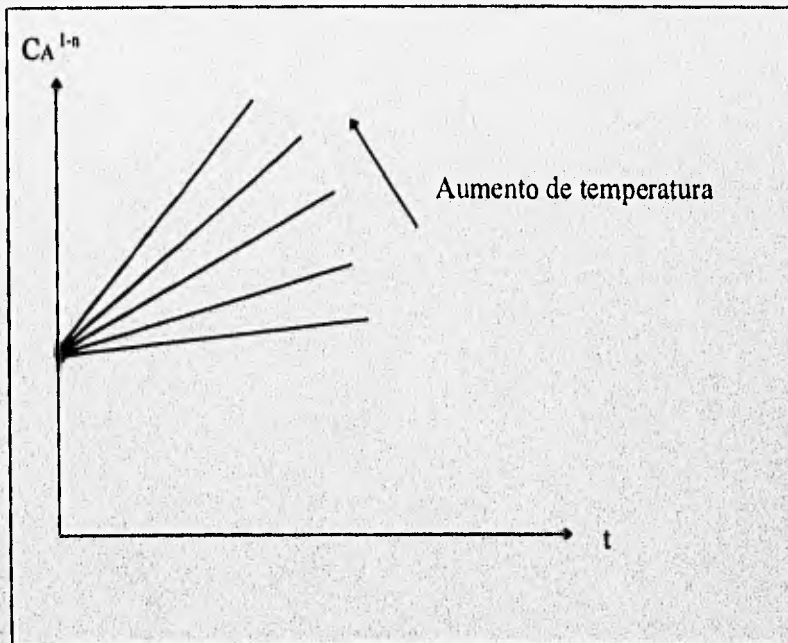
La velocidad de reacción se ve afectada por efecto de la presión y la temperatura. La influencia de la presión puede determinarse con relativa facilidad si uno de los reactivos se considera como gas ideal. Afortunadamente, en el caso de la regeneración del filtro éste es el caso del aire de regeneración. Así, se tiene que la presión parcial del oxígeno en el aire está dada por  $PO_2 = nRT/V$ , donde --para el oxígeno--  $n/V$  equivale a su concentración, por lo que se puede escribir la relación de gas ideal como  $P = CO_2 RT$ . Además, la presión parcial equivale al producto de la fracción mol de la especie de interés A, que en este caso es el oxígeno, y la presión total del aire.

Para la reacción de primer orden involucrada, se tiene por consiguiente:

$$-\frac{dC_{O_2}}{dt} = k_1 C_{O_2} = k_1 X_{O_2} P/R$$

En otras palabras, la velocidad de reacción será directamente proporcional a la presión involucrada.

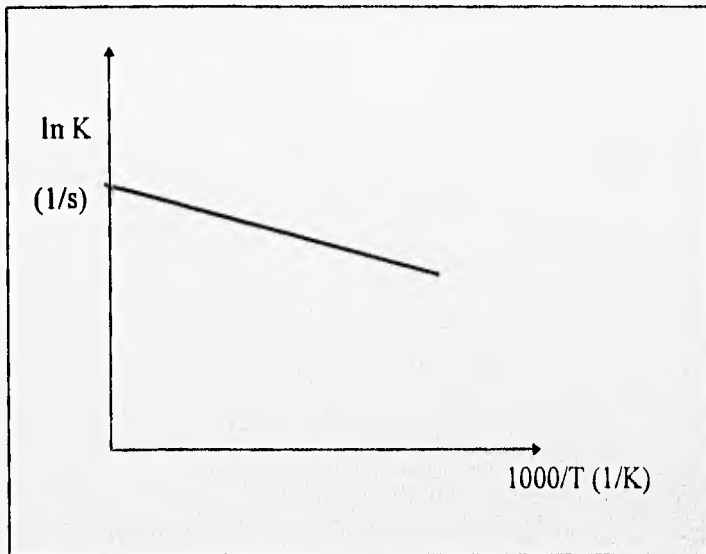
El efecto de la temperatura en la constante de reacción se puede apreciar al analizar la relación entre la concentración de uno de los reactivos y el tiempo, manteniendo la temperatura a la que ocurre la reacción constante. El resultado de hacer esto para diferentes temperaturas se puede observar en la figura 8.2. Este tipo de gráfica permite conocer la constante específica de reacción, indicada por la pendiente de la recta de interés, que se puede expresar como  $(n-1)k_n$ .



**Figura 8.2. Variación de la constante de reacción por efecto de la temperatura.**

En la figura se puede observar cómo la constante específica de reacción, dada por la pendiente de la gráfica, aumenta conforme aumenta el valor de la temperatura. Al graficar el logaritmo natural de la constante de reacción contra el inverso de la temperatura absoluta se obtiene un diagrama de Arrhenius (en honor a quien realizó un enorme número de experimentos de este tipo manteniendo

la temperatura del reactor constante y midiendo las concentraciones de las especies de interés a lo largo del tiempo, para vertir los resultados en este tipo de gráficas):



**Figura 8.3. Diagrama de Arrhenius típico.**

La pendiente de la recta obtenida se puede expresar como un cociente  $-A/B$ . El análisis del patrón de los diagramas de este tipo obtenidos para gases permitió a van Hoff (Kanury) identificar una relación directa de la pendiente con el nivel de energía manejado y la constante del gas involucrado. De esta manera, van Hoff expresó el cociente de la pendiente de la recta como  $-E/R$ , donde  $R$  corresponde a la constante del gas y  $E$ , que es una constante proporcional al nivel de energía, se conoce como la energía de activación. Esta energía de activación corresponde a la entalpía de formación de las moléculas capaces de reaccionar exitosamente en el reactor. Expresando la relación de moléculas "eficientes" y las "inactivas" en condiciones de equilibrio mediante la relación de van Hoff se tiene:

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} = \frac{E}{RT^2}$$

o bien,  $K = (\text{Constante}) \cdot e^{-E/RT}$

$e^{-E/RT}$  indica la fracción de moléculas energéticas capaces de participar en la reacción y representa el factor de probabilidad que indica la fracción de moléculas de la especie reactiva cuya energía es al menos igual a E.

Como una primera aproximación, pueden tomarse como válidos --para las condiciones de la trampa catalizada-- los diagramas de Arrhenius característicos para la combustión del negro de carbón, cuyo comportamiento durante la combustión es muy similar al del hollín (Gilot). La suposición de la constante de velocidad de reacción acorde con estos diagramas permite una selección preliminar de valores para los parámetros pertinentes, para la simulación de la regeneración del filtro.

La aproximación hecha bajo esta suposición es en realidad pesimista, pues dentro del medio catalizado, lo que ocurre es una disminución en la energía de activación de las moléculas reactivas. Esto implica una mayor velocidad de reacción (menor tiempo de combustión). En un diagrama de Arrhenius esto equivaldría a una disminución en la pendiente y un desplazamiento general de la curva hacia arriba, lo que implica una constante de reacción mayor. La disminución de pendiente significa que la variación de la constante de reacción (expresada como el logaritmo natural de la misma) aumentará más lentamente con el aumento en la temperatura, pero el desplazamiento general de la curva hacia arriba implica valores de la constante de reacción considerablemente mayores, es decir, mayor velocidad de oxidación para una misma temperatura.

El cambio de pendiente involucrado debido al medio catalítico se puede calcular si se supone que no importando el medio, el inicio de la reacción implica una misma relación de moléculas "activas" e "inactivas". Entonces, se debería cumplir que:

$$C^*/C = \text{cte.} = \exp(-E_1/RT_1) = \exp(-E_2/RT_1)$$

Si se conoce el valor de la pendiente para un medio no catalizado y se conoce experimentalmente la temperatura a la que se inicia la combustión en el medio catalizado, se puede conocer la energía de activación necesaria dentro del medio catalizado y con ello, la pendiente del diagrama de Arrhenius pertinente. Esto se discute más adelante, en el capítulo de selección de parámetros.

En el diagrama original (es decir en medio no catalizado) se puede observar un cambio importante en la pendiente a partir de cerca de  $700^{\circ}$ . Este punto de quiebre representa una transición entre un régimen de combustión controlado por mecanismos cinéticos y un régimen predominantemente controlado por fenómenos difusivos. La zona cercana al punto de inflexión estaría determinada por un régimen mixto.

En general, la regeneración del filtro estará determinada por la ignición de las partículas de hollín, que para una misma concentración de oxígeno se puede identificar --en general-- con un régimen cinéticamente controlado (*Idem*). Esto significa que las velocidades de reacción involucradas son pequeñas comparadas con la velocidad de difusión de calor y de especies reactivas, de manera que el tiempo en que ocurre el contacto de las especies reactivas y la difusión de temperatura es despreciable comparado con el tiempo que exige la combustión para llevarse a cabo. Esto se debe a que en un momento dado, si la corriente de aire de regeneración permite mantener las condiciones necesarias y suficientes (concentración de oxígeno y temperatura mínima) para que se lleve a cabo la combustión durante el tiempo de regeneración (lo cual sucede esencialmente en la superficie del material particulado), la limitante del proceso será la velocidad con que ocurra la reacción. Es cierto que a mayor temperatura y concentración de oxígeno en el aire de regeneración mayor será la constante de reacción, es decir menor el tiempo de regeneración, pero para las características determinadas del aire de regeneración, bajo las condiciones anteriormente especificadas, la velocidad de reacción estará determinada igualmente por la velocidad con la que los reactivos alcanzan las condiciones necesarias para reaccionar (el proceso más lento es el que determina la velocidad máxima).

En general, las condiciones que determinan un régimen controlado cinéticamente surgen cuando hay un buen grado de mezclado, un coeficiente de difusión igualmente alto, un espesor pequeño de la masa de gas reactivo, un factor preexponencial de colisión pequeño, una alta energía de activación y "baja" temperatura del gas involucrado.

La combustión de carbón no es una reacción simple (entiéndase por esto una reacción de un sólo paso), presentándose un complejo mecanismo de oxidación a monóxido de carbono y luego una reoxidación de éste en una reacción de equilibrio a  $\text{CO}_2$ . No obstante, para fines de la regeneración del filtro solamente el primer paso de la oxidación es el que determinará la

regeneración y así, se puede considerar la combustión de las partículas como una reacción simple, es decir, considerar como reacción determinante la oxidación a CO de las mismas. Esto permite manejar modelos simplificados para determinar la velocidad de reacción.

## **CAPÍTULO IX**

### **MODELADO MATEMÁTICO**

---

El proceso de filtración mecánica y regeneración mediante el uso de filtros cerámicos, catalizados o no, presenta, entre otros, dos problemas principales. El primero de ellos se relaciona con las altas temperaturas que alcanza el material cerámico durante el proceso de regeneración, debidas al calor liberado por la combustión de las partículas de hollín. El material cerámico utilizado en los filtros presenta una temperatura crítica en  $1100^{\circ}\text{C}$ , en la que experimenta un cambio drástico en su superficie específica que puede ocasionar el resquebrajamiento del mismo.

El segundo problema se relaciona con la propagación de la combustión a lo largo de todo el filtro. Esta propagación se logra, por una parte, con la transferencia de calor del aire de regeneración proveniente del Dispositivo de Inercia Térmica (DIT) hacia las paredes del material cerámico y la



capa de hollín atrapadas en el filtro; y por otro lado, con la ayuda del calor liberado durante la combustión de las primeras partículas. Una vez que la totalidad del hollín ha alcanzado la temperatura de ignición, el proceso de regeneración puede considerarse como autosostenible en tanto la concentración de oxígeno en el aire inyectado se mantenga por encima del 5 %, condición que no representa problemas si se considera que el aire de regeneración es aire atmosférico a presión. El problema de la propagación se resuelve en parte con el uso de filtros catalizados, que disminuyen la temperatura de ignición de  $T \approx 700^\circ\text{C}$  a  $T \approx 450^\circ\text{C}$ , con lo que las temperaturas de combustión se pueden alcanzar con mayor facilidad. Sin embargo, si la temperatura del aire de regeneración o la transferencia del calor liberado durante la combustión no son las suficientes para iniciar la combustión de todo el hollín, la regeneración del filtro será únicamente parcial y a la larga, la caída de presión dentro del filtro rebasará los límites admisibles para el motor (10 kPa).

Estos dos problemas hicieron necesario el planteamiento de un modelo matemático del proceso de regeneración del filtro bajo las condiciones que el sistema propuesto determina. El modelo planteado debería de ser capaz, si bien, no de describir de forma exacta el proceso de regeneración, sí de proporcionar una idea de los órdenes de magnitud tanto de las temperaturas máximas alcanzadas durante el proceso, como del tiempo necesario para que la combustión inicie a lo largo de todo el filtro, a fin de determinar si el proceso de regeneración planteado es factible y no presenta problemas que puedan dañar el equipo.

A lo largo de este capítulo se presentan los intentos por realizar un análisis diferencial del proceso, así como el modelo numérico utilizado finalmente y que permite evaluar las condiciones antes mencionadas.

## ANÁLISIS DIFERENCIAL

A fin de realizar el análisis diferencial, hubo que realizar ciertas consideraciones que permitieran plantear un modelo de forma simplificada. Como primera simplificación, se consideró que el filtro estaba formado únicamente por dos ductos, uno de entrada y uno de salida, como se aprecia en la figura 9.1. El ducto de entrada corresponde al canal por donde se inyecta el aire de regeneración proveniente del DIT; de esta forma, el ducto de salida es aquél por donde sale el aire después de atravesar el filtro. Dado el sistema de regeneración inversa, el ducto de salida es aquél por donde entraron los gases de escape del motor diesel para ser filtrados, y por lo tanto es el ducto que contiene la capa de hollín que debe ser quemada. En un sistema con dos canales como el mostrado, la única pared porosa es la pared que separa ambos ductos, y por lo tanto, la totalidad del aire de regeneración atraviesa esta pared para llegar al ducto de salida; asimismo, el ducto de salida recibe aire únicamente a través de esta pared, y la totalidad del hollín filtrado por este ducto se encuentra acumulado sobre esta pared, como puede apreciarse en la misma figura. Sin embargo, a fin de validar el modelo respecto a los filtros reales, se considera que tanto la pared porosa como la capa de hollín tienen el ancho de las cuatro paredes del ducto juntas.



**Figura 9.1. Modelo simplificado del ducto.**

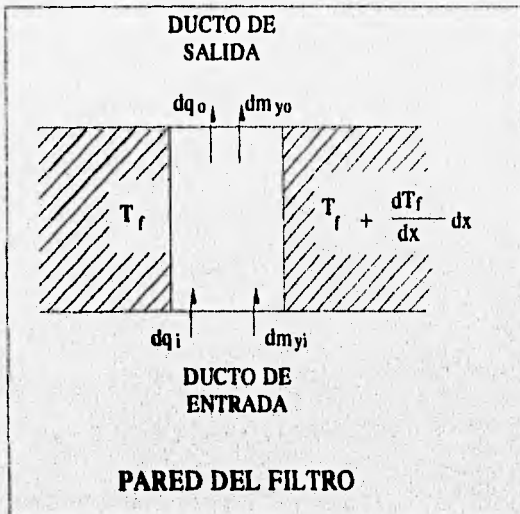
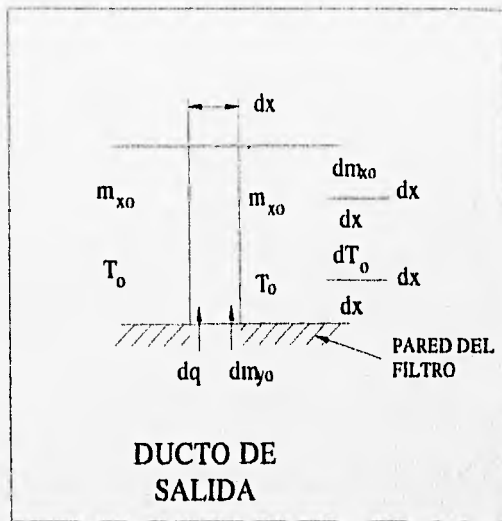
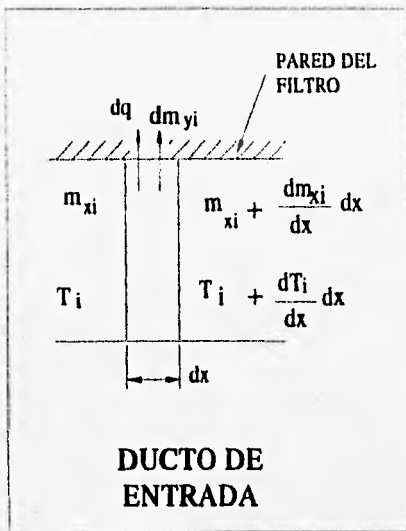
Además de ésta, se realizan las siguientes suposiciones :

- La caída de presión a lo largo de ambos ductos es despreciable en comparación a la caída de presión que sufre el aire al atravesar la pared porosa del filtro (Romero). Esta caída de presión está dada por el fabricante del filtro en función de la cantidad de hollín filtrado, según el cual

$\Delta p = 0.1$  cmHg/g de hollín filtrado. Bajo esta suposición existen tres presiones predominantes en el filtro: 1) la presión en el ducto de entrada igual a la presión del aire de regeneración, dada por el equipo utilizado y por las caídas de presión a lo largo del DIT y de los ductos utilizados para transportarlo; 2) la presión en el ducto de salida, dada como función de la presión de entrada y la caída de presión a través del filtro y ; 3) una presión del aire en el interior de la pared porosa supuesta como la media entre la presión de entrada y la presión de salida.

- Las partículas de hollín filtradas se encuentran igualmente distribuidas a lo largo de todo el filtro, es decir, que el espesor de la capa de hollín es la misma en todo el ducto de salida.
- La temperatura de la capa de hollín es la misma que la temperatura de la pared porosa del filtro en todo momento (*Idem*).
- La transferencia de calor por convección del aire de regeneración a la pared porosa se realiza de forma total, es decir, que el aire que entra al ducto de salida tiene la misma temperatura que la pared del ducto en el punto de transferencia o cruce.
- El calor liberado por la reacción de combustión del hollín durante el proceso de regeneración se transfiere totalmente al aire que entra al ducto de salida después de atravesar la pared porosa.
- Los efectos de radiación no son considerados ya que la totalidad del calor transferido por este medio se transfiere a las mismas paredes del filtro; igualmente las temperaturas esperadas durante el proceso hacen que la transferencia de calor por radiación sean despreciables en comparación a la transferencia de calor por convección y conducción (*Idem*).

Bajo estas suposiciones se planteó el siguiente análisis diferencial. Para ello, se consideraron tres elementos diferenciales, uno correspondiente al ducto de entrada, otro al ducto de salida y un tercero a la pared del filtro. Los elementos diferenciales se muestran en la figura 9.2.



*Figura 9.2. Elementos diferenciales para el modelado del filtro.*

Una vez planteados los balances de masa y energía para los elementos diferenciales mostrados y haciendo las simplificaciones y reducciones necesarias, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales :

$$0 = \frac{\partial m_{xi}}{\partial x} + \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + \frac{P_i A_0}{R} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{T_i} \right) \quad (1)$$

$$0 = m_{xi} C_p \frac{\partial T_i}{\partial x} + C_p T_i \frac{\partial m_{xi}}{\partial x} + C_p T_i \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + 4lh_i (T_i - T_f) \quad (2)$$

$$0 = \frac{\partial m_{xo}}{\partial x} - \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} + \frac{P_o A_0}{R} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{T_o} \right) \quad (3)$$

$$0 = m_{xo} C_p \frac{\partial T_o}{\partial x} + C_p T_o \frac{\partial m_{xo}}{\partial x} - C_p T_f \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} - 4lh_o (T_f - T_o) + \frac{\partial Q_R}{\partial x} \quad (4)$$

$$0 = \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} - \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + \frac{P_f}{R} 4lep \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{T_f} \right) \quad (5)$$

$$0 = \rho 4leC(1-p) \frac{\partial T_f}{\partial x} + C_p T_f \frac{\partial m_{yo}}{\partial x} - C_p T_i \frac{\partial m_{yi}}{\partial x} + 4lh_o (T_f - T_o) - 4lh_i (T_i - T_f) \quad (6)$$

donde :

**m** es el flujo másico de aire regenerante

**P** es la presión del aire

**R** es la constante del aire

**A<sub>0</sub>** es el área transversal de los ductos

**T** es la temperatura

**t** es el tiempo

**C<sub>p</sub>** es la capacidad térmica específica del aire

**h** es el coeficiente de transferencia de calor por convección

**l** es el ancho del ducto

**e** es el espesor de la pared del ducto

**p** es la porosidad del material cerámico

**ρ** es la densidad del material cerámico y

**C** es la capacidad térmica específica del material cerámico

**x** dirección longitudinal

y dirección transversal

**Q<sub>R</sub>** es el calor liberado por la reacción de combustión de hollín

los subíndices corresponden a :

x dirección longitudinal

y dirección transversal

i ducto de entrada

o ducto de salida

f filtro

El calor liberado por la reacción de combustión del hollín ( $Q_R$ ) está dado por :

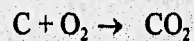
$$Q_R = H R_C m_C \quad (7)$$

donde H es el poder calorífico del hollín

$R_C$  es la velocidad de reacción del hollín y

$m_C$  es la masa de hollín en un determinado momento

Considerando completa la combustión del hollín dada por :



la velocidad de reacción está dada por (Gilot) :

$$R_C = 0.0067 k \rho m_{O_2} \quad (8)$$

donde k es la constante de la reacción

$\rho$  es la densidad de la capa de hollín y

$m_{O_2}$  es la fracción masa de oxígeno en el aire regenerante

Por otro lado se tiene que :

$$R_C = \frac{1}{m_C} \frac{d m_C}{dt} \quad (9)$$

El sistema de ecuaciones mostrado se complementa con las siguientes condiciones iniciales y de frontera :

condiciones iniciales : en  $t = 0$ ,  $T_i = T_o = T_f = T_{esc}$  para toda  $x$ ,  
condiciones de frontera : en  $x = 0$ ,  $T_i = T_{DIT}$ ;  $m_{xi} = m_{in}$ ;  $m_{yi} = m_{yo} = m_{xo} = 0$ .  
en  $x = L$ ,  $m_{xi} = 0$

donde  $T_{esc}$  es la temperatura de los gases de escape antes de la regeneración

$T_{DIT}$  es la temperatura del aire de regeneración a la entrada del filtro

$m_{in}$  es el flujo másico de aire de regeneración que entra al filtro

$L$  es la longitud del filtro.

El sistema resultante mostrado es un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Además de ello, el sistema cuenta con más incógnitas que ecuaciones, por lo que fue necesario fijar una séptima ecuación para cerrar el sistema de ecuaciones. Esta ecuación se determinó de acuerdo a las condiciones de frontera en  $x=0$  y  $x=L$ , para el flujo de aire en el ducto de entrada y en dirección longitudinal ( $M_{xi}$ ). De esta forma se puede elegir un perfil para el flujo másico; este perfil puede ser de tipo lineal, cuadrático, cúbico, etc., siempre y cuando cumpla con las condiciones mencionadas. Para el caso de los perfiles lineal y cuadrático, las ecuaciones resultantes serían :

$$m_{xi} = -\frac{m_{in}}{L}x + m_{in} \quad (\text{caso lineal}) \quad (10)$$

$$m_{xi} = -\frac{m_{in}}{L^2}x^2 + m_{in} \quad (\text{caso cuadrático}) \quad (10')$$

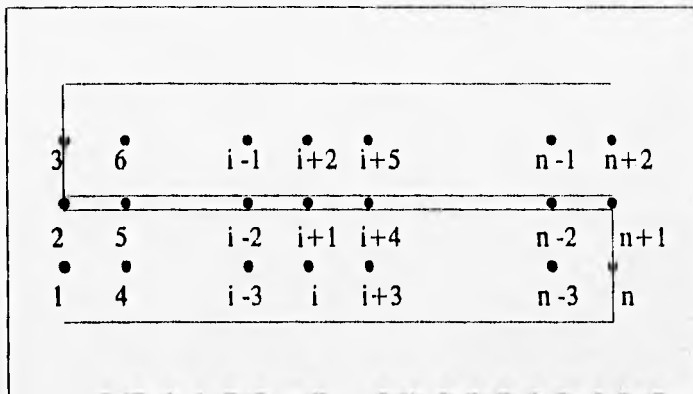
Sin embargo, a pesar de ser un sistema cerrado, la solución del sistema de ecuaciones es sumamente compleja, por lo que se decidió plantear una solución numérica que nos proporcionara los datos necesarios acerca del comportamiento del proceso de regeneración.

## SOLUCIÓN NUMÉRICA

La solución numérica se planteó bajo la misma suposición de que el filtro estaba formado únicamente por un ducto de entrada y un ducto de salida, como se aprecia en la figura 9.1 mostrada anteriormente. Igualmente, se aplican todas las suposiciones hechas para el análisis diferencial. El método numérico seleccionado para la resolución del problema es el de **diferencias finitas**, ya que permite una **gran facilidad** en su manejo y proporciona una exactitud bastante aceptable.

**Para la aplicación del método**, el filtro fue dividido en una serie de elementos, cada uno de ellos representado por un nodo. Los elementos fueron seleccionados de forma tal que existen elementos que incluyen únicamente el aire en el ducto de entrada, elementos para el aire en el ducto de salida, y elementos que incluyen el material cerámico y el aire atrapado momentáneamente en el interior del material poroso. La figura 9.3 muestra el arreglo de nodos descrito anteriormente.





**Figura 9.3. Arreglo de nodos para la solución numérica**

Cada uno de los nodos se encuentra caracterizado por una temperatura y una presión. Las presiones en cada nodo son, de acuerdo a la suposición hecha, las mismas para todos los nodos en el mismo ducto. Además de ello, se considera que existen flujos de masa y de energía entre los nodos adyacentes. Se distinguen dos flujos másicos de aire principales en ambos ductos, los flujos axiales y los flujos radiales. De esta forma, se realizan las siguientes suposiciones adicionales :

- Existe transferencia de calor por convección entre el flujo axial y la pared del filtro en ambos ductos.
- La transferencia de calor por convección entre el flujo radial del ducto de entrada y el material cerámico se considera total, de forma tal que el flujo radial del ducto de salida tiene la misma temperatura que el material cerámico en el nodo en que lo abandonó.
- La transferencia de calor por conducción entre nodos adyacentes de los ductos de entrada y salida se considera despreciable.
- El calor liberado por la reacción de combustión se transfiere íntegramente al flujo radial en el ducto de salida.
- Dado que la capa de hollín y la pared del filtro tienen la misma temperatura, se considera que la ignición del hollín en un nodo en particular se inicia cuando éste alcanza la temperatura de ignición determinada.

Bajo estas suposiciones, se plantearon los balances de masa y energía para los elementos mostrados. Este planteamiento llevó al siguiente sistema de ecuaciones :

*Flujo masico*

$$m_{1,4} = \frac{P_e A_0}{R} \frac{1}{T_1} u_{1,4}$$

$$m_{1,2} = m_{1,4} \frac{T_{DIT}}{T_1} - m_{1,4} - \frac{1}{2} A_f (1-p) \frac{h_1}{CpT_1} (T_1 - T_2)$$

$$m_{2,3} = m_{1,2} - \frac{1}{2} A_f ep \frac{P_f}{R} \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_2^{j-1}} \right)$$

$$m_{3,6} = m_{2,3} \frac{T_2}{T_3} + \frac{1}{2} A_f (1-p) \frac{h_3}{CpT_3} (T_2 - T_3) + \frac{1}{CpT_3} Q_2$$

$$m_{i,j+3} = \frac{P_e A_0}{R} \frac{1}{T_i} u_{i,j+3}$$

$$m_{i,j+1} = m_{i-3,j} \frac{T_{i-3}}{T_i} - m_{i,j+3} - A_f (1-p) \frac{h_i}{CpT_i} (T_i - T_{i+1})$$

$$m_{i+1,j+2} = m_{i,j+1} - A_f ep \frac{P_f}{R} \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{1}{T_{i+1}} - \frac{1}{T_{i+1}^{j-1}} \right)$$

$$m_{i+2,j+1} = m_{i-1,j+2} \frac{T_{i-1}}{T_{i+2}} + m_{i+1,j+2} \frac{T_{i+1}}{T_{i+2}} + A_f (1-p) \frac{h_{i+2}}{CpT_{i+2}} (T_{i+1} - T_{i+2}) + \frac{1}{CpT_{i+2}} Q_{j+2}$$

$$m_{n,n+1} = m_{n-3,n} \frac{T_{n-3}}{T_n} - \frac{1}{2} A_f (1-p) \frac{h_n}{CpT_n} (T_n - T_{n+1})$$

$$m_{n+1,n+2} = m_{n,n+1} - \frac{1}{2} A_f ep \frac{P_f}{R} \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{1}{T_{n+1}} - \frac{1}{T_{n+1}^{j-1}} \right)$$

$$m_0 = m_{n-1,n+2} \frac{T_{n-1}}{T_{n+2}} + m_{n+1,n+2} \frac{T_{n+1}}{T_{n+2}} + \frac{1}{2} A_f (1-p) \frac{h_{n+2}}{CpT_{n+2}} (T_{n+1} - T_{n+2}) + \frac{1}{CpT_{n+2}} Q_{n+2}$$

## Temperaturas

$$\frac{1}{T_1^{j+1}} = \frac{2R\Delta t}{A_0\Delta x P_e} (m_{1,1} - m_{1,2} - m_{1,4}) + \frac{1}{T_1}$$

$$T_2^{j+1} = \frac{2}{\rho e A_f C(1-p)} \left( m_{1,2} C_p T_1 + \frac{1}{2} h_1 A_f (T_1 - T_2) - m_{2,3} C_p T_2 - \frac{1}{2} h_3 A_f (T_2 - T_3) \right) + T_2$$

$$\frac{1}{T_3^{j+1}} = \frac{2R\Delta t}{A_0\Delta x P_s} (m_{2,3} - m_{3,6}) + \frac{1}{T_3}$$

$$\frac{1}{T_i^{j+1}} = \frac{R\Delta t}{A_0\Delta x P_e} (m_{i-3,i} - m_{i,i+1} - m_{i,i+3}) + \frac{1}{T_i}$$

$$T_{i+1}^{j+1} = \frac{1}{\rho e A_f C(1-p)} \left( m_{i,i+1} C_p T_i + h_i A_f (T_i - T_{i+1}) - m_{i+1,i+2} C_p T_{i+1} - h_{i+2} A_f (T_{i+1} - T_{i+2}) \right) + T_{i+1}$$

$$\frac{1}{T_{i+2}^{j+1}} = \frac{R\Delta t}{A_0\Delta x P_s} (m_{i-1,i+2} + m_{i+1,i+2} - m_{i+2,i+5}) + \frac{1}{T_{i+2}}$$

$$\frac{1}{T_n^{j+1}} = \frac{2R\Delta t}{A_0\Delta x P_e} (m_{n-3,n} - m_{n,n+1}) + \frac{1}{T_n}$$

$$T_{n+1}^{j+1} = \frac{2}{\rho e A_f C(1-p)} \left( m_{n,n+1} C_p T_n + h_n A_f (T_n - T_{n+1}) - m_{n+1,n+2} C_p T_{n+1} - h_{n+2} A_f (T_{n+1} - T_{n+2}) \right) + T_{n+1}$$

$$\frac{1}{T_{n+2}^{j+1}} = \frac{2R\Delta t}{A_0\Delta x P_s} (m_{n-1,n+2} + m_{n+1,n+2} - m_o) + \frac{1}{T_{n+2}}$$

donde :

$m_{i,i+1}$  es el flujo másico de aire del nodo i al nodo i+1

$T_i$  es la temperatura en el nodo i

$u_{i,i+1}$  es la velocidad del aire del nodo i al nodo i+1 dada por el perfil seleccionado

$Q_i$  es el calor liberado por la combustión de hollín en el nodo i

$P_e$  es la presión en el ducto de entrada

$P_s$  es la presión en el ducto de salida

$P_f$  es la presión supuesta en el interior del material cerámico

$A_f$  es el área equivalente de transferencia de calor, dada por :  $A_f = 4 l \Delta x$

$\Delta t$  es el intervalo de tiempo seleccionado para las iteraciones

$\Delta x$  es la longitud de elementos, o la distancia de un nodo a otro

i, i+1 e i+2 corresponde a cualquier conjunto de nodos interiores del filtro

n, n+1 y n+2 corresponde a los tres últimos nodos del filtro

las demás variables son las mismas que fueron mostradas para el análisis diferencial.

El calor liberado por la reacción de combustión, así como, la velocidad de reacción están dadas por las mismas ecuaciones mostradas en el análisis diferencial; sin embargo, la masa de hollín en un determinado momento j+1 está dada por :

$$m_c^{j+1} = m_c^j (1 - R_c \Delta t)$$

El método utilizado es un método de tipo explícito, es decir, que el valor de cualquiera de las variables depende del valor de la misma variable y de las variables adyacentes en el instante inmediato anterior. Sin embargo, los mismos balances de masa y energía mostraron que esto sólo se cumple para las temperaturas y que los flujos másicos dependen únicamente de los valores de flujo másico y temperaturas en el instante en cuestión, como puede observarse en el sistema de ecuaciones, donde los flujos másicos de aire son independientes de los valores de  $\Delta t$ .

Un método implícito es aquél en el que el valor de una variable en un cierto instante se calcula a partir de los valores de las variables adyacentes en el instante en cuestión y el valor de la misma variable en el instante inmediato anterior. El método implícito cuenta con una gran precisión y estabilidad, pero requiere del planteamiento de complejas matrices que en ocasiones son imposibles de resolver.

El método explícito presenta la ventaja que mediante cálculos algebraicos sencillos se pueden conocer los valores de temperatura en cualquier instante, si se conocen los valores en el instante anterior; de tal forma que, si se establecen las condiciones iniciales, como fueron mostradas en el análisis diferencial, se pueden conocer los valores en cualquier instante encadenando los resultados unos con otros hasta encontrar los resultados de interés. Sin embargo, el método presenta una desventaja respecto al método implícito. Mientras que el método implícito es estable y converge para cualquier combinación de  $\Delta x$  y  $\Delta t$ , el método explícito requiere del

planteamiento de un criterio de estabilidad que indique la relación que deben mantener  $\Delta x$  y  $\Delta t$  entre sí para que los resultados converjan.

El criterio de convergencia más sencillo establece que, durante el encadenamiento y obtención de los resultados, para una variable cualquiera  $T$  en un instante cualquiera  $j$ , debe cumplirse que :

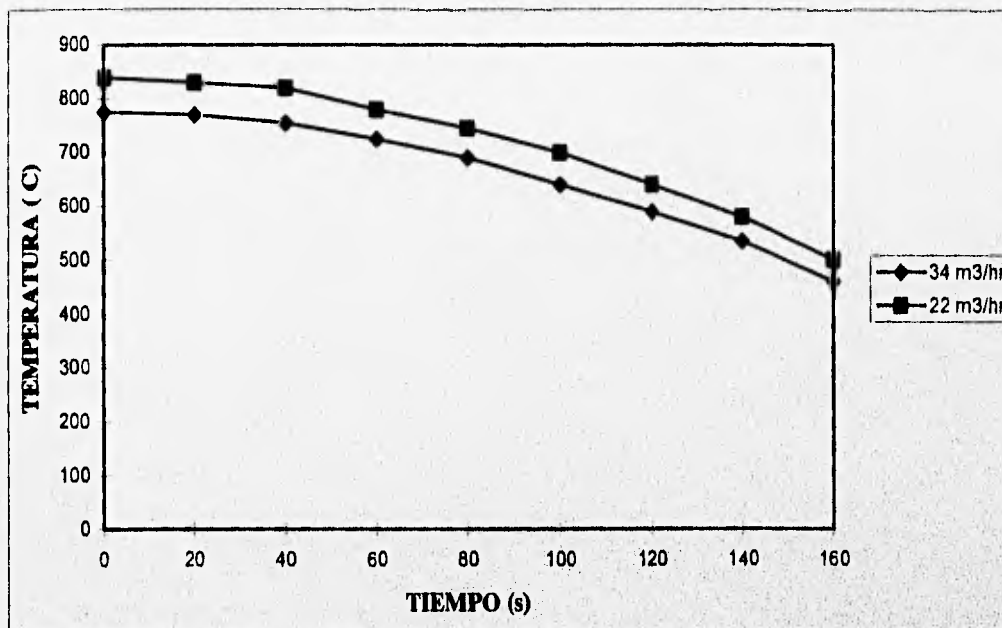
$$|T^{j+1} - T^j| \leq |T^j - T^{j-1}|$$

para asegurar que el valor de la variable en cuestión está convergiendo hacia un cierto valor límite. La implementación del criterio anterior puede realizarse directamente en las ecuaciones de un modelo a fin de establecer la relación entre los intervalos de iteración, cuando el modelo es lo suficientemente simple para permitirlo. Sin embargo, la implementación del criterio en el sistema de ecuaciones mostrado resulta en una ecuación no lineal de difícil resolución. Por esta razón, el criterio se utilizó al momento de realizar las operaciones y obtener los resultados correspondientes, utilizando un sistema de prueba y error para establecer los valores permisibles de  $\Delta t$  para un cierto valor de  $\Delta x$  o para un cierto número de divisiones del filtro.

## TEMPERATURA DEL AIRE DE REGENERACIÓN

El flujo de aire utilizado para la regeneración proviene, como se mencionó anteriormente, del dispositivo de inercia térmica (DIT). Dada la naturaleza del dispositivo, la temperatura del aire regenerante varía de acuerdo al enfriamiento del dispositivo. El enfriamiento de esta corriente de aire es uno de los factores más importantes que determinan la factibilidad de la regeneración del filtro, ya que, bajo ciertas condiciones, la temperatura del aire puede ser insuficiente para iniciar la combustión del hollín a lo largo del filtro y la regeneración sería únicamente parcial, presentando los problemas mencionados anteriormente. Por esta razón, la consideración de la temperatura del aire de acuerdo al enfriamiento del DIT es de vital importancia para lograr que los resultados obtenidos tengan validez.

El enfriamiento del DIT fue simulado previamente al desarrollo de este trabajo, utilizando el método de elementos finitos. La simulación se llevó a cabo considerando diferentes flujos volumétricos de aire, obteniéndose, entre otros, los siguientes resultados.



**Figura 9.4.** *Temperatura del aire de enfriamiento del DIT en función del tiempo, para flujos volumétricos de aire de 22 y 34 m³/hr.*

La figura 9.4 muestra la temperatura del aire a la salida del DIT en función del tiempo, para flujos volumétricos de 34 y 22 m³/h.

Sin embargo para fines de la simulación, los resultados anteriores deben aproximarse mediante una función continua o discreta que pueda introducirse durante las iteraciones. Para estos fines, la gráfica anterior se aproximó mediante una función cuadrática y una función discreta a intervalos de 20 segundos, cualquiera de las cuales puede utilizarse durante la simulación. Las funciones cuadrática y discreta obtenidas son las siguientes :

Para el flujo de  $34 \text{ m}^3/\text{h}$  :

Función cuadrática :  $T(t) = -0.0123t^2 + 775$

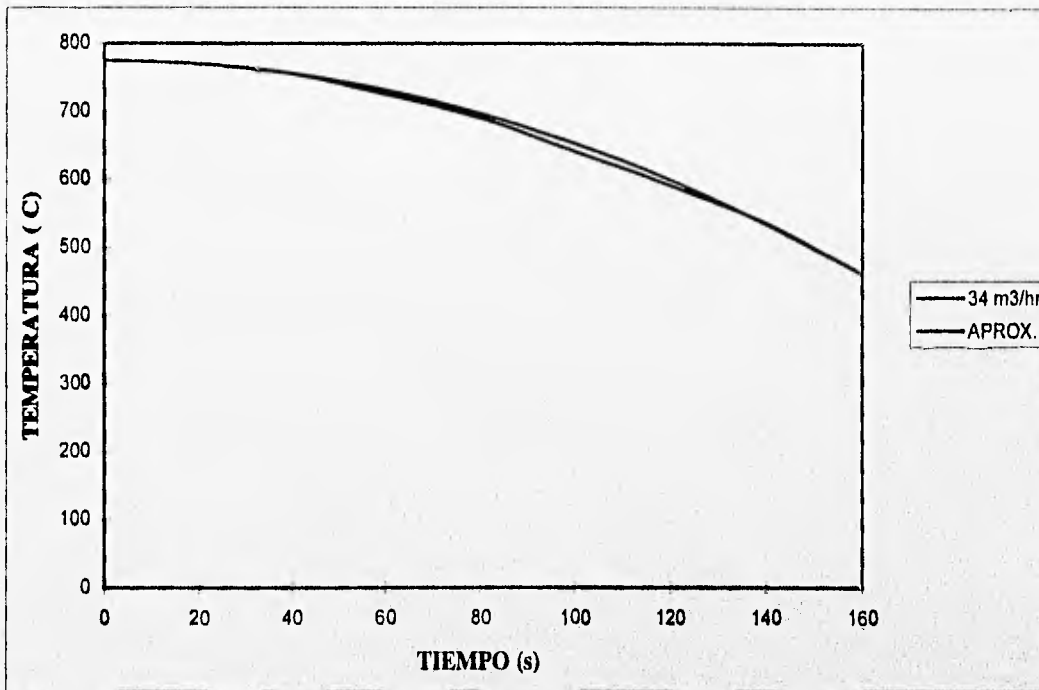
Función discreta :	Tiempo (s)	Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ )
	0	775
	20	770
	40	755
	60	725
	80	690
	100	640
	120	590
	140	535
	160	460

Para el flujo de aire de  $22 \text{ m}^3/\text{h}$  se tiene que :

Función cuadrática :  $T(t) = -0.0133t^2 + 840$

Función discreta :	Tiempo (s)	Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ )
	0	840
	20	830
	40	820
	60	780
	80	745
	100	700
	120	640
	140	560
	160	500

La figura 9.5 muestra una comparación entre los resultados de enfriamiento obtenidos mediante el método de elemento finito y la aproximación cuadrática obtenida. En la gráfica se observa que las funciones son prácticamente las mismas y por lo tanto, la aproximación es válida.



**Figura 9.5.** Comparación entre el enfriamiento estimado del DIT y la aproximación cuadrática determinada para un flujo de 34 m<sup>3</sup>/hr.

### SOLUCIÓN Y SIMULACIÓN

Para la resolución del problema se diseñó un programa de computación que llevara a cabo las iteraciones en las ecuaciones para todos los nodos del modelo del filtro, de acuerdo a cierto número de divisiones. El programa tiene la flexibilidad suficiente para modificar el valor de todas las constantes involucradas, relacionadas con las características del aire, las propiedades del filtro, la naturaleza de la combustión y los intervalos de iteración en el tiempo y en el espacio.



La lógica del programa es la siguiente :

- Se introducen los valores de las constantes relacionadas con el aire, el filtro y el modelo de combustión.
- Se introducen los valores de los intervalos de iteración  $\Delta t$  y  $\Delta x$ .
- Se introducen los valores iniciales de temperatura para cada uno de los nodos, que son las mismas para todos según se mencionó anteriormente.
- El programa realiza las iteraciones, calculando los flujos máxicos de aire a partir de los valores iniciales de temperatura.
- A partir de los valores calculados de flujo máxico el programa realiza las iteraciones para calcular los nuevos valores de temperatura de cada nodo.
- Con los nuevos valores, el programa regresa a realizar las iteraciones para flujo máxico y temperatura y así sucesivamente.
- Después de cada conjunto de valores calculados, el programa compara los valores de temperatura con la temperatura de ignición del hollín predeterminada. Cuando la temperatura del filtro alcanza la temperatura de ignición, el programa incluye en las ecuaciones el término correspondiente a la liberación de calor debida a la combustión en el nodo correspondiente. El programa considera la reducción en el tamaño de la partícula debida a la combustión, y por tanto, la reducción en la cantidad de calor que libera.
- El programa presenta los valores de temperatura después de cada intervalo de tiempo y almacena en un archivo las temperaturas de los nodos cada determinado tiempo para su posterior análisis, al igual que la cantidad de hollín remanente.

El programa se planteó utilizando el lenguaje BASIC y el compilador Qbasic. El listado del programa final aparece en el apéndice.

Durante la simulación se observó que los valores de temperatura resultantes tienden a divergir cuando se utiliza una temperatura del aire de entrada variable, es decir, que las aproximaciones hechas para la temperatura del aire proveniente del DIT, ya fuera la cuadrática o la discreta, introducen inestabilidades en la simulación sin permitir obtener resultados confiables. Por esta razón, se optó por el uso de una función constante de la temperatura del aire a la entrada del filtro. La función constante se eligió como la temperatura promedio del aire proveniente del DIT durante el tiempo en el que la temperatura se encuentra por encima de la temperatura de ignición del hollín. Esta temperatura, aunque fuera de realidad, proporciona un estimado de las temperaturas y el tiempo de regeneración que permiten establecer la factibilidad del sistema.

Por otro lado, si el tiempo necesario para que la ignición se inicie a lo largo de todo el filtro es menor al tiempo en que la temperatura del aire proveniente del DIT se encuentra por encima de la temperatura de ignición, la aproximación de una temperatura constante puede considerarse como válida.

La simulación del proceso se llevó a cabo utilizando un procesador PENTIUM y los datos resultantes fueron procesados mediante la hoja de cálculo EXCEL. Los resultados obtenidos de la simulación se presentan a continuación.

## **CAPÍTULO X**

### **DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS**

---

La validez del modelado matemático depende esencialmente de la selección correcta de parámetros. Esto no es trivial, pues en realidad el conocimiento exacto de las condiciones en que debe ocurrir la regeneración es imposible ya que éstas varían continuamente dentro de un amplio rango, según las condiciones de operación del motor, la cantidad de material particulado acumulado en el filtro, etc. No obstante, se pueden suponer condiciones estables "realistas", es decir que representen condiciones típicas que sean aproximadas a aquéllas en las que debe ocurrir la regeneración (*i.e.* modo predominante de combustión, concentración de material particulado en el filtro, temperatura del material particulado antes de inducir el aire regenerante, presión del aire de regeneración, etc.).

Como se menciona anteriormente, la velocidad de combustión del hollín en las condiciones pertinentes se rige principalmente por mecanismos cinéticos. Esta característica de la combustión del material particulado simplifica enormemente el modelo matemático al "eliminar" la dependencia directa del efecto difusivo. Sin embargo, existen grandes obstáculos para manipular el modelo puramente cinético, principalmente, la determinación de las constantes cinéticas involucradas. Éstas son función de la velocidad con que se difunde el oxígeno a la superficie de las partículas, la distribución, calidad y concentración de las mismas y la temperatura.

Es necesario conocer la velocidad de oxidación para una carga inicial de material particulado y una temperatura dada. Esta velocidad de oxidación se expresa en miligramos de hollín consumidos por segundo y por miligramo de carga inicial y disminuye al aumentar la carga inicial de partículas. Depende esencialmente de la concentración inicial de oxígeno y la porosidad (área específica) del material particulado para un rango de temperaturas dado. Todo lo anterior supone la determinación experimental de los parámetros pertinentes.

Según varios autores, la oxidación del negro de carbón es de primer orden con respecto a la concentración de oxígeno. A diferencia de una reacción de orden cero, en la que la velocidad de reacción es independiente de la cantidad de reactantes sin consumir, en una reacción de primer orden, la velocidad de reacción es proporcional a la concentración instantánea de los mismos (aunque la vida media es independiente de la concentración original). Esto se puede representar como:

$$\frac{dCA}{dt} = k_1 CA \quad \text{donde A representa uno de los reactivos}$$

En realidad, la velocidad de reacción es función de la concentración de cada uno de los reactantes, el encuentro de moléculas de éstos con una orientación adecuada (directamente relacionado con las presiones totales y parciales involucradas) y la energía involucrada en las colisiones (asociada directamente con la temperatura). Estos parámetros van a estar definidos por las condiciones particulares en que se encuentra el reactor y su determinación es básicamente un proceso experimental. Por ejemplo, una oxidación cinéticamente controlada está asociada a una fracción en masa de oxígeno uniforme a lo largo del lecho de carbón, con una tasa de combustión

proporcional a la concentración inicial y una fuerte dependencia de la temperatura. En cambio, una oxidación controlada por efectos difusivos se caracteriza por reacción superficial, sin relación con la concentración original de carbón. Aunque en la realidad se presenta un régimen de combustión mixto, como se menciona anteriormente, por arriba y por debajo de una temperatura crítica uno u otro de los mecanismos mencionados es el que domina.

La similitud en calidad y tamaño entre hollín y negro de humo permite --aparentemente-- hacer una extrapolación de las características de la combustión del negro de humo a la combustión del hollín o del material particulado. Esto es deseable, pues en la determinación experimental de las características de la combustión, hay mayor reproducibilidad de resultados al usar negro de humo que al usar hollín, pues las características químicas y físicas de este último son muy variables según el régimen de trabajo del motor. Esta extrapolación se justifica con datos experimentales, en los que se aprecia sólo una pequeña variación en las características de combustión de ambas especies en condiciones semejantes (Gilot), por lo que considerar las características de combustión obtenidas para el negro de humo como si fuesen las características promedio de la combustión del hollín del material particulado es razonable.

Después de que ocurre la activación de la oxidación, en la que se consume alrededor de 7% del carbón en lo que representa una etapa transitoria de la combustión, la pérdida de peso del carbón se puede aproximar a una función lineal, pudiéndose definir una tasa de combustión (mg/s) única para todo el proceso sin incurrir en errores importantes. Esta tasa de combustión también suele expresarse en relación con la masa inicial de carbón (mg/mg s).

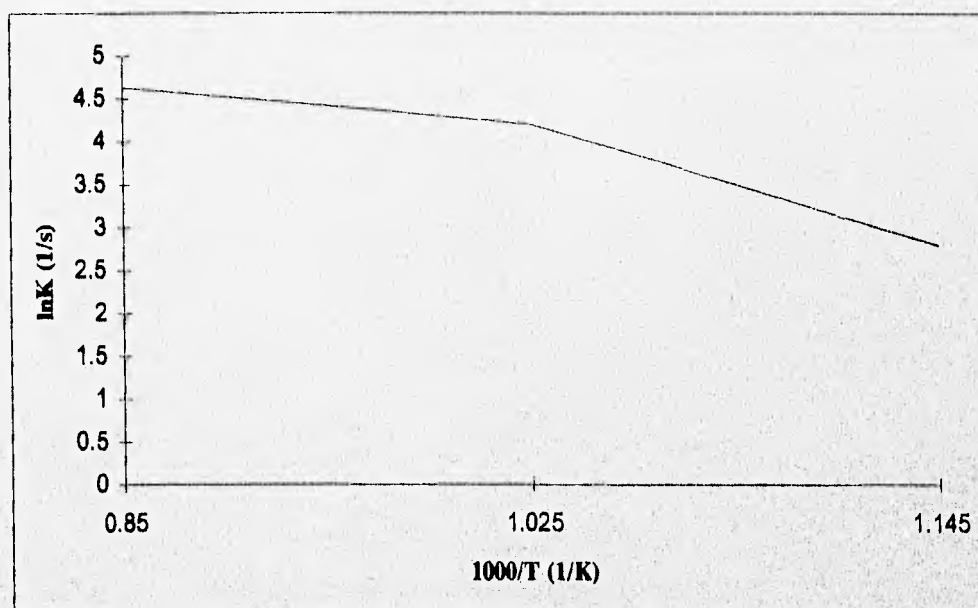
De acuerdo con Gilot, los valores de la constante de reacción en un medio no catalizado en el rango de 600°C a 900°C para el negro de humo son los siguientes :

Temperatura °C	600	650	700	800	900
Constante de reacción (ln) s <sup>-1</sup>	2.708	3.367	4.174	4.344	4.615

**Tabla 10.1. Valores de la constante de reacción en un medio no catalizado.**

Estos valores son válidos para concentraciones de oxígeno de 5%, 10% y 15% y parecen ser especialmente confiables en los límites inferiores de temperatura (c.a.600°C), zona que corresponde cercanamente al rango de temperaturas involucrado en el proceso de regeneración del filtro.

Al ser la combustión del hollín una reacción de primer orden, la constante cinética asociada obedece a una ecuación de Arrhenius. En el caso del negro de humo, el diagrama de Arrhenius correspondiente se presenta a continuación:



**Figura 10.1. Diagrama de Arrhenius del negro de carbón para conocer la constante de oxidación en función de la temperatura.**

En este diagrama se puede apreciar una línea quebrada en un punto. La función que relaciona el logaritmo natural de la constante de reacción y el inverso de la temperatura absoluta muestra dos zonas que se distinguen por tener dos pendientes diferentes. Cada una de estas pendientes representa una energía de activación. Por debajo de 700°C se identifica una energía de activación de 103 kJ/mol, lo que corresponde a una oxidación cinéticamente controlada (la oxidación depende esencialmente de la excitación molecular); por arriba de esta temperatura, la energía de activación necesaria para la oxidación es de 20 kJ/mol. (En este caso la excitación molecular no es obstáculo para la oxidación, que estará determinada por la velocidad de difusión del oxígeno

en condiciones de densidad constante, con el oxígeno consumiéndose cerca de, o en la superficie del hollín). Una oxidación cinéticamente controlada estaría asociada a una fracción en masa de oxígeno uniforme a lo largo del lecho de carbón, con una tasa de combustión proporcional a la concentración inicial y con una fuerte dependencia de la temperatura ; una oxidación controlada por efectos difusivos se caracterizaría por reacción superficial, sin relación con la concentración original de carbón. En realidad, existe régimen mixto (combinación de efecto difusivo y cinético), pero como se menciona anteriormente por arriba y por debajo de una temperatura crítica el mecanismo predominante es uno u otro.

En el caso de interés, inicialmente la regeneración depende de que todo el filtro llegue a la temperatura crítica, es decir al punto de quiebre de la recta. Esto involucra exclusivamente la zona controlada por mecanismos cinéticos. Una vez superada esta temperatura crítica la velocidad de combustión del hollín se rige por mecanismos difusivos. Si no hay limitantes importantes en el suministro de oxígeno, lo cuál no es de esperar con el sistema propuesto, la velocidad de combustión debe aumentar con la temperatura, con lo que disminuye el tiempo de regeneración. En este trabajo se optó por suponer que la velocidad de reacción está siempre regulada cinéticamente, (lo cuál arroja resultados igualmente pesimistas en cuanto al tiempo de regeneración), para conservar la aproximación con un enfoque conservador.

El valor de la constante de reacción considerado en el modelo es --en realidad-- considerablemente mayor al expuesto en las tablas anteriores. Esto se debe a que en el medio catalizado se facilita considerablemente la combustión del material particulado. Se puede hacer un análisis para conocer el valor de la pendiente correspondiente al medio catalítico. El razonamiento se expone a continuación. La pendiente del diagrama de Arrhenius está dada por el cociente de la energía de activación y la constante del aire. Por otra parte, se puede considerar que dicha proporción en el número de moléculas energéticamente aptas para iniciar la combustión es la misma, no importando las condiciones en que ocurra la oxidación (medio catalizado o no catalizado):

$$n_E/n = e^{E_1/RT_1} = e^{E_2/RT_2} \quad \text{de donde}$$

$$E_1/T_1 = E_2/T_2 \quad \text{o bien,}$$

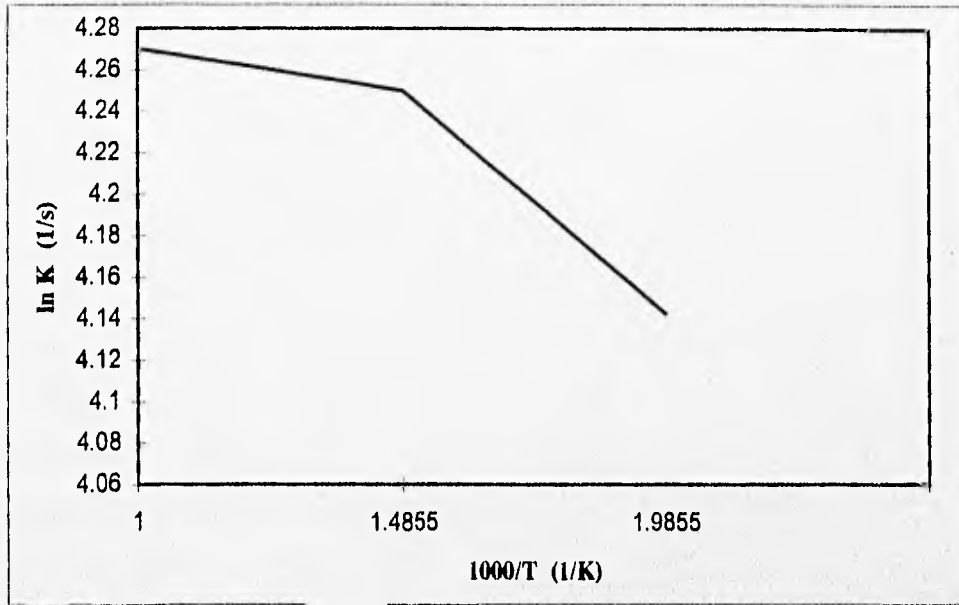
$$E_2 = E_1 (T_2/T_1)$$

Como se conoce la energía de activación en el medio no catalizado (103 kJ/mol en la zona cinéticamente controlada y 20 kJ/mol en la zona difusivamente controlada) y las temperaturas críticas 1 y 2 (750°C y 450°C respectivamente), se puede llegar a conocer las energías de activación correspondientes a los dos tipos de combustión identificados (controlado predominantemente por mecanismos difusivos o cinéticos). Estas energías de activación serían (61.8 kJ/mol y 12 kJ/mol para combustión difusiva y cinéticamente controlada).

De acuerdo con este cálculo, se ve que la pendiente de la recta definida por  $-E/R$  disminuye, lo que significa que el aumento en el valor de la constante de reacción es más pequeño en el medio catalítico. Esto significa que hay mayor uniformidad en la velocidad de combustión. El baño catalítico tendría como efecto benéfico principalmente el que los valores de la constante de reacción identificados para una temperatura en particular son mucho más altos que los identificados para la misma temperatura en ausencia de las especies catalíticas.

La principal dificultad que existe radica en la situación de las líneas generadas, que si bien disminuyen sus pendientes a valores calculables (y con ello la variación de la velocidad de reacción con la temperatura), su desplazamiento hacia arriba, donde se identifica una mayor velocidad de reacción, no es del todo claramente identificable. En el modelado se consideró que la constante de reacción se desplaza tanto como la temperatura crítica, es decir que a 450°C en el medio catalizado se identifican valores semejantes a 750°C en medio no catalizado. Para fines prácticos, se supuso que el punto de inflexión de la curva coincide con la temperatura de ignición o temperatura crítica. Así, con referencia al diagrama de Arrhenius en medio no catalizado, el punto de inflexión se colocó a la altura de la abscisa  $1000/673.15$ , es decir 1.4855 a cuyo valor corresponde un valor de  $\ln K$  de 4.25. En este caso, se tendría un diagrama de Arrhenius como el siguiente:





**Figura 10.2. Diagrama de Arrhenius corregido para el negro de carbón en medio catalizado.**

Para mantenerse del lado pesimista en la aproximación se decidió considerar valores de K correspondientes al medio no catalizado; de esta manera, se considera un valor para lnK igual a 3, lo cuál también es conservador. Otros estudios encuentran valores superiores hasta en un 20% para la velocidad de oxidación.

La caída de presión considerada a través del filtro es --de acuerdo con el fabricante-- de 0.04" de columna de mercurio por gramo de hollín filtrado. Para dar credibilidad al modelo, se supuso una carga de partículas equivalente a la utilizada en los estudios experimentales de los que se tomó el estimado de la velocidad de reacción. Esto para todo el filtro equivale a 40 gramos, lo cuál representa una caída de presión total en el filtro de 5.4 kPa, por debajo del límite tolerable de 10 kPa.

El resto de los parámetros están definidos por las características del filtro, la configuración del sistema y las condiciones con las que entra el aire de regeneración. Los valores se listan a continuación:

Longitud del ducto	0.203 m
Longitud del lado de la sección cuadrada del ducto	0.0025 cm
Espesor de la pared del ducto	0.0004mm
Presión de entrada	120kPa
Presión de salida	110kPa
Índice adiabático del aire	1.4
Coefficiente de conducción térmica del aire	0.062 W/mK
Número de Prandtl del aire	0.72
Viscosidad cinemática del aire	0.0001029 m <sup>2</sup> /s
Coefficiente de conducción térmica del filtro	3.5 W/mK
Densidad del filtro	2000 kg/m <sup>3</sup>
Capacidad térmica del filtro	1000 J/kgK
Velocidad de aire a la entrada	1 m/s y 2m/s
Temperatura del aire a la entrada	1048 K y 950 K
Temperatura inicial del filtro	650 K
Intervalos en los que se divide el filtro	9
Intervalo de tiempo para las iteraciones	0.009s

Las características del aire de regeneración de 1048 K y 1m/s por un lado y 950 K y 2 m/s por el otro lado, corresponden a las curvas de enfriamiento del DIT para flujos de 22 m<sup>3</sup>/hr y 46 m<sup>3</sup>/hr, respectivamente.

## **CAPÍTULO XI**

### **RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN E INTERPRETACIÓN DE LOS MISMOS**

---

La simulación del proceso de regeneración, de acuerdo al modelo matemático planteado previamente, se llevó a cabo considerando diferentes condiciones del aire de regeneración proveniente del Dispositivo de Inercia Térmica (temperatura y velocidad a la entrada del filtro). Las condiciones comunes bajo las cuales se corrieron las diferentes simulaciones se discuten en el capítulo correspondiente a selección de parámetros.

Para el análisis general de las simulaciones se seleccionaron aquellas cuyos valores paramétricos arrojaron los resultados más pesimistas y más optimistas. De esta forma, mientras los valores

paramétricos se encuentren dentro del rango definido por éstas, el comportamiento esperado queda comprendido dentro de los límites definidos por los resultados de las simulaciones extremas. Estos resultados se presentan y discuten a continuación.

Para cada una de las simulaciones se presentan seis gráficas que muestran el comportamiento esperado del proceso de regeneración. Las gráficas mostradas, lo que representan y los resultados relevantes que se espera obtener de ellas son las siguientes :

- **Temperatura de los nodos 2 y 3 en el tiempo**

Esta gráfica muestra la temperatura del aire en el ducto de salida (nodo 3) en comparación con la temperatura de la pared filtrante (nodo 2) en el extremo de entrada del aire de regeneración. En esta gráfica se pueden apreciar las temperaturas máximas del aire y el material cerámico en el proceso de regeneración, la mayor de las cuales es la temperatura del aire. El dato de la temperatura máxima en el material cerámico permite conocer el riesgo de resquebrajamiento o fusión del filtro como se describe en el capítulo correspondiente, al compararlo con el valor de la temperatura crítica del material ( 1100°C). Asimismo, se puede observar el momento de ignición del hollín. El tiempo correspondiente a este punto **identifica** el tiempo necesario para que se inicie la regeneración del filtro.

- **Temperatura de los nodos 29 y 30 en el tiempo**

Esta gráfica muestra la temperatura del aire en el ducto de salida (nodo 30) en comparación con la temperatura de la pared filtrante (nodo 29) en el extremo de salida del aire de regeneración. En ella se puede observar el momento en que el nodo extremo del filtro alcanza la temperatura de ignición del hollín. El tiempo correspondiente a este instante es el necesario para que la regeneración del filtro pueda considerarse autosostenible. Una vez que todo el hollín se ha encendido (ha alcanzado la temperatura crítica), la regeneración del filtro ya no depende de la elevación de temperatura, sino del oxígeno presente. Así, mientras haya oxígeno suficiente, la combustión puede continuar sin ayuda del DIT (aunque sigue siendo

necesaria la corriente de aire regenerativo para asegurar una concentración adecuada de oxígeno).

- Temperatura del aire en el ducto de salida para todos los nodos en el tiempo

Esta gráfica muestra la variación de la temperatura del aire de salida a lo largo del filtro con el tiempo. En ella se pueden observar los instantes en que se enciende el hollín a lo largo del filtro, lo que permite tener una idea de la velocidad de propagación de la flama.

- Gradientes de temperatura para nodos representativos en el tiempo

En esta gráfica se pueden observar los gradientes de temperatura esperados entre diferentes nodos contiguos de la pared cerámica del filtro. Si los valores máximos no superan el límite establecido ( $\pm 35^{\circ}\text{C}/\text{cm}$ ), la durabilidad del filtro no se ve afectada de manera importante por efecto de fatiga térmica.

- Temperatura del aire de salida vs. posición en el filtro para diferentes tiempos

Esta gráfica permite observar el movimiento del frente de flama a lo largo del filtro en el tiempo. La figura puede compararse con las fotografías equivalentes que aparecen en el capítulo V.

- Porcentaje de regeneración en el tiempo

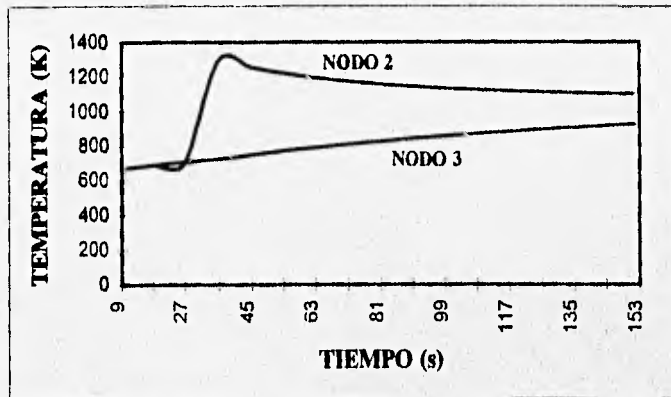
Esta gráfica muestra el grado de regeneración del filtro, dado por el porcentaje de hollín consumido respecto a la carga inicial del filtro. La curva estimada por el programa está acompañada de una aproximación a la misma que permite calcular el tiempo necesario para tener un porcentaje dado de regeneración (idealmente, 100%).

Las simulaciones que marcan los resultados extremos se distinguen por las condiciones del aire regenerante proveniente del dispositivo de inercia térmica. La primera de ellas, distinguida por la letra A, considera la temperatura máxima en el aire de regeneración, correspondiente a la menor velocidad del mismo. Los valores utilizados son 1048 K y 1.0 m/s respectivamente. La segunda

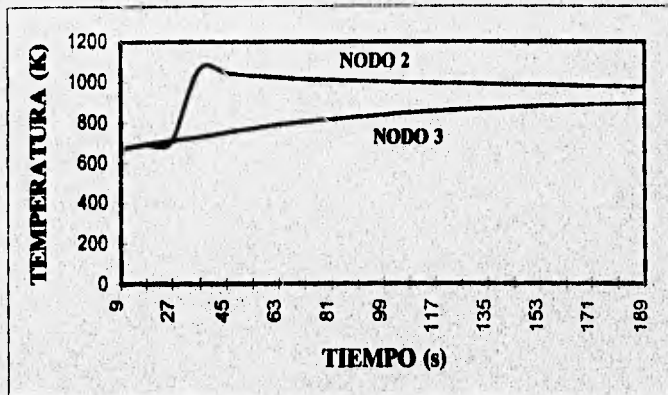
simulación, identificada por la letra B, se llevó a cabo considerando la menor temperatura y mayor velocidad del aire de entrada. Los valores son 950 K y 2 m/s respectivamente.

Los resultados obtenidos, junto con la discusión de los mismos, se presentan a continuación.

### TEMPERATURA DE LOS NODOS 2 Y 3 EN EL TIEMPO



**Figura 11.1. Simulación A**

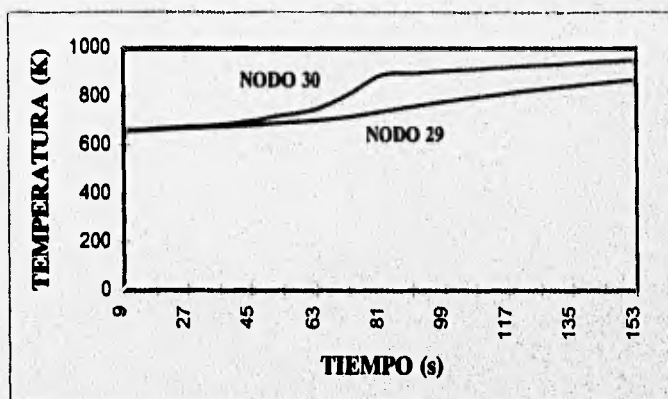


**Figura 11.2. Simulación B**

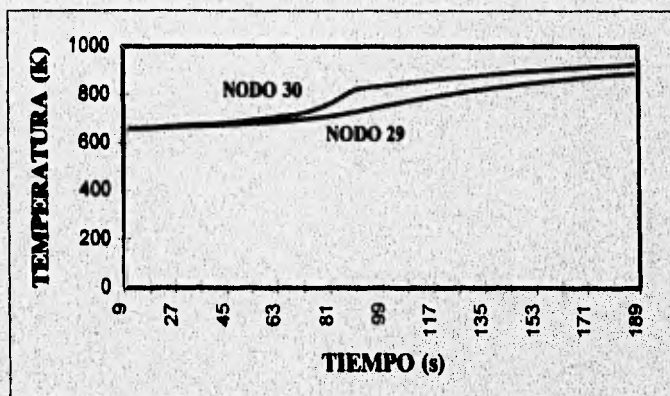
En las gráficas se observa, por un lado, que las temperaturas máximas obtenidas durante el proceso son *ca.* 1300 K y *ca.* 920 para el aire y el material cerámico respectivamente, en la simulación A. En la simulación B las temperaturas máximas son *ca.* 1100 K y *ca.* 890 K para el aire y el filtro respectivamente. En ambos casos, el material cerámico se encuentra muy por

debajo de la temperatura crítica de 1100 °C (1373 K), al igual que el aire de regeneración. Esto asegura que ninguna temperatura dentro del filtro rebasa el valor crítico mencionado. Este resultado se debe a la configuración del sistema, pues al entrar el aire regenerante en sentido inverso, se favorece la disipación de calor generado en la combustión, evitando la elevación de temperatura en el filtro a valores inconvenientes. Por otro lado, se desprende que para cualquiera de las simulaciones se requiere un tiempo de *ca.* 27 segundos para iniciar la regeneración del filtro.

### TEMPERATURA DE LOS NODOS 29 Y 30 EN EL TIEMPO



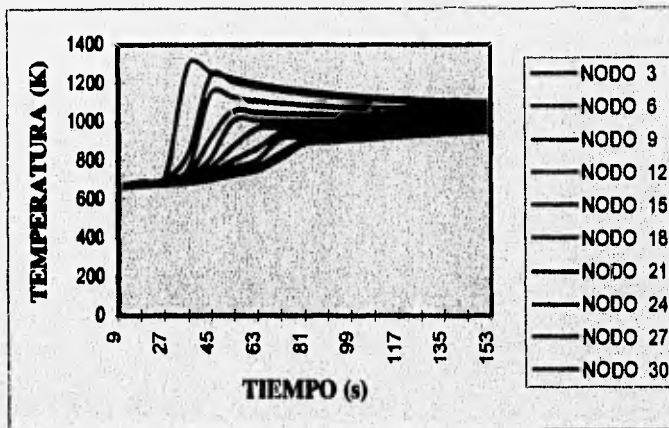
**Figura 11.3. Simulación A**



**Figura 11.4. Simulación B**

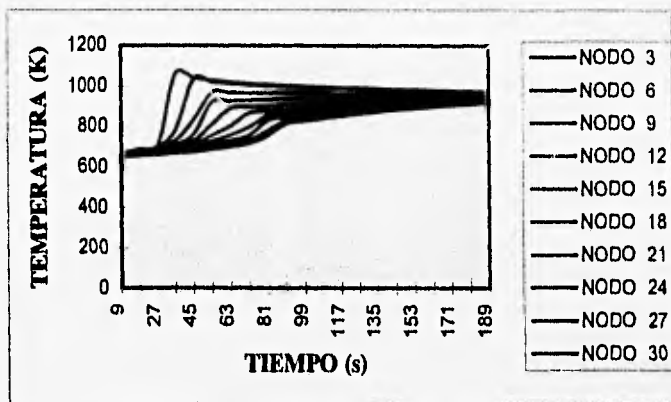
En estas gráficas se observa que en la simulación A el nodo extremo del filtro alcanza la temperatura crítica a los 65 segundos de iniciarse el flujo de aire regenerante. En la simulación B, el tiempo necesario para que esto ocurra es de 74 segundos. Cuando esta temperatura se alcanza, el hollín a lo largo del filtro está encendido y el suministro de energía externa ya no es necesario, por lo que la regeneración se puede considerar autosostenible. En ambos casos, el tiempo de ignición del último nodo está por debajo del tiempo en que la temperatura del aire proveniente del DIT cae por debajo de la temperatura de ignición, lo que valida la suposición de la temperatura promedio considerada para el aire de regeneración y muestra que la capacidad de regeneración del DIT es suficiente.

### TEMPERATURA DEL AIRE EN EL DUCTO DE SALIDA PARA TODOS LOS NODOS EN EL TIEMPO



**Figura 11.5. Simulación A. El incremento en el número de nodo es en dirección del aire de regeneración**

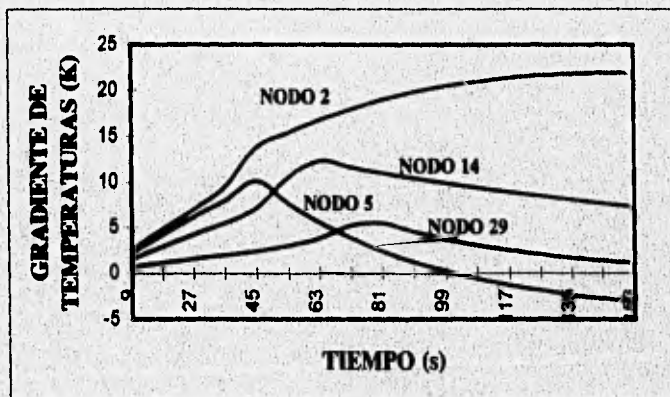




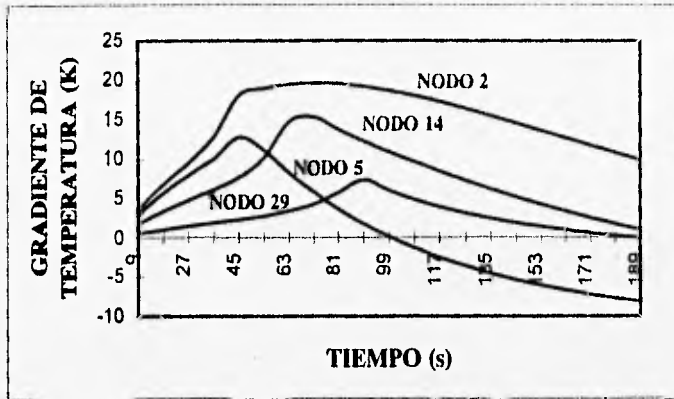
**Figura 11.6. Simulación B**

En estas gráficas comprueban que la temperatura máxima identificada en el proceso se sitúa en el extremo de entrada del aire de regeneración en ambas simulaciones. Igualmente, se observa que la ignición de las partículas ocurre progresivamente desde el extremo de entrada hasta el extremo de salida. El tiempo requerido para que todo el filtro alcance la temperatura crítica está dado por la diferencia entre el tiempo necesario para que prenda el último nodo y el tiempo necesario para que prenda el primer nodo. En la simulación A el tiempo de propagación de la temperatura crítica es de 38 segundos; en la simulación B, 47 segundos.

**GRADIENTES DE TEMPERATURA PARA NODOS REPRESENTATIVOS EN EL TIEMPO**



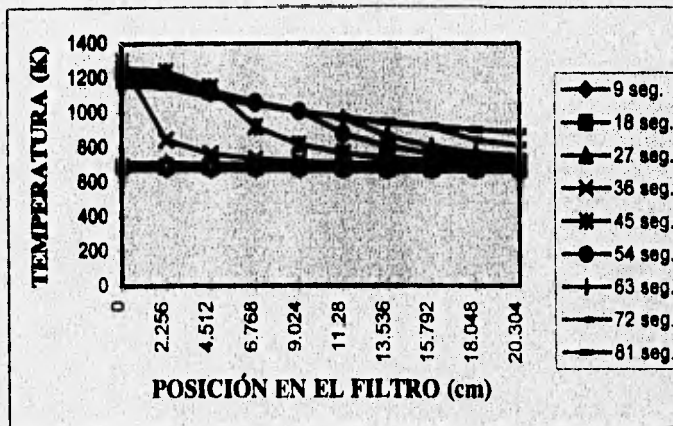
**Figura 11.7. Simulación A**



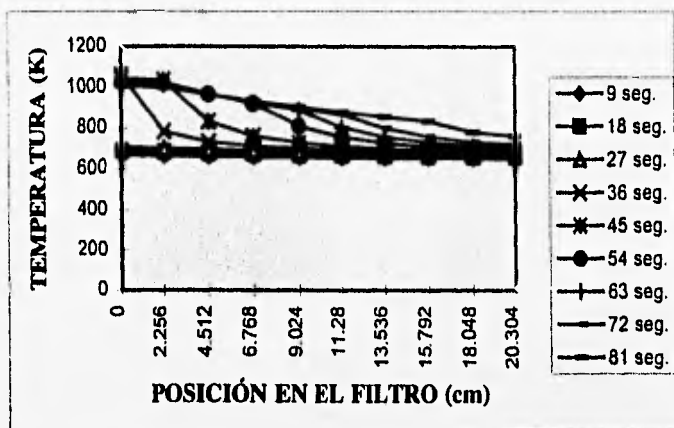
**Figura 11.8. Simulación B**

En estas gráficas se ve que los valores de los gradientes de temperatura entre cualesquiera nodos adyacentes está por debajo del límite permisible de  $\pm 35^{\circ}\text{C}$ . En la simulación A el gradiente máximo esperado es de  $22^{\circ}\text{C}$ ; en la simulación B, de  $20^{\circ}\text{C}$ . En ambos casos, el gradiente máximo ocurre entre los primeros dos nodos del filtro (nodos 2 y 5). Este resultado elimina a la fatiga térmica del filtro como factor de trascendencia.

**TEMPERATURA EN EL AIRE DE SALIDA vs POSICIÓN EN EL FILTRO PARA DIFERENTES TIEMPOS**



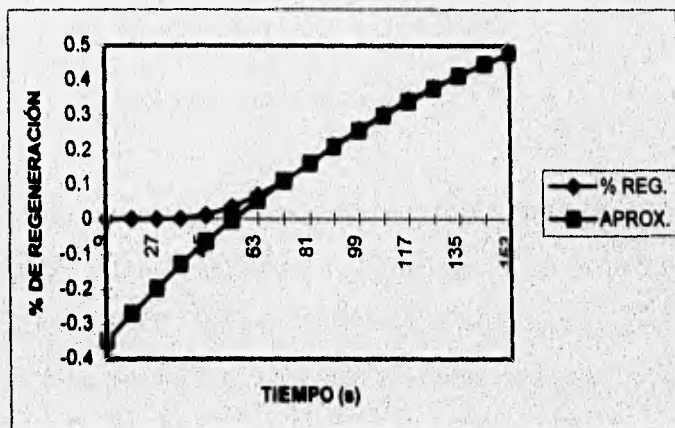
**Figura 11.9. Simulación A**



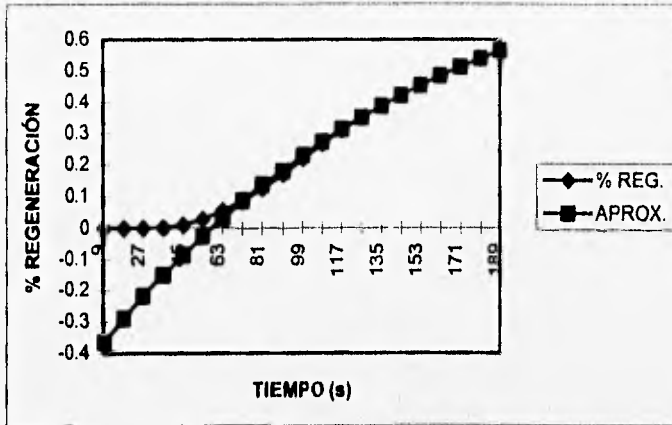
**Figura 11.10. Simulación B**

Estas gráficas son sólo esquemáticas y muestran, propiamente, la propagación de la flama a lo largo del filtro, tal y como se indicó en la descripción general de las gráficas. Al igual que en las gráficas 11.5 y 11.6 se observa una propagación paulatina de la combustión a lo largo del filtro.

### REGENERACIÓN DEL FILTRO EN EL TIEMPO



**Figura 11.11. Simulación A**



**Figura 11.12. Simulación B**

En la simulación A, la regeneración del filtro alcanzó cerca del 47.8% al parar la simulación (153 segundos). Para ese mismo tiempo, la simulación B mostró una regeneración de 45.4% y, para 189 segundos, al parar la simulación, de 56.4%. Las aproximaciones a la curvas generadas fueron las siguientes:

**A : % Regeneración =  $-1.432 e^{-0.0066 t} + 1$**

**B : % Regeneración =  $-1.446 e^{-0.0064 t} + 1$**

A partir de estas aproximaciones se estimó el tiempo necesario para regenerar los filtros al 95% y 99%. Para la simulación A, los tiempos fueron de 508 y 752 segundos respectivamente; para la simulación B, 525 y 777 segundos. De esta manera, los límites esperados para la regeneración del filtro son 8.47 minutos y 8.75 minutos para tener un 95% de regeneración y 12.53 y 12.95 minutos para tener un 99% de regeneración.

Un estudio señala que un camión de servicio pesado a 50 mi/hora genera  $0.5g_{HOLLIN}/milla$  (Rao). Considerando este valor, se puede estimar el tiempo necesario para la saturación del filtro. El cálculo se hizo considerando una carga de 40g en todo el filtro de acuerdo con la selección de parámetros. Su resultado indica que se necesitan 1.6 horas para saturar el filtro. El tiempo requerido para la regeneración del filtro es -- incluso en el caso más pesimista-- mucho menor a

este tiempo. Así, es de esperar que --aún siendo mucho mayor la emisión de partículas-- existe suficiente tiempo para completar la regeneración del filtro, antes que el filtro paralelo se sature.

## **CAPÍTULO XII**

### **CONCLUSIONES**

---

Con base en los resultados mostrados en el capítulo anterior, se desprenden las siguientes conclusiones :

- **La energía almacenada en el dispositivo de inercia térmica, que se transfiere al aire de regeneración, es suficiente para iniciar la combustión de las partículas en el interior del filtro.**
- **El tiempo que tarda en iniciarse la combustión es prácticamente independiente de las condiciones del aire de regeneración, para el rango de temperaturas considerado.**

- La energía almacenada en el dispositivo de inercia térmica es suficiente para llevar el proceso al régimen de regeneración autosostenible.
- La regeneración del filtro se lleva a cabo de manera progresiva, por lo que se puede considerar un proceso de combustión controlado.
- El tiempo necesario para llevar a cabo la regeneración del filtro es mucho menor al tiempo requerido para saturar el filtro paralelo.
- Las temperaturas máximas del aire y del material cerámico se localizan en el extremo de entrada del aire de regeneración.
- Las temperaturas máximas del proceso se localizan en el aire y no en la pared del filtro.
- El esquema de regeneración inversa favorece la disipación del calor en el material cerámico.
- La integridad física del material cerámico no se ve amenazada por las temperaturas involucradas en el proceso.
- La durabilidad del filtro no se ve mermada debido a la fatiga térmica generada por los gradientes de temperatura involucrados.
- El sistema de regeneración inversa planteado es operacionalmente factible y aparentemente capaz de satisfacer los límites de emisión fijados por la Secretaría de Desarrollo Social.
- Es necesario realizar pruebas experimentales para corroborar y ratificar las conclusiones anteriores.

## COMENTARIOS

---

Este trabajo representa un primer acercamiento para determinar la funcionalidad del esquema propuesto y estimar el comportamiento del mismo, con el objeto de fijar valores paramétricos preliminares para la realización de pruebas experimentales del sistema. Desgraciadamente, estas pruebas no pudieron llevarse a cabo, por un lado debido a la falta de infraestructura necesaria y los trabajos de instalación y obra civil en el Laboratorio de Control de Emisiones de la Facultad de Ingeniería, y por el otro lado, a la falta de presupuesto suficiente para la adquisición del equipo y material necesarios para controlar y llevar a cabo las pruebas al sistema.

Es importante señalar que las suposiciones realizadas en el modelado del proceso de combustión de las partículas son válidas para condiciones controladas de laboratorio. Esto significa que



durante el régimen de trabajo de un motor diesel las condiciones del gas de escape varían considerablemente.

Del mismo modo, las constantes de reacción involucradas en la oxidación del hollín en el filtro presentan variación según el régimen de operación del motor y la evolución de la combustión en el filtro. Esto es especialmente cierto cuando se supera la temperatura crítica, situación identificada por el punto de quiebre en el diagrama de Arrhenius pertinente, que implica mayor velocidad de reacción y un fenómeno de oxidación controlado por fenómenos difusivos. No obstante, los valores considerados en las variables críticas son promedio y --como tales-- sirven para tener una idea de qué esperar del proceso.

Las estimaciones del tiempo requerido para regenerar el filtro al 95% y 99% están basadas en un ajuste matemático que supone continuidad y estabilidad en la propagación de la combustión en el filtro. Esta suposición es factible, suponiendo un depósito uniforme de carbón a lo largo del filtro. En realidad el hollín no se deposita uniformemente en el filtro, sino que tiende a concentrarse en la parte más cercana al escape del motor.

El esquema de regeneración propuesto es factible de acuerdo con los contenidos de azufre presentes en el combustible Diesel SIN proporcionados por PEMEX. No obstante, un análisis independiente del combustible realizado por el Instituto de Investigaciones Eléctricas difiere considerablemente de los valores reportados por PEMEX por lo que no se puede confiar en contar con la calidad de combustible necesaria para evitar el envenenamiento del recubrimiento catalítico.

## APÉNDICE

---

### LISTADO DEL PROGRAMA

10 REM \*\*\*\*\* PROGRAMA PARA SIMULAR EL PROCESO \*\*\*\*\*  
20 REM  
30 REM \*\*\*\*\* DE REGENERACIÓN DE UN FILTRO\*\*\*\*\*  
40 REM  
50 REM \*\*\*\*\* CATALIZADO CARGADO CON PARTÍCULAS \*\*\*\*\*  
60 REM  
70 REM \*\*\*\*\* DE HOLLÍN \*\*\*\*\*  
80 REM  
90 CLS  
100 TIMES = "00:00"  
110 OPEN "O", 1, "C:RESULT"

```
120 SCREEN 2
130 DIM TEMP(35, 2)
140 DIM M(35, 35, 2)
150 DIM UI(35, 35)
160 DIM HF(35)
170 DIM QCOM(35)
175 DIM MC(35)
180 PRINT "PROGRAMA PARA SIMULAR LA REGENERACIÓN DEL FILTRO"
190 PRINT
200 REM
210 REM ***** INTRODUCCION DE CONSTANTES DEL AIRE Y DEL FILTRO *****
220 REM
230 PRINT "INTRODUCE LOS SIGUIENTES VALORES"
240 PRINT
260 INPUT "LONGITUD DEL DUCTO L (cm)"; LO
270 PRINT
280 INPUT "LADO DEL DUCTO l (cm)"; LA
290 PRINT
300 INPUT "ESPESOR DE LA PARED e (mm)"; E
310 PRINT
320 INPUT "PRESION DE ENTRADA Pe (Pa)"; PE
330 PRINT
340 INPUT "PRESION DE SALIDA Ps (Ps)"; PS
350 PRINT
360 INPUT "INDICE ADIABATICO DEL AIRE k "; K
370 PRINT
380 INPUT "COEFICIENTE DE CONDUCCION TERMICA DEL AIRE kqa (W/mK)"; KQA
390 PRINT
400 INPUT "NUMERO DE PRANDTL DEL AIRE Pr"; PR
410 PRINT
420 INPUT "VISCOSIDAD CINEMATICA DEL AIRE nu (m^2/s)"; NU
430 PRINT
440 INPUT "COFICIENTE DE CONDUCCION TERMICA DEL FILTRO kq (W/mK)"; KQ
450 PRINT
460 INPUT "DENSIDAD DEL FILTRO p (kg/m^3)"; RO
470 PRINT
```

```

480 INPUT "CAPACIDAD TERMICA DEL FILTRO C (J/kgK)"; C
490 PRINT
500 INPUT "VELOCIDAD DEL AIRE DE ENTRADA uo (m/s)"; UO
510 PRINT
520 INPUT "TEMPERATURA DEL AIRE DE ENTRADA Tdit (K)"; TDIT
530 PRINT
540 INPUT "TEMPERATURA INICIAL DEL FILTRO Tfil (K)"; TFIL
550 PRINT
560 INPUT "NUMERO DE INTERVALOS n EN LOS QUE VAS A DIVIDIR EL FILTRO"; N
570 PRINT
580 INPUT "LONGITUD DE LOS INTERVALOS DE TIEMPO dT (seg)"; DT
590 REM
600 REM
610 REM ***** VALORES DE DEFAULT DE LA CONSTANTES *****
620 REM
630 LO = .203: LA = .0025: E = .0004: POR = .48
640 CP = 1100: R = 287: K = 1.4: KQA = .062: PR = .72: NU = .0001029
650 KQ = 3.5: RO = 2000: C = 1000
660 PE = 120000!: PS = 110000!: UO = 1: TDIT = 1048: TFIL = 650:
670 MCO = .000008: KR = 20: MO2 = .1: DH = 28000000#: TCOMB = 723
680 N = 9: DT = .009
690 DX = LO / N: BETA = 4 * DX / LA: PF = (PE + PS) / 2: GAMA = PE / PF: F = DX / E: MCX = MCO / N
700 REM
710 REM
720 REM ***** INICIALIZACION DE TEMPERATURAS *****
730 P = 3 * (N + 1)
740 FOR I = 1 TO P
750 TEMP(I, 0) = TFIL
760 NEXT I
770 PRINT "TEMPERATURAS INICIALES"
780 PRINT
790 FOR I = 3 TO P STEP 3
800 PRINT TEMP(I, 0),
810 NEXT I
820 FOR I = 2 TO P - 1 STEP 3
830 PRINT TEMP(I, 0),

```

```

840 NEXT I
850 FOR I = 1 TO P - 2 STEP 3
860 PRINT TEMP(I, 0),
870 NEXT I
880 PRINT
890 REM
900 REM *****INICIALIZACION DE FLUJOS MASICO*****
910 REM
920 MI = PE / R / TDIT * UO * (LA ^ 2)
930 M = (3 * N) - 2
940 FOR I = 1 TO M STEP 3
950 J = I + 3
960 UI(I,J) = (-UO/LO^2)*((((I+J+1)/3)-1)*DX/2)^2)+UO
970 M(I, J, 0) = PE * (LA ^ 2) / R / TFIL * U1(I, J)
980 NEXT I
990 M(1, 2, 0) = MI * TDIT / TFIL - M(1, 4, 0)
1000 M(2, 3, 0) = M(1, 2, 0)
1010 M(3, 6, 0) = M(2, 3, 0)
1020 FOR I = 4 TO 3 * N - 2 STEP 3
1030 M(I, I + 1, 0) = M(I - 3, I, 0) - M(I, I + 3, 0)
1040 M(I + 1, I + 2, 0) = M(I, I + 1, 0)
1050 M(I + 2, I + 5, 0) = M(I - 1, I + 2, 0) + M(I + 1, I + 2, 0)
1060 NEXT I
1070 G = 3 * N + 1
1080 M(G, G + 1, 0) = M(G - 3, G, 0)
1090 M(G + 1, G + 2, 0) = M(G, G + 1, 0)
1100 MO = M(G - 1, G + 2, 0) + M(G + 1, G + 2, 0)
1110 PRINT
1120 PRINT M(3, 6, 0), M(6, 9, 0), MO
1130 PRINT M(2, 3, 0), M(5, 6, 0), M(8, 9, 0)
1140 PRINT M(1, 2, 0), M(4, 5, 0), M(7, 8, 0)
1150 PRINT MI, M(1, 4, 0), M(4, 7, 0)
1160 REM
1170 REM
1180 REM ***** DETERMINACION DE COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA *****
1190 REM

```

```

1200 REM
1210 COEF = PE * LA * CP / (R * 4 * DX * (1 - POR) * (TDIT - TFIL))
1220 HF(1) = COEF * (UO - UI(1, 4))
1230 FOR I = 4 TO 3 * N + 1 STEP 3
1240 HF(I) = (-HF(1) / N * (((I + 2) / 3) - 1)) + HF(1)
1250 NEXT I
1260 HF(3) = HF(G)
1270 HF(G + 2) = HF(1)
1280 FOR I = 4 TO 3 * N - 2 STEP 3
1290 HF(I + 2) = HF(2 + (3 * N) - I)
1300 NEXT I
1310 T = 0
1320 PRINT
1330 FOR W = 1 TO 1000
1340 REM
1350 REM
1360 REM ***** ITERACIONES EN EL TIEMPO *****
1370 REM
1380 REM
1390 REM ***** ITERACIONES DE TEMPERATURA *****
1400 REM
1410 TEMP(1, 1) = 1 / ((2 * R * DT / (LA ^ 2) / DX / PE * (MI - M(1, 2, 0) - M(1, 4, 0))) + (1 / TEMP(1, 0)))
1420 TEMP(2, 1) = (2 * DT / (RO * E * 4 * LA * DX * C * (1 - POR))) * ((M(1, 2, 0) * CP * TEMP(1, 0)) + (4 *
    LA * DX / 2 * (1 - POR) * HF(1) * (TEMP(1, 0) - TEMP(2, 0))) - (M(2, 3, 0) * CP * TEMP(2, 0)) - (4 * LA *
    DX / 2 * (1 - POR) * HF(3) * (TEMP(2, 0) - TEMP(3, 0)))) + TEMP(2, 0)
1430 TEMP(3, 1) = 1 / ((2 * R * DT / (LA ^ 2) / DX / PS * (M(2, 3, 0) - M(3, 6, 0))) + (1 / TEMP(3, 0)))
1440 FOR I = 4 TO N * 3 - 2 STEP 3
1450 TEMP(I, 1) = 1 / ((R * DT / PE / (LA ^ 2) / DX * (M(I - 3, 1, 0) - M(I, 1 + 3, 0) - M(I, 1 + 1, 0))) + (1 /
    TEMP(I, 0)))
1460 TEMP(I + 1, 1) = (DT / (RO * E * 4 * LA * DX * C * (1 - POR))) * ((M(I, 1 + 1, 0) * CP * TEMP(I, 0)) + (4 *
    LA * DX * (1 - POR) * HF(1) * (TEMP(I, 0) - TEMP(I + 1, 0))) - (M(I + 1, 1 + 2, 0) * CP * TEMP(I + 1, 0)) -
    (4 * LA * DX * (1 - POR) * HF(I + 2) * (TEMP(I + 1, 0) - TEMP(I + 2, 0)))) + TEMP(I + 1, 0)
1470 TEMP(I + 2, 1) = 1 / ((R * DT / PS / (LA ^ 2) / DX * (M(I - 1, 1 + 2, 0) + M(I + 1, 1 + 2, 0) - M(I + 2, 1 + 5,
    0))) + (1 / TEMP(I + 2, 0)))
1480 NEXT I
1490 G = 3 * N + 1

```

```

1500 TEMP(G, 1) = 1 / ((2 * R * DT / (LA ^ 2) / DX / PS * (M(G - 3, G, 0) - M(G, G + 1, 0))) + (1 / TEMP(G, 0)))
1510 TEMP(G + 1, 1) = (2 * DT / (RO * E * 4 * LA * DX * C * (1 - POR))) * ((M(G, G + 1, 0) * CP * TEMP(G, 0))
+ (4 * LA * DX / 2 * (1 - POR) * HF(G) * (TEMP(G, 0) - TEMP(G + 1, 0))) - (M(G + 1, G + 2, 0) * CP *
TEMP(G + 1, 0)) - (4 * LA * DX / 2 * (1 - POR) * HF(G + 2) * (TEMP(G + 1, 0) - TEMP(G + 2, 0)))) +
TEMP(G + 1, 0)
1520 TEMP(G + 2, 1) = 1 / ((2 * R * DT / (LA ^ 2) / DX / PS * (M(G - 1, G + 2, 0) + M(G + 1, G + 2, 0) - MO)) +
(1 / TEMP(G + 2, 0)))
1530 REM
1540 REM
1550 REM ***** ITERACIONES DE FLUJO MASICO *****
1560 REM
1570 T = T + 1
1580 M(1, 4, 1) = PE * (LA ^ 2) / R * UI(1, 4) / TEMP(1, 1)
1590 M(1, 2, 1) = (MI * TDIT / TEMP(1, 1)) - M(1, 4, 1) - (4 * LA * DX * (1 - POR) / 2 / CP * HF(1) / TEMP(1, 1)
* (TEMP(1, 1) - TEMP(2, 1)))
1600 M(2, 3, 1) = M(1, 2, 1) - (4 * LA * DX * E * POR * PF / 2 / R / DT * ((1 / TEMP(2, 1)) - (1 / TEMP(2, 0))))
1610 M(3, 6, 1) = (M(2, 3, 1) * TEMP(2, 1) / TEMP(3, 1)) + (4 * LA * DX * (1 - POR) / 2 / CP * HF(3) / TEMP(3,
1) * (TEMP(2, 1) - TEMP(3, 1))) + (QCOM(2) / 2 / CP / TEMP(3, 1))
1620 FOR I = 4 TO 3 * N - 2 STEP 3
1630 M(I, I + 3, 1) = PE * (LA ^ 2) / R * UI(I, I + 3) / TEMP(I, 1)
1640 M(I, I + 1, 1) = (M(I - 3, I, 1) * TEMP(I - 3, 1) / TEMP(I, 1)) - M(I, I + 3, 1) - (4 * LA * DX * (1 - POR) / CP
* HF(I) / TEMP(I, 1) * (TEMP(I, 1) - TEMP(I + 1, 1)))
1650 M(I + 1, I + 2, 1) = M(I, I + 1, 1) - (4 * LA * DX * E * POR * PF / R / DT * ((1 / TEMP(I + 1, 1)) - (1 /
TEMP(I + 1, 0))))
1660 M(I + 2, I + 5, 1) = (M(I - 1, I + 2, 1) * TEMP(I - 1, 1) / TEMP(I + 2, 1)) + (M(I + 1, I + 2, 1) * TEMP(I + 1,
1) / TEMP(I + 2, 1)) + (4 * LA * DX * (1 - POR) / CP * HF(I + 2) / TEMP(I + 2, 1) * (TEMP(I + 1, 1) -
TEMP(I + 2, 1))) + (QCOM(I + 1) / CP / TEMP(I + 2, 1))
1670 NEXT I
1680 M(G, G + 1, 1) = (M(G - 3, G, 1) * TEMP(G - 3, 1) / TEMP(G, 1)) - (4 * LA * DX * (1 - POR) / 2 / CP *
HF(G) / TEMP(G, 1) * (TEMP(G, 1) - TEMP(G + 1, 1)))
1690 M(G + 1, G + 2, 1) = M(G, G + 1, 1) - (4 * LA * DX * E * POR * PF / 2 / R / DT * ((1 / TEMP(G + 1, 1)) - (1
/ TEMP(G + 1, 0))))
1700 MO = (M(G - 1, G + 2, 1) * TEMP(G - 1, 1) / TEMP(G + 2, 1)) + (M(G + 1, G + 2, 1) * TEMP(G + 1, 1) /
TEMP(G + 2, 1)) + (4 * LA * DX * (1 - POR) / 2 / CP * HF(G + 2) / TEMP(G + 2, 1) * (TEMP(G + 1, 1) -
TEMP(G + 2, 1))) + (QCOM(G + 1) / 2 / CP / TEMP(G + 2, 1))
1710 REM

```

```

1720 REM *****IMPRESION DE RESULTADOS*****
1730 REM
1740 CLS
1750 PRINT
1760 PRINT "DX = ", DX, " DT = ", DT
1770 PRINT "TIEMPO SIMULADO = ", DT * T, "SEGUNDOS"
1780 PRINT "TIEMPO REAL = ", TIMES, "SEGUNDOS"
1790 PRINT
1800 PRINT "TEMPERATURAS FINALES"
1810 PRINT
1820 FOR I = 3 TO 3 * N + 3 STEP 3
1830 PRINT TEMP(I, 1), ,
1840 TEMP(I, 0) = TEMP(I, 1)
1850 NEXT I
1860 PRINT
1870 FOR I = 2 TO 3 * N + 2 STEP 3
1880 PRINT TEMP(I, 1), ,
1890 TEMP(I, 0) = TEMP(I, 1)
1900 GOSUB 2220
1920 NEXT I
1930 PRINT
1940 FOR I = 1 TO 3 * N + 1 STEP 3
1950 PRINT TEMP(I, 1), ,
1960 TEMP(I, 0) = TEMP(I, 1)
1970 NEXT I
1980 PRINT
1990 PRINT QCOM(2), TDIT, HF(3)
2000 FOR I = 3 TO 3 * N STEP 3
2010 M(I, I + 3, 0) = M(I, I + 3, 1)
2020 NEXT I
2030 FOR I = 2 TO 3 * N + 2 STEP 3
2040 M(I, I + 1, 0) = M(I, I + 1, 1)
2050 NEXT I
2060 FOR I = 1 TO 3 * N + 1 STEP 3
2070 M(I, I + 1, 0) = M(I, I + 1, 1)
2080 NEXT I

```



```

2090 FOR I = 1 TO 3 * N - 2 STEP 3
2100 M(I, I + 3, 0) = M(I, I + 3, 1)
2110 NEXT I
2120 NEXT W
2130 PRINT #1,
2140 PRINT #1, "TIEMPO = ", T * DT, "SEGUNDOS"
2150 PRINT #1,
2160 FOR I = 1 TO 3 * N + 3
2170 PRINT #1, TEMP(I, 0),
2180 NEXT I
2190 GOTO I330
2200 END
2210 REM
2220 REM ***** SUBROUTINA DE DETERMINACION DE CALOR GENERADO *****
2230 REM
2240 IF TEMP(I, 0) >= TCOMB THEN GOTO 2250 ELSE RETURN
2250 IF QCOM(I) = 0 THEN GOTO 2260 ELSE GOTO 2310
2260 MC(I) = MCX
2270 RC = (6.696428E-03 * KR * PF / R * MO2) / TEMP(I, 0)
2280 QCOM(I) = DH * RC * MC(I)
2290 MC(I) = MC(I) * (1 - (RC * DT))
2300 RETURN
2310 RC = (6.696428E-03 * KR * PF / R * MO2) / TEMP(I, 0)
2320 QCOM(I) = DH * RC * MC(I)
2330 MC(I) = MC(I) * (1 - (RC * DT))
2340 RETURN

```

## XVI BIBLIOGRAFÍA

---

- Barale, R. *et al.* "Preliminary Investigation on Genotoxic Potential of Diesel Exhaust". SAE Paper 920397.
- Barbella, R. *et al.* "Soot and Unburnt Liquid Hydrocarbon Emissions From Diesel Engines" en *Combustion Science and Technology*, vol 59. Londres : Gordon and Breach , 1988.
- Benítez B., Luis y Guadalupe Quiñones Silva "El cáncer. ¿Un problema de salud en México ?" en Revista Médica del IMSS. México :IMSS,1991
- Bykowski, B. "Formulation and Evaluation of Alternate Diesel Particulate Trap Media". ASME Paper 87-ICE-36.

- Ciajolo, A. *et al.* "Combustion of Tetradecane and Tetradecane/ $\alpha$ -Methylnaphthalene in a Diesel Engine With Regard to Soot and PAH Formation" en *Combustion Science and Technology*, vol 87. Londres : Gordon and Breach , 1993.
- "Diesel Exhaust: A Critical Analysis of Emissions, Exposure, and Health Effects. Cambridge, Mass.: Health Effects Institute, 1995. Identification and Risk Quantitation. Stockholm, mayo-junio, 1992.
- Emmelin, A. *et al.* "Diesel Exhaust Exposure and Smoking :A Case Referent Study of Lung Cancer Among Swedish Dock Workers" en *Epidemiology Resources, Inc.*, 1993.
- Engler, B. *et al.* "Catalytically Activated Diesel Particulate Traps - New Development and Applications". SAE Paper 860007.
- Gilot, P. *et al.* "Determination of Kinetic Data for Soot Oxidation. Modeling of Competition Between Oxygen Diffusion and Reaction During Thermogravimetric Analysis" en *Combustion and Flame*. Elsevier Science Publishing Co. Inc., 1993.
- Glassman, I. *Combustion*. London :Academic Press, 1987.
- Hammerle, R. *et al.* "A Perspective on the Potential Developmente of Environmentally Acceptable Light-duty Diesel Engines", en Symposium on Risk Assessment of Urban Air :Emissions, Exposures, Risk
- Hühwohl, G. y Pischinger, F. "Self-Supporting Regeneration of Diesel Particulate Traps". SAE Paper 870017.
- Johnson, J. H. *et al.* "A Review of Diesel Particulate Control Technology and Emissions Effects - 1992 Horning Memorial Award Lecture". SAE Paper 940233
- Kabuto *et al.* "Associations Between Road Side Diesel Exhaust Pollutions and Female Lung Cancer Mortality in the Greater Tokio Area (GTA)" en la Fourth Annual Meeting of the International Society for Environmental Epidemiology (ISEE) and the International Society of Exposure Analysis, Cuernavaca, Mor., México.
- Kanury, M. *Introduction to Combustion Phenomena*. New York :Gordon & Breach Science Publishers, 1975.
- Khair, M. K. "Progress in Diesel Engine Emissions Control". ASME Paper 92-ICE-14.

- Lipkea, W. H. y Johnson, J. H. "The Physical and Chemical Character of Diesel Particulate Emissions - Measurement Techniques and Fundamental Considerations". SAE Paper 780108.
- MacDonald, J. S. y Simon, G. M. "Development of a Particulate Trap System for a Heavy-Duty Diesel Engine". SAE Paper 880006.
- McCabe, R. W. y Sinkevitch, R. M. "Oxidation of Diesel Particulates by Catalyzed Wall-Flow Monolith Filters. 2. Regeneration Characteristics of Platinum, Lithium and Platinum-Lithium Catalyzed Filters". SAE Paper 872137.
- Nauss, K. and HEIDG. "Critical Issues in Assessing the Carcinogenicity of Diesel Exhaust: A Synthesis of Current Knowledge" en "*Diesel Exhaust: A Critical Analysis of Emissions, Exposure, and Health Effects*. Cambridge, Mass.: Health Effects Institute, 1995
- Noirot, R. *et al.* "Control of Soot Emission by Filtration and Post-Combustion. A Laboratory Study of the Regeneration of an Organic Particulate Trap Assisted by Hydrocarbon Injection", en *Combustion Science and Technology*, vol 85. Londres : Gordon and Breach, 1992.
- "Norma Oficial Mexicana NOM-PA-CCAT-007/93" aparecida en *El Diario Oficial de la Federación* con fecha del miércoles 23 de junio de 1993.
- Obuchi, A. *et al.* "A Study of an Optical Temperature Monitoring Device Sensitive in the Extended Region to Controlled Regeneration of a Diesel Particulate Filter", en *Combustion Science and Technology*, vol 77. Londres : Gordon and Breach , 1991.
- Oçizik, M.N. *Heat Conduction*. New York : Wiley and Sons, 1993.
- Pattas, K. N. y Stametelos, A. M. "Transient Behaviour of Turbocharged-Engined Vehicles Equipped with Diesel Particulate Traps". SAE Paper 920361.
- Pauli, E. *et al.* "The Description of the Regeneration Behavior of Diesel Particulate Traps With the Aid of a Mathematical Model". SAE paper 830180.
- Rao, V. D. *et al.* "Advanced Techniques for Thermal and Catalytic Diesel Particulate Trap Regeneration". SAE Paper 850014.
- Romero, A. *et al.* "Soot Combustion During Regeneration of Filter Ceramic Traps for Diesel Engines". SAE Paper 960127.

- Secretaría de Desarrollo Social (SEDESOL). "Norma Oficial Mexicana NOM-PA-CCAT-007/93" aparecida en *El Diario Oficial de la Federación* con fecha del miércoles 23 de junio de 1993.
- Takama, K. *et al.* "Regeneration Process of Ceramic Foam Diesel-Particulate Traps". SAE Paper 841394.
- Wiedemann, B. *et al.* "Regeneration of Particulate Filters at Low Temperatures". SAE Paper 830086.