



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



---

## TRABAJO DE FIN DE GRADO

# ANÁLISIS DE SISTEMAS DE REDUCCIÓN CATALÍTICA SELECTIVA CON INYECCIÓN DE UREA MEDIANTE CFD

GRADO EN INGENIERÍA MECÁNICA

**Autor**

Carlos Ortiz Ruiz

**Tutor**

Antonio Gil Megías

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Departamento de Máquinas y Motores Térmicos

Universitat Politècnica de València

2017-18

---

## RESUMEN

En la actualidad, con la entrada en vigor de la normativa Euro VI de emisiones contaminantes, se ha restringido en gran medida la emisión de óxidos de nitrógeno (NOx) en los vehículos con motor diésel. Por ello la tecnología referida a sistemas de reducción catalítica selectiva ha evolucionado exponencialmente en los últimos años.

En el presente proyecto se realiza un análisis mediante técnicas CFD (Computational Fluid Dynamics) de un sistema de reducción catalítica selectiva (SCR). El sistema SCR consiste en un reactor químico que tiene como finalidad la de reducción de óxidos de nitrógeno a nitrógeno molecular mediante agentes catalizadores.

En primer lugar, se realizará un estudio sobre el método empleado en la industria para realizar diseños de SCR, que consiste en la inyección de agua al sistema y posteriormente el análisis de parámetros de evaporación y flujo. En segundo lugar, se realizará un estudio más complejo, en el que se inyectará una solución de urea en agua (UWS) en el sistema, y del cual se obtendrá parámetros relacionados con el mezclador y con la deposición de urea en el sistema.

Con el trabajo realizado se pretende obtener una evaluación de viabilidad del estudio de inyección de urea para ver si en términos de gasto computacional y de parámetros obtenidos complementa de manera eficiente los resultados obtenidos mediante el estudio de la inyección de agua.

# ÍNDICE GENERAL

Índice general.....	2
Índice de figura.....	5
Índice de tablas.....	7

## I Memoria

Capítulo 1. Introducción.....	12
1.1 Objeto del proyecto .....	12
1.2 Justificación del proyecto.....	13
1.3 Objetivos del proyecto .....	14
1.4 Estructura del trabajo.....	14
Capítulo 2. Introducción a fundamentos de MCIA y emisiones contaminantes.....	16
2.1 Introducción .....	16
2.2 Teoría MCIA.....	16
2.2.1 Introducción .....	16
2.2.2 Clasificación de los MCIA.....	18
2.2.3 Diferencias MEC/MEP .....	20
2.2.4 Parámetros fundamentales MCIA.....	21
2.2 Emisiones contaminantes y sistemas de postratamiento. ....	23
2.2.1 Introducción .....	23
2.2.2 Normativa de emisiones contaminantes .....	24
2.2.3 Tipos de emisiones contaminantes.....	26
2.2.4 Emisiones contaminantes en vehículos Diesel (MEC).....	27
2.2.5 Óxidos de nitrógeno NO <sub>x</sub> .....	30
2.2.6 Estrategias de reducción de emisiones contaminantes en vehículos Diesel (MEC) .....	31
2.2.6.1 Estrategias activas.....	32
2.2.6.2 Estrategias Pasivas .....	32
2.3 Sistemas de reducción catalítica selectiva (SCR).....	36
2.3.1 Introducción .....	36
2.3.2 Proceso de reducción catalítica selectiva.....	36
Capitulo 3. Cálculo mediante método CFD .....	39

3.1	Introducción al caso de estudio .....	39
3.2	Dinámica de fluidos computacional (CFD) .....	40
3.3	Ecuaciones para el cálculo CFD .....	41
3.3.1	Ecuación de continuidad .....	41
3.3.2	Ecuación de conservación de cantidad de movimiento .....	42
3.3.3	Ecuación de conservación de la energía .....	42
3.3.4	Ecuación de conservación de las especies .....	42
3.4	Modelos de turbulencia .....	43
3.5	Discretización espacial .....	45
Capitulo 4.	Metodología computacional de sistema SCR mediante CFD.....	47
4.1	Introducción .....	47
4.2	Caso 1. Inyección de urea.....	48
4.2.1	Geometría. ....	48
4.2.2	Case setup. ....	51
4.2.2.1	Materials. ....	52
4.2.2.2	Simulation parameters.....	58
4.2.2.3	Boundary conditions .....	60
4.2.2.4	Initial conditions and events .....	66
4.2.2.5	Physical models .....	68
4.2.2.6	Grid control .....	77
5.2.7	Resumen inyeccion de urea .....	80
5.3	Inyección de agua .....	81
5.3.1.	Materials .....	81
4.3.2	Boundary conditions .....	83
4.3.3	Initial conditions and events .....	83
4.3.4	Physical models .....	84
Capitulo 5.	Análisis de resultados .....	85
5.1	Introducción .....	85
5.2	Análisis de inyección agua.....	86
5.2.1	Parámetros de H2O en el sistema.....	87
5.2.1.1	Cantidad de H2O en el sistema .....	87
5.2.1.2	Parámetros del chorro en la inyección .....	88
5.2.1.3	Vaporación .....	89
5.2.1.4	Deposiciones de agua.....	91

5.2.1.6 Concentración másica de H <sub>2</sub> O en el sistema.....	92
5.2.1.7 Campo de velocidades del flujo .....	94
5.3 Análisis de inyección urea .....	98
5.3.1 Parámetros de Urea/H <sub>2</sub> O en el sistema .....	98
5.3.1.1 Vaporización.....	<b>¡Error! Marcador no definido.</b>
5.3.1.2 Depositiones de urea .....	101
5.3.1.3 Concentración de NH <sub>3</sub> en el sistema .....	102
5.4 Gasto computacional .....	104
Capítulo 6. Conclusiones y trabajos futuros.....	106
Capítulo 7. Bibliografía.....	106

## II Pliego de condiciones

## III Presupuesto

# Índice de figuras

Figura 1. Ciclo Otto 4T.....	17
Figura 2. Patente “mejora en los motores a gasolina” .....	17
Figura 3. Ciclo Diesel 4T.....	17
Figura 4. Diagrama P-V 4T .....	18
Figura 5. Ciclo 4T .....	18
Figura 6. Diagrama P-V 4T .....	18
Figura 7. Ciclo 2T .....	18
Figura 8. Esquema de motores sobrealimentados.....	19
Figura 9. Configuración de cilindros en el motor .....	19
Figura 10. Comparativa proceso de encendido.....	20
Figura 11. Geometría básica.....	21
Figura 12. Años de vida perdidos debido a la contaminación .....	23
Figura 13. Etapas de regulación de normativa de emisiones.....	24
Figura 14. Límites de emisiones para vehículos Diésel .....	25
Figura 15. Límites de emisiones para vehículos gasolina.....	25
Figura 16. Gráfico de reducción de emisiones contaminantes.....	26
Figura 17. Composición de los gases de escape en un motor MEC .....	28
Figura 18. Grafica de factor Lambda .....	30
Figura 19. Componentes del sistema de postratamiento en un motor diesel .....	33
Figura 20. Catalizador de oxidación .....	33
Figura 21. Catalizador de oxidación-reducción .....	34
Figura 22. Catalizador de 3 vías.....	34
Figura 23. Filtro de partículas.....	35
Figura 24. Esquema de un sistema SCR.....	36
Figura 25. Sucesión de catalizadores en un sistema SCR .....	37
Figura 26. Sistema de inyección de Adblue.....	37
Figura 27. Esquema y reacciones del catalizador de un sistema SCR .....	38
Figura 28. Software Converge v2.4 .....	39
Figura 29. Pasos para resolver numéricamente un problema CFD.....	40
Figura 30. Representación de un dominio discretizado con el método de volúmenes finitos... 45	
Figura 31. Mallas estructuradas .....	46
Figura 32. Mallas no estructuradas.....	46
Figura 33. Importar geometría .....	48
Figura 34. Configuración Fences .....	48
Figura 35. Asignar triangulos a la nueva Flag.....	49
Figura 36. Crear new Flag.....	49
Figura 37. Boundaries del sistema SCR .....	49
Figura 38. Diagnosis Dock .....	50
Figura 39. Begin Case Setup .....	51
Figura 40. Seleccionar Configuración de la simulación .....	51
Figura 41. Importar therm.data .....	52
Figura 42. Gas simulation .....	52

Figura 43. Ecuación de estado.....	53
Figura 44. Importar Liquid.data .....	53
Figura 45. Parcel simulation .....	54
Figura 46. Solid simulation .....	55
Figura 47. Global transport parameters.....	55
Figura 48. Reaction mechanism .....	56
Figura 49. Species.....	57
Figura 50. Run parameters.....	58
Figura 51. Simulation time parameters.....	59
Figura 52. Solver parameters .....	60
Figura 53. Configuración Inlet .....	61
Figura 54. Configuración Outlet .....	62
Figura 55. Configuración wall.....	63
Figura 56. Interfaz entre el final del mezclador y el conducto del mezclador .....	64
Figura 57. Configuración del final del mezclador .....	64
Figura 58. Configuración regiones 0-6 .....	67
Figura 59. Configuración región 7 .....	67
Figura 60. Configuración de Events.....	68
Figura 61. Spray modeling-General.....	69
Figura 62. Spray modeling- Collision/breakup/drag .....	70
Figura 63. Modelo de Kuhnke .....	71
Figura 64. Wall interaction.....	72
Figura 65. Modelo del inyector .....	73
Figura 66. Parámetros del inyector .....	73
Figura 67. Parámetros de nozzle .....	74
Figura 68. Combustion modeling .....	75
Figura 69. Turbulence modeling .....	75
Figura 70. Source/Sink modeling .....	76
Figura 71. Super-Cycle modeling.....	77
Figura 72. Niveles de mallado .....	77
Figura 73. AMR .....	78
Figura 74. Fixed embedding .....	79
Figura 75. Esquema resumen inyección urea. ....	80
Figura 76. Therm.dat (casoAgua) .....	81
Figura 77. Parcel simulation (casoAgua) .....	82
Figura 78. Reaction mechanism (CasoAgua).....	82
Figura 79. Regions and initialization (CasoAgua) .....	83
Figura 80. Configuración del inyector (CasoAgua).....	84
Figura 81. Sistema de reducción catalítica selectiva.....	86
Figura 82. Cantidad de agua en el sistema.....	87
Figura 83. Diámetro medio de Sauter .....	88
Figura 84. Número de gotas en el sistema.....	89
Figura 85. Radio de gotas de agua .....	90
Figura 86. Agua almacenada en las paredes del sistema.....	91
Figura 87. Secciones 1,2 y 3 de concentración másica de agua.....	92

Figura 88. Fracción másica de agua en la sección 1 .....	93
Figura 89. Fracción másica de agua en la sección 2 .....	93
Figura 90. Fracción másica de agua a la entrada del catalizador.....	94
Figura 91. Evolución de la velocidad del flujo .....	95
Figura 92. Turbulencia del fluido salida mezclador.....	96
Figura 93. Turbulencia del fluido a la entrada del catalizador .....	97
Figura 94. Geometría inyección urea .....	98
Figura 95. Fracción másica de urea/agua.....	99
Figura 96. Radio de gota UWS.....	100
Figura 97. Derivados de urea .....	101
Figura 98. Depósitos de urea/agua .....	101
Figura 99. Derivados de la urea.....	102
Figura 100. Concentración de NH <sub>3</sub> en la sección longitudinal y paredes el sistema.....	103
Figura 101. Comparación de fracción másica de agua y urea .....	103
Figura 102. Tiempo/celda por paso temporal.....	104
Figura 103. Time-step agua/urea .....	105

## Índice de tablas

Tabla 1. Parámetros MEP/MEC.....	21
Tabla 2: Partes del sistema y gama de colores .....	49
Tabla 3: Configuración de la simulación.....	52
Tabla 4. Species .....	57
Tabla 5. Valores de Time-step.....	59
Tabla 6. Especies Inlet .....	61
Tabla 7. Regiones .....	66
Tabla 8. Parámetros regiones 0-6 .....	66
Tabla 9. Especies inyectadas .....	72
Tabla 10. Equipos informáticos .....	118
Tabla 11. Licencias de software .....	118
Tabla 12. Personal para el trabajo .....	118
Tabla 13. Presupuesto parcial de mano de obra.....	119
Tabla 14. Presupuesto parcial equipos informáticos .....	120
Tabla 15. Presupuesto parcial licencias de software .....	121
Tabla 16. Presupuesto total .....	121

# Tabla de símbolos

## Nomenclatura

D	Diámetro
A	Área
R	Radio
T	Temperatura
$\rho$	Densidad del fluido
$\dot{m}$	Gasto másico
Y	Concentración másica
$\mu$	Viscosidad cinemática del fluido
p	Presión
v	Velocidad del fluido
$T_B$	Punto de ebullición normal
R	Constante de los gases
$\Delta H_{\text{vap}}$	Entalpia de vaporización
K	Número de kunhke
La	Número de Laplace

## Siglas

CFD	Computational Fluid Dynamics
MCIA	Motor de Combustión Interna Alternativo
MEC	Motor de Encendido por Compresión
MEP	Motor de Encendido Provocado

DPF	Filtro de Partículas Diésel
DOC	Catalizador de Oxidación Diésel
CMT	Centro de Motores Térmicos
SCR	Reducción Catalítica Selectiva
RANS	Reynoldsd Averaged Navier-Stokes

# **DOCUMENTO I**

---

**Memoria**

## Capítulo 1

# Introducción

### 1.1 Objeto del proyecto

En la actualidad, en la industria de la automoción, el motor de combustión diésel es la mejor alternativa en términos de eficiencia y economía, los cuales son aspectos fundamentales en dicho sector. Sin embargo, estos motores en términos de emisiones contaminantes, han tenido que desarrollar dispositivos para reducir o eliminar dichas emisiones y así poder cumplir la normativa Euro vigente.

Los motores diésel han evolucionado tecnológicamente con los años a través de la mejora y la optimización en los sistemas de inyección y en los sistemas de postratamiento de gases de escape. Estos dos aspectos, han conseguido que se produzca una reducción en los niveles de emisiones contaminantes y que se mejore la eficiencia del motor de tal forma que disminuyan las emisiones de CO<sub>2</sub>.

Con la entrada en el 2014 de la normativa de emisiones contaminantes Euro VI y la restricción de emisiones de NO<sub>x</sub>, el desarrollo de los motores diésel para la reducción de emisiones contaminantes ha ido en dos direcciones:

- Reducción de emisiones desde el origen, es decir, mejora de las condiciones de diseño y sus componentes.
- Reducción de emisiones mediante el tratamiento posterior de los gases de escape mediante sistema de reducción catalítica selectiva (SCR).

El presente proyecto se va a centrar en el estudio de sistemas de reducción catalítica selectiva (SCR), de manera que se pueda analizar y optimizar su metodología mediante CFD.

Un proceso de reducción catalítica selectiva tiene como objetivo la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno (Nox) en los motores diésel de Combustión. En este proceso, se inyecta un agente reductor llamado AdBlue, el cual es una solución acuosa de urea al 32.5%, en los gases de escape del motor.

En un primer lugar se va a utilizar la metodología usada habitualmente en la industria, que se trata de realizar una inyección de agua al sistema y analizar los parámetros característicos. Este cálculo se realiza sin tener en cuenta los mecanismos químicos del sistema y se basa en el análisis de la evaporación del agua. En un segundo lugar se va a realizar una inyección de Adblue, una solución de urea en agua, de manera que se pueda observar los datos que puede aportar y la viabilidad que tiene este estudio en cuanto a costes. Este cálculo sí que tiene en cuenta todos los mecanismos físico-químicos.

## **1.2 Justificación del proyecto**

El presente proyecto ha sido redactado con carácter de trabajo de fin de grado, con el objetivo de obtener la titulación en ingeniería mecánica y las competencias finales como ingeniero. En el proyecto han sido aplicados los conocimientos obtenidos a lo largo de los 4 años de grado junto a los conocimientos adquiridos durante la realización del presente proyecto.

Para la realización del proyecto ha sido necesario la adquisición de conocimientos sobre los sistemas de postratamiento en vehículos con motores diésel, en especial el sistema de reducción catalítica selectiva.

Del mismo modo, se han tenido que obtener amplios conocimientos de cálculo CFD (*Computational Fluid Dynamic*), ya que ha sido la herramienta de trabajo para realizar el cálculo del sistema en el proyecto. Al mismo tiempo es necesario para el cálculo CFD tener amplios conocimientos sobre dinámica de fluidos, trabajar con software CAD, etc.

Por último, ha sido necesario para la obtención de datos un software de postproceso, el cual ha aportado una gran variedad de posibilidades a la hora de obtener los parámetros necesarios para el análisis del sistema.

## 1.3 Objetivos del proyecto

Los objetivos principales del proyecto son los siguientes:

- Finalizar los estudios de grado en ingeniería mecánica y adquirir las competencias finales como ingeniero mecánico.
- Realizar una evaluación de viabilidad, entre una primera simulación de inyección de agua (técnica usada actualmente en la industria), y una segunda simulación en la que se inyecta una solución de urea en agua.
- Describir y analizar las técnicas utilizadas para realizar el cálculo CFD en sistema de postratamiento

## 1.4 Estructura del trabajo

El trabajo de fin de grado está dividido en tres documentos principales: memoria, pliego de condiciones y presupuesto.

La memoria del trabajo está formada por 5 capítulos:

- **Teoría MCI y emisiones contaminantes.**

En este capítulo se realiza una breve explicación sobre los motores de combustión interna alternativos y se introduce las bases teóricas sobre emisiones contaminantes y sistemas de postratamiento, con la finalidad de comprender mejor el sistema de estudio.

- **Cálculo mediante método CFD.**

En este capítulo se explica en que consiste la dinámica de fluidos computacional (CFD) y se introduce el software utilizado para la realización del estudio del sistema SCR, el cual es Converge Studio v2.4.

- **Metodología computacional en sistema SCR mediante CFD.**

En este capítulo se va a realizar los casos de estudio del proyecto. En primer caso se realizará una simulación en la que se inyectará agua al sistema sin ningún mecanismo químico. En segundo lugar, se realizará una simulación en la que se inyectará una solución de urea en agua.

- **Análisis de resultados.**

En este capítulo se presentarán los resultados obtenidos en cada uno de los casos de estudio.

- **Conclusiones.**

En este capítulo se presentarán las conclusiones referidas al proyecto, así como futuros trabajos.

## Capítulo 2

# INTRODUCCION A FUNDAMENTOS DE MCA Y EMISIONES CONTAMINANTES

## 2.1 Introducción

En este capítulo se va a explicar los conceptos generales sobre los Motores de combustión interna alternativa y sobre las emisiones de contaminantes en los motores diésel junto a los procesos de postratamiento a los que son sometido para eliminar los gases de escape contaminantes. Esta teoría será útil para entender el proceso de postratamiento de un catalizador de reducción selectiva y entender mejor los parámetros que serán introducidos en la simulación.

## 2.2 Teoría MCA

### 2.2.1 Introducción

La mecánica de motor [1] continúa siendo la base de los motores en vehículos según el principio Otto. El objetivo es transformar la energía química que contiene el combustible en movimiento mediante un proceso termodinámico. El pistón se acelera gracias a la combustión de la mezcla de combustible y aire. El movimiento superior e inferior que produce el pistón se convierte en movimiento circular gracias al cigüeñal. Este mecanismo está situado en el cárter

del cigüeñal. Finalmente, el control que se produce en las válvulas de intercambio de gases lo realiza la culata.

Este procedimiento se inició en 1876, cuando Nikolaus August Otto desarrolló el motor de gasolina de cuatro tiempos con encendido por chispa y accionamiento por pistones alternativos.

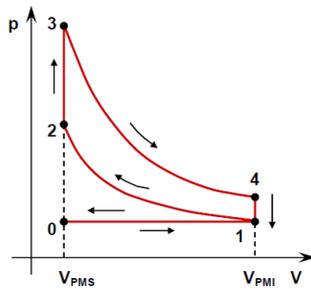


Figura 1. Ciclo Otto 4T



Figuran 2. Patente "mejora en los motores a gasolina"

En 1884, Daimler desarrolló una nueva patente llamada "Un nuevo motor de gas". Esta nueva patente fue conocida posteriormente por "motor de cabeza caliente", Este motor se encontraba entre el motor de Otto y el de Diésel. Se trataba de un motor de encendido por compresión, donde la compresión se realizaba en el momento de la mezcla del aire y del combustible. A diferencia de Daimler, Diésel propuso realizar la compresión solamente con aire. El objetivo principal de diésel era estar lo más cerca posible del ciclo de Carnot. Diésel quería mantener constantes la temperatura en las fases de compresión y expansión, y para ello, decidió en inyectar el combustible al mismo tiempo que lo quemaba, por lo que el único elemento que se comprimía era el aire. En 1892 muestra esas ideas desarrollando una patente denominada "Procedimientos para producir trabajo motor por la combustión de combustible". Tras esta publicación en 1893 estuvo trabajando varios años en la construcción de un prototipo funcional que finalmente vio la luz en 1897 de la mano de la casa MANN.

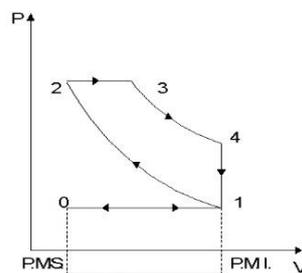


Figura 3. Ciclo Diesel 4T

Más adelante, los motores se diferenciarán en dos grandes grupos, los motores de encendido por compresión (MEC) y los motores de encendido provocado (MEP) e irán evolucionando y mejorando hasta la actualidad.

## 2.1.2 Clasificación de los MCI

Los motores alternativos se pueden clasificar de diversas formas [1], atendiendo a procesos como puede ser la combustión, el ciclo de trabajo, la forma en que se introduce el aire en el cilindro, el tipo de combustible utilizado, el sistema para introducir el combustible, el tipo de refrigeración, el número de cilindros y su disposición, etc...

Todas estas características no son excluyentes entre ellas, por lo que, tenemos una gama de tipo de motores muy amplias. Los criterios más relevantes para clasificar los MCI son los siguientes:

- **Según el proceso de combustión.**

Por el proceso de combustión podemos clasificar los MCI en motores de encendido provocado (MEP), más conocido como motores de ciclo Otto o gasolina, y los motores de encendido por compresión (MEC), conocidos como motores diésel.

- **Según el proceso de renovación de la carga.**

Considerando el proceso de renovación de la carga podemos diferenciar los MCI en motores de 4 tiempos, el ciclo completo de trabajo de estos motores dura dos vueltas del cigüeñal, lo que es lo mismo que 4 carreras de embolo. Por otro lado, están los motores de dos tiempos, los cuales su ciclo de trabajo completo dura dos carreras de embolo, lo que es igual a una revolución (360°).

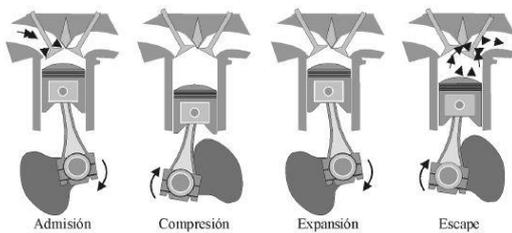


Figura 5. Ciclo 4T

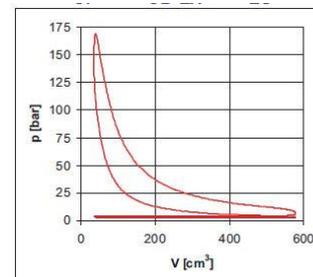


Figura 4. Diagrama P-V 4T

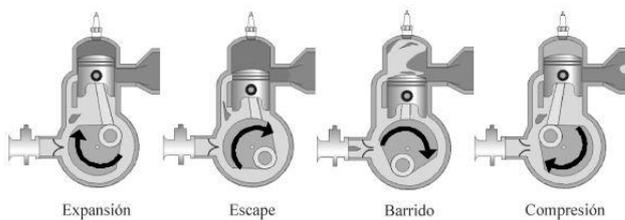


Figura 7. Ciclo 2T

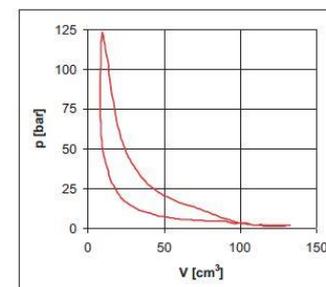
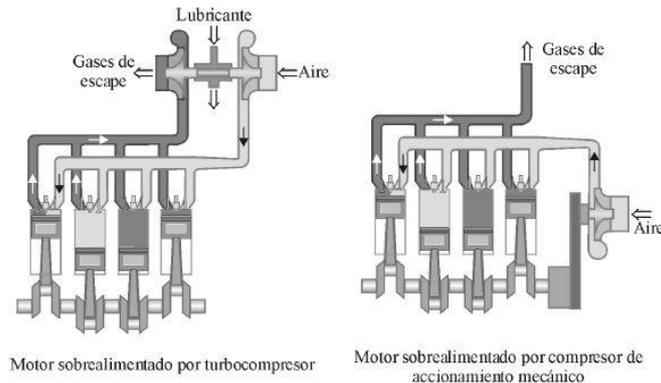


Figura 6. Diagrama P-V 4T

- **Según presión de admisión.**

Dependiendo la presión existente en el colector de admisión, podemos clasificar los motores en motores de aspiración natural y motores sobrealimentados. Los motores de aspiración natural son aquellos que el valor medio de presión en el colector de admisión será igual a la presión atmosférica, en cambio, los motores sobrealimentados se caracterizan por la inclusión de un compresor en la admisión para así aumentar la presión de entrada. Como resultado se obtendrá un aumento de potencia, de rendimiento y una reducción de emisiones.



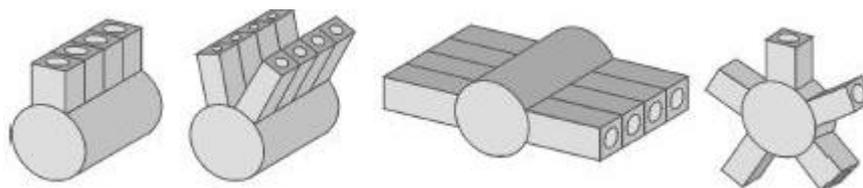
**Figura 8. Esquema de motores sobrealimentados**

- **Según sistema de refrigeración.**

En los MCI existen elevadas temperaturas en los cilindros debidos al proceso de combustión. Para limitar los esfuerzos térmicos, deformaciones y mantener la temperatura dentro de los márgenes de diseño, estos motores tendrán un sistema de refrigeración. Dependiendo del estado físico en que se encuentre el fluido, el cual entra en contacto con el motor para liberar el calor, agua o aire, los motores se pueden clasificar en motores refrigerados por aire y motores refrigerados por agua.

- **Según el número y la disposición de los cilindros.**

En los motores alternativos, una vez se conoce el tamaño de los cilindros, se determinará el número de cilindros dependiendo de la potencia que se quiera obtener. Normalmente, cuanto mayor sea el número de cilindros mayor será la potencia obtenida. El número de cilindro puede ir desde uno hasta varias decenas (aplicaciones aeroespaciales). Estos cilindros se pueden agrupar de diferentes formas y orientaciones, el espacio ocupado por el motor será el factor que determine la elección de su distribución. Las configuraciones más utilizadas son: en línea, en V, Cilindros opuestos (bóxer), en estrella o radiales.



**Figura 9. Configuración de cilindros en el motor**

### 2.1.3 Diferencias MEC/MEP

La principal característica que diferencia a los motores MEC de los MEP es el proceso de encendido de la mezcla combustible aire, y la consecuente evolución de la combustión. [1]

- **Motor de encendido provocado (MEP)**

En el caso de los MEP, el encendido de la mezcla se inicia hacia el final de la carrera de compresión, cuando se produce una chispa a través de la bujía. Esto genera una inflamación de la mezcla combustible-aire, con lo que se empieza a propagar un frente de llama hacia el resto de la cámara de combustión. Para ello es necesario obtener una mezcla homogénea en la cámara de combustión y que esta se encuentre dentro de los límites de inflamabilidad. Por esta razón, la mezcla suele realizarse al inicio de la carrera de admisión, para evitar que la mezcla se autoencienda durante la carrera de compresión. En algunos casos, para controlar que la mezcla de combustible-aire sea homogénea y este dentro de los límites de inflamabilidad, se coloca en la admisión una válvula mariposa para controlar la masa de combustible y la masa de aire que pasa a la cámara de combustión.

- **Motor de encendido por compresión (MEC)**

En el caso de los MEC, para favorecer el autoencendido se deben obtener elevadas temperaturas dentro de la en la cámara de combustión y reducir el tiempo que el combustible está en contacto con el aire para evitar el encendido espontaneo sin control. Por esta razón el gasóleo se inyecta más o menos cerca del punto muerto superior. En este punto el aire, que ha sido comprimido y se encuentra a altas presiones y altas temperaturas le es inyectado el combustible a mucha presión para favorecer el atomizado y la mezcla oportuna y que se produzca la combustión.

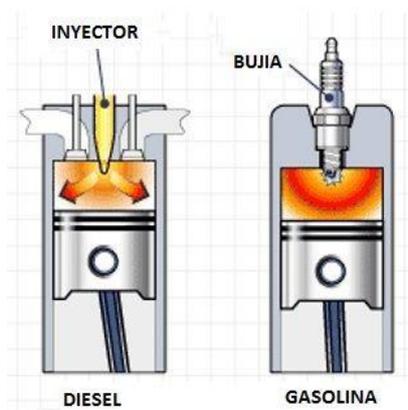


Figura 10. Comparativa de proceso de encendido

En la siguiente tabla se mostrarán los parámetros más importantes de ambos motores:

Tabla 1. Parámetros MEP/MEC

Características	MEP	MEC
Formación de la mezcla	Durante la admisión	Final de la combustión
Encendido de la mezcla	Mediante chispa eléctrica	Autoinflamable
Regulación de la carga	Cuantitativa(± mezcla)	Cualitativa(± combustible)
combustibles	Ligeros(gasolina, GLP, etanol, Biogas)-alto octano	Más pesados(gasoil, fueloil, biodiesel)-alto cetano
Fluido operante	Aire + combustible	Aire
Relación de compresión	8-12( limitada por detonación)	12-24(limitada por Pmax y η)
Régimen de giro máximo	Automoción: 5500-6500	Automoción: 5000
Rendimiento máximo	0,2-0,38	0,35-0,5
Dosado relativo	1	< 0,85-0,95(global)
Potencia específica (KW/l)	Automoción: 70-90 (Bugatti Veyron)	automoción: 35(II)-65(ID)

## 2.1.4 Parámetros fundamentales MCIA

### Parámetros geométricos:

Definen la geometría básica de un motor de combustión interna alternativa:

Diámetro del pistón:	D
Carrera del pistón:	S
Relación carrera-diámetro:	S/D
Sección del pistón:	$A_p = \frac{\pi \cdot D^2}{4}$
Cilindrada unitaria:	$V_d = A_p \cdot S$
Número de cilindros:	z
Cilindrada total:	$V_T = z \cdot V_d$
Número de ciclos por revolución:	i
Vol. de la cámara de combustión:	$r = \frac{V_c + d}{V_c}$

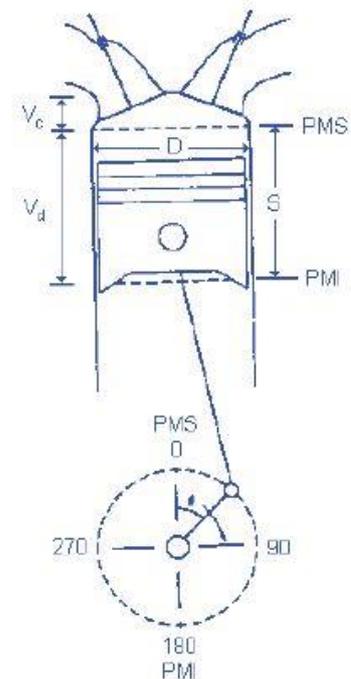


Figura 11. Geometría básica

### Parámetros de funcionamiento:

Los parámetros básicos de un motor que permiten definir un estado operativo a partir de variables.

Régimen de giro y velocidad media del pistón	$n / C_m$
Grado de carga	$a = \frac{N_e}{N_{e,max}}$
Gasto de aire	$\dot{m}_a$
Rendimiento volumétrico	$\frac{\dot{m}_a}{\rho_{ref} * V_t * n * i}$
Gasto de combustible	$\dot{m}_f$
Poder calorífico	PC
Dosado	$F = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}$
Dosado relativo	$F = \frac{F}{F_e}$

## 2.2 Emisiones contaminantes y sistemas de postratamiento.

### 2.2.1 Introducción

A lo largo del tiempo se ha destacado la importancia del aire y sobre todo de los efectos negativos que tiene respirar aire contaminado, por tanto, como resultado ha habido un gran número de defunciones. Bastantes enfermedades respiratorias han sido causadas por los contaminantes del aire en los seres humanos y en los animales. Pero no se puede olvidar otras implicaciones negativas de este hecho como son la contaminación medioambiental, mediante smog fotoquímico, partículas, ruido y el conocido efecto invernadero. Cuando la corona decidió cobrar impuestos a quienes quisieran utilizar carbón como medio de calefacción debido a la gran concentración de humo que este producía. En Alemania a principios del siglo XX se comienza a plantear de manera muy paulatina el control de emisiones originadas por los motores de los vehículos. Aunque fue a principios de la década de los 70 cuando en Los Ángeles (California) se empieza a regular por vía legal. La razón por la cual se inició allí todo este movimiento que restringía las emisiones contaminantes fue por casi inexistencia de industria y de sistemas de calefacción. Estos hechos llevaron a pensar que los automóviles eran los causantes del 60 % total de las emisiones contaminantes. Desde ese momento los países industrializados han impuesto diferentes medidas para restringir las emisiones provocadas por los vehículos, siendo así cada vez más estrechos los límites de permisividad.

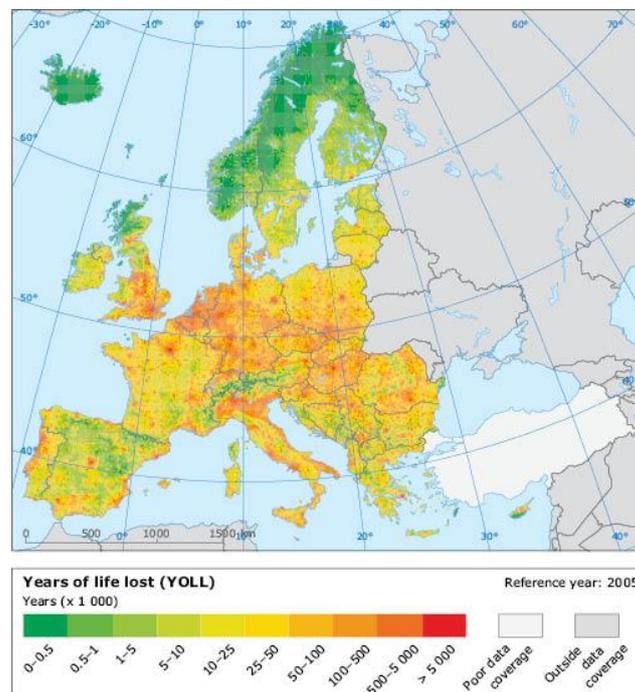


Figura 12. Años de vida perdidos debido a la contaminación

## 2.2.2 Normativa de emisiones contaminantes

A principios de la década de los 90, se emitieron decretos y disposiciones legales con el objetivo a la reducir las emisiones contaminantes que se expulsan al medio ambiente, ya que dentro de los sectores que contribuían a la contaminación atmosférica, estaba el sector del automóvil. Por esta razón, y motivada por las normativas más estrictas sobre las emisiones contaminantes en Europa y también EEUU y Japón, la industria del automóvil desarrolló tecnologías nuevas y mejoradas para reducir y eliminar sustancias contaminantes en los gases de escape. Por lo que se inició la denominada norma EURO, que comenzó con la EURO 1 y actualmente está bajo vigor legal la norma EURO 6. Estas normativas indican a la industria del automóvil los límites de las emisiones contaminantes para la homologación de nuevos modelos de vehículos.

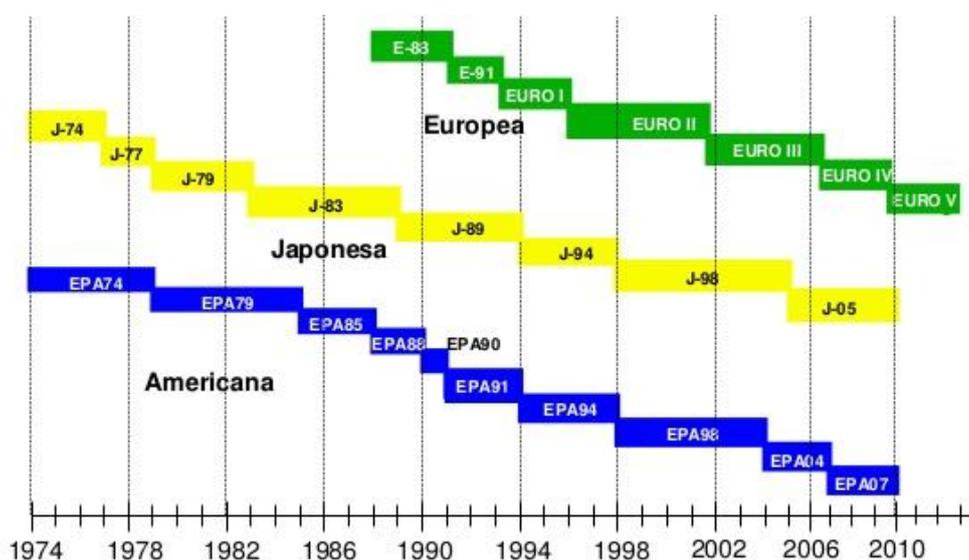


Figura 13. Etapas de regulación de normativa de emisiones

En el año 1992 se impuso a todos los fabricantes de vehículos en Europa, que tenían que aplicar a la normativa Euro 1, la cual obligaba a reducir las emisiones tanto a vehículos diésel como gasolina. Para ello se desarrolló un nuevo un componente, llamado catalizador, situado antes del tubo de escape. Su función era reducir y transformar los gases de combustión del coche de manera que no emitiría tantos gases contaminantes.

Entre los años 1992 y 2005, se impusieron diferentes normativas Euro que fueron siendo más restrictivas conforme pasaban los años. Se centran básicamente en mejorar y desarrollar el catalizador de la normativa Euro 1, aunque en ese momento algunos fabricantes decidieron reducir el tamaño de los motores con el fin de consumir menos combustible. Los métodos que utilizaron fueron incluir sistemas de sobrealimentación (turbos, compresores) para obtener los mismos rendimientos en menores cilindradas, y esto llevó a menores consumos y menores emisiones.

En el año 2009 se introduce la normativa Euro V, en la que la prioridad es la eliminación de los contaminantes producidos por los vehículos diésel. Estos contaminantes tienen origen en las impurezas del diésel y tienen diferentes tamaños, siendo los más peligrosos los de menor tamaño pues tienen mayor poder de penetración en los organismos vivos. Con el objetivo de eliminar estas partículas dañinas, los fabricantes decidieron introducir un filtro antipartículas (FAP ó DPF), que consistía en una trampa para las partículas sólidas en suspensión, quedando retenidas en una especie de panal de cerámica con poros muy finos.

La normativa Euro VI, actual normativa vigente, se implementa en el año 2014 con el objetivo de reducir de forma definitiva las emisiones de los vehículos diésel. Para ello se recurre a un compuesto líquido llamado *AdBlue* que administrándolo en pequeñas dosis en los gases generados en la combustión producen una reacción química a alta temperatura que produce amoniaco que descompone las moléculas de óxidos de nitrógeno en nitrógeno molecular y agua, que no son nocivos para el medio ambiente. La normativa Euro 6 marca una reducción definitiva de los gases contaminantes, especialmente los óxidos nitrosos o NOx. La anterior normativa Euro 5 contemplaba unas emisiones de 180 mg/km de NOx, mientras que Euro 6 lo rebaja hasta 80 mg/km.

Limitaciones a las emisiones para vehículos nuevos con motor diésel						
	válido a partir de	CO (g/km)	HC (g/km)	NOx (g/km)	HC+NOx (g/km)	PM
<b>Euro I</b>	01/92	3,16	-	-	1,13	0,14
<b>Euro II</b>	01/96	1,00	0,15	0,55	0,70	0,08
<b>Euro III</b>	01/00	0,64	0,06	0,50	0,56	0,05
<b>Euro IV</b>	01/05	0,50	0,05	0,25	0,30	-
<b>Euro V</b>	09/09	0,50	0,05	0,18	0,23	0,005
<b>Euro VI</b>	08/14	0,50	0,09	0,08	0,17	0,005

Figura 14. Límites de emisiones para vehículos Diésel

Limitaciones a las emisiones para vehículos nuevos con motor de gasolina						
	válido a partir de	CO (g/km)	HC (g/km)	NOx (g/km)	HC+NOx (g/km)	PM
<b>Euro I</b>	12/92	2,72	-	-	0,97	-
<b>Euro II</b>	01/97	2,20	-	-	0,5	-
<b>Euro III</b>	01/00	2,30	0,20	0,15	-	-
<b>Euro IV</b>	01/05	1,00	0,10	0,08	-	-
<b>Euro V</b>	09/09	1,00	0,10	0,06	-	0,005*
<b>Euro VI</b>	08/14	1,00	0,10	0,06	-	0,005*

Figura 15. Límites de emisiones para vehículos gasolina

En la siguiente gráfica se puede ver la evolución de la normativa para motores diésel en cuanto a NOx, hidrocarburos, CO y partículas.

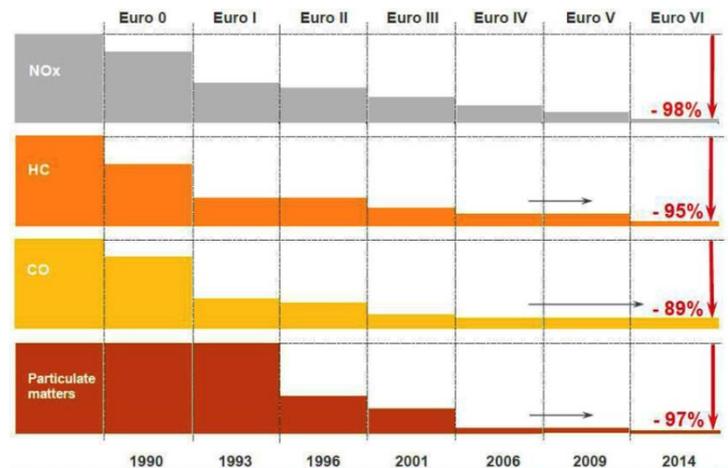


Figura 16. Gráfico de reducción de emisiones contaminantes

### 2.2.3 Tipos de emisiones contaminantes

El término contaminante se refiere a cualquier sustancia adicionada al medio ambiente en una concentración tal, que tenga efectos medibles sobre los seres humanos, las plantas, los animales. Podemos considerar entonces como contaminantes a materiales naturales o artificiales, sólidos, líquidos o gaseosos, los cuales se dividen en dos grandes grupos que son: primarios y secundarios.

- **Contaminantes primarios:** son aquellos cuya fuente de emisión es directamente identificable, tales como los compuestos de carbono (CO y CO<sub>2</sub>), compuestos de nitrógeno (NO + NO<sub>2</sub> = NO<sub>x</sub>, N<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>), compuestos orgánicos (volátiles o VOC, hidrocarburos, hidrocarburos aromáticos polinucleares PAH, compuestos carboxílicos), compuestos de azufre (SO<sub>2</sub>, SO, S<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), compuestos halogenados, compuestos metálicos, partículas (finas si diámetro < 100 μm y gruesas si su diámetro > 100 μm)
- **Contaminantes secundarios:** son aquellos que se forman en la atmósfera por reacciones entre los contaminantes primarios o por reacciones entre los primarios y algunos componentes que se encuentran en estado natural en la atmósfera.

Los MCIAs son una gran fuente de contaminantes primarios, especialmente de monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>), Hidrocarburos sin quemar (HC) y partículas. Los vehículos tienen 3 grandes fuentes de emisiones:

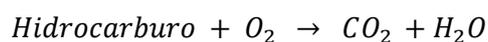
- **Combustible evaporado procedente del depósito y del carburador,** responsable, aproximadamente de un 20% de los hidrocarburos sin quemar (HC) que emite el motor. Para evitar la emisión de estos vapores se comunican, a motor parado, el carburador y el depósito a un recipiente lleno de carbón activado, comúnmente llamado *Canister* el cual absorbe y retiene los vapores de combustible mediante condensación. Este combustible absorbido por el carbón activado se recupera posteriormente al poner el motor en marcha, haciendo pasar una corriente de aire a través del recipiente.

- **Gases procedentes del cárter del motor**, que fluyen al exterior por el respiradero de éste. Están compuestos fundamentalmente por HC, aunque, dependiendo del estado del motor, pueden contener también productos procedentes de la combustión. Son responsables de otro 25% del total de HC emitido por el vehículo. Esta fuente de emisiones puede eliminarse fácilmente mediante el recirculado de estos vapores hacia la admisión (blow-by)
- **Gases de escape**, procedentes del proceso de combustión aportan prácticamente el 100% de productos contaminantes, tales como el monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno, etc... Y el 55% de los HC sin quemar.

## 2.2.4 Emisiones contaminantes en vehículos diésel (MEC)

Los motores diésel son máquinas térmicas que transforman la energía química en energía mecánica y energía térmica, con un rendimiento que se encuentra entre el 35-40%. Se produce una combustión en el interior de la cámara del pistón de un motor diésel, que consiste en una reacción química de oxidorreducción, en la que unos compuestos se oxidan y otros se reducen. Para que haya una combustión han de haber tres elementos principales, un combustible, un comburente (u oxidante) y una energía de activación. La energía de activación corresponde con la elevada presión y temperatura que se consiguen con la compresión de la mezcla de combustible y comburente en el interior de la cámara de compresión, lo que hace que literalmente explote. El combustible en un motor diésel es el gasóleo, un derivado del petróleo que está compuesto aproximadamente por un 75% de hidrocarburos saturados (principalmente parafinas incluyendo isoparafinas y cicloparafinas) y un 25% de hidrocarburos aromáticos (incluyendo naftalenos y alcalobencenos). La fórmula química general del gasóleo común es  $C_{12}H_{23}$ . Aproximadamente el 86,1% del diésel es carbono, y cuando se quema se obtiene un poder calorífico de 43,10 MJ/kg. En cuanto al comburente, en un motor diésel es el oxígeno.

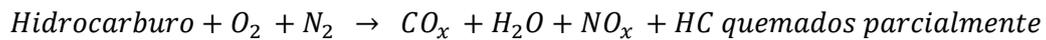
En la siguiente reacción se puede observar, que en una combustión ideal el combustible y el comburente reaccionan dando lugar únicamente a dióxido de carbono y agua:



En esta reacción el carbono se oxida (pierde electrones) que se los cede al oxígeno (que los gana), por eso es una reacción de oxidorreducción. Esta reacción puede causar algunos problemas cuando pasa de ser ideal a tener exceso o falta de oxidante. Cuando ocurre este fenómeno, aparecen otros productos en la reacción, como es el caso del monóxido de carbono

(CO), carbono (en forma de carbonilla), hidrocarburos parcialmente quemados y debido a las impurezas también puede aparecer dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>).

Pero la problemática que presenta actualmente los motores diésel, tiene que ver con la composición del comburente que entra a la cámara de combustión. Ya que no únicamente entra oxígeno, sino que entra aire, que está formado por un 21% oxígeno de y un 79% de nitrógeno. Cuando este porcentaje de nitrógeno entra a la cámara de combustión y se alcanzan temperaturas del orden de los 1600 °C, este reacciona con un exceso de oxígeno produciendo los llamados óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>). Lo que nos lleva a la siguiente reacción:



Los contaminantes de mayor importancia provenientes de la combustión son los hidrocarburos sin quemar o parcialmente quemados que salen por el escape (HC), el monóxido de carbono (CO), las emisiones de partículas (PM) y los óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>)[1].

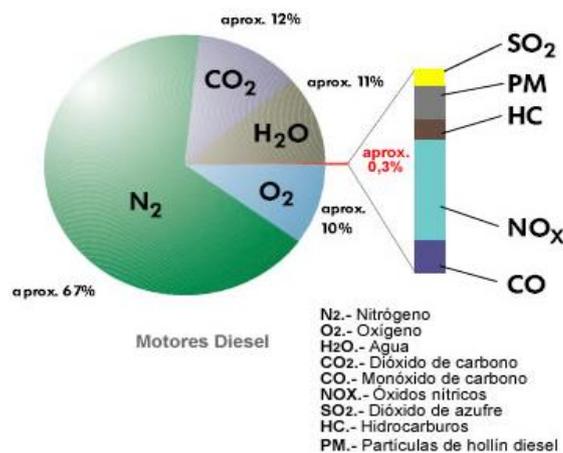


Figura 17. Composición de los gases de escape en un motor MEC

- **Hidrocarburos sin quemar o parcialmente quemados (HC).** Pueden tener importantes efectos sobre la salud humana, sobre todo los aromáticos. Estas emisiones suelen ser superiores en los motores de gasolina que en los motores diésel. Aparecen debido a la combustión incompleta, al apagado de llama por efecto de pared o *misfring*, fugas de escape, cortocircuito de carga fresca, dosados locales altos, etc.
- **Monóxido de carbono (CO).** Es un contaminante fuertemente asfixiante, siendo tremendamente peligroso en locales cerrados como garajes o túneles. En los motores

diésel su emisión es casi despreciable. El CO es un producto intermedio de la oxidación de un hidrocarburo. En motores de combustión interna, la mayor parte de las emisiones de CO se deben al dosado, ya que las regiones con mezcla muy pobre no son capaces de quemarse rápidamente y las regiones muy ricas no son capaces de quemarse completamente debido a la falta de oxígeno.

- **Partículas.** Se considera partículas a cualquier sólido o líquido presente en los gases de escape y son las responsables de la opacidad en los mismos. En cuanto a sus efectos sobre la salud, las de menor tamaño (<5 micrómetros) pasan a los alveolos pulmonares, generando irritación y efectos cancerígenos. Algunos ejemplos como el hollín debido a la oxidación incompleta, y otras partículas, sólidas y líquidas debido a las impurezas del combustible, cenizas, restos de aceite y a la reacción de determinados compuestos con la atmósfera.
- **Óxidos de azufre (SO<sub>x</sub>).** Debido al contenido de azufre del combustible, cada vez más restringido (actualmente máximo 10ppm). En condiciones de mezcla pobre, se forma principalmente SO<sub>2</sub> y, en menor medida, SO<sub>3</sub>. Si se dan condiciones de mezcla rica, tienen lugar, además, otras especies como el HS, H<sub>2</sub>S y COS.
- **Óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>).** Estas emisiones son principales responsables de fenómenos como la lluvia ácida o el smog fotoquímico. Además, pueden reducir el ozono en la estratosfera o ser irritantes para los pulmones. La mayor parte de las emisiones de NO<sub>x</sub> se deben fundamentalmente a la reacción producida entre el oxígeno y el nitrógeno a temperaturas elevadas, y depende en menor medida de las características del combustible y la mezcla empleada. Este contaminante será explicado con más detalle en un apartado más adelante.

Ahora bien, existen tres situaciones en las que se producen diferentes contaminantes. La primera situación es cuando hay un exceso de combustible o defecto de oxidante (mezcla rica), la segunda situación se da cuando la mezcla es estequiométrica y la tercera se da cuando hay un defecto de combustible o un exceso de oxidante (mezcla pobre). El factor "Lambda" es la relación que existe entre la proporción aire/combustible para la relación estequiométrica.

Cuando un motor está en funcionamiento el factor lambda debe variar dentro de unos límites máximos y mínimos establecidos, ya que el motor no puede estar alimentado constantemente con una mezcla en relación estequiométrica teórica, puesto que en estas condiciones el motor no proporcionara ni su potencia máxima ni el máximo rendimiento térmico.

- **Mezcla pobre:** Se da cuando hay un defecto de combustible o un exceso de oxidante. La concentración de monóxido de carbono y de hidrocarburos es muy baja, ya que hay suficiente oxígeno para oxidar todo el combustible, pero en contra, la concentración de óxidos de nitrógeno es muy alta al haber suficiente temperatura en la cámara de combustión y un exceso de oxígeno que reacciona con el nitrógeno atmosférico.

En los motores diésel, debido a sus características, predomina la mezcla pobre (relación  $\lambda > 1$ ), ya que en parte el exceso de oxígeno se emplea para oxidar los óxidos de nitrógeno, el monóxido de carbono y la carbonilla en el catalizador, como luego veremos.

- **Mezcla estequiométrica:** Es la mezcla ideal, donde no hay ni exceso ni defecto.
- **Mezcla rica:** Se da cuando hay un exceso de combustible o un defecto de oxidante. Como es obvio, al faltar oxidante se produce una combustión incompleta del combustible, por lo que en los gases de escape aumenta la concentración de monóxido de carbono y de hidrocarburos. La proporción de óxidos de nitrógeno también baja debido a la falta de oxígeno y de temperatura.

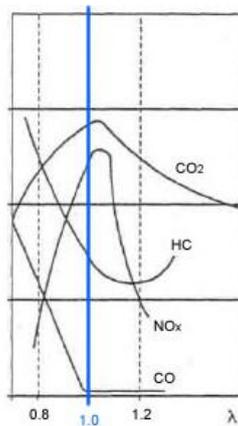
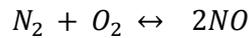


Figura 18. Grafica de factor Lambda

### 2.2.5 Óxidos de nitrógeno $\text{NO}_x$

Con el nombre de óxidos de nitrógeno [1] se designa a un grupo de compuestos químicos gaseosos formados por la combinación de oxígeno y nitrógeno. En función de la valencia atómica que utilice el nitrógeno reciben diferentes nombres y tienen distintas formulaciones, siendo los más importantes el óxido nítrico ( $\text{NO}$ ) y el dióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ). Ambos óxidos están considerados contaminantes del aire y se denominan habitualmente  $\text{NO}_x$ . El monóxido de nitrógeno u óxido nítrico ( $\text{NO}$ ) es un gas incoloro y poco soluble en agua presente en pequeñas cantidades en los mamíferos. En cuanto al dióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ), se trata de un agente tóxico, no inflamable, soluble en agua y de color pardo-rojizo. Su estructura molecular está constituida por un átomo de nitrógeno y dos átomos de oxígeno. Otros óxidos de nitrógeno presentes habitualmente en la atmósfera son  $\text{N}_2\text{O}$  (óxido nitroso),  $\text{N}_2\text{O}_3$  (trióxido de dinitrógeno) y  $\text{N}_2\text{O}_5$  (pentóxido de dinitrógeno).

Los óxidos de nitrógeno se producen debido a la reacción del nitrógeno molecular presente en el aire con el oxígeno. El nitrógeno no se oxida a bajas temperaturas debido a la cinética química de la reacción es excesivamente lenta, pero a las altas temperaturas que se llega en la combustión si se presenta el siguiente equilibrio:



La reacción de equilibrio se encuentra muy desplazada hacia los reactivos a baja temperatura, y se va desplazando hacia los productos a medida que aumenta la temperatura. A altas temperaturas la cinética es lo suficientemente rápida para que aparezca cierta concentración de NO. Durante la carrera de expansión la temperatura baja y el equilibrio tiende a restablecerse y elimina el contaminante, pero debido a que la cinética es muy lenta siempre aparece cierta concentración de NO. Por lo tanto, cuanto mayor sea la concentración de O<sub>2</sub> haya mayor será la formación de NO, es decir, la formación de óxidos de nitrógeno será mayor para mezclas pobres

## 2.2.6 Estrategias de reducción de emisiones contaminantes en vehículos diésel (MEC)

En los MCIAs existen diversas estrategias de funcionamiento y de diseño para reducir o minimizar las emisiones contaminantes. Las estrategias de reducción de emisiones contaminantes se pueden dividir en dos grupos: estrategias activas y estrategias pasivas [1].

- **Estrategias activas.** Conjunto de medidas con el objetivo de la reducción de las emisiones contaminantes. Estas medidas se realizan sobre el origen de la fuente del contaminante, por lo que están directamente relacionadas al diseño del motor y sus componentes.
- **Estrategias pasivas.** Conjunto de medidas, también denominadas sistemas de postratamiento, cuyo objetivo es realizar una reducción de las emisiones ya creadas y van a ser expulsadas a la atmósfera. Estos sistemas van situados a la salida del motor y realizan tratamientos químicos a los gases de escape.

En los motores Diésel existe un problema relacionado con la formación de emisiones contaminantes que emite el motor a la atmósfera. Esto es debido que la formación de óxidos de nitrógeno en el escape es causado por altas temperaturas y presiones y a la presencia de oxígeno. Aunque al mismo tiempo estas condiciones favorecen la disminución de emisiones contaminantes, tales como, monóxido de carbono y partículas.

En cuanto a motores de encendido por compresión, como se ha podido observar en la figura(x), las emisiones más características son los NO<sub>x</sub> y las partículas. Por esta razón, actualmente la mayoría de los avances en cuanto a tecnología de SCR van dirigidos a la reducción de estos dos contaminantes mediante diversas medidas que se explicaran a continuación.

### 2.2.6.1 Estrategias activas

- **Sistema de recirculación de gases de escape (EGR).** Una medida muy efectiva para disminuir la emisión de óxidos de nitrógeno (NOx), es actuar sobre la temperatura de llama. Para ello se dejan sin evacuar en el cilindro gases residuales del ciclo anterior, lo que se conoce como recirculación de gases de escape (EGR). Estos gases recirculados reducen la masa de aire caliente expulsada a la atmosfera para pasar a la admisión y subir la temperatura del aire de admisión y así favorecer el proceso de combustión. Al mismo tiempo favorece para disminuir la temperatura de los gases de escape y disminuir la emisión de NOx. Sin embargo, esta reducción de emisiones NOx se realiza a costa de aumentar las partículas y los hidrocarburos sin quemar a altos grados de carga, por lo que es importante que el sistema EGR trabaje a bajos o medios grados de carga.
- **Enfriamiento del aire de la admisión.** Con el fin de reducir la temperatura del aire que entra a la admisión y al mismo tiempo la temperatura de la combustión, es importante la utilización de un intercambiador de calor o de un intercooler (si se trata de un motor sobrealimentado) para la reducción de emisiones de NOx.
- **Sistema de inyección.** Actuar sobre el chorro significa actuar sobre el desarrollo del proceso de combustión. Por ejemplo, un aumento de la presión de inyección supone una atomización más fina, mejorando el proceso de mezcla y evaporación, acelerándose así la combustión y disminuyendo la formación de hollín y a la vez, por el contrario, aumentando la formación de NOx. De esta manera, además de la presión de inyección, se controla el adelanto o retraso de la inyección, así como otra serie de parámetros.
- **Diseño de la cámara de combustión.** La cámara de combustión, que en el caso de motores Diésel de inyección directa, se encuentra tallada en el pistón, tiene como premisa favorecer la turbulencia de manera que aumente la interacción entre el chorro y los patrones de flujo. El diseño del bowl, de la geometría de los conductos de admisión y de las características del sistema de inyección debe realizarse de forma conjunta para cada motor ya que es la combinación de los distintos diseños lo que realmente determinará las prestaciones y emisiones alcanzadas.[1]

### 2.2.6.2 Estrategias Pasivas

Los sistemas de postratamiento de gases de escape más extendidos son los catalizadores y los filtros [1]. Los catalizadores son componentes instalados en la línea de escape que tienen como objeto restituir el equilibrio químico, incluso a baja temperatura, que ha congelado durante la expansión y que ha provocado la aparición de algunas especies, o de finalizar una reacción que ha quedado asimismo congelada por cinética química. Los agentes catalizadores contienen metales nobles como el paladio (Pd), el platino (Pt), o el rodio (Rh). El otro tipo de

sistemas lo constituyen los filtros, que también se ubican en la línea de escape. Pueden ser tanto físicos como químicos, y tienen la misión de acumular las especies no deseadas para después deshacerse de ellas sin emitir las a la atmósfera.

Tanto catalizadores como filtros se incorporarán además de las medidas activas mencionadas anteriormente. Del mismo modo, los motores diésel pueden incorporar uno o más tipos de filtros y catalizadores, en función del tipo de motor y de la normativa vigente de la aplicación a la que da servicio el motor.

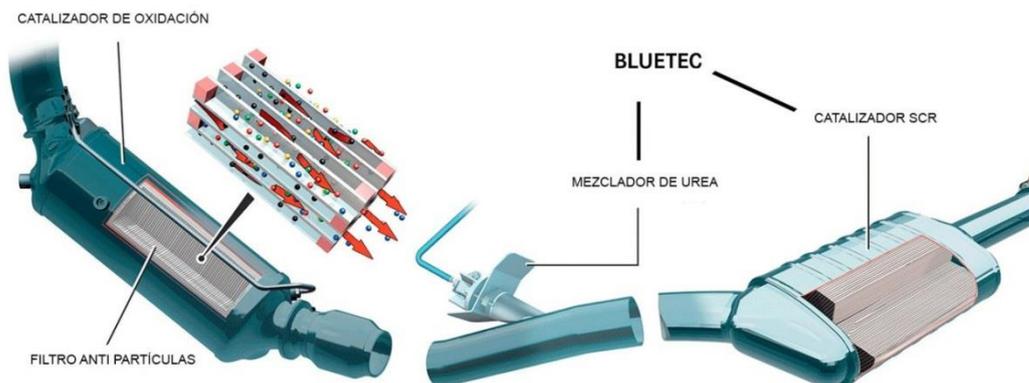


Figura 19. Componentes del sistema de postratamiento en un motor diésel

- Catalizadores de oxidación:** los catalizadores de oxidación tienen como finalidad la oxidación del CO y de los HC sin quemar (especies contaminantes) para obtener CO<sub>2</sub> (la especie deseada). Como efecto colateral también termina oxidando el NO para dar NO<sub>2</sub>, pero hay que destacar que no reduce la emisión de NO<sub>x</sub>, sino que cambia el tipo de óxido de nitrógeno que emite a la atmósfera. Solamente funcionan en atmósferas con contenido en oxígeno. Los agentes catalizadores son el platino y el paladio.

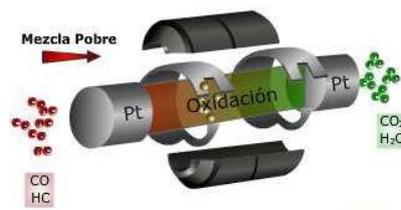


Figura 20. Catalizador de oxidación

- Catalizadores de reducción:** los catalizadores de reducción tienen como finalidad reducir los óxidos de nitrógeno a nitrógeno molecular. El agente catalizador más efectivo es el rodio. No son capaces de funcionar en presencia de oxígeno, por lo que solo sería posible su empleo en motores trabajando con mezcla rica, que no es muy común. Por esta razón su uso no está muy extendido. Cuando se instalan para reducir los NO<sub>x</sub> es necesario disponer primero de un catalizador de reducción y a continuación uno de oxidación, tras una incorporación de aire fresco para que este pueda funcionar y oxidar el CO y los HC sin quemar.

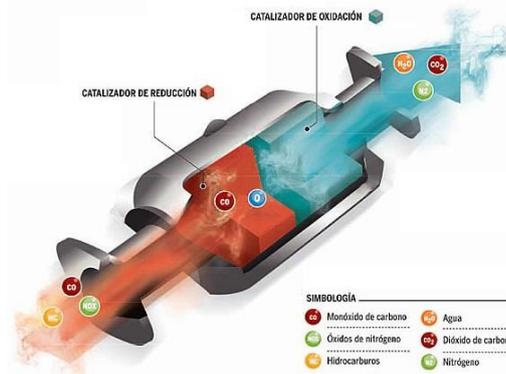


Figura 21. Catalizador de oxidación-reducción

- Catalizadores de tres vías:** es el catalizador empleado en los motores de gasolina convencionales de automoción. Actúa conjuntamente sobre la oxidación del CO y de los HC sin quemar así como sobre la reducción de  $\text{NO}_x$ . Como agentes catalizadores emplean paladio, platino y rodio. Para su correcto uso requiere un dosado estequiométrico. Por lo tanto por este hecho los catalizadores de tres vías no pueden usarse en motores Diésel.

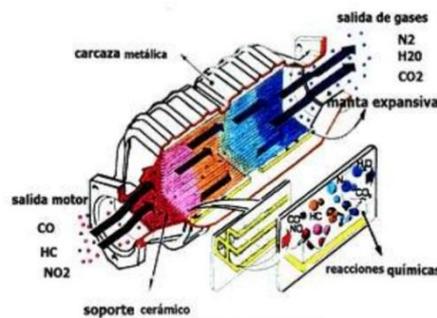


Figura 22. Catalizador de 3 vías

- Reactores de reducción catalítica selectiva (SCR):** se trata de un reactor químico que tiene como finalidad la de reducción de óxidos de nitrógeno a nitrógeno molecular en atmosferas ricas en oxígeno. Como agentes catalizadores utilizan titanio y vanadio. Para su correcto funcionamiento requieren del consumo de amoníaco. Por su alta toxicidad y peligrosidad, se añade una fase previa de generación de amoníaco a partir de urea, que es el componente que se debe suministrar. Esta tecnología se expondrá de una forma más detallada en los siguientes apartados.
- Sistemas de almacenamiento químico de  $\text{NO}_x$ , o trampa de  $\text{NO}_x$ :** estos sistemas son filtros químicos que, por adsorción química, atrapan las moléculas de  $\text{NO}_2$ . Constructivamente son como un catalizador de tres vías, pero incluyen el agente que consigue la ruptura del  $\text{NO}_2$ , que es comúnmente el óxido de bario ( $\text{BaO}$ ). En atmosferas ricas en oxígeno el sistema oxida el CO y los HC sin quemar y también el NO para producir  $\text{NO}_2$ . En los motores Diésel esta tecnología recibe el nombre de NSR (NOX Storage - reduction) o LNT (Lean NOX Tramps).

- **Filtro de partículas:** los sistemas de filtro de partículas en motores diésel (DPF: Diesel Particulate Filter) tienen la función de recoger las partículas provenientes del hollín, los hidrocarburos, los sulfatos, el agua y una pequeña cantidad de cenizas. Los más extendidos son los de tipo *wall Flow*. Se trata de una estructura monolítica de material cerámico y sección cilíndrica u ovalada, con un gran número de canales paralelos y reducida sección transversal, que atraviesa longitudinalmente el monolito y que tienen sus extremos sellados alternativamente, obligando al flujo del gas a atravesar la pared porosa del monolito, actuando de medio filtrante.

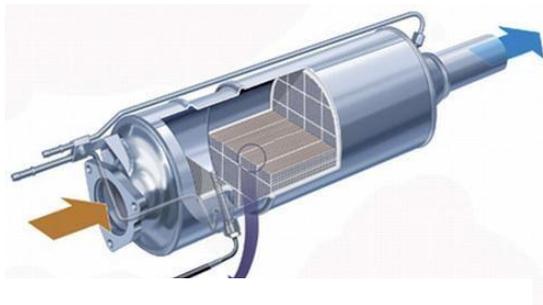


Figura 23. Filtro de partículas

## 2.3 Sistemas de reducción catalítica selectiva (SCR)

### 2.3.1 Introducción

En este apartado se va a explicar detalladamente los sistemas de reducción catalítica selectiva con inyección de urea. Se explicará los procesos químicos a los que son sometido la mezcla de gases de escape y la urea.

### 2.3.2 Proceso de reducción catalítica selectiva

Los sistemas SCR están diseñados para reducir catalíticamente las emisiones de NOx de los motores diésel en un entorno rico en oxígeno inyectando un agente reductor como el AdBlue. La reducción catalítica selectiva del NOx ha sido la principal tecnología elegida por la industria del motor europea para satisfacer los requisitos de emisiones Euro IV y Euro V para motores diésel pesados y durante los últimos diez años también ha sido escogida como una posible estrategia para la eliminación de NOx en vehículos ligeros y cumplir la normativa Euro VI.

La principal característica del proceso SCR es el uso de un agente reductor para reaccionar especialmente con los óxidos de nitrógeno, pero no con el exceso de oxígeno de los gases de escape proveniente de los motores de combustión pobre. La ventaja de esta tecnología es que el NH<sub>3</sub> es un compuesto muy selectivo que reacciona preferentemente con NO y NO<sub>2</sub> para dar N<sub>2</sub> y obteniendo N<sub>2</sub> como subproducto.

Los primeros sistemas SCR comenzaron a usarse en motores estacionarios y marinos, en los cuales se inyectaba directamente el amoníaco (NH<sub>3</sub>) sin diluir. El transporte y almacenamiento de amoníaco resulta peligroso, por lo que en la aplicación de los sistemas SCR para vehículos se usa una dilución de urea al 32,5% en agua (Aus32), comercialmente conocida como AdBlue.

En la Figura 24 se muestra un esquema del sistema SCR:

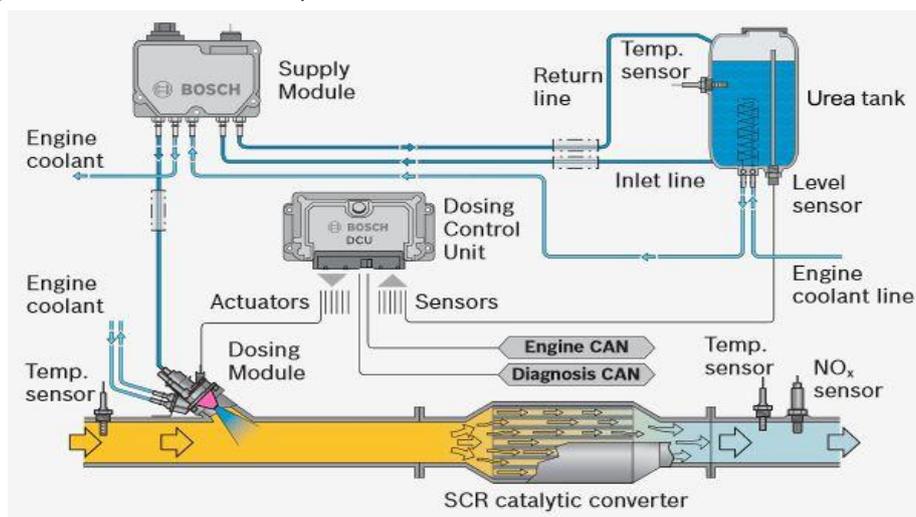


Figura 24. Esquema de un sistema SCR

El objetivo es convertir los NOx contaminantes a un gas no nocivo N<sub>2</sub> mediante una reducción catalítica selectiva con amoníaco (NH<sub>3</sub>) como agente reductor. Para la reducción selectiva

catalítica (SCR) es necesario el uso de catalizadores que adsorban y almacenen  $\text{NH}_3$  a bajas temperaturas ( $T < 200$ ) para desorber posteriormente a temperaturas más altas ( $T = 200-800$ ). Se produce por las sucesivas termólisis e hidrólisis de solución de agua y urea.

El esquema básico de un sistema SCR es una sucesión de catalizadores en el que se producen diferentes reacciones:

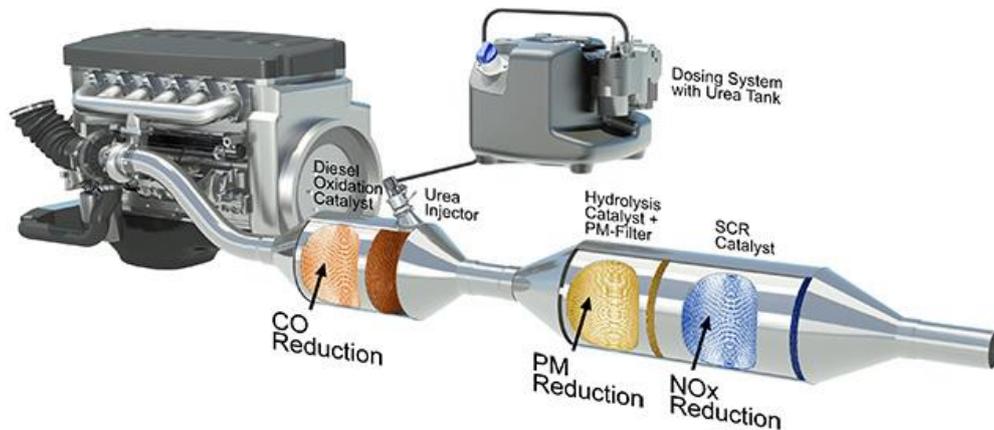


Figura 25. Sucesión de catalizadores en un sistema SCR

En primer lugar, se encuentra un catalizador de oxidación diesel (DOC), con el fin de reducir la concentración de HC si quemar y CO, al mismo tiempo que transformar el NO a  $\text{NO}_2$ , ya que el amoníaco reacciona mejor con este compuesto.

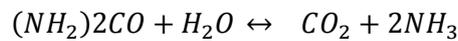
A continuación, está colocado el sistema de inyección de urea, que está formado por los siguientes componentes:

- **Depósito de urea:** normalmente de unos 20 litros de capacidad, con una autonomía de unos 20.000 km.
- **Inyector de urea:** insertado en el tubo de escape y antes del catalizador, pulveriza la cantidad precisa de urea para que tenga lugar la reacción química.
- **Unidad de control:** una centralita que debe calcular la cantidad de urea necesaria en cada momento para que la reacción sea estequiométrica (es decir, que todas las moléculas reaccionen sin que sobren de una o de otra). Esta centralita, además, deberá informar al conductor sobre la cantidad que queda en el depósito de urea y recomendar el repostaje del aditivo antes de que se agote.



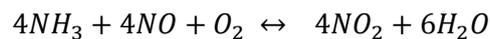
Figura 26. Sistema de inyección de Adblue

El sistema de inyección inyecta una dilución de urea al 32,5% en agua. Esta dilución de urea es arrastrada por los gases de escape, diluyéndose uniformemente con ayuda del mezclador con la finalidad de obtener una mezcla homogénea. De camino hacia los catalizadores de reducción, el denominado tramo de hidrólisis, el agente reductor se descompone en amoníaco (NH<sub>3</sub>) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>):



Para calcular la cantidad inyectada de AdBlue, la unidad de control tiene en cuenta parámetros como el estado operativo del motor, la temperatura de los gases de escape y el porcentaje de NO<sub>x</sub> contenido en los gases de escape.

Posteriormente se encuentra el catalizador SCR, que es un catalizador de reducción formado por una mezcla de óxidos de vanadio y de titanio es un sustrato cerámico. En este catalizador el amoníaco reacciona con los óxidos de nitrógeno, convirtiéndolos en nitrógeno (N<sub>2</sub>) y agua (H<sub>2</sub>O):



Es muy importante el control y la precisión en la inyección de urea ya que, un exceso de ella podría contaminar y emitir amoníaco al escape. Por esta razón, a la salida del catalizador SCR se coloca un catalizador de oxidación de amoníaco, llamado catalizador de limpieza, y un sensor de detección de NO<sub>x</sub>.

En el siguiente esquema se muestra un resumen de los catalizadores y sus reacciones:

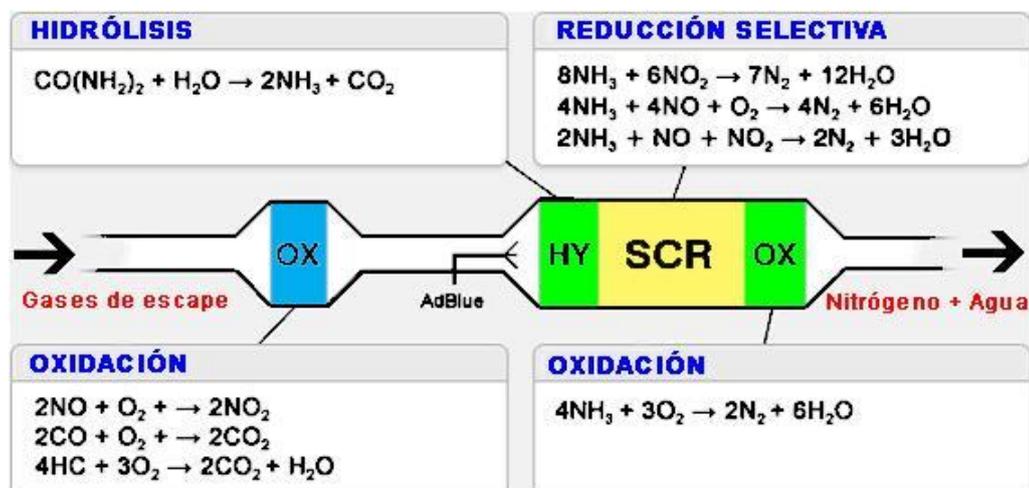


Figura 27. Esquema y reacciones del catalizador de un sistema SCR

## Capítulo 3

# Cálculo mediante método CFD

### 3.1 Introducción al caso de estudio

Para el estudio de la inyección de urea en un catalizador de reducción selectiva, propuesto en este proyecto, el software utilizado ha sido el llamado “Converge v2.4”. Converge v2.4 es un software de dinámica del flujo computacional (CFD), el cual tiene una aplicación al postratamiento de gases de escape muy desarrollada que ha permitido analizar tanto, las áreas en riesgo de sufrir depósitos de urea y la maximización de la uniformidad de los flujos aguas arriba de los catalizadores. Para la detección de áreas con riesgo de sufrir deposiciones de urea, Converge también cuenta con el modelo de transferencia de calor conjugado (CHT). Estos dos aspectos son dos de desafíos más importantes en el diseño de sistema de postratamiento de gases de escape.

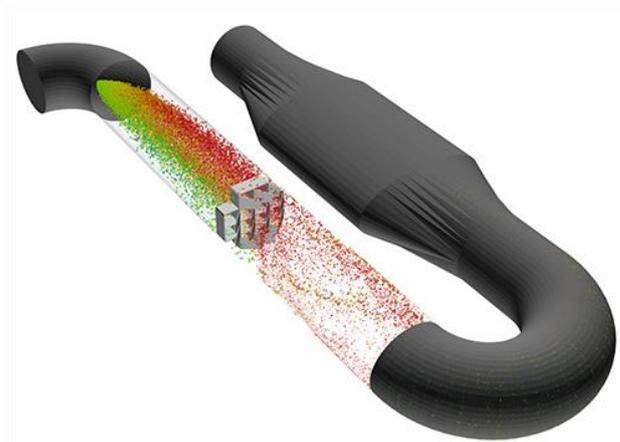


Figura 28. Software Converge v2.4

### 3.2 Dinámica de fluidos computacional (CFD)

La Fluidodinámica Computacional o CFD (Computational Fluid Dynamics)[6] es una disciplina de la mecánica de fluidos donde se realiza la simulación numérica del comportamiento de sistemas de flujo fluido, transferencia de calor, reacción química y otros fenómenos físicos relacionados. La CFD resuelve las ecuaciones del flujo fluido en la región o dominio de interés, con condiciones especificadas en los contornos del dominio.

En el planteamiento del problema CFD, el punto de inicio de todo método numérico es el modelo matemático del fenómeno físico que se desea estudiar y que generalmente suele ser expresado en forma de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales o ecuaciones integro-diferenciales junto con las condiciones de contorno. En el caso de la dinámica de fluidos computacional se utilizan las ecuaciones de Navier-Stokes o simplificaciones de las mismas dependiendo de la aplicación. Una vez definido el problema matemático que se quiere resolver, se procede a realizar la discretización temporal y espacial y a transformar las ecuaciones en algebraicas. Como resultado, la solución que obtenemos no sea continua, sino que vendrá dada por una serie discreta de valores tanto en el espacio como en el tiempo. El software CFD empleado en el proyecto ha sido Converge v2.4

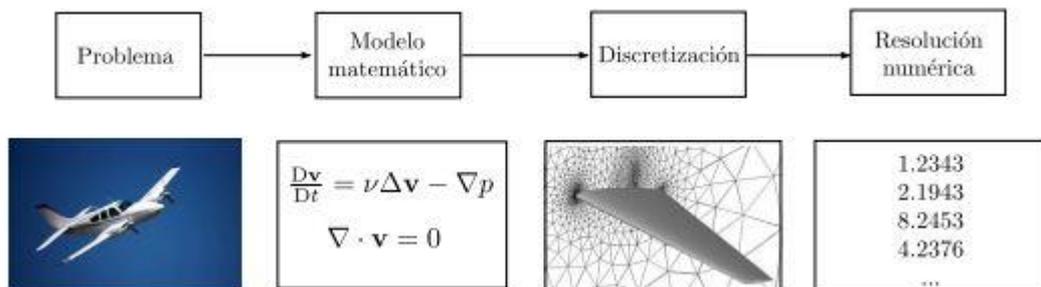


Figura 29. Pasos para resolver numéricamente un problema CFD

### 3.3 Ecuaciones para el cálculo CFD

La mecánica de fluidos es la rama de la mecánica que estudia el movimiento de los fluidos en movimiento, las interacciones que provocan entre ellos y las fuerzas que generan. Se define un fluido en movimiento como la función de distribución de la velocidad y dos magnitudes termodinámicas del mismo.

Un método utilizado para resolver las ecuaciones de los cálculos CFD, es considerar un volumen finito por el cual atraviesa un fluido, este método es el de volúmenes finitos, explicado anteriormente.

Los cálculos CFD están basados en las ecuaciones de la mecánica de fluidos y las ecuaciones principales son las siguientes [6]:

- Ecuación de continuidad.
- Ecuación de conservación de cantidad de movimiento.
- Ecuación de conservación de la energía.
- Ecuación de conservación de especies.

#### 3.3.1 Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad está basada en el principio de la conservación de la masa. El principio de la conservación de la masa dice que a lo largo de un fluido la masa ni se crea ni se destruye, es igual a la entrada y a la salida de sistema. Se puede expresar matemáticamente, en su forma diferencial, de la siguiente manera:

$$\frac{d\rho}{dt} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

Donde  $\rho$  es la densidad del fluido y  $\vec{v}$  la velocidad del fluido en un punto  $(x,y,z)$  del espacio en un tiempo  $t$  determinado. La ecuación está dividida en dos términos, el primero muestra la variación de masa por unidad de volumen y tiempo en un punto determinado, y el segundo término hace referencia a la variación de velocidad del fluido.

### 3.3.2 Ecuación de conservación de cantidad de movimiento

La ecuación de cantidad de movimiento de un fluido se obtiene de la segunda ley de Newton, la cual dice que para un volumen finito la variación de la cantidad de movimiento de la masa es igual a la resultante de las fuerzas que actúan sobre ese volumen. La siguiente expresión muestra la forma diferencial de la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla(\rho \vec{v} * \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \vec{\tau} + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Donde  $\rho \vec{g}$  es la fuerza gravitacional y  $\vec{F}$  son las fuerzas externas que se producen y finalmente  $\nabla \vec{\tau}$  muestra la variación en el tensor de tensiones del fluido. En la ecuación el primer término representa la variación temporal de la cantidad de movimiento dentro del volumen finito y el segundo término representa la cantidad de movimiento que entra y sale al sistema. Ya que esta es una ecuación de conservación, la cantidad de movimiento no puede variar desde que entra hasta que sale del sistema cerrado. La anterior ecuación es la que se utiliza en los cálculos CFD.

### 3.3.3 Ecuación de conservación de la energía

La ecuación de la conservación de la energía está basada en el primer principio de la termodinámica, la cual establece que el valor de la energía de un sistema aislado permanece invariable con el paso del tiempo. Esto significa que energía no puede ser creada ni destruida, solo puede transformarse de una forma a otra.

### 3.3.4 Ecuación de conservación de las especies

La ecuación de la conservación de las especies resuelve la fracción másica de todas las especies que se encuentran en el dominio. La fracción másica de una especie como:

$$Y_i = \frac{M_i}{M_t} = \frac{\rho_i}{\rho_t}$$

Donde  $M_i$  es la masa de la especie  $i$  en una celda determinada,  $M_t$  es la masa total que existe en una celda determinada. La  $\rho_i$  es la densidad de la especie  $i$  en una celda determinada y  $\rho_t$  es la densidad total que existe en dicha celda.

Las ecuaciones de especies se pueden resolver de manera independiente o se pueden resolver junto a otras ecuaciones de conservación. Si la conservación de momento no se resuelve, la convección no se considerará en la ecuación de conservación de especies.

### **3.4 Modelos de turbulencia**

La dinámica de fluidos computacional (CFD) es una herramienta muy extendida actualmente para la resolución de flujos turbulentos. Para ello, mediante la resolución numérica, se aplican las ecuaciones de la mecánica de fluidos para un medio continuo. Pero uno de los problemas de las ecuaciones de la mecánica de fluidos es el tratamiento de la turbulencia, por lo que para obtener una solución óptima se aplican las ecuaciones de Navier-Stokes.

Las ecuaciones de Navier-Stokes son un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento de un fluido newtoniano. Excepto para situaciones muy concretas y pequeños tipos de flujo, es muy difícil obtener una solución analítica por lo que para obtenerla se realizan aproximaciones a flujo turbulento mediante análisis numéricos.

Para el análisis de flujos turbulentos existen diferentes métodos de cálculo:

- DNS (Direct Numerical Simulation).
- LES (Large Eddy Simulation).
- RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes).

#### **DNS (Direct Numerical Simulation)**

Este método de resolución de flujo turbulento resuelve de manera directa las ecuaciones de Navier Stokes sin la utilización de ningún modelo de turbulencia. Este método es el más eficaz y preciso para predecir flujos turbulentos. Resuelve tanto escalas grandes como pequeñas espaciales y temporales de flujos turbulentos.

El inconveniente de este método es que el gasto computacional necesario es muy elevado, por lo que se aconseja utilizar este método para resolver flujos con geometrías sencillas y números de Reynolds muy bajos.

#### **LES (Large Eddy Simulation)**

Existe un amplio rango de escalas espaciales y temporales en los flujos turbulentos. Es en las escalas grandes donde es más efectivo el transporte de propiedades, mientras que en las escalas pequeñas son más débiles y su capacidad de transporte de propiedades es menor. Por

esta razón este método de resolución de flujo turbulento se basa en la resolución de las escalas grandes, mientras que para las escalas más pequeñas se realizan mediante un modelo una aproximación que permita tener en cuenta las variaciones del flujo.

Este método está basado en el cálculo de las velocidades en cada diferencial de volumen para así a continuación calcular la vorticidad del fluido y poder determinar la disipación de cada escala.

La principal ventaja de este modelo es que reduce el error ya que la mayor parte de información de la turbulencia es calculada. Pero el gasto computacional sigue siendo muy elevado y no es posible realizar simulaciones con geometrías complejas.

### **RANS (Reynolds Averaged Navier Strokes)**

Este método de resolución de flujo turbulento está basado en las ecuaciones de Navier Stokes. Consiste en la promediación de las ecuaciones del fluido, por lo que los valores se sustituyen por la suma de su valor medio y una componente fluctuante.

En el campo de la ingeniería, es más importante los valores medios que las fluctuaciones, por lo que se aplica métodos de aproximación estadísticos. Este método es el más utilizado para casos prácticos de la industria.

Los modelos RANS que permite utilizar el software Converge v2.4 son: standard k-ε, RNG k-ε, Generalized RNG k-ε, Rapid distortion RNG k-ε, k-ω SST, Realizable k-ε.

El método RANS utilizado para el análisis del presente proyecto ha sido RNG k-ε. Este método está basado en la representación del transporte turbulento a través de la energía cinética turbulenta k y la disipación turbulenta ε. Este modelo requiere de dos ecuaciones adicionales para su modelación.

Este método presenta dos variaciones con respecto al standard k-ε. Propone un cambio en la definición de la viscosidad turbulenta  $\mu_t$  debido al efecto de la rotacionalidad del flujo e incluye un término adicional en la ecuación de transporte de ε. En el modelo RNG la viscosidad turbulenta se obtiene en función de la rotacionalidad  $\alpha_s$  y un número de rotación  $\Omega$ :

$$\mu_t = \mu_{t0} f\left(\alpha_s, \Omega, \frac{k}{\varepsilon}\right)$$

### 3.5 Discretización espacial

El primer paso en la aplicación de la dinámica de fluidos computacional [8], consiste en la discretización espacial del dominio para posteriormente se calcula sobre la misma la aproximación numérica de los flujos convectivos y difusos, así como las fuentes. Existen muchos métodos para las discretización del problema. A groso modo, se puede clasificar los distintos esquemas de discretización en tres métodos principales:

- **Métodos de diferencias finitas.** Utilizan la formulación diferencial de las ecuaciones. El dominio se cubre con puntos llamados nodos en los cuales la ecuación es aproximada remplazando las derivadas parciales por aproximaciones en términos de los valores nodales de la función. Cuando se aplican en mallas estructuradas son muy sencillos y efectivos. Además, es fácil obtener esquemas de alto orden. Entre sus inconvenientes están que la conservación no está garantizada si no se tiene especial cuidado y es complicada su aplicación a dominios de geometrías irregulares.
- **Métodos de volúmenes finitos.** Utilizan la formulación integral de las ecuaciones. Se basa en la discretización directa de las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento y la energía. Este método integra las ecuaciones en cada uno de volúmenes de control en que se divide el dominio de trabajo asociando a cada uno de ellos un punto nodal en el centro. Las integrales de superficie que aparecen en las ecuaciones se aproximan por la suma de los flujos que atraviesan cada una de caras del poliedro; el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de las variables en un grupo de puntos nodales. La principal ventaja del método de los volúmenes finitos es que la discretización espacial se lleva a cabo directamente en el espacio físico del problema. Por lo tanto, no hay problemas con la transformación entre sistemas de coordenadas, como ocurre en el método de las diferencias finitas. Otra ventaja del método es la gran exibilidad que ofrece a la hora de usarlo tanto en mallas estructuradas como no estructuradas. Es el método utilizado por la mayoría de software CFD (ANSYS FLUENT, STAR CCM+, CONVERGE...). Este método de discretización es el empleado en el Converge Studio v2.4.

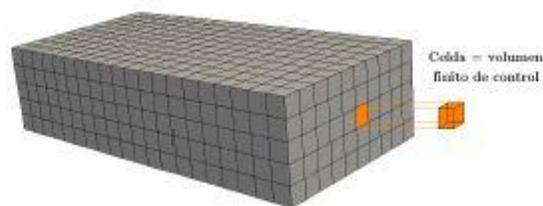


Figura 30. Representación de un dominio discretizado con el método de volúmenes finitos.

- **Métodos de elementos finitos.** Utilizan la formulación débil: la ecuación diferencial es multiplicada por unas funciones llamadas funciones peso y posteriormente integradas. Son similares en cierto modo al método de volúmenes finitos. El dominio se divide en elementos y en cada uno de ellos la solución es aproximada, generalmente de forma

lineal, utilizando los valores de la función en los vértices del elemento. Esta aproximación es sustituida en la ecuación integral pesada y se impone que la derivada de dicha integral con respecto al valor en cada nodo sea cero. Son apropiados para geometrías complejas y fáciles de analizar matemáticamente.

Para poder llevar a cabo todos estos métodos, es necesario realizar una previa discretización geométrica (espacial), para poder resolver la discretización de las ecuaciones que gobiernan en el fluido. Los dos tipos de mallado más importantes son:

- **Mallado estructurado.** Están formadas por un conjunto de nodos y cada punto de la malla está identificado, por los subíndices  $i, j, k$ , en coordenadas cartesianas, aunque también se pueden expresar en un sistema curvilíneo. La mayor ventaja de este tipo de mallas está en la ordenación de cada elemento en memoria, es decir, el acceso a celdas vecinas es muy rápida y eficaz. La gran desventaja de este tipo de malla es que solo sirven para geometrías simples. Son las mallas utilizadas en elementos finitos.

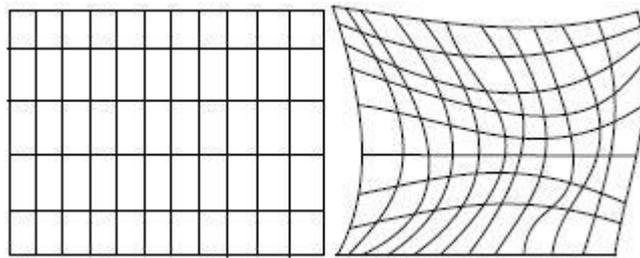


Figura 31. Mallas estructuradas

- **Mallado no estructurado.** En este tipo de mallado las celdas y nodos no siguen un orden determinado, por lo que, a diferencia de las mallas estructuradas, no se puede pasar de una celda a otra mediante los subíndices  $i, j, k$ . Los elementos de esta malla son un conjunto de cuadriláteros y triángulos. La ventaja que aporta este tipo de mallado es la flexibilidad que tiene en cuanto a dominios de geometría, ya que se adapta sin ninguna restricción en cuanto a número de elementos ni nodos. Estas mallas son utilizadas para los métodos de volúmenes y el de elementos finitos.

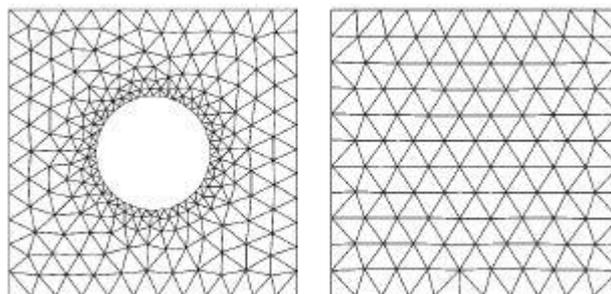


Figura 32. Mallas no estructuradas

## Capítulo 4

# Metodología computacional de resolución sistema SCR mediante CFD

### 4.1 Introducción

En este capítulo se va a realizar la preparación de dos análisis mediante el software Converge v2.4. En el primer análisis de estudio se va a simular un sistema de Catalizador de reducción selectiva (SCR) con inyección de urea. En la inyección se va a segregar una mezcla de 67.5 % de agua y 32.5 % de Urea. Al mismo tiempo se va a usar el modelo *Conjugate heat transfer (CHT)*, con el que se va a analizar el intercambio de calor entre el fluido y la parte sólida del mezclador. Se va a utilizar la opción *Detailed Decomposition*, el cual permite ver las deposiciones de urea y derivados que se forman en el sistema.

Por otro lado, se va a realizar un segundo análisis, donde se va a simular el mismo caso, pero solo se va a inyectar agua. En la actualidad de la industria, a la hora de realizar un estudio sobre sistemas de reducción selectiva catalítica con inyección de urea, el método habitual es realizar una inyección de agua y eliminar todos los procesos químicos de manera que se trate de un cálculo rápido y simple y poder ahorrar gasto computacional.

Al final de la preparación del caso de inyección de urea se mostrará un esquema resumen mostrando las condiciones de entrada/salida y los mecanismos físico-químicos utilizados en el análisis.

## 4.2 Caso 1. Inyección de urea

### 4.2.1 Geometría.

Una vez está iniciado el programa *Converge studio v2.4*, el primer paso a realizar para preparar la simulación, es importar la geometría. *Converge studio v2.4* permite importar geometría con formato \*.stl.

**File → Import → Import STL → Open**

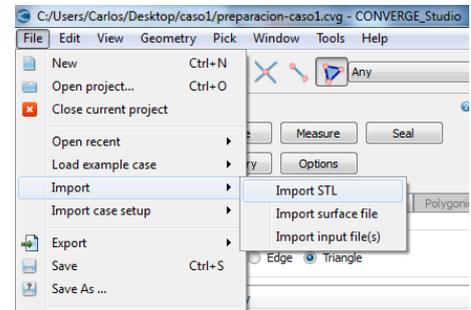


Figura 33. Importar geometría

Cuando la geometría ya está importada, y con el fin de hacer más sencillo el trabajo el sólido, se puede configurar la opción de *Fences/flags*, que permite la separación del sólido mediante la distribución de los triángulos con los límites que sean necesarios. Para ello hay varias opciones:

- **Fences:** Permite seleccionar manualmente los diferentes límites que queremos aplicar sobre el sólido, mediante la selección de vértices, aristas o triángulos.
- **Find/Clean:** permite colocar o eliminar límites automáticamente, y se configura mediante un ángulo de actuación.
- **Flags:** Permite crear o eliminar límites, y asignar triángulos a un límite creado anteriormente.

En la preparación de la simulación, se ha optado por el uso de la opción *Fence* y *Flags*, para dividir el sólido en diferentes límites que posteriormente serán las partes del catalizador SCR.

**Geometry → Boundary → Fences → seleccionar vértices/aristas → Mark Fence**

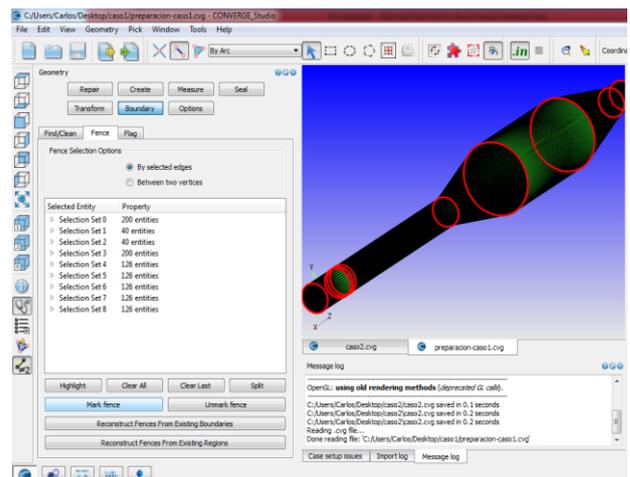
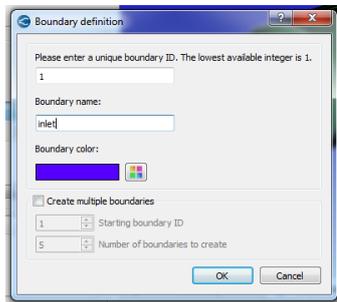
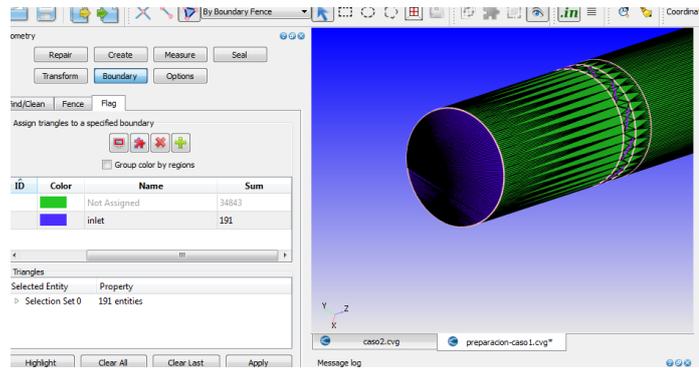


Figura 34. Configuración Fences

**Geometry → Boundary → flag → create new boundary → Seleccionar triangulos → apply**



**Figura 36. Crear new Flag**



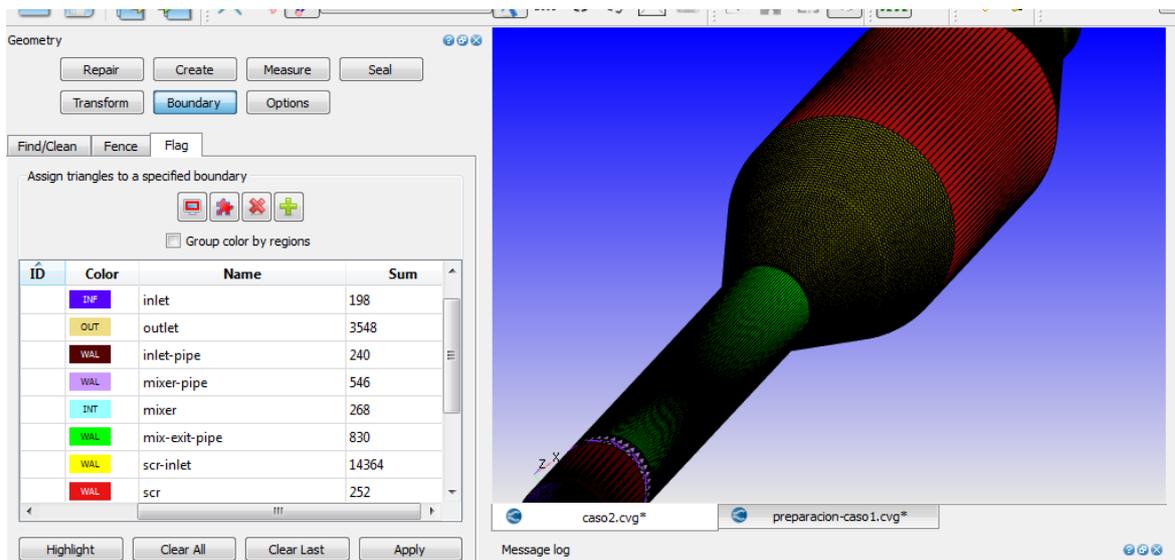
**Figura 35. Asignar triangulos a la nueva Flag**

Este proceso se ha repetido para cada una de las partes del sólido. El sistema está formado de las siguientes partes:

**Tabla 2: Partes del sistema y gama de colores**

Inlet 	Outlet 	Inlet-Pipe 	Mixer-Pipe 	Mixer 	Mixer-Ends 
Mixer-exit-pipe 	SCR-Inlet 	SCR 	SCR-Outlet 	Outlet-pipe 	

Finalmente, el sólido queda dividido mediante límites en diferentes partes, que son diferenciadas por los colores asignados en la *Tabla 1*.



**Figura 37. Boundaries del sistema SCR**

Por último, hay que comprobar que el archivo importado \*.stl, no tienen errores constructivos que puedan afectar a la simulación. Para ello se utiliza el *Diagnosis Dock*.

El *Diagnosis Dock* es una opción que permite identificar problemas en la superficie de la geometría las cuales pueden causar error o inconsistencias en la simulación. Para acceder al *Diagnosis Dock* hay diferentes maneras:

- *View* → *Diagnosis Dock*.
- Clickar con el botón derecho sobre *Toolbar area* y seleccionar la opción *Diagnosis Dock* en el *pop-up menu*.
- Teclar *Ctrl+D* en el teclado.

En *Find Options* se seleccionan los tipos de error que se quiere hallar en la superficie de la geometría. Los errores más importantes, y por los que si aparecen, *Converge Studio*, no permite realizar la simulación son los siguientes:

- **Intersections:** el plano de un triángulo intersecta con el plano de otro triángulo.
- **Nonmanifold problems:** aristas compartidas por dos o más triángulos.
- **Open Edges:** triángulos con al menos una arista que no comparte con otro triángulo.
- **Normal orientation:** Triángulos cuyos vectores normales son aproximadamente 180 grados diferentes que los vectores normales de los triángulos adyacentes.
- **Isolated Tris:** triángulos, cuyos triángulos colindantes están asignados a otro límite.

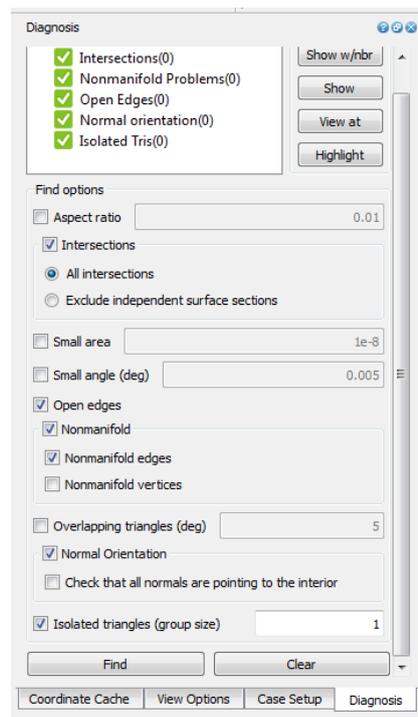


Figura 38. Diagnosis Dock

Las herramientas para reparar estos errores se encuentran en **Geometry** → **Repair**. Dentro de este menú hay diversas herramientas (*Delete, stitch, patch, align*, etc) para resolver los errores que encuentre el programa.

Una vez seleccionado los errores deseados, se selecciona sobre *Find*, para en la parte superior del *Diagnosis Dock*, mostrar los errores encontrados. Cuando a la derecha de cada tipo de error aparezca un 0, la geometría estará totalmente reparada y preparada para iniciar el *Case Setup*.

#### 4.2.2 Case setup.

El segundo paso, una vez ya está la geometría reparada de errores y preparada, es configurar el *Case Setup Dock*. El *Case Setup dock* es un menú que permite introducir los modelos físicos de la simulación, las condiciones iniciales, los materiales, los parámetros de simulación y otros muchos parámetros que serán explicados a continuación.

Para abrir el *Case Setup Dock* ir a **menu bar** → **view** → **Case Setup Dock**

Cuando ya está abierto el menú *Case Setup Dock*, se inicia seleccionando *Begin Case Setup*.

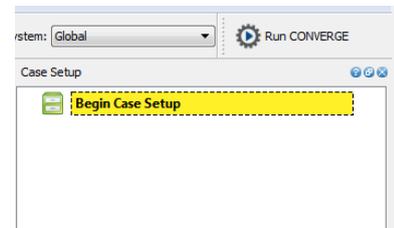


Figura 39. Begin Case Setup

Para poder iniciar el Case Setup hay que seleccionar la configuración y los modelos necesarios para realizar la simulación. A continuación se adjunta la tabla 3 donde se especifica toda la configuración y modelos de la simulación.

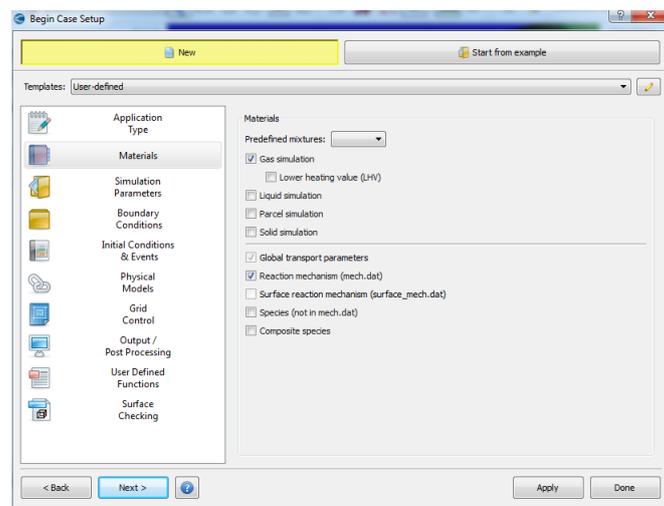


Figura 40. Seleccionar Configuración de la simulación

Tabla 3: Configuración de la simulación

Materials	Gas simulation	Parcel simulation	Global transport parameters	Reaction mechanism	
simulation parameters	Run parameters	Simulation time parameters	Solver parameters		
Boundary conditions	Boundary				
Initial conditions and Events	Regions and initialization	Events			
Physical models	Spray modeling	Combustion modeling	Turbulence modeling	Source/Sink modeling	Super-Cycle
Grid control	Base grid	Adaptive mesh refinement	Fixed embedding		
Output/Post processing	Post variable selection	Output files			

### 4.2.2.1 Materials.

#### Gas simulation

En la configuración de *Gas simulation* se va a introducir los gases utilizados en el proceso de catalización de gases de escape. Para ello, hay que importar el archivo *therm.dat*, donde están todos los gases necesarios.

**Gas simulation** → **Gas thermodynamic data...** → **Import data** → **Seleccionar archivo therm.dat** → **OK**

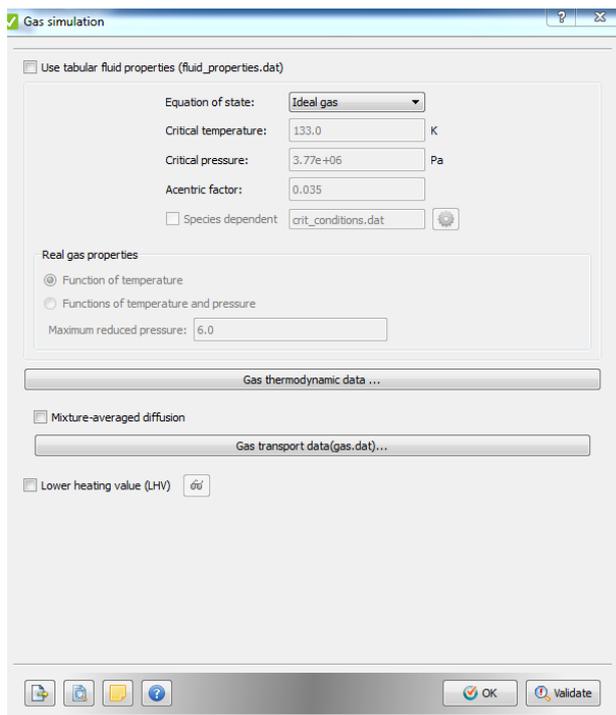


Figura 42. Gas simulation

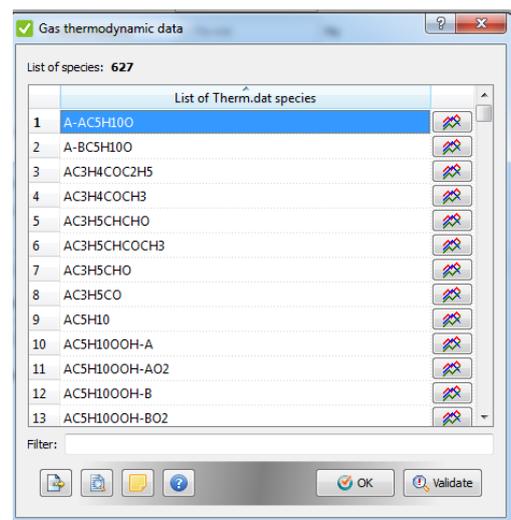
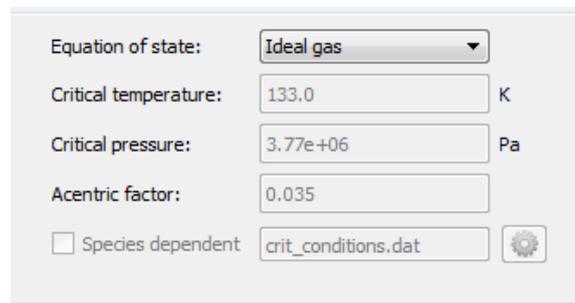


Figura 41. Importar therm.data

Por otro lado, la ecuación de estado usada en el estudio es la de gas ideal. Esta opción usa códigos de resolución basadas en las leyes de gases ideales usa parámetros ya configurados que permiten compensar los errores asociados a la superposición de gases.

**Gas simulation → Equation of state → Ideal gas → OK**



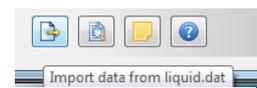
**Figura 43. Ecuación de estado**

## Parcel simulation

*Converge Studio* emplea parcelas Lagrangianas discretas para simular un tipo de líquido especial en conjunción con un modelado de spray. Esta configuración es idéntica a la configuración de un líquido. La principal diferencia es que la simulación de líquidos está basada en un método Euleriano y la simulación de parcelas está basada en un método Lagrangiano.

En el proyecto se va a estudiar la inyección de urea es un catalizador SCR, por lo que la mejor opción es el uso de la configuración *Parcel simulation*.

Los dos líquidos que se va a inyectar son agua (H<sub>2</sub>O) y urea ((NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CO). Para ello se tiene que importar el archivo *Liquid.dat*



**Figura 44. Importar Liquid.data**

**Parcel simulation → Import data → Seleccionar archivo Liquid.data → OK**

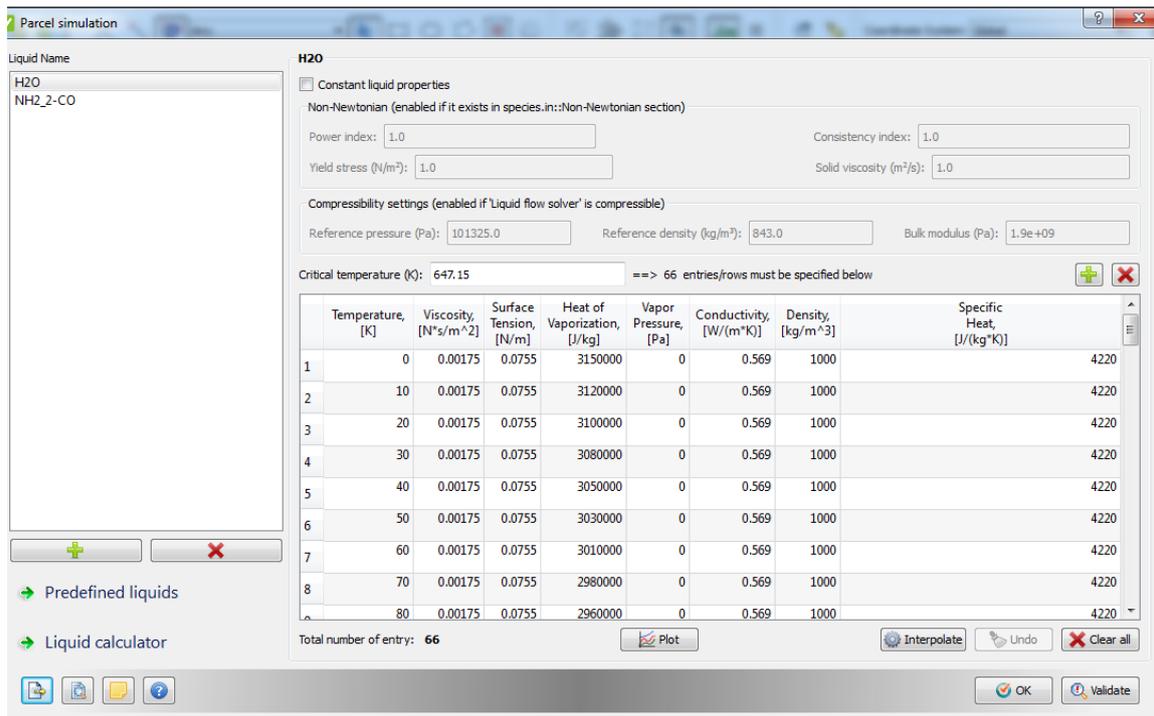


Figura 45. Parcel simulation

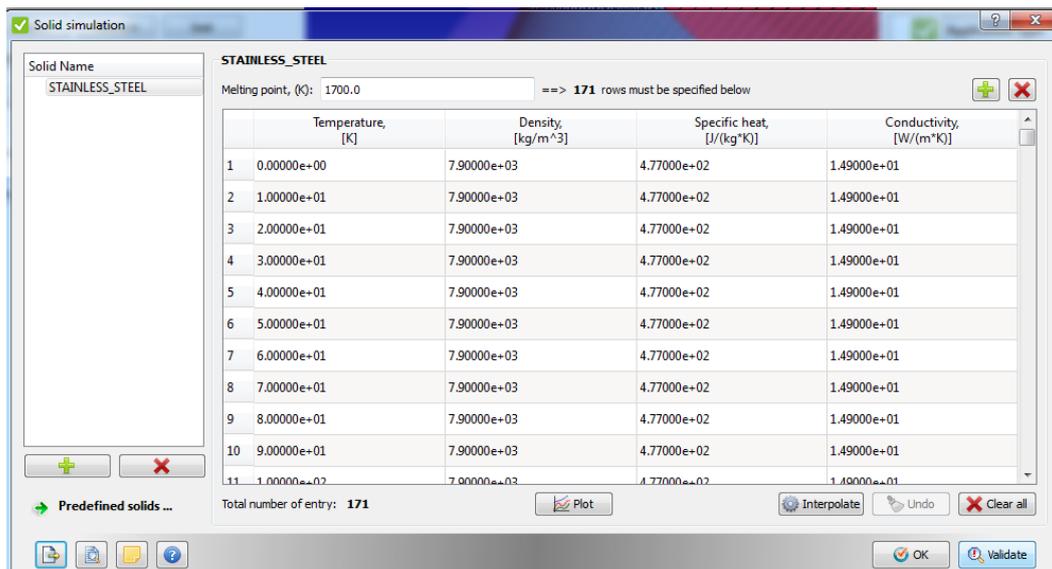
Una vez importados los dos líquidos, como se muestra en la figura x, aparecen todos sus parámetros como la temperatura, viscosidad, calor específico, etc.

## Solid simulation

En la configuración del *Case Setup* es muy importante introducir cual va a ser el sólido utilizado, ya que se va a utilizar el modelo *Conjugate heat transfer (CHT)* para obtener la transferencia de calor que se produce entre el fluido y el sólido cuando pasan a través del mezclador.

En este caso el sólido seleccionado es el acero inoxidable, ya que para la simulación es el metal que mejores parámetros tiene. Para importar el sólido, de igual manera en el caso de *Parcel simulation*, hay que importar el archivo *Solid.dat*

**Solid simulation → Import data → Seleccionar archivo Solid.dat →OK**



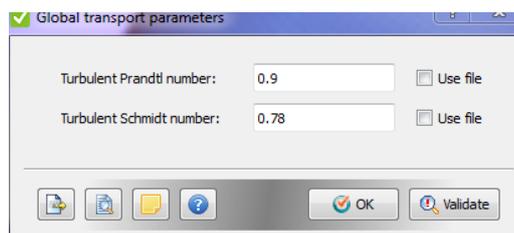
**Figura 46. Solid simulation**

Converge Studio muestra los valores de densidad, calor específico y conductividad. Estos valores pueden ser modificados según sea necesario clickando dos veces sobre el valor que se quiere modificar.

## Global transport parameters

En la configuración de Global transport parameters hay que introducir los valores de *Turbulent Prandtl number* (relación de viscosidad cinemática a difusividad térmica) y *Turbulent Schmidt number* (relación de la viscosidad cinemática a la difusividad másica).

Los valores asignados son 0.9 y 0.78 respectivamente.



**Figura 47. Global transport parameters**

## Reaction mechanism

En la configuración de Reaction mechanism hay que importar el archivo mech.dat, el cual incluye todos los elementos, reacciones y especies utilizadas en la simulación.

Para cada reacción, el archivo de Reaction mechanism, debe definir los valores de factor pre-exponencial  $A_i$  (En centímetros, gramos o segundos, dependiendo de la reacción), el exponente de temperatura  $\beta_i$  (Adimensional), y la energía de activación  $E_i$  (En cal/g\*m-mol).

Estas constantes pertenecen a la expresión de Arrhenius, por la cual está basado el modelo físico:

$$K_{fi} = A_i * T^{\beta_i} * \exp\left(\frac{-E_i}{R_u * T}\right)$$

Para que *Converge v.2.4* procese el mecanismo de reacción definido en el archivo del mecanismo de reacción, también se debe importar datos termodinámicos para todas las especies en el archivo de mecanismo de reacción.

**Reaction mechanism → Import data → Seleccionar archivo mech.dat → OK**

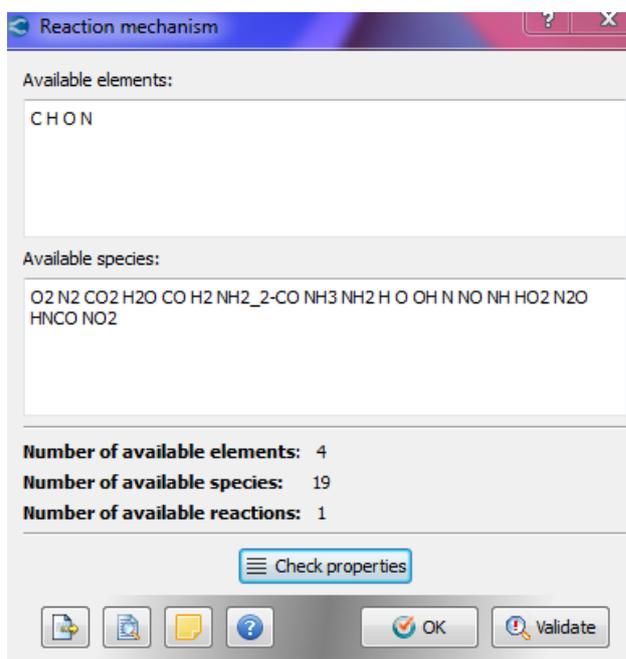


Figura 48. Reaction mechanism

## Species

En la configuración de *Species*, el archivo importado es *Species.in*, el cual incluye un listado de cada tipo de especie (Gas, líquido, parcela, no newtoniano, escalar, pasivo o sólido) utilizado en la simulación.

En el cuadro de diálogo *Especies*, puede definirse cualquier número especies, utilizando nombres arbitrarios, siempre que también defina las propiedades de cada especie en el archivo de datos correspondiente (archivo de datos termodinámicos, *gas.dat*, *liquid.dat* o *solid.dat*).

En la simulación, las especies utilizadas son las siguientes:

***Species → Import file .in → Seleccionar archivo Species.in → OK***

Tabla 4. Species

Gas	CN
Parcel	H2O, (NH2)2CO
Non-transport pasive	Chem stiff
Solid	Stainless steel

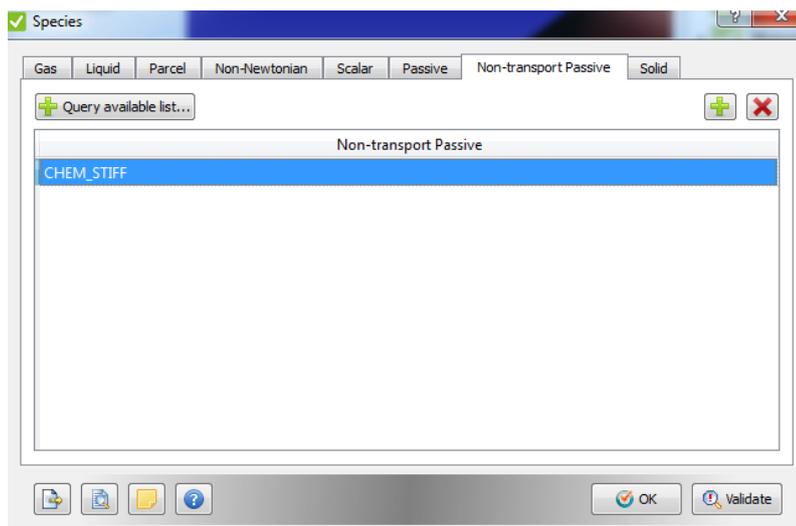


Figura 49. Species

En resumen, este apartado se ha definido los materiales que intervienen en el sistema. Hay que definir los dos fluidos que van a ser inyectados, el agua y la urea. También hay que definir el material sólido del mezclador, acero inoxidable, con el objetivo de poder calcular la transferencia de calor entre el fluido y el sólido.

A lo largo del sistema SCR, se produce una reacción de hidrólisis, la cual permite transformar la urea y el agua en amoníaco y dióxido de carbono. Estos productos son los que una vez entren al catalizador se convertirán en nitrógeno y agua. Por esta razón se ha definido la reacción de hidrólisis en el sistema.

## 4.2.2.2 Simulation parameters.

### Run parameters

La configuración de *Run parameters*, permite elegir un modo de simulación, nueva o ya empezada, genera el archivo de superficie con la geometría ya reparada (La geometría es guardada como Surface.dat) y elegir entre muchos parámetros de configuración y opciones de solucionado.

La simulación se comienza como una nueva simulación:

**Run parameters → Run mode → OK**

En el *solver tab*, el *solver* seleccionado es transient, ya que se va a analizar el flujo de urea y gases de escape en regimen transitorio. La opción *simulation mode* permite realizar dos tipos de simulacion:

- **Full hydrodynamics:** realiza la simulación de manera completa, tanto con el mallado con los modelos físicos.
- **No hydrodynamics:** este modo ignora las ecuaciones de transporte, spray y combustión, de manera que la simulación que realiza es solo sobre el mallado de la superficie del sólido.

En la simulacion del sistema de inyeccion de urea en el SCR, se ha obtado emplear los dos modos.

En primer lugar se ha empleado el modo *No hydrodynamics*, con el objetivo de revisar que la superficie de la geometría estaba en perfectas condiciones y con el objetivo de ahorrar de reducir el timpo computacional gastado.

En segundo lugar se ha cambiado el modo a *Full hydrodynamics*, con el objetivo de una vez revisada la superficie de la geomtria, realizar el estudio completo de la inyección de urea a lo largo de todo el sistema de catalizado de gases de escape.

Por último, el *gas flow solver* utilizado es *Compressible* y el *Liquid flow solver* es *incompressible*.

### Simulation time parameters

La configuración de *Simulation time parameters*, permite especificar parámetros y opciones de control del *timing* de la simulación, límites de *time-step* y otras opciones relacionadas con los límites admitidos por la simulación.

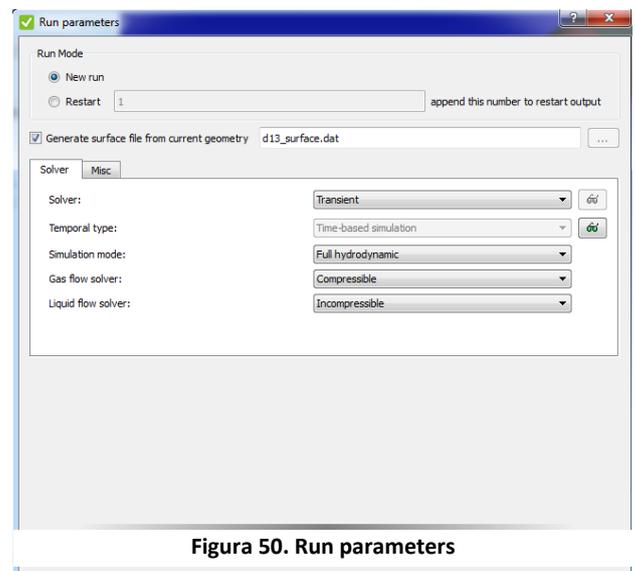


Figura 50. Run parameters

En primer lugar, se introduce el principio y el final de la simulación. El time-step en la simulación se mide en segundos, el inicio es 0 segundos y el final de la simulación es 1 segundos.

En cuanto a la selección del *time-step*, la opción seleccionada para la simulación es un algoritmo de *time-step* variable, ya que permite un mejor análisis en las zonas que crean más conflicto.

Tabla 5. Valores de Time-step

time-step inicial	Time-step máximo	Time-step mínimo
1,00E-06	0,01	1,00E-08

En cuanto al resto de parámetros se introduce los valores recomendados por *Converge Studio*, ya que se adecuan a los requisitos de la simulación.

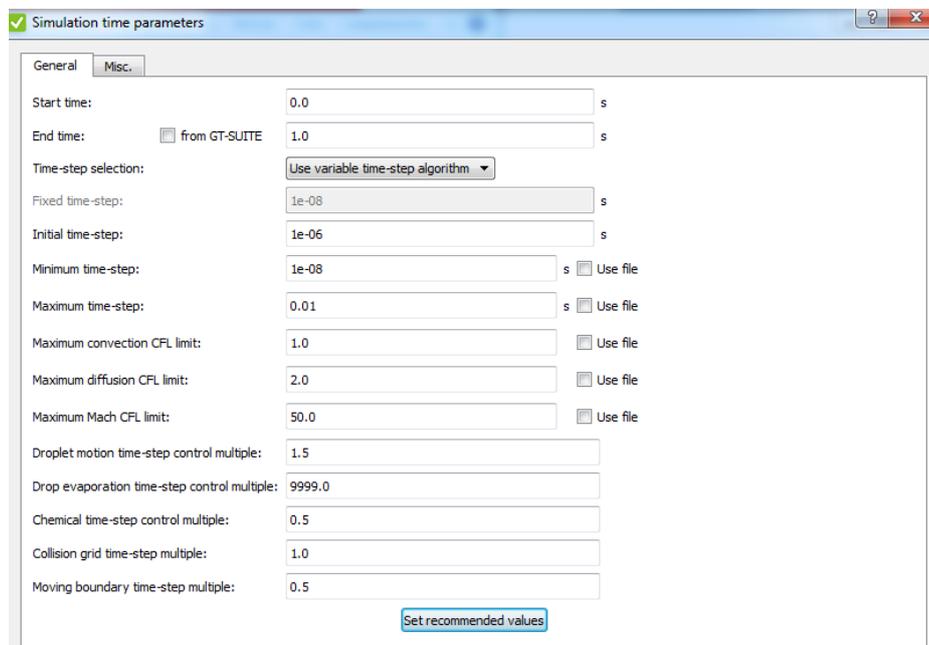


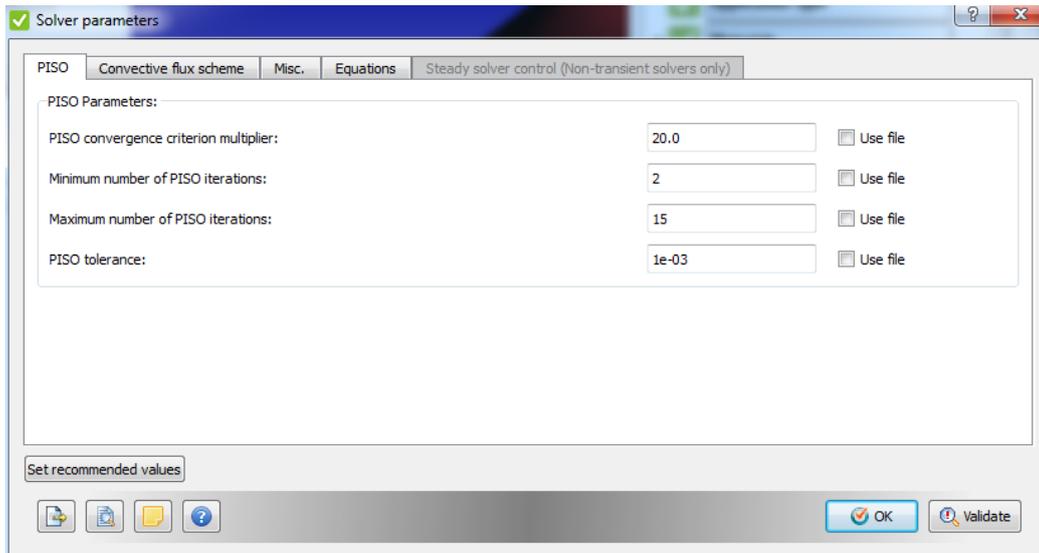
Figura 51. Simulation time parameters

## Solver parameters

La configuración de *Solver parameters* permite modificar los parámetros del solucionador. *Solvers parameters* permite configurar los valores del algoritmo multiplicador PISO, Flujo convectivo, ecuaciones y control del solucionador estacionario.

Para simulaciones de gas o flujo transitorio *Converge Studio* recomienda usar valores por defecto. Para ello:

**Solver parameters → Click en Set recommended values → OK**



**Figura 52. Solver parameters**

### 4.2.2.3 Boundary conditions

#### Boundary

La configuración de *Boundary* permite dividir el sólido en diferentes partes y asignar a cada una de ellas unos parámetros de movimiento, temperatura, región y otras condiciones de superficie.

Para cada uno de los límites creados anteriormente en el apartado de la geometría, hay que configurar las propiedades de superficie.

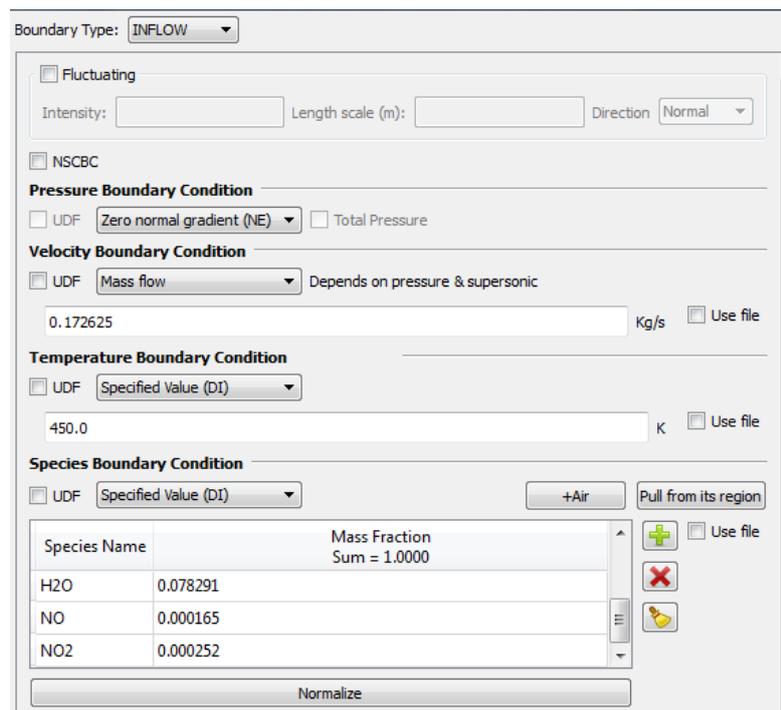
En primer lugar, hay que configurar la entrada (Inlet) y la salida (Outlet). Para ello en *Boundary Type*, se selecciona *Inflow* y *Outflow* para cada caso.

- Inlet Setup: una vez asignado el *Boundary type* como *Inflow*, hay que introducir el resto de parámetros de entrada de los gases de escape, los cuales son, presión, velocidad, temperatura, especies que entran al sistema y pasivos que entran al sistema.
  - Presión. Se selecciona la opción *Zero normal gradient*. Esta opción está basada en el modelo de Neumann, que consiste en ejecutar la simulación sin que se produzca una transferencia de presión entre la superficie y el fluido.

- Velocidad. Se selecciona la opción *Mass Flow*. Para ello hay que introducir un valor de flujo másico (Kg/s) para determinar la velocidad en todas las celdas en la zona de entrada al sistema. El valor del flujo másico es **0.172625 Kg/s**
- Temperatura. Se selecciona la opción *Specified Value (DI)*. Esta opción está basada en el modelo de Dirichlet y permite introducir el valor de la temperatura (K) en la superficie de entrada al sistema. El valor de la temperatura es **450 K**.
- Especies. Se selecciona la opción *Specified Value (DI)*. Una vez selecciona, hay que añadir todas las especies que van a ser introducidas en el sistema junto a su fracción másica. Para se selecciona la opción *Add item* y se introducen las siguientes especies:

**Tabla 6. Especies Inlet**

Nombre de la especie	Fracción másica
O2	0,23
N2	0,77



**Figura 53. Configuración Inlet**

- Outlet Setup: una vez asignado el *Boundary type* como *outflow*, hay que introducir el resto de parámetros de entrada de los gases de escape, los cuales son, presión,

velocidad, temperatura, especies que entran al sistema y pasivos que entran al sistema.

- **Presión.** Se selecciona la opción *Specified value (DI)*. Esta opción está basada en el modelo de Dirichlet y permite introducir un valor constante de la presión estática (Pa) para los gases de salida del sistema. El valor de la presión estática es 98630.0 Pa.
- **Velocidad.** Se selecciona la opción *Zero normal gradient*. Esta opción está basada en el modelo de Neumann, consiste en que no se produce transferencia de momento entre el fluido y la superficie.

A continuación, hay que introducir los parámetros del flujo de salida de los gases de escape mezclados con la urea. Los parámetros de salida siguen el modelo de Dirichlet (*Specified value*), por lo que hay que asignar un valor constante a cada uno de ellos. Los parámetros de salida son la temperatura y las especies que el sistema expulsa a la atmósfera.

- **Temperatura.** La temperatura de los gases de salida del sistema es **450 K**.
- **Especies.** A diferencia de los gases que habían entrado al sistema, después de haber realizado un proceso catalítico de reducción selectiva y junto con la inyección de urea, se consigue eliminar los gases contaminantes para conseguir expulsar componentes no contaminantes a la atmósfera. Estos componentes son O<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>

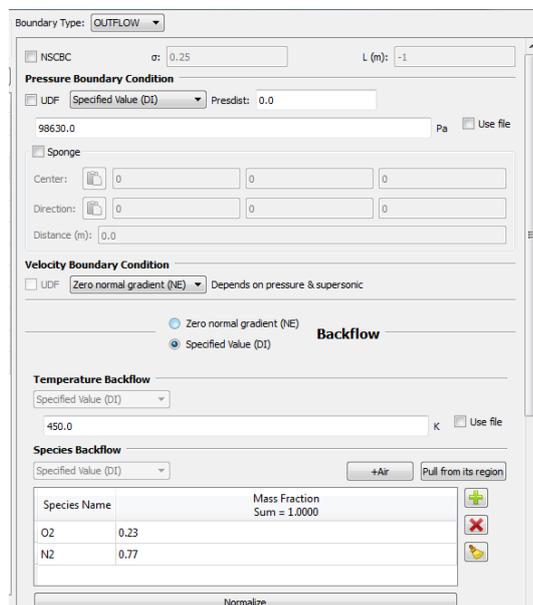


Figura 54. Configuración Outlet

Una vez están configuradas la entrada y la salida del sistema, hay que configurar el resto de partes del, que, en esta simulación, tendrán los mismos parámetros. Estas partes son *Inlet-pipe*, *Mixer-pipe*, *Mixer-exit-pipe*, *Scr-inlet*, *SCR*, *SCR-outlet* y *Outlet-pipe*.

En todas ellas el *Boundary type* es de tipo **wall**, estas partes tienen una configuración de pared en el sistema. En cuanto a la velocidad, ya que las partes son tratadas como las paredes del

sistema, no tiene movimiento y por tanto la velocidad es nula. Se selecciona la opción de movimiento (*Wall motion type*) **Stationary**. En cuanto al movimiento de la superficie, se selecciona automáticamente *Fixed*, ya que anteriormente ha sido elegida la opción *Stationary*, y se selecciona la opción **Law of wall**. Esta opción usa un método de ajuste de curva logarítmica para determinar la velocidad del fluido en el límite de la pared.

En la configuración de la temperatura se selecciona la opción **Heat flux**, esta opción está basada en el modelo de Neumann, y consiste en introducir un valor de gradiente de transferencia de calor entre el fluido y la pared.

Por último, hay que introducir la constante de rugosidad de la pared del sistema, la cual es **0.5**.

Boundary Type: WALL

**Velocity Boundary Condition**

Wall motion type: Stationary

Surface movement: FIXED

UDF Law of wall

**Temperature Boundary Condition**

UDF Heat flux  CHT1D

Flux: 0.0 W/m<sup>2</sup>  Use file

**Law of wall roughness parameters**

Absolute roughness: 0.0 m

Roughness constant: 0.5

**Turbulent Kinetic Energy (tke) Boundary Condition**

Zero normal gradient (NE)

**Turbulent Dissipation (eps) Boundary Condition**

Wall model

Figura 55. Configuración wall

En la simulación se va a utilizar el modelo *Conjugate heat transfer* (CHT), para obtener la transferencia de calor entre el fluido y el mezclador, por lo que hay que crear un interfaz entre estas dos partes del sistema. El interfaz se tiene que crear entre la parte final del mezclador (End-mixer) y el conducto del mezclador (Mixer-pipe).

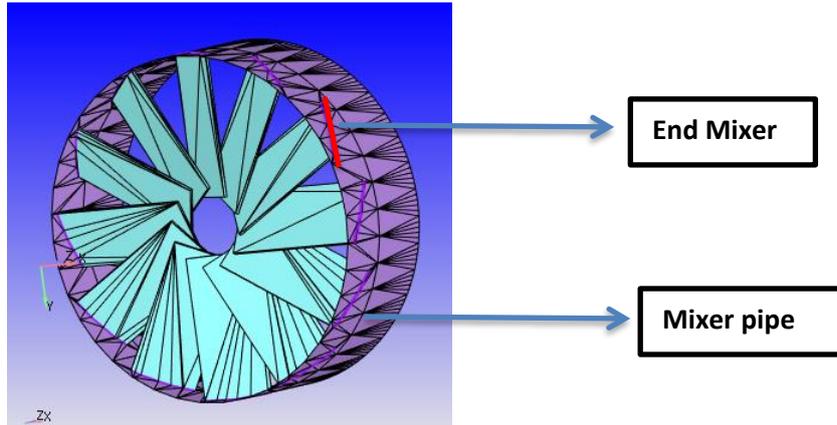


Figura 56. Interfaz entre el final del mezclador y el conducto del mezclador

El interfaz permite especificar un límite de pared que separe dos regiones creando cuadrículas independientes para cada una de las regiones, por lo que se produce una interacción entre los triángulos de la interfaz. Esta interfaz se usa para separar dos fases (líquida y sólida), de manera que es el modelo idóneo para la simulación, ya que permite calcular la transferencia de calor entre el flujo de gases de escape junto con la urea y el mezclador.

En primer lugar, hay que crear el límite del final del mezclador. El *Boundary type* es de tipo **wall**. En cuanto a la velocidad se selecciona la opción de movimiento (*Wall motion type*) **Stationary**. En el movimiento de superficie (*Surface movement*), se selecciona la opción **no-slip**, la cual establece que la velocidad en la pared sea cero. La temperatura es introducida mediante la selección de la opción **Specified value (DI)** y es de **300 k**.

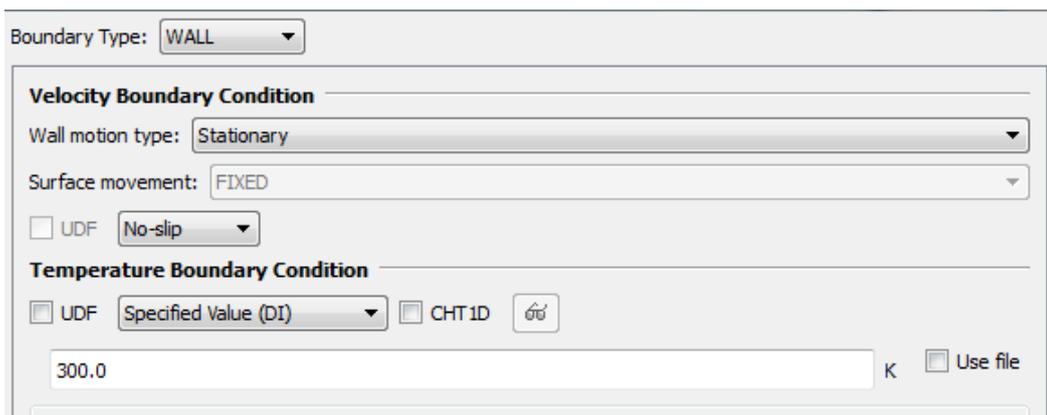


Figura 57. Configuración del final del mezclador

Una vez creada la región al final del mezclador, hay que pasar a crear el interfaz entre las dos regiones.

La configuración del interfaz comienza seleccionando en *Boundary type* la opción **interface**. En cuanto a la velocidad se selecciona la opción de movimiento (*Wall motion type*) **Stationary**, ya que no existe movimiento en la interfaz.

Para realizar la interfaz entre dos regiones hay que configurar ambas, de manera que una región será **Forward Boundary**. Esta es la región hacia donde apuntan los vectores normales de los triángulos. En la simulación será la **región 1 (Mixer pipe)**.

Por otro lado, la otra región será **Reverse Boundary**. Esta es la región desde donde apuntan los vectores normales de los triángulos. En la simulación será la **región 7 (Ends Mixer)**.

- Forward Boundary: región 1.

**Velocity Boundary condition** → Wall treatment → Law of wall  
**Temperature Boundary condition** → Zero normal gradient

- Reverse Boundary: region 7.

**Velocity Boundary condition** → Wall treatment → slip  
**Temperature Boundary condition** → Specified value (DI)

Boundary Type: INTERFACE

Boundary Motion

**Velocity Boundary Condition**

Wall motion type: Stationary

Surface movement: FIXED

Symmetry boundary     Flow through     Disconnect

Contact resistance: 0 K\*m<sup>2</sup>/W

Forward boundary

Region: Region 1

**Velocity Boundary Condition**

Wall treatment: Law of wall

**Temperature Boundary Condition**

Zero normal gradient (NE)  coupled

Reverse boundary

Region: Region 7

**Velocity Boundary Condition**

Wall treatment: Slip

**Temperature Boundary Condition**

Specified Value (DI)  coupled

Figura 58: Configuración del interfaz entre región 1 y región 7

## 4.2.2.4 Initial conditions and events

### Regions and initialization

La configuración de *Regions and initialization* permite la creación de diferentes regiones, para más tarde asignarlas a los límites creados en el apartado anterior. A las regiones creadas hay que introducirle valores de temperatura y presión, valores de turbulencia inicial y el nombre de especies que participan en cada región y su fracción másica.

Para la simulación hay que crear 8 regiones y asignarlas a los siguientes límites:

Tabla 7. Regiones

Región 0	Región 1	Región 2	Región 3	Región 4	Región 5	Región 6	Región 7
Inlet	Mixer pipe	Mixer pipe exit	SCR inlet	SCR	SRC exit pipe	Outlet pipe	Ends mixer
Inlet pipe						Outlet	

Para las regiones desde la 0 hasta la 6 los parámetros son los mismos, ya que forman el sistema por donde circula la mezcla de gases de escape y la urea.

Tabla 8. Parámetros regiones 0-6

Temperature[k]	Pressure[Pa]	species	mass fraction
450	98630.0	CO2	0,171404
		N2	0,693513
		O2	0,056379
		H2O	0,078291
		NO	0,000165
		NO2	0,000252

Para la región 7 es diferente debido a que esta región actúa como un sólido, necesario para realizar el cálculo de la transferencia de calor entre el fluido y el mezclador mediante el modelo *Conjugate heat transfer* (CHT).

Tabla 9. Parámetros región 7

Temperature[k]	Pressure[Pa]	Species	Mass fraction
450	101325	acero inoxidable	1

La configuración *Stream ID/Solid* permite agrupar, según en el estado físico en que se encuentre (sólido, líquido o gaseoso), diferentes regiones. En el caso de la simulación se asignará **Stream ID 0** a las regiones desde la 0-6 y **Stream ID 1** a la región 7 junto a la selección de la opción **Solid**. Esta configuración permite el cálculo de transferencia de calor entre el fluido y la parte sólida.

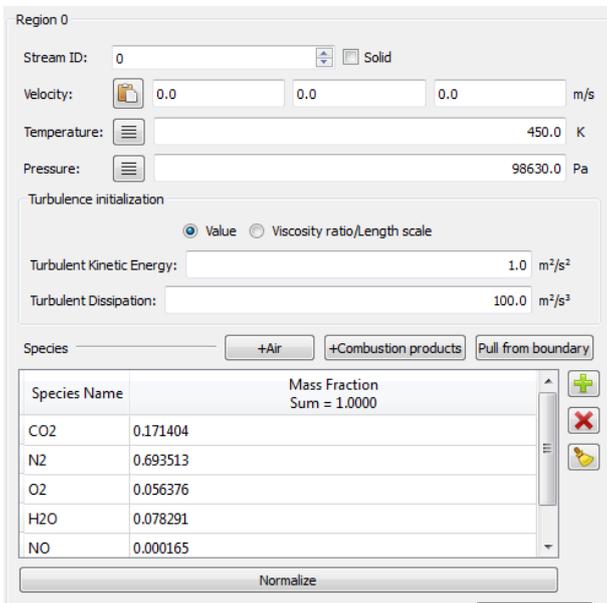


Figura 58. Configuración regiones 0-6

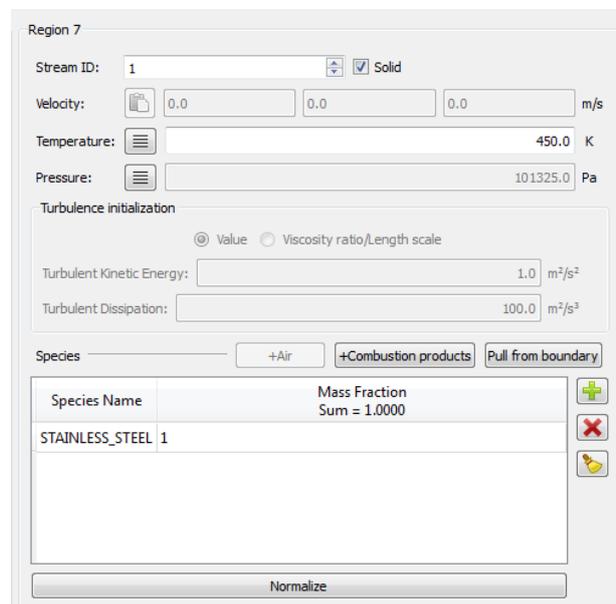


Figura 59. Configuración región 7

## Events

La configuración de *Events* permite activar (Open) o desactivar (Close) los triángulos de dos o más regiones con un intervalo definido. En el menú de *Events* hay que seleccionar la opción **Permanent**, de manera que los triángulos se mantengan constantes durante la simulación.

Hay que crear 6 intervalos, de manera que quede conectadas todas las regiones del sistema, y seleccionar la opción *open* en cada uno de ellos para que los triángulos se mantengan conectados.

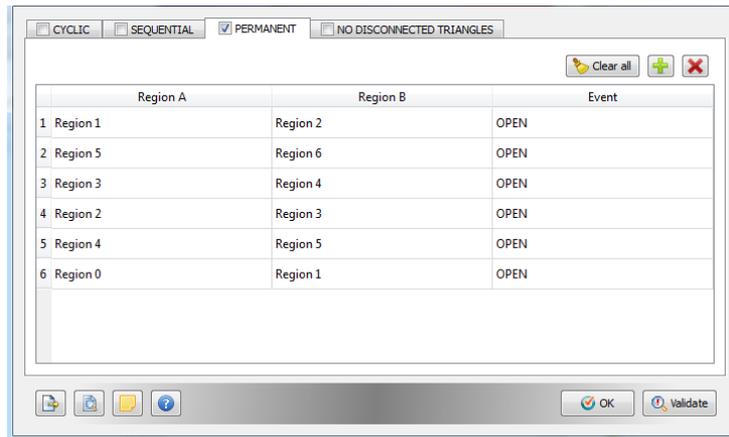


Figura 60. Configuración de Events

## 4.2.2.5 Physical models

### Spray modeling

El modelo físico *Spray modeling* permite la configuración de inyectores, *nozzles*, velocidades de inyección, establecer constantes relacionadas con el rociado y diversos modelos de inyección y de arrastre de gota (*Drop drag model*).

En la simulación se va a introducir un inyector con un *nozzle* de dos agujeros. En la inyección se va a introducir al sistema una mezcla de agua y urea durante un periodo de 10 segundos.

En primer lugar, dentro del menú *General* hay que seleccionar el modelo de urea, ***Detailed decomposition***. Como ha sido explicado anteriormente, este modelo permite estudiar con precisión las deposiciones de urea y derivados que van a aparecer en el sistema.

***Spray modeling***→ ***General***→ ***Urea***→***Detailed decomposition***

En cuanto a la distribución de las parcelas (*Parcel distribution*), seleccionar la opción ***Cluster parcels near cone center***, para que la distribución de las parcelas sean desde el centro del cono. Y en cuanto a la dispersión turbulenta (Turbulent dispersion), selecciona el modelo de ***O'rouke***.

El resto de parámetros no es necesario modificarlos, ya que los que proporciona Converge son válidos para la simulación.

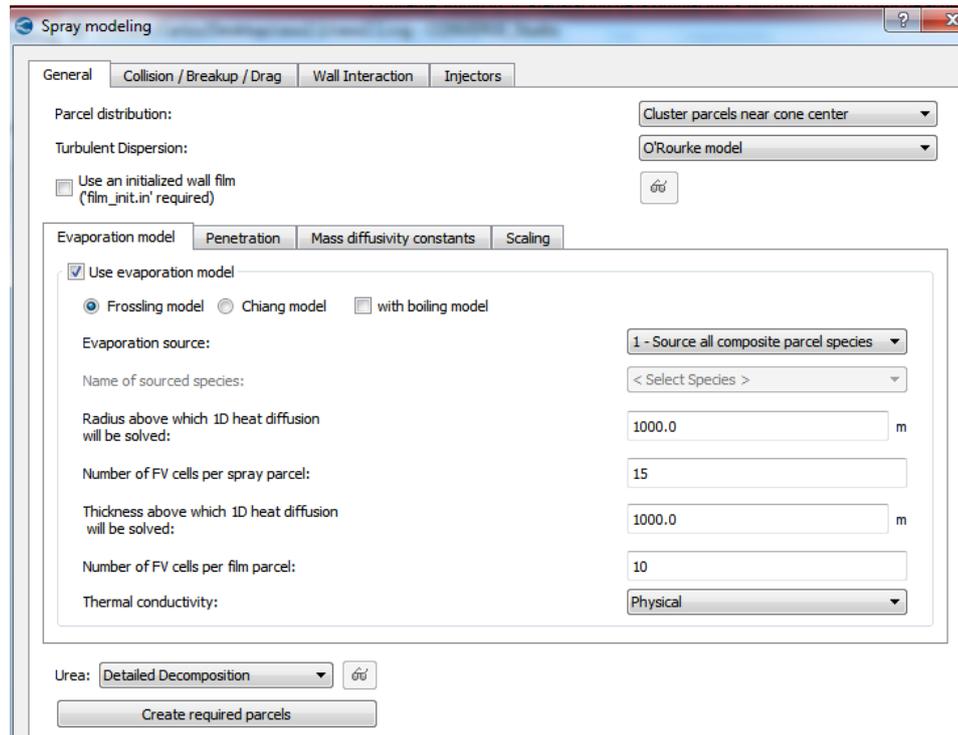


Figura 61. Spray modeling-General

El menu *Collision/breakup/drag* permite seleccionar diferentes modelos de colisión, de rotura y de arrastre.

En el modelo de colisión (Collision model) hay que seleccionar el modelo **No Collision**. En el modelo de arrastre de gotas (Drop drag model), se va a seleccionar **Dynamic drop drag model**. Este modelo determina el coeficiente de arrastre de gota de manera dinámica, teniendo en cuenta las variaciones en la forma de la gota durante el arrastre. Los valores de la distorsión de la gota son calculados mediante el modelo *Taylor Analogy Breakup (TAB)*.

El modelo *Taylor Analogy Breakup (TAB)* es un método clásico de calcular distorsión y rotura de gotas. Este método está basado en la analogía de Taylor entre una gota oscilante y distorsionante y un sistema de masa de resorte.

Las constantes de variación del modelo TAB, Converge las introduce por defecto.

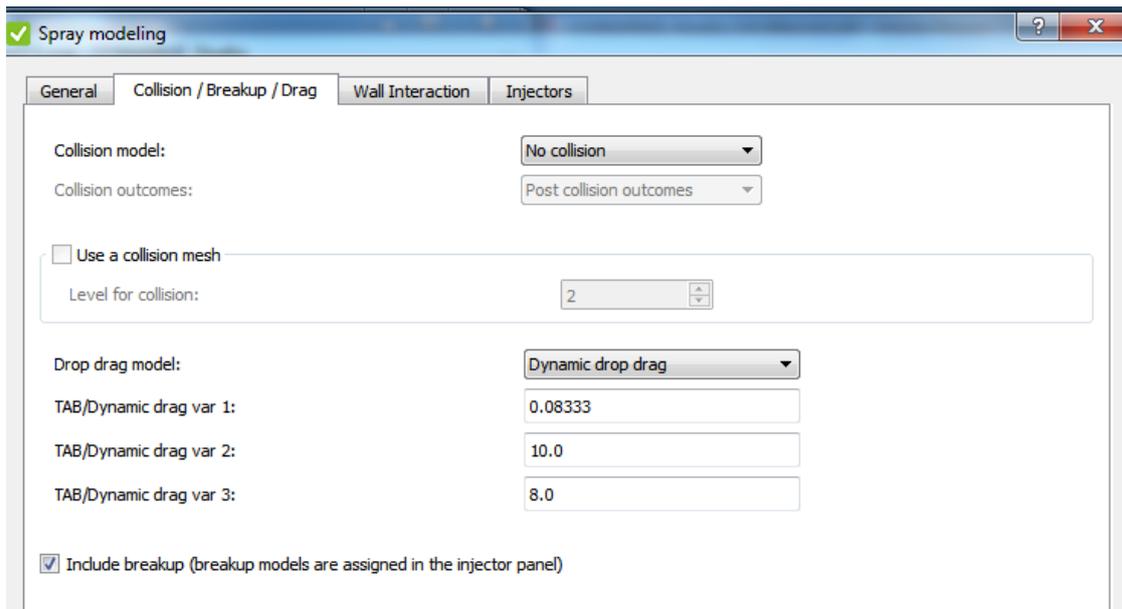


Figura 62. Spray modeling- Collision/breakup/drag

El menú *Wall interaction* permite seleccionar diferentes modelos de interacción entre el fluido y las paredes del sistema.

El modelo de interacción utilizado en la simulación es **Wall film**. Este modelo ofrece una película de pared basada en partículas para modelar la interacción entre las gotas del fluido con las paredes del sistema. El modelo utiliza un enfoque híbrido para el modelado de película, en algunos cálculos utiliza partículas individuales, mientras que en otros calcula utiliza una película de partículas.

Cuando se activa el modelo **Wall film**, automáticamente se abre un menú de *Splash model*, donde da 3 posibles modelos: O'Rourke, Kuhnke y Bai-Gosman. En la simulación el modelo utilizado es el modelo **Film splash model of Kuhnke**.

El modelo *Kuhnke splash* considera la temperatura y la humedad (grosor de la película de la pared) de la pared para determinar la extensión de la salpicadura de la gota/película creada. *Kuhnke film splash model* funciona comparando el número K del conjunto del fluido. El número K viene definido por las siguientes ecuaciones:

$$K = \frac{(\rho * d)^{\frac{3}{4}} * U^{\frac{5}{4}}}{\sigma^{\frac{1}{2}} * \mu^{\frac{1}{4}}}$$

O por la ecuación,

$$K = We^{\frac{5}{8}} * La^{\frac{1}{8}}$$

Donde  $We$  es el número de *Webber* y  $La$  es el número de *Laplace*, definido como:

$$La = \frac{\sigma * \rho * L}{\mu^2}$$

La figura 63 ofrece un esquema conceptual de las condiciones bajo las cuales las parcelas se someterán a cada tipo de interacción de gota/película dependiendo de los valores de  $K$  y de  $T^*$ .

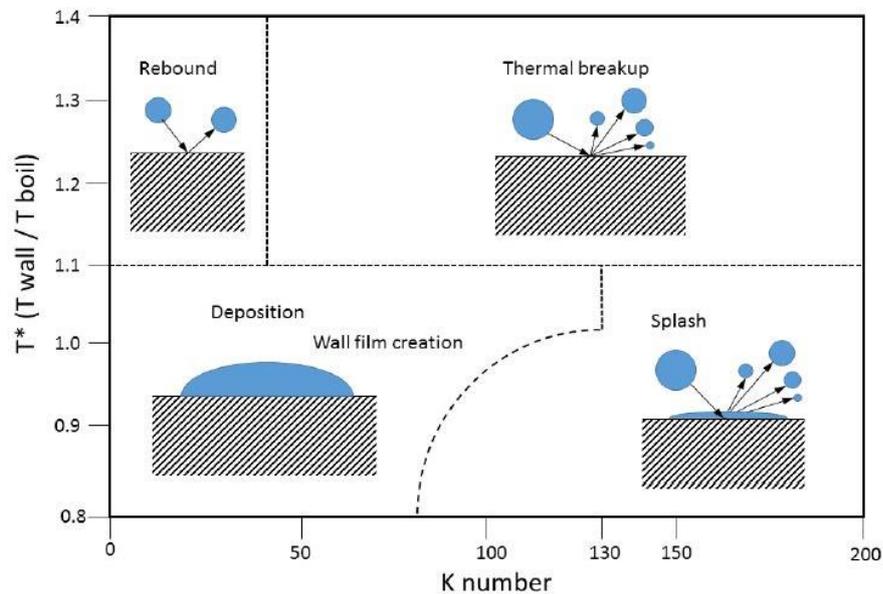


Figura 63. Modelo de Kuhnke

- Cuando el valor de  $K$  de la parcela de fluido y la temperatura son bajos, se creará una película de fluido (Deposición).
- Cuando el valor de  $K$  es bajo, pero el valor de la temperatura es alto, la parcela del fluido rebotará.
- Cuando el valor de  $K$  es alto pero el valor de la temperatura es bajo, las paredes provocarán una salpicadura de la parcela.
- Cuando el valor de  $k$  es alto y el de la temperatura es alto, la parcela sufrirá una rotura térmica.

Cuando el número  $K$  de las parcelas del fluido es más grande que la  $K$  crítica de las condiciones específicas de las paredes del sistema (basado en la  $T^*$ ) la gota experimentará un proceso de salpicadura, rotura térmica o una combinación de ambas.

En la simulación, la temperatura crítica de la pared es  $T^* = 1.22$ .

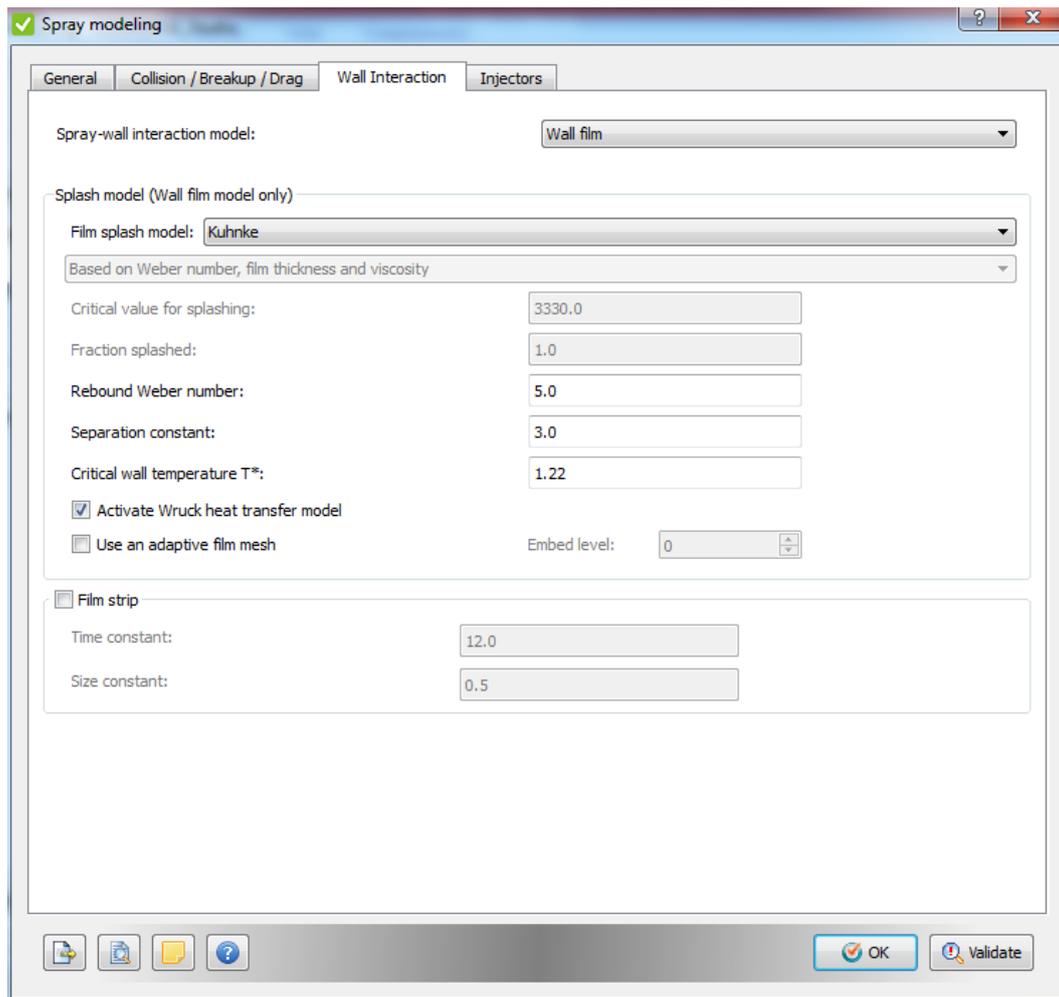


Figura 64. Wall interaction

Por último, hay que crear el inyector que segregue la mezcla de agua y urea al sistema. Para ello, en el último menú llamado *Injectors*, seleccionar **Add new injector** y comenzar a configurarlo:

- **Injected Species/Rate Species.** Introducir las especies que van a ser inyectadas al sistema junto con su fracción másica (Tabla 10).

Tabla 9. Especies inyectadas

Especie	Fracción másica
H2O	0,675
(NH2)2CO	0,325

- **Models.** Introducir el modelo que va a seguir el inyector. El modelo utilizado en el inyector de la simulación es **Taylor Analogy Breakup (TAB)**, el cual ha sido explicado anteriormente. Este modelo va a seguir una distribución **Rosin-Rammler con TAB**, la cual consiste en obtener los tamaños de gota inyectada.

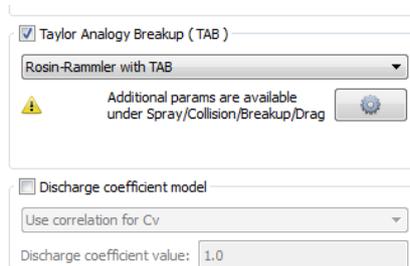


Figura 65. Modelo del inyector

- **Time/temp/TKE/EPS/Mass/Size.** Introducir los parámetros característicos del inyector, tales como tiempo de inyección, temperatura, distribución de inyección, masa inyectada. La simulación comienza a inyectar desde el momento **inicial = 0**, y durante **10 segundos** inyecta la mezcla de agua y urea. La masa inyectada es **0.00081498 kg** y por último sigue una **distribución Rosin-Rammler** con un valor del parámetro característica de la distribución de **3.27**. En cuanto a la temperatura, es un valor constante de **300 k**.

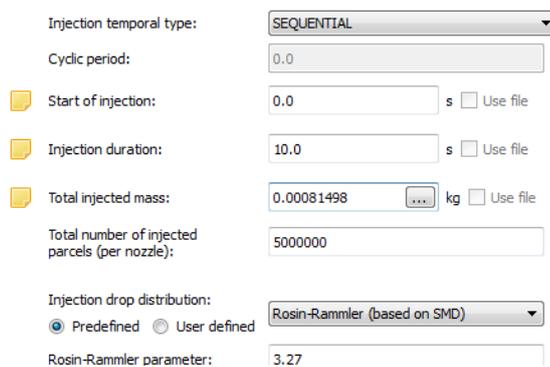


Figura 66. Parámetros del inyector

- **Nozzles.** Introducir y configurar el nozzle del inyector. Añadir un nozzle seleccionar sobre **Add new nozzle**. La simulación tiene un nozzle con dos agujeros con los siguientes parámetros:

Nozzle diameter:	6.25e-05	m
Nozzle length:	2e-05	m
Sauter mean diameter (SMD):	3.5e-05	m
Initial drop distortion for TAB breakup:	0.0	
Circular injection radius:	0.002	m
Spray cone angle:	70.0	deg <input type="checkbox"/> Use file
Spray thickness for hollow cone sprays:	20.0	deg

Figura 67. Parámetros de nozzle

## Combustion modeling

El modelo físico *Combustion modeling* permite configurar diversos modelos de combustión y modelos químicos. Para la simulación se va a utilizar la configuración de modelos químicos, en particular el modelo **SAGE Detailed Chemical Kinetics Solver**.

El modelo SAGE es un modelo de Combustión que resuelve la cinética química de manera detallada. Este modelado de la cinética química se realiza a través de un conjunto de archivos de entrada con un formato CHEMKIN.

El modelo SAGE tiene 2 opciones de resolver los sistemas de ecuaciones ordinarios: el solucionador *CVODE (Suite of nonlinear and differential/algebraic equation Solvers)* y el solucionador *SuperLU (Sparse linear equation Solver)*.

Un mecanismo de reacción química es un conjunto de reacciones elementales que describen una reacción química. SAGE calcula las velocidades para cada reacción elemental mientras que el solucionador CFD resuelve las ecuaciones de transporte. SAGE puede modelar ya sea a volumen constante o a presión constante, en este caso se modelará a **volumen constante**.

Para reducir el gasto computacional SAGE solo resuelve las celdas que cumplen unos criterios de cambio de temperatura. En la simulación se resolverá cada vez que varíe la temperatura **2 K**.

En la simulación, la configuración del modelo SAGE ayudará a realizar al cálculo de la transferencia de calor entre el fluido y el mezclador (CHT).

Los parámetros introducidos en la simulación son los siguientes:

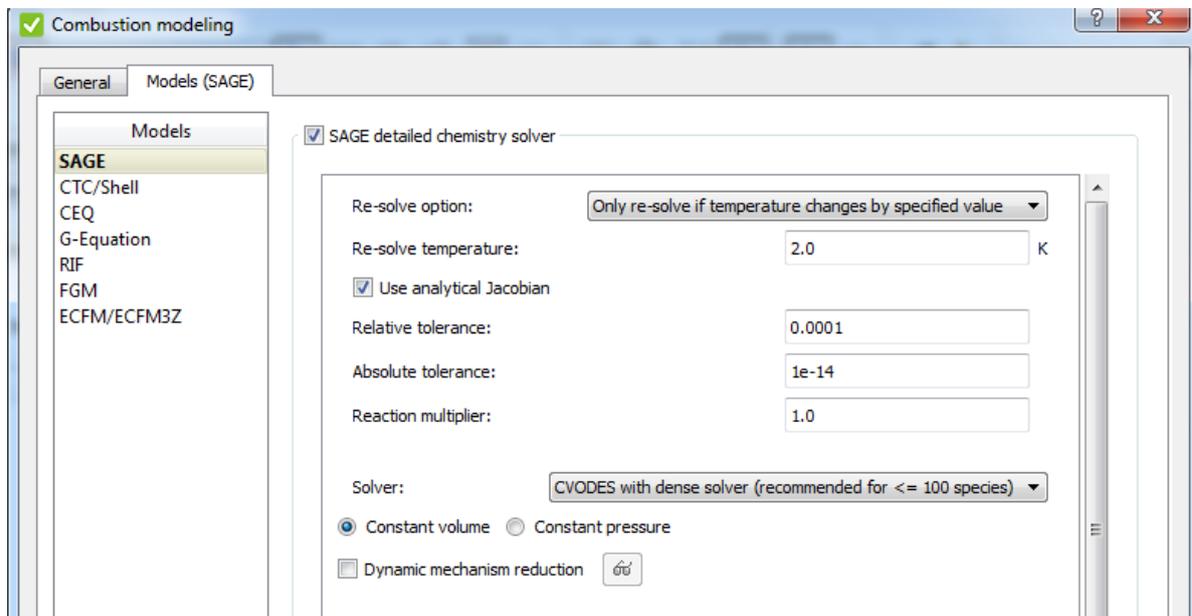


Figura 68. Combustion modeling

## Turbulence modeling

La configuración de Turbulence modeling permite introducir el modelo de turbulencia que va a haber en el sistema. El modelo que se va a introducir al sistema es **Reynolds average Navier-Stokes (RANS)**. Los modelos RANS son modelos de dos ecuaciones que descomponen las variables de flujo en un valor medio y en un valor fluctuante.

El modelo utilizado es el RGN  $k-\epsilon$ , el cual es modelo más utilizado, ya que tiene en cuenta los movimientos de escala más pequeños.

En cuanto al heat model, como ha sido mencionado anteriormente, el modelo seleccionado es **O'Rourke and Amsden**, con una valor de la **constante de von karman's de 0.42**.

Por último, hay que introducir la constantes de RANS, que son las que se aprecia en la figura

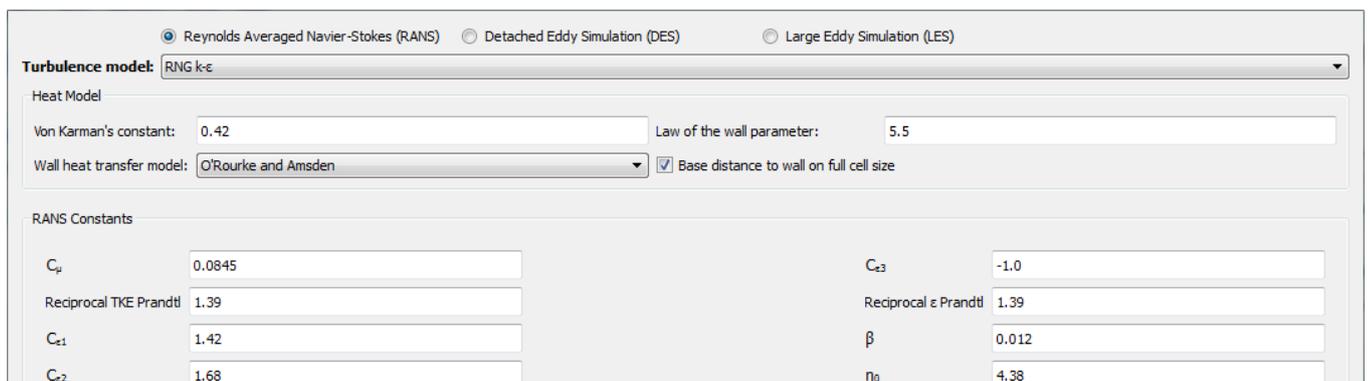


Figura 69. Turbulence modeling

69.

## Source/Sink modeling

La configuración de Source/ sink modeling permite la introducción de una fuente de momento, energía, disipación turbulenta (EPS), especies, pasivos y medios porosos.

En la simulación se va a introducir un medio poroso en la **región 4**, el catalizador de reducción catalítica.

Los valores de las constantes son:

- $\beta = 1500 \text{ km}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$
- $\alpha = 15 \text{ km}/\text{m}^4$

Por último la fuente de medio poroso va a ser de modo **permanente**.

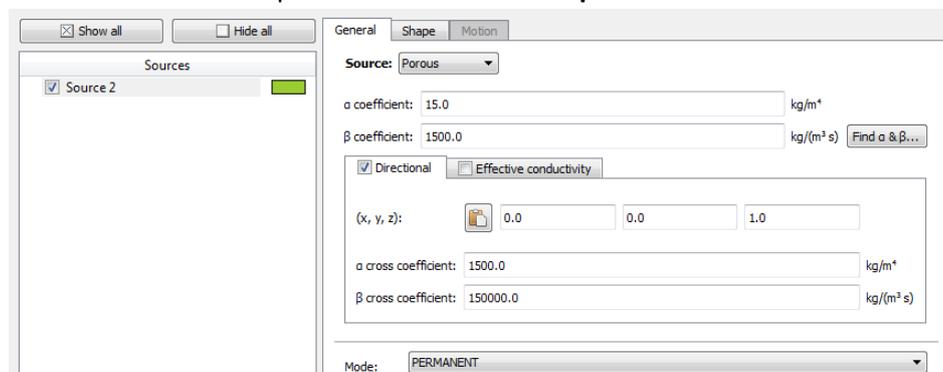


Figura 70. Source/Sink modeling

## Super-cycle modeling

La configuración del modelo físico Super-cycle, es un complemento para el cálculo del *Conjugate heat transfer (CHT)* y hacer más eficiente el gasto computacional.

En un sistema, la escala de tiempo necesaria para resolver la transferencia de calor del sólido suele ser mucho mayor que la de la transferencia de calor del fluido. Se necesitan muchos time-steps para que la temperatura del sólido alcance el estado estable.

Super-cycle es un método de aceleración que resuelve los problemas de CHT dependientes del tiempo a un estado estacionario en un sólido con menos ciclos. Este modelo itera los solucionadores transitorios y de estado estacionario de manera simultánea.

Los parámetros introducidos para configurar el *Super-Cycle* son los siguientes:

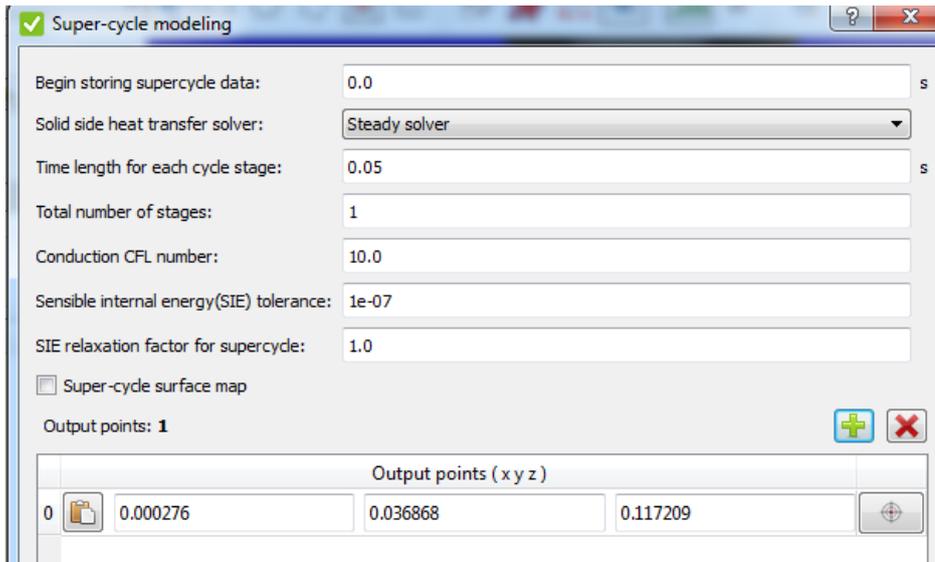


Figura 71. Super-Cycle modeling

#### 4.2.2.6 Grid control

##### Base grid

La configuración de *Base grid* permite controlar el tamaño de las celdas antes y durante la simulación en las direcciones x, y, z.

El tamaño de las celdas varía con respecto a diferentes niveles de malla. El valor de base grid corresponde con el nivel 0. Conforme se va subiendo de nivel, el tamaño se va reduciendo a la mitad (No es aconsejable superar el nivel 4 debido al gasto computacional).

En la simulación, en un principio el valor que se iba a introducir de base grid era de 8 mm, pero una vez realizada la simulación se observó que el gasto computacional era inviable ya que el tamaño mínimo de celda en el nivel 4 era de 0.5 mm. Por ello, y para ahorrar gasto computacional se decidió aumentar el tamaño mínimo de celda del nivel 4 a **0.7 mm**, por lo que el valor de base grid final es **11.2 mm**.

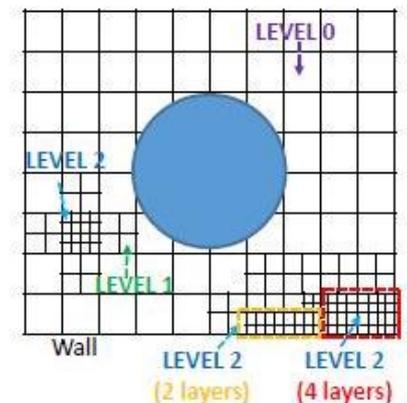


Figura 72. Niveles de malla

## Adaptive mesh refinement (AMR)

La configuración de *Adaptive mesh refinement* (AMR) permite refinar automáticamente las celdas según las condiciones fluctuantes y de movimiento, como la temperatura o la velocidad. En la simulación, esta opción es muy útil para obtener un mallado altamente refinado para simular con precisión el flujo de urea y gases de escape desde que pasa por el mezclador hasta que llega a la entrada del catalizador.

En la simulación las regiones que van a ser implementadas con el modelo AMR son las **regiones 1,2 y 3**, que pertenecen al dominio comprendido entre el mezclador y la entrada del catalizador.

La configuración del AMR va a depender de la **velocidad**. El **punto de inicio** del refinamiento es **0.21** segundos hasta el **final de la inyección 10 segundos**. El máximo nivel de mallado es el **nivel 3** y la velocidad de remallado es de **0.5 m/s**.

Figura 73. AMR

## Fixed embedding

La configuración de *Fixed embedding* permite refinar la malla en zonas específicas del sistema donde una resolución más fina es vital para obtener una solución precisa.

En la simulación, se ha introducido un cilindro desde la salida del *nozzle* hasta la entrada del catalizador para resolver el problema del comportamiento del flujo. Por otro lado, se ha introducido un *embed* en el interfaz entre el mezclador y los extremos del mezclador donde el nivel de mallado es 2. También se ha introducido un *embed* en los extremos del mezclador de nivel 4, ya que es un punto conflictivo debido al paso del flujo a través del mezclador. Se ha introducido un *embed* de nivel 1 en el inyector de manera que controle el mallado de la inyección. En el resto de zonas del sistema se ha introducido un *embed* de nivel 1.

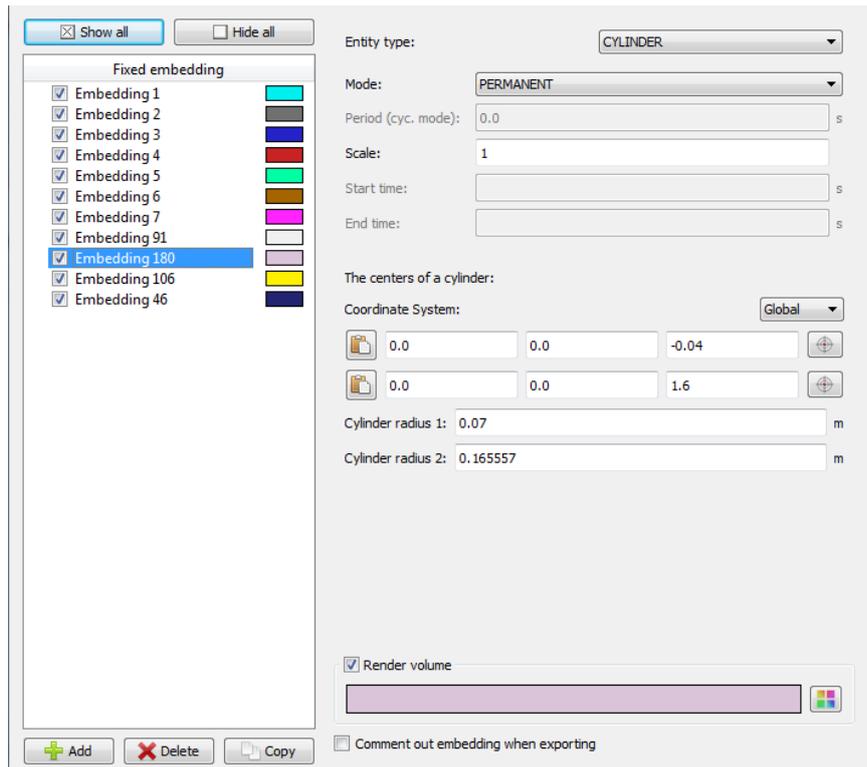


Figura 74. Fixed embedding

## 5.2.7 Resumen inyección de urea

En este apartado se va a mostrar un esquema resumen (Figura 75) de las condiciones de entrada y salida del sistema y de los modelos físico-químicos que se ha utilizado en la simulación.

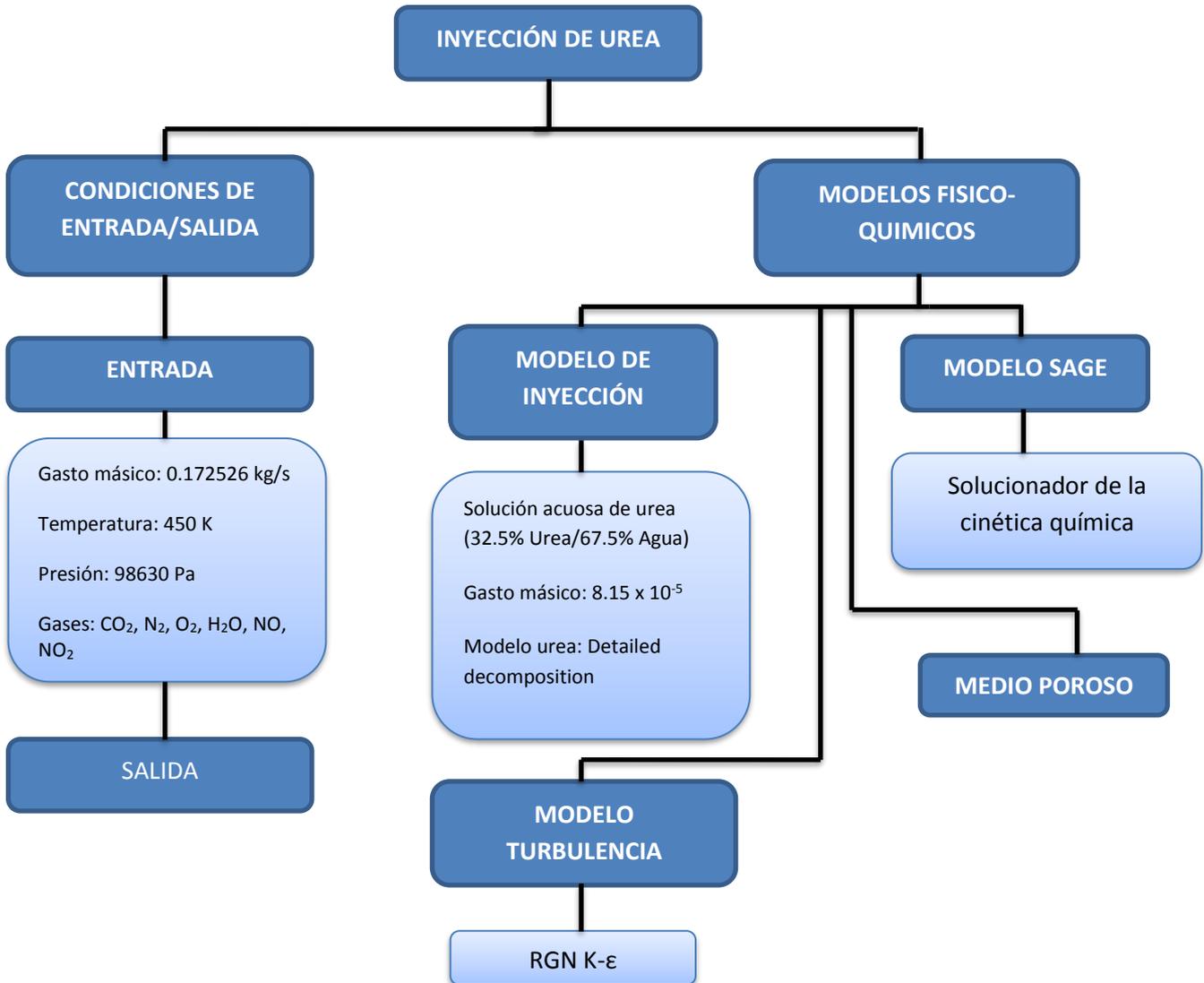


Figura 75. Esquema resumen inyección urea.

## 5.3 Inyección de agua

El caso 2 se trata de una simulación de inyección de agua al sistema de reducción catalítica selectiva. La razón de realizar esta simulación, es realizar una comparación con el caso 1 de los parámetros y resultados que se puede obtener con cada uno de los casos. En la actualidad, en el diseño de sistemas de catalización de inyección de urea, la metodología a seguir, es la de realizar una inyección de agua, en lugar de la mezcla de agua y urea.

Para ello la metodología a seguir es, a partir del caso 1, modificarlo eliminando toda la configuración de modelos químicos y eliminando la urea inyectada de manera que solo inyecte agua al sistema.

Por otro lado, se va a tomar como gases de escape que entran al sistema aire caliente, de manera que facilite el cálculo. La geometría no hay que modificarla, ya que se trata del mismo sistema, pero inyectando otro fluido.

### 5.3.1. Materials

#### Gas simulation

En el análisis de, inyección de agua al sistema, se toma como gases de escape que entran al sistema aire caliente, por lo tanto, para ahorrar gasto computacional, del archivo *Therm.dat* hay que eliminar todos los gases exceptuando **O<sub>2</sub>**, **N<sub>2</sub>** y **H<sub>2</sub>O**.

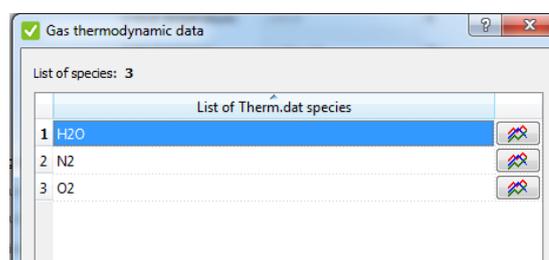


Figura 76. Therm.dat (casoAgua)

## Parcel simulation

En el segundo análisis, la inyección va a ser únicamente de agua, por lo que hay que eliminar la urea ((NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CO). Para ello, seleccionar el líquido (NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CO y pulsar sobre la opción **delete a liquid**. De esta manera el único líquido restante es el agua (H<sub>2</sub>O).

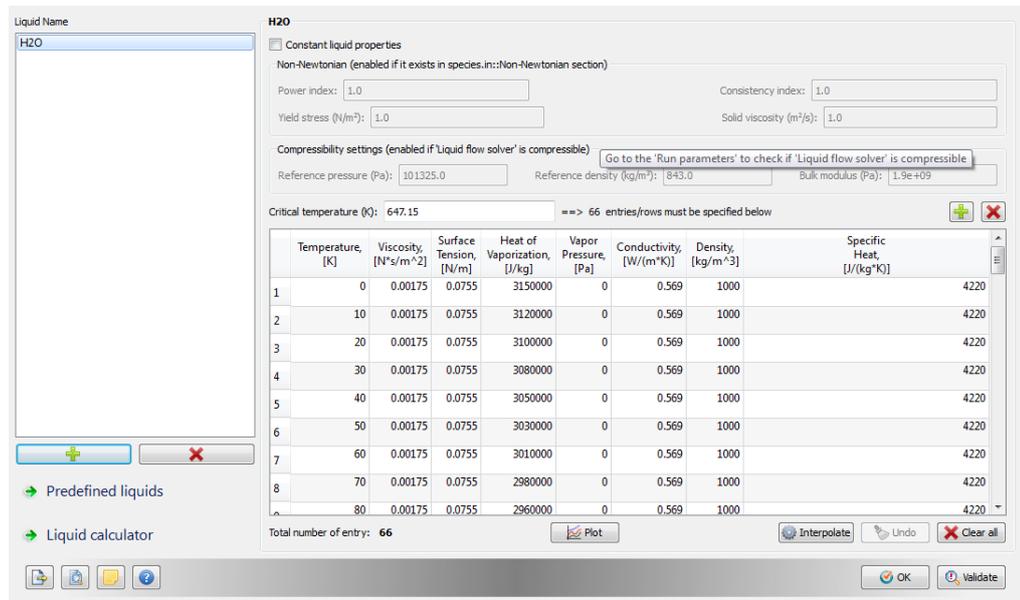


Figura 77. Parcel simulation (caso Agua)

## Reaction mechanism

De igual manera que en la configuración de *gas simulation*, y por el hecho de ahorrar gasto computacional, hay que eliminar todas las especies y reacciones que no se van a usar en la simulación. Por lo tanto, los únicos elementos disponibles son **H, C, y N** y las únicas especies disponibles son **O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O**.

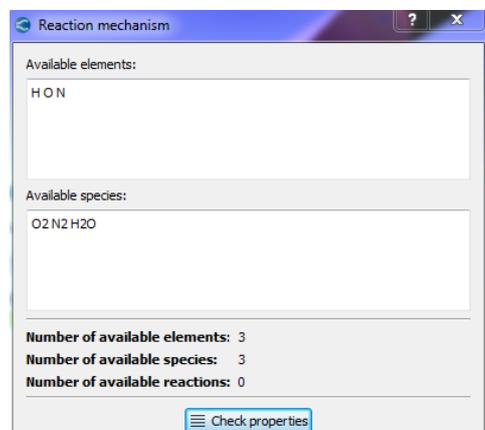


Figura 78. Reaction mechanism (Caso Agua)

## Species

En la configuración de *Species*, hay que eliminar tanto la especie de urea ( $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$ ) del menu *parcels*, como la especie **Chem\_stiff**, ya que hay que eliminar el modelo químico SAGE, en el menu *Non-transport passive*.

### 4.3.2 Boundary conditions

#### Boundary

En cuanto a la configuración de *Boundary*, únicamente hay que modificar las especies que entran al sistema (Inlet), las cuales pasan a ser  $\text{O}_2$  (23%) y  $\text{N}_2$  (77%), es decir aire.

La final de introducir, como gases de escape que entran al sistema, aire, es por un ahorro de gasto computacional y por simplificar el cálculo del problema.

### 4.3.3 Initial conditions and events

#### Regions and initialization

En la configuración de *Regions and initialization*, hay que modificar las especies que se encuentran en cada de región, ya que se ha supuesto que los gases de entrada al sistema son  $\text{O}_2$  (23%) y  $\text{N}_2$  (77%), es decir aire. Por ello en todas las regiones excepto la región 7, que es la parte sólida (acero inoxidable) la especies que hay que introducir son  $\text{O}_2$  (23%) y  $\text{N}_2$  (77%).

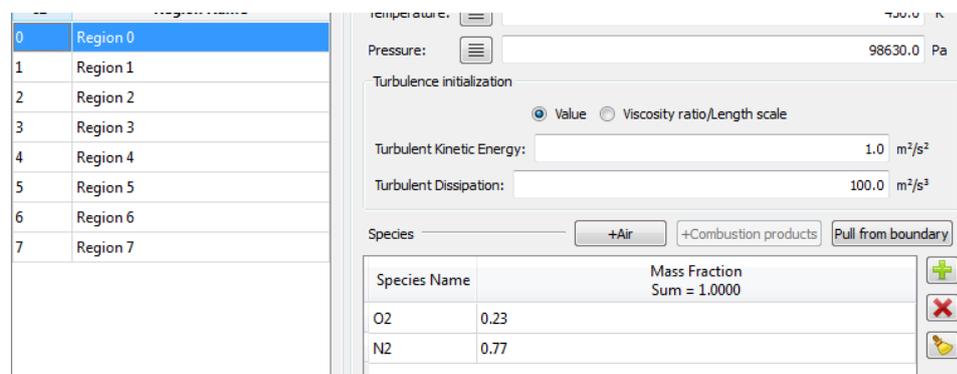


Figura 79. Regions and initialization (CasoAgua)

### 4.3.4 Physical models

#### Spray modeling

En la simulación inyección de agua, se va a pasar de inyectar una mezcla de 67.5 % de agua y 32.5 % de Urea, a inyectar solamente agua. Por ello en el menú *Injector*, hay que modificar el inyector de manera que el único fluido que se inyecte al sistema sea agua.

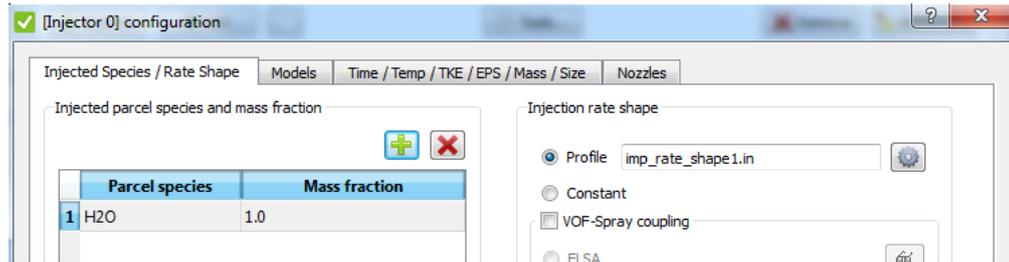


Figura 80. Configuración del inyector (CasoAgua)

## **Capítulo 5**

# **Análisis de resultados**

### **5.1 Introducción**

Este capítulo tiene como objetivo, una vez ya se ha explicado la metodología utilizada y la preparación del sistema SCR, analizar y representar los resultados que han sido obtenidos para las dos simulaciones realizadas en el proyecto (inyección de agua e Inyección de urea).

En primer lugar, se ha analizado el caso de inyección de gua, que es el método utilizado en la industria para el diseño de sistemas SCR, y en segundo lugar se ha analizado el caso de inyección de urea, de manera que se pueda observar de manera clara los parámetros de diseño que puede aportar esta metodología a la metodología aplicada actualmente en la industria.

El objetivo de estos dos estudios es la de mejorar la metodología empleada en el diseño de sistemas SCR. Para ellos una vez se hayan obtenido los resultados de ambos casos se realizará una comparación tanto de parámetros de diseño como de gasto computacional para comprobar si el uso de esta metodología de trabajo es eficiente o no.

Los resultados obtenidos se van a extraer del software de pos proceso EnSight 10.2 y de los datos obtenidos del software Converge v2.4.

## 5.2 Análisis de inyección agua

En primer lugar, se va a realizar el análisis de inyección de agua, el cual consiste en la inyección de agua a un sistema de reducción catalítica selectiva, con el fin de obtener los parámetros característicos el sistema. El sistema de análisis es el mostrado en la Figura 80:

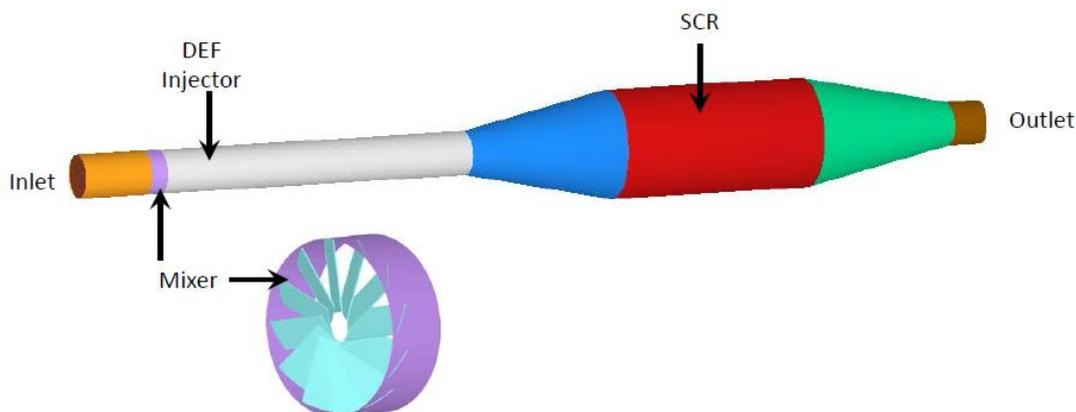


Figura 81. Sistema de reducción catalítica selectiva

El sistema está formado un inyector, el cual en este caso inyectará agua. A la salida del inyector está colocado el mezclador, cuya finalidad es la conseguir una mezcla más homogénea. A continuación, la mezcla de agua inyectada y aire caliente que expulsa el escape, entran al reactor de descomposición, donde posteriormente se realizará un análisis de evaporación del agua inyectada. Este reactor de descomposición desemboca en la entrada del catalizador SCR y finalmente los gases resultantes son expulsados a la atmosfera.

En primer lugar, debido a que el coste computacional de la simulación de este caso es muy grande, se ha realizado una estimación de la velocidad y del tiempo medio que tarda una partícula en atravesar todo el dominio del sistema. Este cálculo se ha realizado aplicando la ecuación de continuidad.

Se ha obtenido que la velocidad media que tarda una partícula en cruzar el dominio del sistema es de 17.93 m/s y por consiguiente el tiempo que transcurre mientras que la partícula está en el en el sistema es de 0.066 segundos.

Esta estimación ha permitido reducir el tiempo de simulación, ya que en el caso inicial era inviable realizar un tiempo de simulación de 10 segundos ya que el tiempo de cálculo era muy grande. De manera que se ha reducido a 0.26 segundos. Este tiempo de cálculo ha sido suficiente para resolver el problema transitorio como se va a mostrar en las gráficas del sistema a continuación.

## 5.2.1 Parámetros de H2O en el sistema

En este apartado se han analizado los principales parámetros de diseño de un sistema SCR. En la primera simulación el fluido inyectado es agua, por lo que, dichos parámetros están relacionados con la evolución de este fluido a lo largo del tiempo en el sistema. Los parámetros analizados han sido la cantidad de agua en el sistema y las deposiciones de agua alojada en las paredes del sistema, caracterización de las gotas en la inyección, mecanismo de vaporización, concentración másica del agua a lo largo del sistema y el campo de velocidades del flujo.

### 5.2.1.1 Cantidad de H2O en el sistema

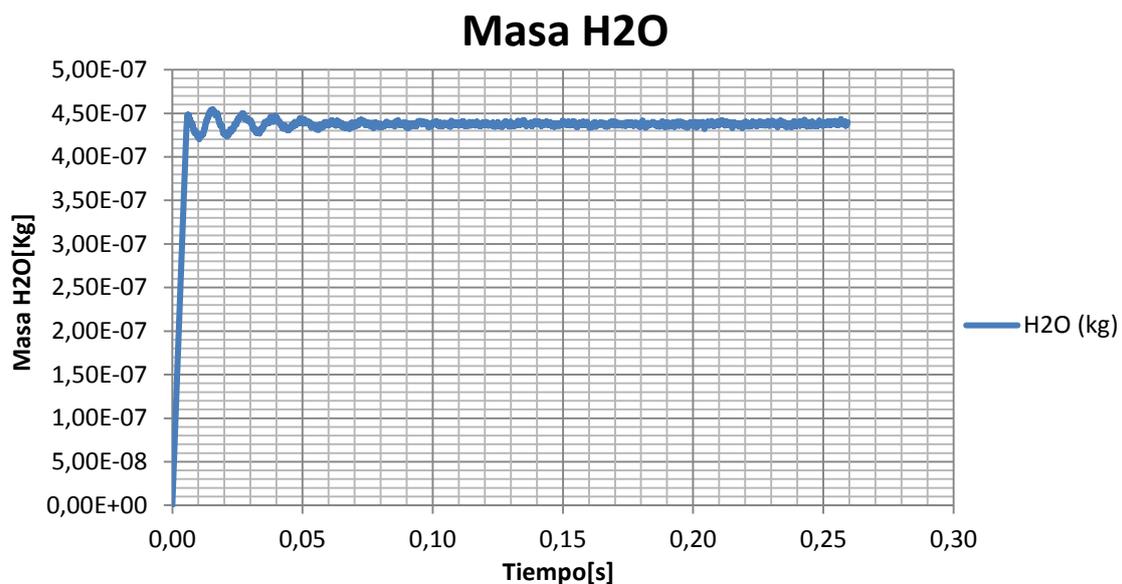


Figura 82. Cantidad de agua en el sistema

En la Figura 81 se observa la cantidad de agua que hay en el sistema durante los 0.26 segundos que dura la simulación. Inicialmente se produce la inyección de agua con un valor de  $4.5 \times 10^{-7}$  Kg. La cantidad de agua sufre pequeñas variaciones de masa hasta que la simulación llega a 0.1 segundos, donde, debido a que el agua comienza a evaporar, el valor de la masa converge a una solución estacionaria de  $4.4 \times 10^{-7}$  Kg.

### 5.2.1.2 Parámetros del chorro en la inyección

En este apartado se va a representar los parámetros fundamentales del chorro inyectado al sistema. Estos parámetros que se van a analizar son el diámetro medio de Sauter, el número de gotas y el cambio de tamaño de gotas a lo largo de la simulación.

En primer lugar, El diámetro medio de Sauter [1] es un parámetro que muestra la distribución del diámetro de gota. Los tamaños de las gotas dependen de los diferentes procesos físico-químicos que se produzcan en el proceso de la inyección del fluido. Este parámetro permite interpretar el diámetro de gotas de un chorro monodisperso como un chorro polidisperso con una relación de volumen/superficie similar. El SMD está relacionado con la ley de frenado de las gotas de fluido y con la tasa de evaporación de las mismas.

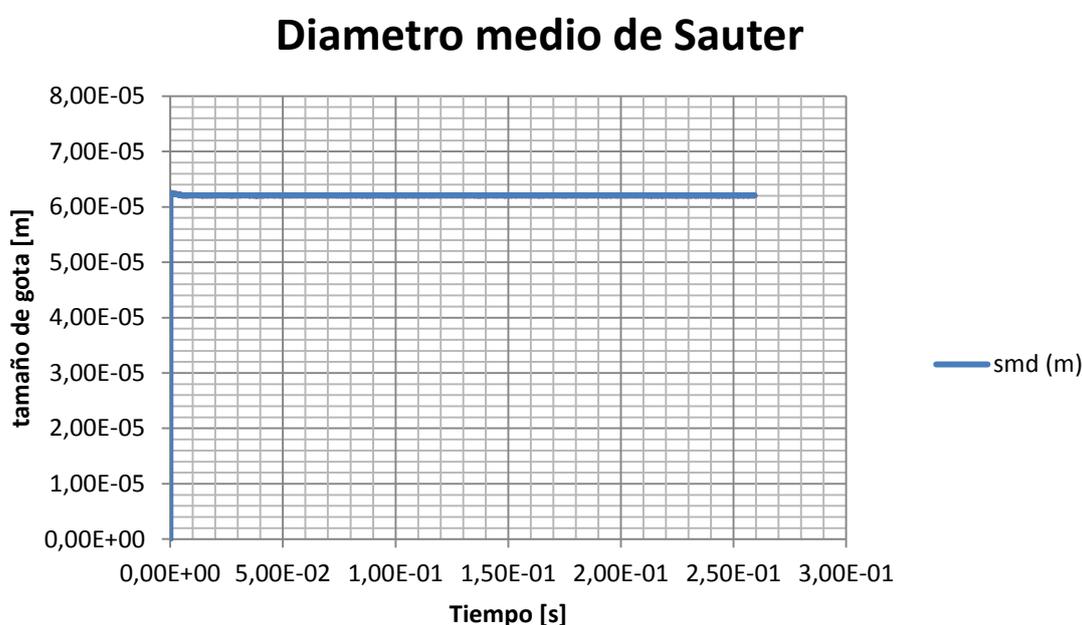


Figura 83. Diámetro medio de Sauter

En la figura 82, se muestra el diámetro medio de Sauter (SMD). El valor se mantiene constante durante los 25 segundos de simulación y es de  $6.3 \times 10^{-5}$ . El valor es constante debido a que en la simulación de inyección de agua no existe ningún mecanismo químico por lo que el proceso de evaporación de las gotas es as sencillo.

En la Figura 83 se observa la cantidad de gotas que se ha pulverizado en la inyección. De igual manera que en la Figura 81, se aprecia que hasta que la simulación no llega a 0.1 segundos la cantidad de gotas varía entre los valores de 2650 y 2850. Una vez la simulación llega a 0.1 segundo, y comienza a evaporarse el agua el valor se mantiene estabilizado en torno a un valor de 2750 gotas.

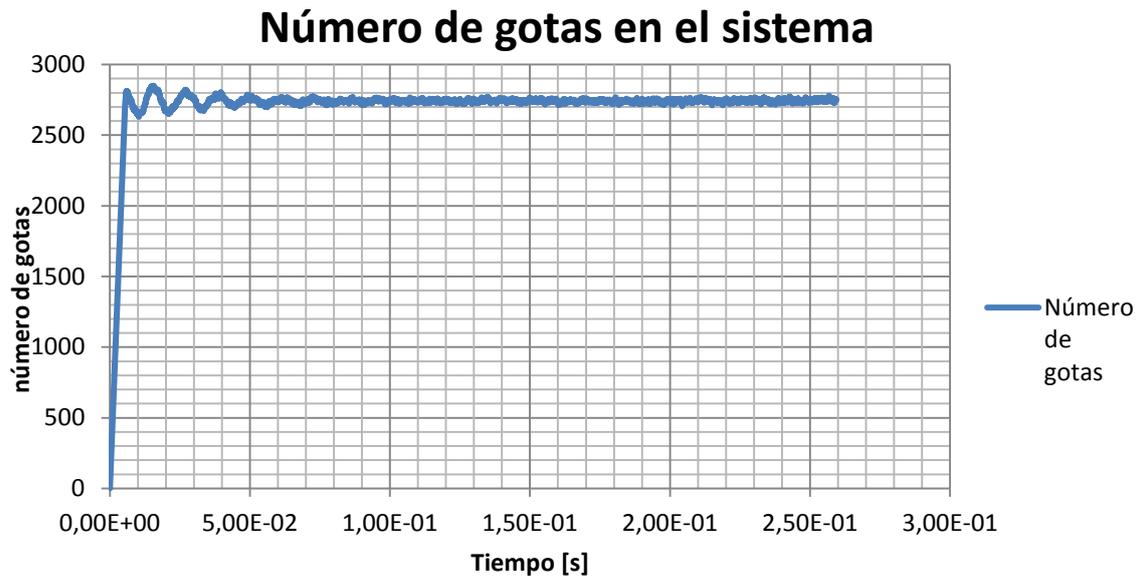


Figura 84. Número de gotas en el sistema

### 5.2.1.3 Vaporación

Uno de los parámetros más importantes en cuanto al diseño de sistemas de SCR es el fenómeno de vaporización. La vaporización es el proceso por el cual el agua pasa de estado líquido a estado gaseoso. Está compuesto por dos mecanismos, la evaporación y la ebullición.

La ebullición consiste en el cambio de estado producido por el aumento de la temperatura en el interior de la gota de agua. Este cambio se produce cuando la temperatura de la gota alcanza el punto de ebullición.

$$T_B = \frac{R * \ln(P_0)}{\Delta H_{vap}} + \frac{1}{T_0}$$

Dónde:

$T_B$ : Punto de ebullición normal [kelvin]

$R$ : Constante de los gases [ $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$ ]

$P_0$ : Presión de vapor a una temperatura dada [atm]

$\Delta H_{vap}$ : Entalpia de vaporización [J/mol]

$T_0$ : Temperatura a la que se mide la presión de vapor [Kelvin]

Por otro lado, la evaporación es el proceso de cambio de fase de líquido a sólido, pero a diferencia de la ebullición es un proceso más lento. Este fenómeno consiste en la rotura de la tensión superficial de las gotas de agua mediante la energía alcanzada por el flujo. Las temperaturas elevadas favorecen el proceso de evaporación.

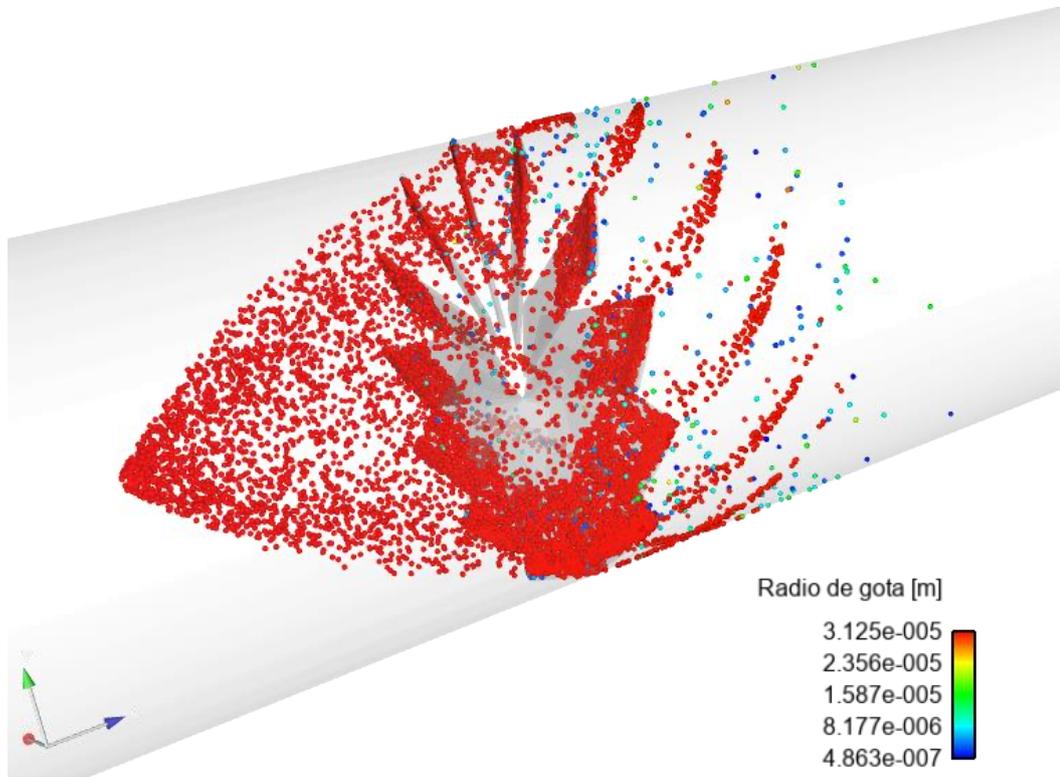


Figura 85. Radio de gotas de agua

En la Figura 84, se muestra mediante esferas el radio de las gotas de agua en la inyección. El radio al inicio de la inyección es de  $3.125 \times 10^{-5}$  m. Una vez las gotas cruzan el mezclador el radio de estas disminuye de manera notable debido al proceso de vaporación, ya que la temperatura en el sistema es de 450 K, mucho mayor que el punto de ebullición calculado anteriormente, 373.30 K. Por otro lado, también afecta el proceso de evaporación, ya que la velocidad del flujo crea la energía necesaria para romper la tensión superficial de las gotas de agua. Una vez las gotas de agua cruzan el mezclador, el valor medio de las gotas disminuye hasta  $8.0 \times 10^{-6}$  m.

### 5.2.1.4 Depositiones de agua

Un riesgo de una mezcla o evaporación incompleta son los depósitos de especies en las paredes del sistema, que surgen cuando las gotas líquidas no pueden romperse completamente o evaporarse a tiempo, dejando estas especies no resueltas o productos intermedios para formar depósitos sólidos en las regiones de la pared.

En la figura 84, se representa un avance durante la simulación de la cantidad de agua que es almacenada en las paredes del sistema. Se observa que el valor crece continuamente. Cuando la simulación llega a 0.25 segundos el valor es de  $5 \times 10^{-7}$  kg de agua. Los depósitos creados en las paredes son debido a varios factores como la transferencia de calor de la pared, la configuración de la tubería y la estrategia de inyección.

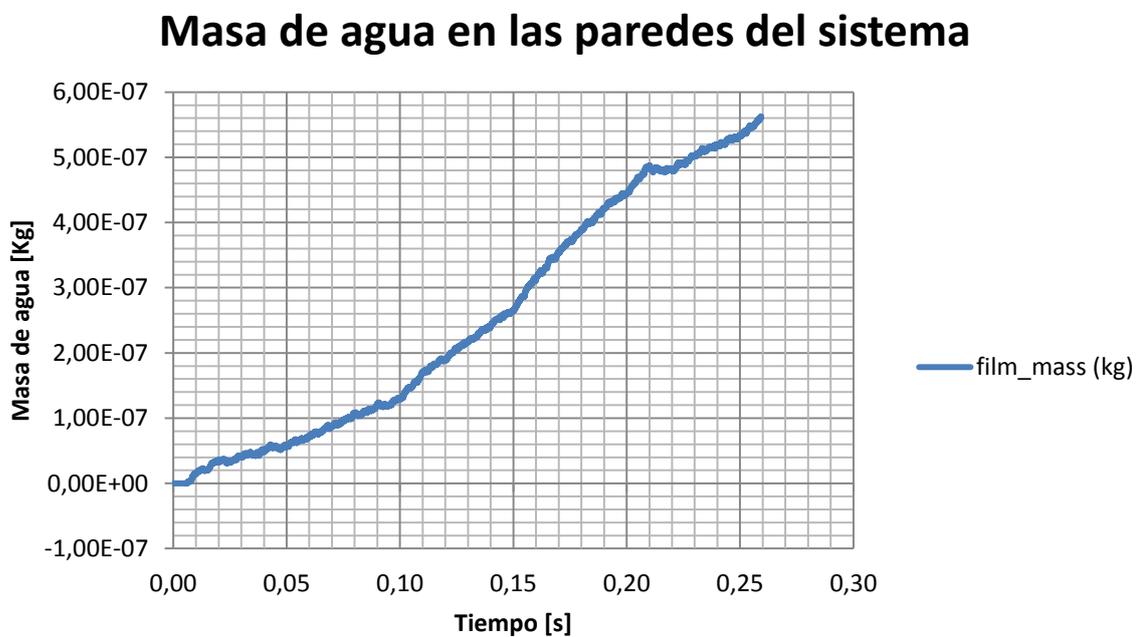


Figura 86. Agua almacenada en las paredes del sistema

### 5.2.1.6 Concentración másica de H<sub>2</sub>O en el sistema

Para observar la evolución de la concentración másica de H<sub>2</sub>O en el sistema se ha realizado dos métodos diferentes. En primer lugar, se han realizado tres secciones a lo largo del sistema SCR, la primera a la salida del mezclador, la segunda entre el mezclador y el catalizador y por último la tercera en la entrada del catalizador. En segundo lugar, se ha realizado un corte transversal a lo largo del sistema SCR, con el objetivo de ver cómo avanza la concentración másica del agua durante la simulación.

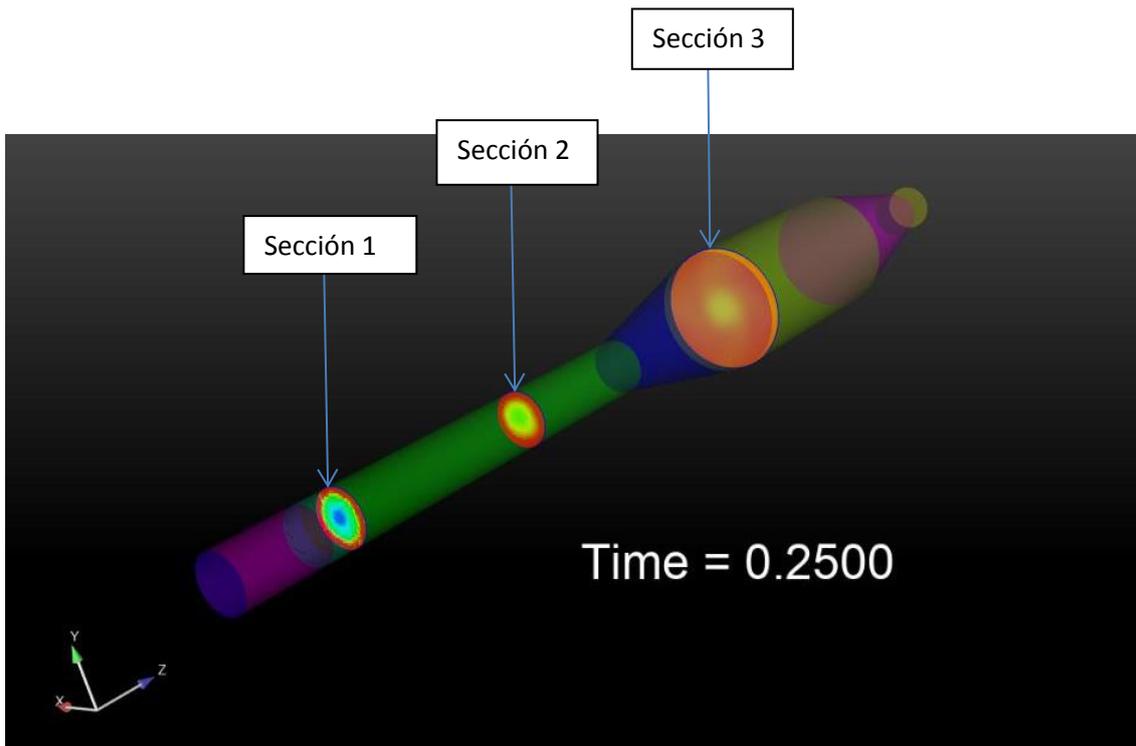


Figura 87. Secciones 1,2 y 3 de concentración másica de agua

La figura 88, se muestra una sección situada a la salida del mezclador donde representa la concentración másica del agua. Se observa en la figura que la mayor concentración de agua se sitúa cerca de las paredes del sistema, esto es debido a la fuerza centrífuga de la rotación del flujo inducida por el paso por el mezclador.

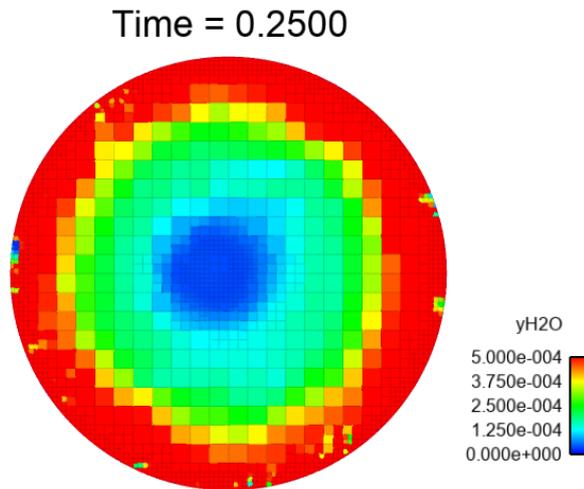


Ilustración 88. Fracción másica de agua en la sección 1

La segunda sección realizada en el sistema está situada a mitad del reactor de descomposición. Como se observa en Figura 89, la concentración de agua en las zonas más cercanas a las paredes sigue siendo elevada, pero en la zona central del tubo ha aumentado considerablemente también. Esto es debido al fenómeno de vaporación de agua, ya que la temperatura de las paredes es de 450 k y por lo tanto el agua va evaporando continuamente y este vapor de agua es arrastrado por el flujo, de manera que se va homogeneizando el flujo a lo largo del tubo.

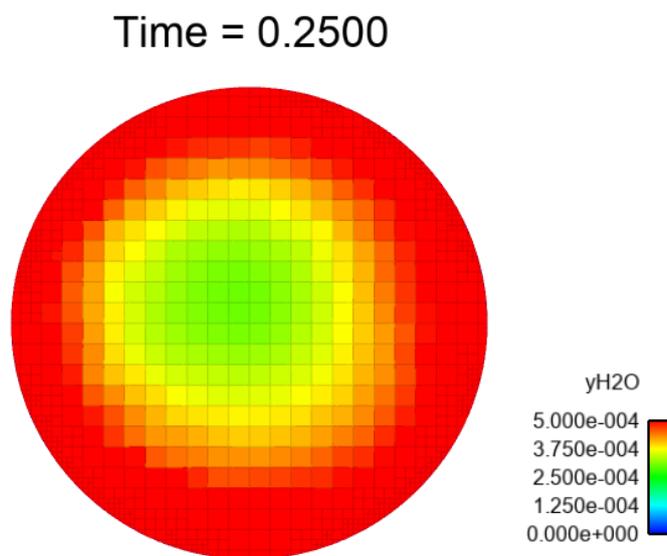


Ilustración 89. Fracción másica de agua en la sección 2

Finalmente, la ultima seccion esta situada a la entrada del catalizador. Teóricamente el cálculo de la concentracion másica del agua en el sistema es el siguiente:

$$Y_{h2o} = \frac{m_{h2o}}{m_t} = 4.8 \times 10^{-4}$$

Como se muestra en la Figura 90, la concentración másica en la mayor parte de la sección es de  $4.5 \times 10^{-4}$ , un valor muy parecido al teórico. También se aprecia la homogeneización de la concentración del agua en el flujo ya que es prácticamente la misma en toda la sección.

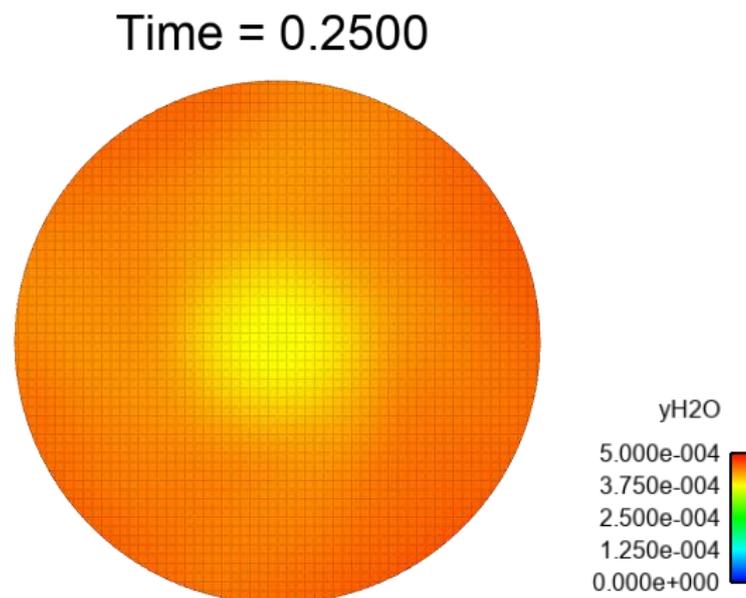


Ilustración 90. Fracción másica de agua a la entrada del catalizador

### 5.2.1.7 Campo de velocidades del flujo

En este apartado se muestra el contorno de velocidades del flujo a lo largo del sistema. Para ello se ha realizado un corte transversal del sistema SCR y se ha obtenido imágenes para ver la evolución de la velocidad durante los 0.25 segundos de la simulación.

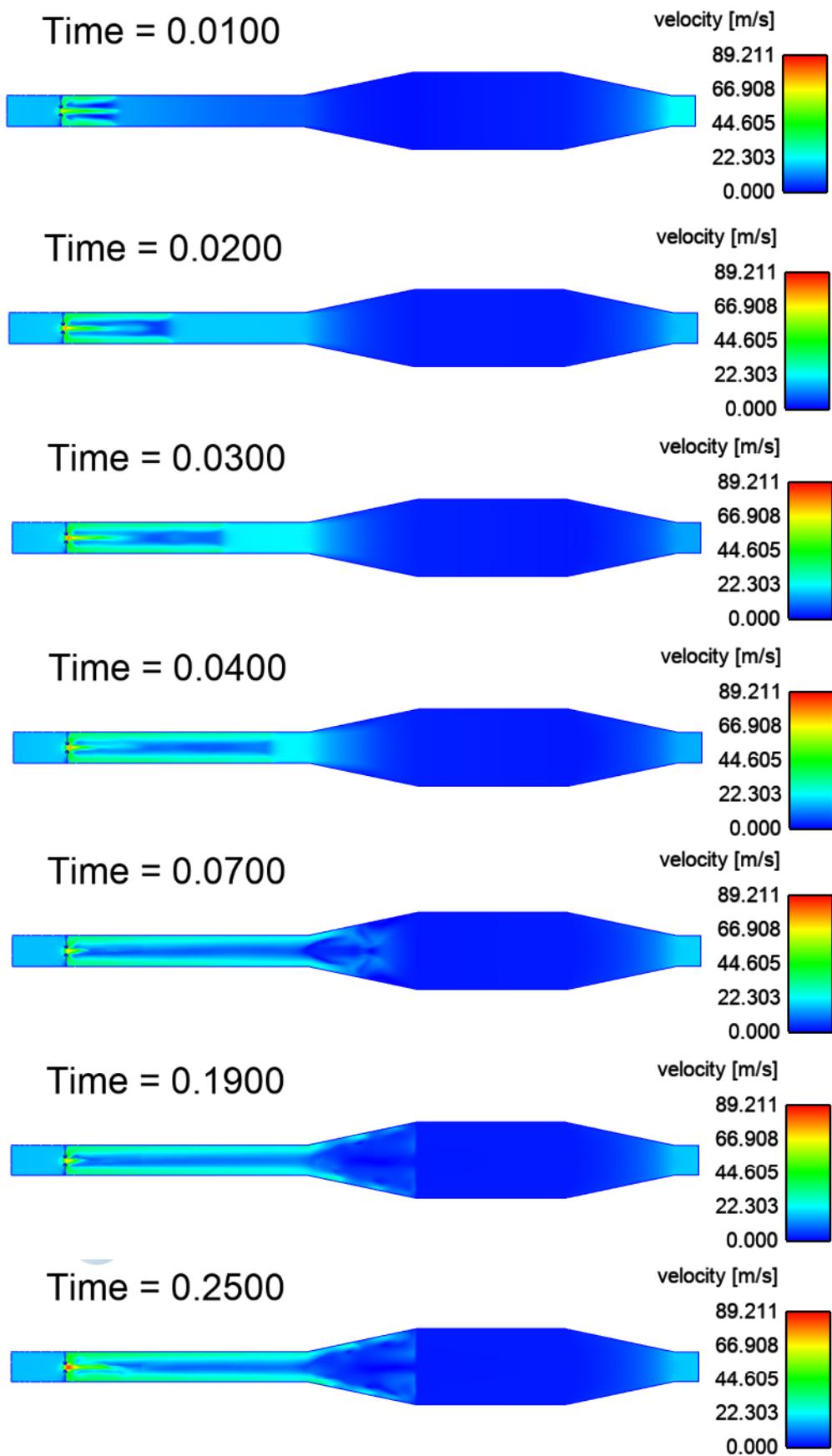
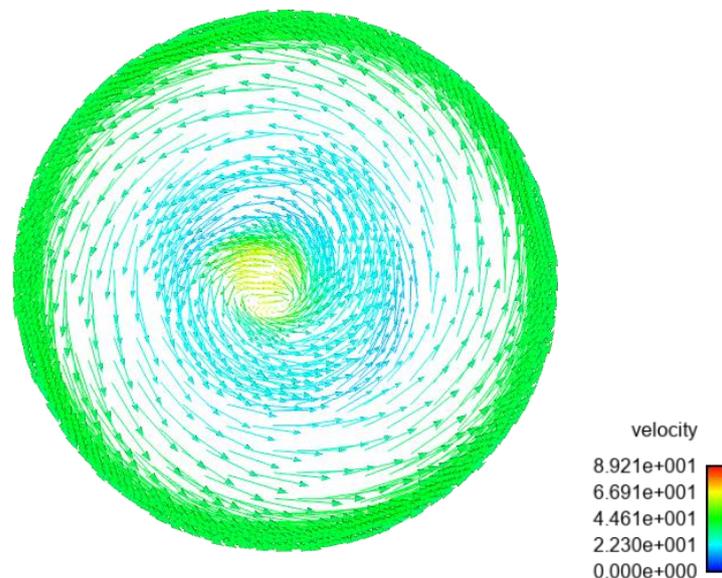


Figura 91. Evolución de la velocidad del flujo

En la figura 91, se muestra representado el avance de la velocidad absoluta del flujo en el interior del sistema durante el tiempo de simulación.

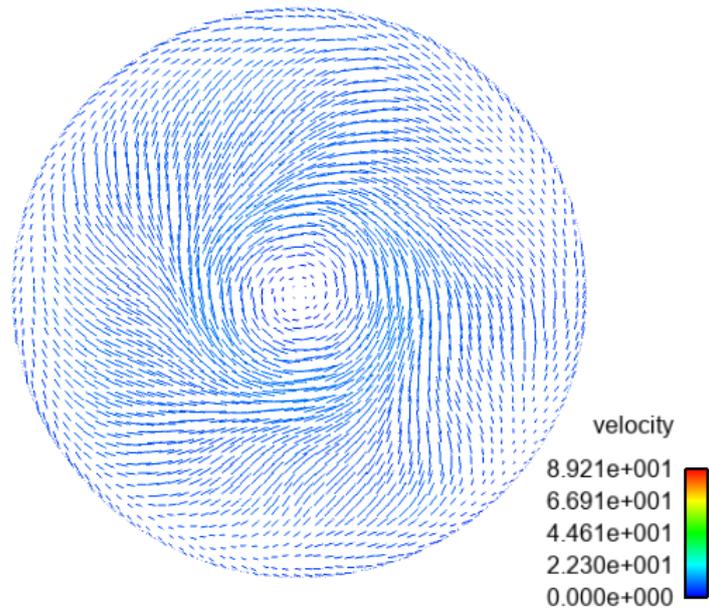
En el inicio de la simulación, entre 0.01s y 0.04s se aprecia cómo se empieza a formar el flujo en el reactor de descomposición. Las velocidades más altas se dan en las zonas cercanas a la pared. Según la ley de Poiseuille, cuando un fluido se mueve por un tubo de sección circular, su velocidad en la capa más externa es muy inferior a la velocidad en el centro del tubo debido a que se producen pérdidas por rozamiento con la pared. En cambio, en el sistema, se aprecia que a la salida del mezclador las velocidades más altas se dan en las zonas cercanas a las paredes. Este fenómeno es debido a que cuando el flujo cruza el mezclador, este crea una velocidad tangencial que direcciona el fluido hacia las paredes del sistema. El valor de velocidad en esta zona es de 23 m/s, en cambio en la zona central del tubo es muy inferior, alrededor de 9 m/s.

En la Figura 92 se aprecia, mediante una sección a la salida del mezclador, la magnitud de la velocidad tangencial al atravesar el mezclador.



**Figura 92. Turbulencia del fluido salida mezclador**

A partir de 0.07 la velocidad del fluido se estabiliza. En la figura 93 se muestra la sección a la entrada del catalizador, donde se aprecia como la velocidad es mucho más uniforme que a la salida del mezclador, en torno a 20 m/s. También se aprecia que la vorticidad del flujo es mucho menor, donde se sigue apreciando la velocidad tangencial, pero en este caso no se concentra en las paredes, sino que es más homogénea en toda la sección.



**Figura 93. Turbulencia del fluido a la entrada del catalizador**

### 5.3 Análisis de inyección urea

En segundo lugar, se va a realizar el análisis de del sistema SCR mediante la inyección de urea. El objetivo de este segundo estudio es ver que parámetros se pueden obtener de manera que se pueda comparar ambos estudios y realizar una evaluación de viabilidad para ver en términos de gasto computacional y en parámetros calculados cuál de los dos métodos es el óptimo para realizar el estudio de diseño.

Inicialmente para el análisis de inyección de urea se iba a utilizar la misma geometría que para el caso de inyección de agua. Después del análisis de la simulación de inyección de agua y de una estimación del tiempo de cálculo necesario para la inyección de urea, fue inviable realizar la simulación con toda la geometría ya que el tiempo estimado de cálculo era muy elevado debido a los mecanismos físico-químicos y a las reacciones del sistema. La solución adoptada fue reducir el dominio del sistema y analizar los fenómenos que ocurrían a la salida del mezclador.

La figura muestra el dominio analizado en la simulación:

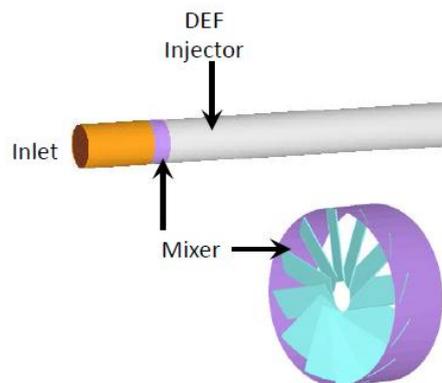


Figura 94. Geometría inyección urea

#### 5.3.1 Parámetros de Urea/H<sub>2</sub>O en el sistema

En este apartado se han analizado los parámetros más importantes de diseño de un sistema SCR, de manera que se puedan comparar con el caso de estudio anterior. El fluido inyectado es una solución acuosa de urea al 32.5 %. Los parámetros que se han analizado y comparado con el método anterior han sido los relacionados con la evaporación del fluido de este fluido a lo largo del tiempo de simulación, las deposiciones de urea y derivados de la urea en las paredes del sistema, la conversión de la urea en el proceso de hidrólisis mediante la concentración de amoníaco y el campo de velocidades a la salida del mezclador.

### 5.3.1.1 Vaporización

Como se ha explicado en el caso de inyección de agua, uno de los mecanismos más importantes en el diseño de sistemas de reducción catalítica selectiva. En el caso anterior no existía ninguna reacción de descomposición del flujo, pero en cambio, en el caso de inyección de urea se produce la reacción de hidrólisis.

En primer lugar, el modelo que se utiliza es el llamado *Detailed Decomposition*. El modelo *Detailed Decomposition* consiste en un modelo de evaporación para gotas UWS (Urea/Water Solution) y un modelo de descomposición térmica para sistemas de postratamiento.

Debido a que a presiones atmosféricas la presión de vapor de la urea es baja, el modelo de evaporación de gotas UWS se basa en la suposición de que solo se produce la evaporación del agua de la solución. Por otro lado, el modelo de descomposición térmica se encarga de la descomposición de la urea en fases sólidas y acuosas, y de manera simultánea predice la aparición de los subproductos generados en la descomposición de la urea en forma de depósitos que serán explicados en los siguientes apartados.

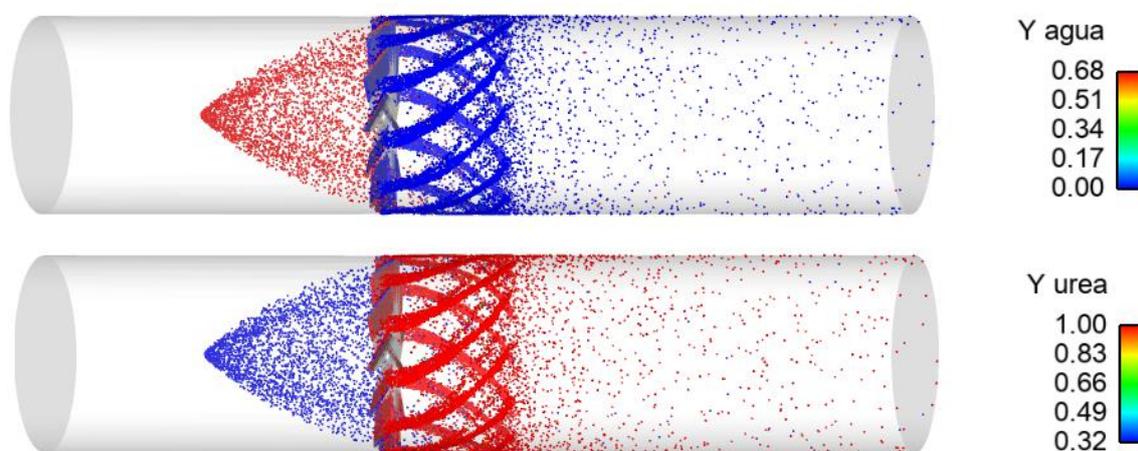


Figura 95. Fracción másica de urea/agua

En la figura 95, se muestra tanto la fracción másica del agua y de la urea. Se aprecia de manera clara como en el inicio de la inyección el 67.5% es agua y el 32.5% es de urea, y en el momento que el fluido cruza el mezclador y se produce el mecanismo de evaporación, toda el agua es evaporada y la fracción másica de la urea pasa a ser 1.

Por otro lado, debido a la evaporación de las gotas UWS, también se produce una variación en el radio de las gotas.

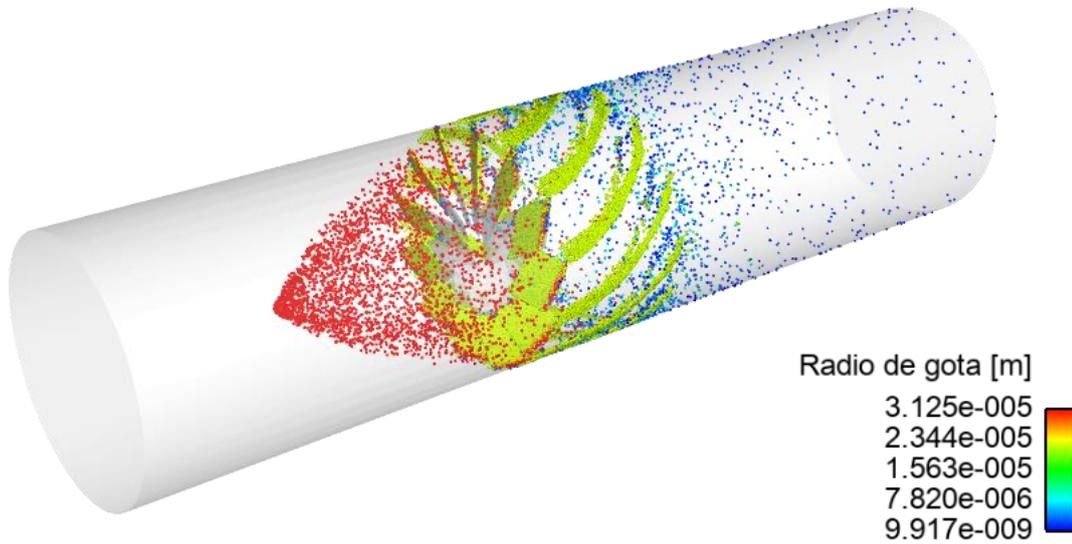


Figura 96. Radio de gota UWS

En la figura 96, se muestra mediante esferas el radio de las gotas UWS en la inyección. El radio al inicio de la inyección es de  $3.125 \times 10^{-5}$  m. Una vez las gotas cruzan el mezclador el radio de estas disminuye de manera progresiva debido al mecanismo de evaporación y la descomposición térmica mencionada anteriormente. El tamaño a la salida del mezclador es de  $2.34 \times 10^{-5}$  y conforme avanza el flujo de gotas el tamaño se reduce hasta  $8.5 \times 10^{-6}$  m.

En comparación con el caso de inyección de agua, el tamaño de gotas es muy similar. La gran diferencia es el tiempo de evaporación, ya que, en el caso de agua, las gotas evaporaban de manera casi instantánea, pero en cambio, en el caso de inyección de urea se evaporan de manera progresiva debido a los mecanismos de evaporación del agua y descomposición térmica de la urea.

### 5.3.1.2 Depositiones de urea

En el apartado anterior se ha explicado el proceso de descomposición teórico que sufre la urea una vez entra al sistema. Pero no es el caso real, ya que la descomposición de la urea es un proceso complejo y puede tomar diferentes caminos. La urea se descompone en una parte sólida y una parte acuosa, pero también existen otros derivados de la urea que aparecen. Esto es debido a que la reacción de hidrólisis es un proceso lento, por lo que brinda la oportunidad al ácido isocianico de mezclarse con la urea no descompuesta.

Los compuestos que se crean cuando el ácido isocianico entra en contacto con la urea no descompuesta son biuret, triuret, melanina, ammeline y ácido cianúrico y toman las siguientes reacciones:

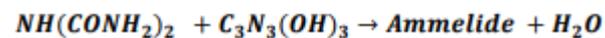
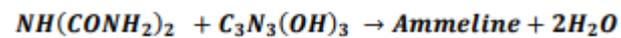
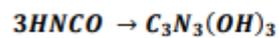
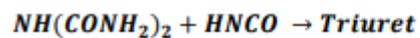


Figura 97. Derivados de urea

Debido a que tiempo de cálculo durante el proyecto ha sido reducido, los parámetros adquiridos con respecto a deposiciones sólidas de derivados de urea no son relevantes ya que los valores son demasiado pequeños. En cambio, sí que se puede apreciar como aparecen pequeñas deposiciones de los derivados mencionados anteriormente.

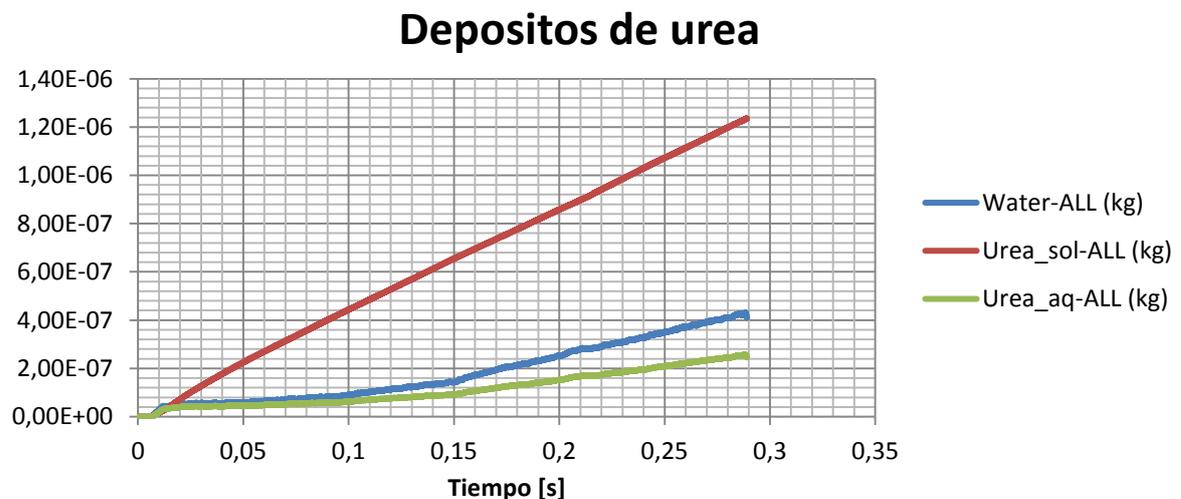


Figura 98. Depósitos de urea/agua

En la figura 98, se muestra la cantidad en masa de deposiciones de agua líquida urea sólida y urea líquida que hay en el sistema a lo largo del tiempo de simulación. Se aprecia como cantidad de urea sólida aumenta de manera casi constante hasta llegar a  $1.25 \times 10^{-6}$ . En cambio, los valores de urea y agua líquida son mucho menores,  $2.5 \times 10^{-7}$  y  $4.0 \times 10^{-7}$  respectivamente. Estos valores son muchos menores debido a los mecanismos mencionados anteriormente de evaporación.

Como se ha mencionado, los valores adquiridos de derivados de urea no son relevantes, pero en la figura 99 se aprecia como comienza la aparición de pequeñas deposiciones de estos elementos en las paredes del sistema.

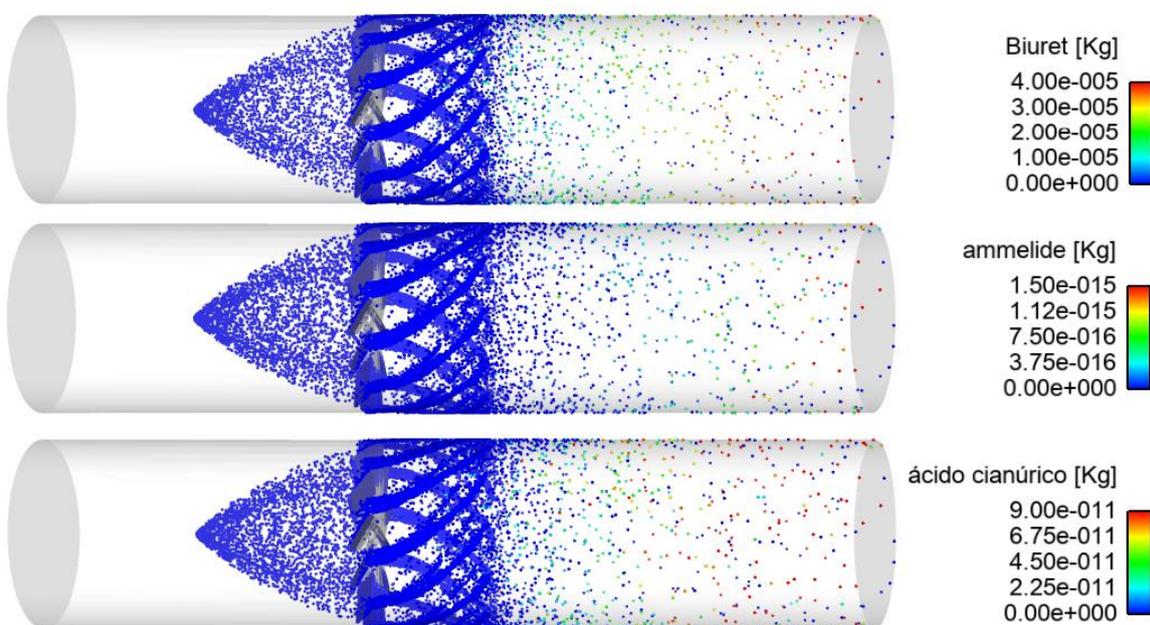


Ilustración 99. Derivados de la urea

### 5.3.1.3 Concentración de $\text{NH}_3$ en el sistema

La reacción más importante que tiene lugar en el proceso de reducción catalítico selectivo es la hidrólisis. La hidrólisis es el proceso por el cual se realiza la conversión de urea en  $\text{NH}_3$  y  $\text{CO}_2$  durante el proceso de descomposición.

En este apartado se va a mostrar mediante una sección longitudinal del sistema, la concentración másica del  $\text{NH}_3$  tanto en las paredes como en el centro del tubo, de manera que se pueda observar la conversión de la urea en proceso de hidrólisis.

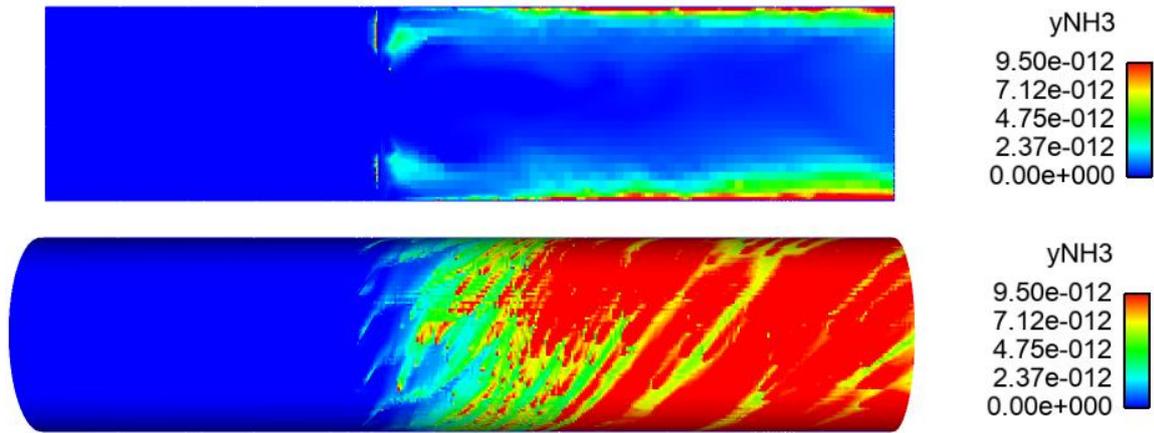


Figura 100. Concentración de NH<sub>3</sub> en la sección longitudinal y paredes el sistema

En la figura 100, se muestra la concentración de NH<sub>3</sub>, en la parte superior en el interior del tubo de descomposición, y en la parte inferior en las paredes del sistema. Se observa que los valores de concentración son bajos debido a que el tiempo de calcula ha sido muy pequeño. Se aprecia que la mayor cantidad de NH<sub>3</sub> está situado en zonas cercanas a las paredes del sistema debido a la fuerza centrífuga de rotación creada por el mezclador.

En la Figura 101, se muestra la comparación entre el caso de inyección de agua (Izquierda) y el caso de inyección de urea (Derecha). Se observa como la tendencia de la fracción másica del agua y del NH<sub>3</sub> es dirigir hacia las paredes las partículas, mediante el mezclador, para así conseguir una mezcla homogénea y mejorar el proceso de descomposición.

La concentración de NH<sub>3</sub> es muy inferior a la de agua debido a que el la reacción de hidrólisis es un proceso lento de descomposición, en cambio, el agua no sufre ninguna reacción de descomposición, si no que evapora directamente.

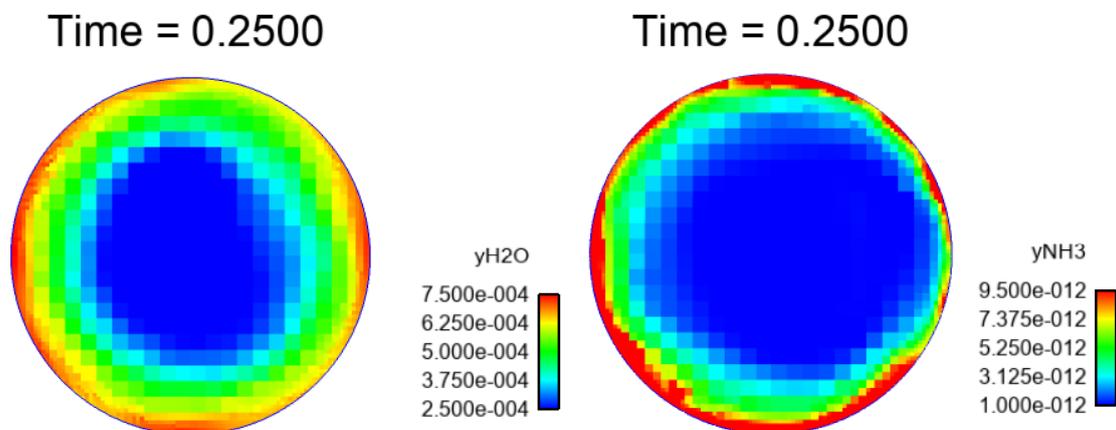


Figura 101. Comparación de fracción másica de agua y urea

## 6.4 Gasto computacional

El gasto computacional en un cálculo CFD es un parámetro muy importante debido a que un gasto muy elevado puede hacer inviable el cálculo del resultado. En el trabajo se ha realizado una comparación entre el gasto utilizado por el análisis de la inyección de agua y el análisis de la inyección de urea.

Las dos simulaciones tienen condiciones diferentes, ya que, en la simulación de inyección de agua, el dominio es mucho mayor pero en cambio carece de cualquier mecanismo químico. Por esta razón los valores obtenidos de tiempo por iteración y número de celdas han sido normalizados con el fin de obtener una comparación válida.

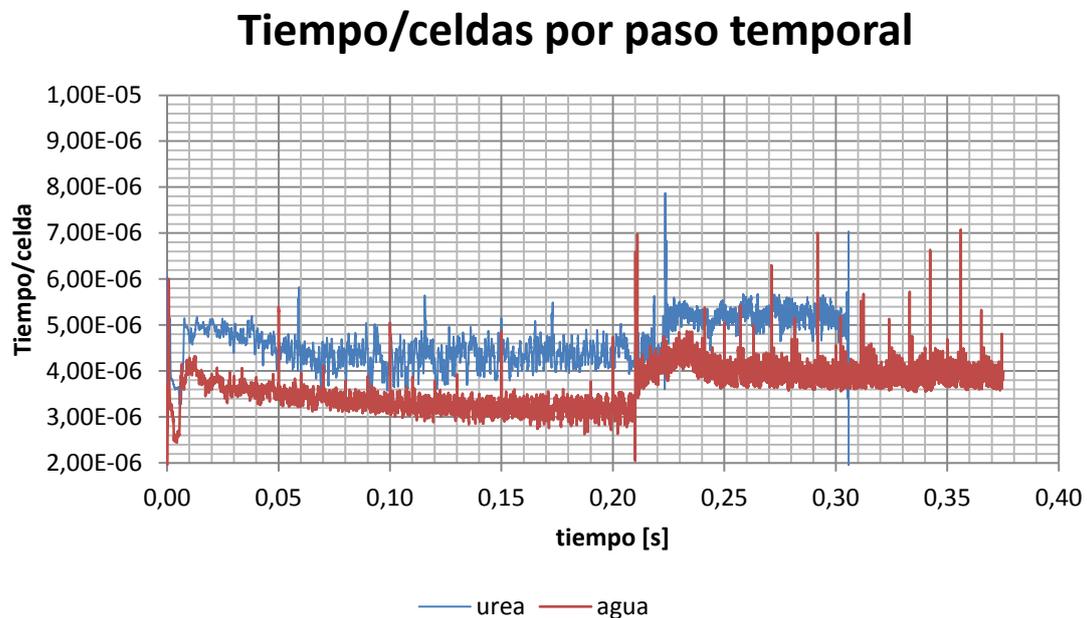


Figura 102. Tiempo/celda por paso temporal

En la figura 102, se representa la comparación del tiempo/celda por paso temporal del análisis de la inyección de agua y de la de urea. Se aprecia que el tiempo/celda del análisis de urea está en torno a  $5,00 \times 10^{-6}$  segundos y el de agua en torno a  $3,50 \times 10^{-6}$  segundos. Esto es debido a que la simulación de urea contiene más mecanismos físico-químicos que hacen que el tiempo de cálculo sea 103, representa la comparación de time-step de agua frente a urea, la cual muestra que una vez se estabiliza el valor de time-step de agua es del orden de  $1,0 \times 10^{-5}$  y el de la urea de  $1,0 \times 10^{-8}$ . Esto implica que el cálculo de la urea avanza mil veces más lento que el de agua.

## Time-step agua/urea

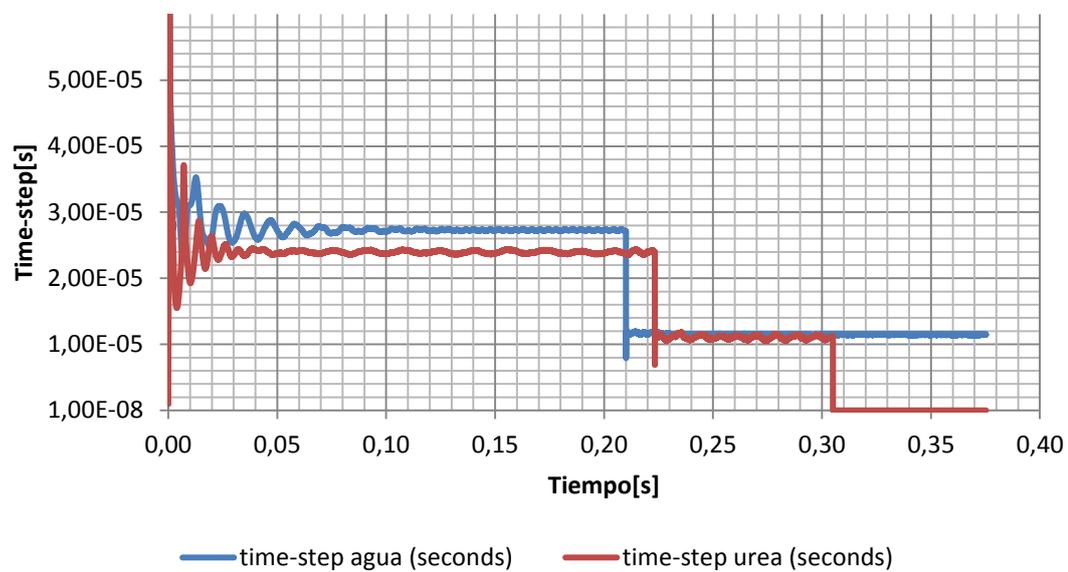


Figura 103. Time-step agua/urea

## Capítulo 6

# Conclusiones y trabajos futuros

Se ha realizado satisfactoriamente el proyecto final de grado para la obtención del título de graduado en ingeniería mecánica.

Con la realización del proyecto se han adquirido conocimientos en distintas áreas de la ingeniería, tales como:

- En la realización de proyecto en un ambiente de trabajo semejante a un puesto de trabajo en una empresa.
- En sistemas de post-tratamiento para motores diésel, en el funcionamiento de sistemas de reducción catalítica selectiva, en las técnicas y problemas relacionados con el diseño de sistemas SCR.
- Aprendizaje de las herramientas necesarias para realizar estudios CFD y la metodología aplicada en los dos casos de estudio realizados en el desarrollo del estudio. El software utilizado para la preparación y configuración de la geometría ha sido Converge Studio, para la simulación CFD ha sido Converge v2.4 y el programa para el postproceso 3D y obtención de resultados ha sido EnSight 10.2.

En el proyecto se ha realizado satisfactoriamente una comparación de dos metodologías para la optimización en el diseño de sistemas de reducción catalítica selectiva mediante la herramienta CFD Converge.

Partiendo de una geometría inicial de un sistema de postratamiento de reducción catalítica selectiva, se ha aplicado la metodología utilizada actualmente en la industria para el diseño de sistema SCR. Esta metodología consiste en la inyección de únicamente agua al sistema. Esta metodología se caracteriza por carecer de todos los mecanismos físico-químicos y analizar tanto el proceso de vaporización de agua como el flujo desarrollado en el interior del sistema. Los resultados obtenidos en cuanto a vaporización de agua y el análisis del flujo, muestran que tanto la geometría como la introducción del mezclador, son correctos para su funcionamiento debido a los altos niveles de homogeneidad del flujo y una alta tasa de vaporización de agua junto con la poca aparición de deposiciones de agua en las paredes del sistema.

La segunda metodología que ha sido analizada, ha consistido en la inyección de una solución acuosa de urea al 32.5% (AdBlue) al sistema. A diferencia del caso anterior, esta metodología se caracteriza por introducir todos los mecanismos físico-químicos, en especial el modelo de inyección de urea llamado *Detailed Decomposition*. Consiste en un modelo de evaporación para gotas UWS (Urea/Water Solution) y un modelo de descomposición térmica para sistemas de postratamiento. Debido al tiempo disponible para la realización del proyecto, el sistema analizado se ha reducido, de manera que se ha realizado un estudio de los fenómenos ocurridos a la salida del mezclador. Los resultados obtenidos con esta segunda metodología han aportado, con respecto al primer método utilizado, parámetros de la evaporación de las partículas de urea y agua y parámetros de descomposición de la urea, tales como conversión de urea en amoníaco y deposiciones sólidas de urea y derivados de urea en las paredes del sistema.

Por último, con la finalidad de realizar una comparación de las metodologías, se ha realizado un estudio del gasto computacional de ambas. El estudio se ha basado en el tiempo de time-step de cada metodología y los resultados obtenidos muestran que el tiempo de cálculo de la inyección de urea es del orden de mil veces más lento que el de inyección de agua. Esto es debido a que el modelo utilizado en el caso de inyección de urea contiene muchos mecanismos tanto físicos como químicos que hacen más compleja su resolución.

Comparando ambos métodos de diseño, se ha obtenido como conclusión que la metodología de inyección de urea, debido a la complejidad de los mecanismo físico-químicos, requiere un gasto computacional muy elevado por lo que para la realización de cualquier estudio de sistema SCR, habría que tener en cuenta si los parámetros obtenidos gracias a este método compensan con el tiempo necesario de cálculo.

Una vez finalizado el proyecto, debido a la falta de tiempo, quedan pendientes los siguientes trabajos:

- Análisis del sistema SCR con la metodología de inyección de urea con un tiempo de simulación completo.
- Análisis del flujo del sistema mediante el uso de mezcladores e inyectores con diferentes geometrías

## Capítulo 7

# BIBLIOGRAFÍA

- [1] Prof. F.Payri, Prof. J.M. Desantes: Motores de combustión interna alternativos. CMT, Universitat Politècnica de València, 2011.
- [2] Converge CFD software. Converge manual: Manual de teoría de Converge v2.4, 2018.
- [3] Converge CFD software. Converge Studio manual: Manual de converge studio v2.4, 2018.
- [4] Carlos Guardiola, Santiago Ruiz, Benjamín Pla, David Blanco-Rodríguez: Motores térmicos para ingeniería mecánica. Servicio de publicaciones de UPV.
- [5] Javier Miñana: Optimización de un nuevo concepto de sistema de post-tratamiento en motores diesel mediante técnicas CFD. Trabajo de final de carrera, 2012.
- [6] Merle C. Potter, David C. Wiggert. Mecánica de fluidos, 2002.
- [7] Zheng, G., "CFD Modeling of Urea Spray and Deposits for SCR Systems," SAE Technical Paper 2016-01-8077, 2016, doi: 10.4271/2016-01-8077.
- [8] Xubo Gan, Dongwei Yao □, Feng Wu, Jiawei Dai, Lai Wei, Xingwen Li, "Modeling and simulation of urea-water-solution droplet evaporation and thermolysis processes for SCR systems"

# **DOCUMENTO II**

---

**Pliego de condiciones**

## 1. CONDICIONES DEL PUESTO DE TRABAJO

### 1.1 INTRODUCCIÓN

Durante la realización del proyecto el trabajador se ve sometido a una serie de condiciones de trabajo, las cuales van influir tanto en la salud como en el propio rendimiento del mismo. Por esta razón, hay que poner los medios para la prevención de riesgos laborales. En este proyecto, por la labor que se realiza, estos riesgos pueden provocar fatiga, malestar, estrés estados depresivos...

La normativa que se ajusta al tipo de actividad que se va a realizar en este proyecto está regida en el Real Decreto 488/1997 del 14 de Abril, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas de visualización. *“El constituido por un equipo con pantalla de visualización provisto, en su caso de un teclado o dispositivo de adquisición de datos, de un programa para la interconexión persona-máquina, de accesorios ofimáticos u de un asiento y mesa o superficie de trabajo, así como el entorno laboral inmediato”.*

Se atenderá a 4 variables para prever el tipo de riesgos a los que puede enfrenarse el trabajador:

- Tiempo de trabajo con la pantalla de visualización.
- Tiempo de atención requerida ante la pantalla, que a su vez puede ser continua o discontinua.
- Exigencia y grado de complejidad de la tarea realizada en la pantalla.
- Necesidad de obtener información de manera muy rápida.

Los riesgos que pueden surgir en este trabajo son:

- Seguridad (Contactos eléctricos)
- Higiene industrial (Iluminación, Ruido, condiciones termohigrométricas)
- Ergonomía (Fatiga visual, física y mental)

### 1.2 CONDICIONES DEL LUGAR DE TRABAJO

Los entornos donde se lleva a cabo la actividad deben atenderse a lo establecido en el Real Decreto 486/1997 del 14 de Abril, sobre condiciones mínimas de seguridad y salud aplicables a los lugares de trabajo, además de lo establecido específicamente en el Real Decreto 488/1997 mencionado anteriormente.

### **1.2.1 Medidas de emergencia. Vías y salidas de evacuación.**

La empresa debe tener adoptadas medidas de emergencia en las que este incluidas las vías y salidas de evacuación en caso de que ocurra una emergencia. Los trabajadores deben de tener conocimiento de estas medidas.

### **1.2.2 Protección contra incendios**

Todas las instalaciones contra incendios deben estar proyectadas, implantadas y mantenidas por empresas debidamente autorizadas por el organismo competente.

### **1.2.3 Instalaciones eléctricas**

La instalación eléctrica debe estar proyectada, puesta en funcionamiento y mantenida por una empresa que esté debidamente autorizada y cualificada (Ministerio de industria y energía, consejería de industria, etc.).

La instalación debe estar de tal manera que evite el contacto con persona, incendios y o explosiones, atendándose a lo establecido en los reglamentos de alta y baja tensión.

Desde un punto de vista de la seguridad eléctrica, se deben cumplir lo establecido para puestos de trabajo con equipos de pantalla de visualización:

- Garantizar el mantenimiento de cables y conexiones.
- Reducir a niveles muy bajos la radiación electromagnética.
- Facilitar el acceso y mantenimiento de los cables sin necesidad de interrumpa la actividad de trabajo.
- Mantener una separación mínima entre los cables eléctricos y los telefónicos.
- Emplear cables con margen de longitud para una posible reforma en el futuro.

### **1.2.4 Condiciones termohigrométricas**

Atendiéndose al Real Decreto 488/1997 sobre puestos de trabajo con equipos de visualización, establece las siguientes magnitudes para estos puestos:

- La temperatura operativa de confort debe mantenerse dentro de los siguientes limites
  - Verano: 23 – 26°C
  - Invierno: 20 – 24°C
  - En ningún momento exceder 26°C
- El rango de la humedad relativa del aire tiene que estar entre 45 y 65 % para cualquier temperatura.

### **1.2.5 Iluminación**

La iluminación del lugar de trabajo puede ser natural o artificial. Lo más recomendable es que sea natural, pero debido a los cambios en la intensidad de la luz a lo largo del día y los cambios de estaciones, es necesario complementarla con luz artificial. Esta luz artificial puede ser localizada o general, pero lo habitual es que sea localizada. En ningún caso esta luz provocará deslumbramientos ni un exceso de contraste entre zonas iluminadas y de sombra.

Los niveles de iluminación serán suficientes para la actividad de trabajo realizada en los puestos de trabajo, tanto en la ubicación del puesto como de la pantalla.

### **1.2.5 Ruido**

El ruido permitido en el área de trabajo está recogido en el Real Decreto 1316/1989 del 27 de Octubre, el cual establece que el empresario debe evaluar la exposición de los trabajadores al ruido, como objeto de comprobar si supera el límite establecido en la norma mencionada. El límite establecido según la norma es de 55 dB(A).

## **1.3 Ergonomía. Diseño del puesto de trabajo**

Una vez se ha expuesto los posibles riesgos que supone la realización de esta actividad, es necesario definir un conjunto de medidas para evitar posibles riesgos. Los riesgos relacionados con los puestos de trabajo con pantallas de - en el Real Decreto 488/1997 citadas en un anexo de disposiciones mínimas.

- **Mesa o superficie de trabajo.**

Las dimensiones de las mesas deberán ser suficiente para la actividad realizada sobre ella y deberá ser poco reflectante y tener el espacio suficiente para poder colocar de manera cómoda el ratón, el teclado, la pantalla y el material de documentación necesario

- **Teclado**

El teclado debe poder inclinarse y estar independiente de la pantalla de tal manera que se pueda evitar malas posturas del trabajador tanto de los brazos como de la espalda. Para ello en la parte delantera al teclado debe haber espacio suficiente para poder apoyar los brazos.

- **Colocación de la pantalla**

La distancia óptima que debe existir entre la pantalla y los ojos del trabajador está entre 45 y 75 cm. Además, tiene que estar colocada de manera que el ángulo de visión del trabajador sea de 70°.

- **Asiento del trabajador**

Para evitar problemas relacionados con la posición corporal del trabajador, es necesario que el asiento sea regulable en cuanto a la altura y que le permita una libertad de movimiento suficiente para el confort del trabajador. Para ello la mejor opción es la de utilizar sillas con ruedas.

## **2. CONDICIONES DE LOS RECURSOS INFORMATICOS**

### **2.1 Introducción**

Para la realización del proyecto son necesarios recursos informáticos, de manera que se puedan resolver la complejidad de los cálculos requeridos en el proyecto. Los recursos informáticos utilizados para la realización del presente proyecto se pueden clasificar en recursos informáticos de hardware y recursos informáticos de software.

### **2.2 Condiciones de hardware**

Los recursos informáticos de hardware deberán estar formados por dispositivos de alta potencia y memoria, debido a la complejidad de los cálculos que se va a realizar con ellos. Por otro lado, estos dispositivos tienen que estar en perfectas condiciones ya que van a realizar cálculos durante un largo intervalo de tiempo y de manera ininterrumpida.

Como material de hardware para realizar los cálculos y obtener los resultados del proyecto, ha sido utilizado un ordenador portátil y un ordenador de sobremesa. El ordenador portátil ha sido utilizado para realizar actividades que requieran menos potencia y capacidad de memoria debido a su limitación de poder realizar simulaciones, en cambio para el cálculo de la malla y de la simulación de los diferentes casos, se ha usado el ordenador de sobremesa debido a la alta capacidad de memoria RAM y especificaciones de gráfica.

#### **Ordenador portátil**

- Modelo: HP Pavilion dv6 6185 la 64 bits.
- Procesador: Intel Core i7-2630QM de segunda generación a 2,00 GHz.
- Numero de procesadores: 8 procesadores.
- Memoria RAM: 6 G DDR3.
- Tarjeta gráfica: NVIDIA GEFORVE GT 630M 2Gb.
- Disco duro: 1 Tb.
- Sistema operativo: Windows 7.
- Pantalla: BrightView de 15,6 pulgadas.

### **2.3 Condiciones de software**

Los recursos de software que se va a utilizar son los diferentes programas para realizar tanto cálculo como el post proceso. Uno de los inconvenientes de usar estos softwares son las elevadas licencias, que en este proyecto asumirá la Universidad Politécnica de Valencia. Las licencias obtenidas son licencias académicas. Los softwares utilizados en el proyecto son *Converge Studio v2.4*, *EnSight 10.2* y el paquete Microsoft office 2010.

#### **Software CFD**

El software utilizado para realizar tanto el mallado como la preparación del sistema a analizar ha sido *Converge Studio v2.4*. El uso de este software se rige por la licencia concedida por la empresa *Converge Sciencie, Inc*.

#### **Software de post proceso**

El software utilizado para realizar el post proceso y obtener los resultados de las simulaciones realizadas es *EnSight 10.2*. El uso de este software se rige por la licencia adquirida por la empresa *Computational Engineering International, Inc*.

# **DOCUMENTO III**

---

## **Presupuesto**

## 1. Introducción

En este capítulo se va a describir los costes necesarios para el proyecto “Análisis de sistemas de reducción catalítica con inyección de urea mediante CFD”. Los costes del proyecto han sido separados en mano de obra y equipos y software informáticos utilizados para el cálculo computacional del proyecto. Estos costes forman parte de los presupuestos parciales, que en conjunto forman el presupuesto final del proyecto.

Los equipos que han sido necesarios para la realización del proyecto han sido utilizados de los existentes en el Departamento de máquinas y motores térmicos (CMT). Todos los recursos que han sido utilizados en el CMT, ya que no han sido adquiridos para la realización del presente proyecto, se calculará la amortiguación en relación al uso empleado para el proyecto.

Para la redacción del presupuesto se ha dividido los costes según su origen de manera que el sumatorio de los presupuestos parciales será el resultado final del presupuesto. Estos costes serán los relacionados con mano la de obra, donde se cuantificará las horas trabajadas en el proyecto tanto por el alumno como por el tutor del proyecto, y los relacionados con los equipos y software utilizados. Una vez se haya sumado los presupuestos parciales se le sumara el 21 % equivalente al impuesto sobre el valor añadido (I.V.A) y el 6% equivalente a los costes indirectos.

El coste de amortización se calcula de la siguiente manera:

$$amort = \frac{VC - VR}{n}$$

Dónde:

- *Amort*: amortización [€/año]
- *VC*: valor de compra [€]
- *VR*: valor residual al cabo del tiempo de amortización [€]
- *n*: Periodo de amortización [años]

La tasa horaria se calcula:

$$t_h = \frac{amort}{h}$$

Dónde:

- $t_h$ : tasa horaria [ €/hora]
- *h*: horas [h]

## 1.1 ESTADO DE MEDICIONES

En este apartado se especificará los recursos que han sido necesarios para la realización de Trabajo de Final de Grado:

- Equipos informáticos (tabla 1).

Descripción	unidades
Ordenador portátil HP Pavilion dv6	1
Estación de cálculo	1

Tabla 10. Equipos informáticos

- Licencias de software (tabla 2).

Descripción	unidades
Licencia de Converge v2.4	1
Licencia de EnSight 10.2	1
Licencia de Microsoft office 2010	1

Tabla 11. Licencias de software

- Personal para el desarrollo del trabajo (tabla 3).

Descripción	unidades
Alumno	1
Tutor del proyecto	1

Tabla 12. Personal para el trabajo

## 1.2 PRESUPUESTOS PARCIALES

### 1.2.1 Mano de obra

Los costes asociados a la mano de obra son el salario de las personas involucradas en el trabajo de campo. En este caso han sido el tutor D. Antonio Gil Megías asociado al Departamento de "CFD" del CMT y un estudiante del último año del grado de Ingeniería Mecánica.

	Unidades [h]	Coste unitario [€/h]	Importe total [€]
Tutor	20	60	1200
Alumno	120	20	2400
Total	3600 €		

**Tabla 13. Presupuesto parcial de mano de obra**

Por tanto, el coste total de la mano de obra en este proyecto es de **TRES MIL SEISCIENTOS EUROS.**

### **1.2.2 Equipos informáticos**

En este apartado se incluyen los costes relacionados con el mantenimiento y alquiler de los aparatos utilizados para llevar a cabo el proyecto. Dado que es un proyecto no experimental, se incluyen los dos ordenadores con los que se ha realizado el trabajo. Sus características son las siguientes:

#### **Ordenador HP Pavilion dv6**

El ordenador personal de usuario consta de un procesador de 2.3 GHz Intel Core i7, una memoria RAM de 8GB con tarjeta gráfica NVIDIA GeForce 630M y Windows 7 como sistema operativo. Este ordenador se utilizó básicamente para la realización y redacción del proyecto de final de grado.

#### **Ordenador Departamento de Motores Térmicos del CMT**

El ordenador con el que se han realizado los procesos iterativos y cálculos presenta un procesador Intel Core i7 de 2.80 GHz y memoria RAM de 8 GB, siendo su sistema operativo Windows 8.1. En este ordenador se ha llevado a cabo el estudio completo del motor mediante el software GT-Power v7.5. y sus derivados (GT-ISE y GT-POST).

En cuanto a la amortización del portátil, se va a calcular en base al precio de compra (974.9 €), su tasa de amortización (4 años) y su valor residual con respecto a su valor de compra (0.15)

$$amort. portatil = \frac{(1-0.15)*974.9}{4} = 207.16 \text{ €/año}$$

En cuanto a la amortización del ordenador del CMT, se va a calcular en base al precio de compra (5000 €), su tasa de amortización (1 año) y su valor residual con respecto a su valor de compra (0.15).

$$amort. ordenador = \frac{(1-0.85)*5000}{1} = 750 \text{ €/año}$$

En este apartado también se ha añadido el material fungible utilizado durante la realización del proyecto. Actualmente el coste eléctrico del kW es de 0.125 €/KWh. La potencia utilizada por el portátil es de 50 W, por lo tanto, el coste del material fungible es el siguiente:

$$E = 50 * 360 = 18000 \frac{W}{año}$$

$$Coste material fungible = 18000 * 0.125 = 2.7 \text{ €}$$

Descripción	unidades	Importe total [€]
Portátil HP Pavilion dv6	1	207,16
Ordenador CMT	1	750
Material Fungible	1	2,7
Total	-	959.86

Tabla 14. Presupuesto parcial equipos informáticos

Por tanto, el coste total de los equipos informáticos en este proyecto es de **NOVECIENTOS CINCUENTA Y NUEVE EUROS CON OCHENTA Y SEIS CENTIMOS.**

### 1.3.3 Licencias de software

Este apartado se muestra las amortizaciones de las licencias que se han utilizado. Considerando el coste total de las licencias y dividiéndolo por el periodo de realización del proyecto se obtendrá el Valor de Amortización Anual. Teniendo en cuenta que la duración del trabajo ha sido de un año, se puede obtener la amortización total del software utilizado.

Las licencias necesarias para la realización del proyecto han sido: Microsoft office, Converge v2.4 y EnSight 10.2.

Descripción	unidades	Importe total [€]
Licencia de Converge v2.4	1	1900
Licencia de EnSight 10.2	1	0
Licencia de Microsoft office 2010	1	115
Total	-	2015

Tabla 15. Presupuesto parcial licencias de software

Por tanto, el coste total las licencias de software en este proyecto es de **DOS MIL QUINCE EUROS**.

### 1.3 PRESUPUESTO TOTAL

A partir de los presupuestos parciales de cada uno de los apartados anteriores se calcula el presupuesto total del proyecto. Para ello, primero se sumará el coste relacionado a la mano de obra, la amortización de los equipos y la amortización de licencias. Una vez calculado este aspecto, se aplicará el Impuesto de Valor Añadido (IVA) y se obtendrá el coste total del proyecto. Se recuerda, que para este proyecto se aplica el IVA general vigente hasta la fecha, el cual supone un 21% del total.

<b>PRESUPUESTO TOTAL</b>		
Descripción	Cuantía	Unidades
Presupuesto parcial de mano de obra	3600,00	€
Presupuesto parcial de equipos informáticos	959,86	€
Presupuesto parcial de licencias de software	2015,00	€
<b>SUBTOTAL</b>	6574,86	€
Costes imprevistos (5%)	328,74	€
<b>TOTAL NETO</b>	6903,60	€
IVA (21%)	1449,76	€
<b>TOTAL</b>	8353,36	€

Tabla 16. Presupuesto total

Por tanto, el coste total del presupuesto para la realización del proyecto es de **OCHO MIL TRESCIENTOS CINQUENTA Y TRES EUROS CON TREINTA Y SEIS CÉNTIMOS**.

