



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO
DEPARTAMENTO DE MÁQUINAS Y MOTORES TÉRMICOS

ESTUDIO DEL IMPACTO DEL USO DE PRE-CATALIZADOR DE OXIDACIÓN PRE- TURBO EN LA EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DE CO Y HC

TRABAJO DE FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA MECÁNICA

AUTOR: ANA BELÉN FERRER REDONDO
TUTOR: DR. PEDRO PIQUERAS CABRERA

VALENCIA, SEPTIEMBRE 2019

Agradecimientos

En estas líneas que continúan pretendo mostrar mi agradecimiento a todas las personas que de una forma u otra han hecho posible la redacción de este trabajo.

En primer lugar, me gustaría mostrar mi agradecimiento al Departamento de Máquinas y Motores Térmicos, en especial al tutor de este trabajo de fin de grado, Pedro Piqueras Cabrera, por haber confiado en mí para el desarrollo de este proyecto y haberme mostrado más en profundidad el mundo de los sistemas de postratamiento. A María José Ruiz, con la que he compartido la mayor parte del tiempo, por haberme dedicado parte de tu tiempo en transmitirme las nociones que hoy sé, pero también por haber sido un gran apoyo personal durante la realización de este proyecto y tomarte mis logros como si fueran también los tuyos.

A mis compañeros de despacho, porque me he sentido como una más del despacho del tercero desde el primer momento.

A María, por ser mi otro gran apoyo incondicional dentro del departamento, por compartir las penas y alegrías.

A mis compañeros y compañeras de carrera, que después de estos cuatro años la palabra amistad se queda corta, habéis hecho que la carrera sea mucho más llevadera e incluso divertida.

Agradeceros en el sentido más personal a vosotros, papá y mamá, por haberme inculcado los valores de la constancia y esfuerzo que me han traído hasta aquí. Gracias por haber creído en mí hasta cuando yo no lo hacía, sin vuestro apoyo no hubiera sido posible. A ti, Jaime, mi hermano, por intentar alegrarme las tardes de estudio y hacer que el agobio fuera menor. A ti, abuelo, porque tu mayor preocupación es que yo acabe la carrera.

A Paqui, Concha, Eugenia y Marién, por haber sido mujeres ejemplo durante mi trayectoria académica, pero sobre todo a ti Paqui, por haberme transmitido tu amor por la tecnología, sin ello hoy no hubiera llegado hasta aquí.

Por último, a Ignacio Lezcano, mi profesor del colegio por haberme transmitido muchos de los valores que han hecho que hoy esté donde estoy y enseñado tantas cosas. “Uno recuerda con aprecio a sus maestros brillantes, pero con gratitud a los que tocaron nuestros sentimientos”.

Resumen

En el presente trabajo se recoge el estudio realizado para evaluar el impacto que tiene ubicar un catalizador de oxidación diésel aguas arriba de la turbina frente a la configuración estándar ubicada aguas debajo de la misma, en términos de eficiencia de conversión de monóxido de carbono e hidrocarburos.

Para estudiar dicho impacto se dispone de ensayos experimentales de trabajos previos que han sido analizados con ayuda de herramientas de modelado. Para ello se ha usado un modelo de valor medio de catalizador de oxidación, realizando una calibración del mismo partiendo de la información experimental, que sirve como base para analizar y explorar la configuración propuesta. Finalmente, se realiza un estudio de dimensionado para evaluar su capacidad de mejora mediante un redimensionamiento del pre-catalizador.

Índice

I. MEMORIA

1.	INTRODUCCIÓN	34
1.1.	MOTIVACIÓN	34
1.2.	OBJETIVO DEL TRABAJO	34
1.3.	ANTECEDENTES	35
2.	MARCO TEÓRICO	36
2.1.	EMISIONES CONTAMINANTES EN MOTORES DIÉSEL.....	36
2.1.1.	<i>Formación y efectos de los óxidos de nitrógeno</i>	37
2.1.2.	<i>Formación y efectos de las partículas</i>	37
2.1.3.	<i>Formación y efectos del monóxido de carbono</i>	38
2.1.4.	<i>Formación y efectos de los hidrocarburos</i>	38
2.1.5.	<i>Otros contaminantes</i>	39
2.1.6.	<i>Parámetros para la cuantificación de emisiones contaminantes</i>	39
2.2.	EVOLUCIÓN DE LA NORMATIVA DE LAS EMISIONES CONTAMINANTES	40
2.3.	SISTEMAS DE POSTRATAMIENTO.....	41
2.3.1.	<i>Filtros físicos</i>	42
2.3.2.	<i>Filtros químicos</i>	43
2.3.3.	<i>Reactores catalíticos</i>	44
2.3.3.1.	<i>Reactores catalíticos de reducción</i>	44
2.3.3.2.	<i>Reactores catalíticos de oxidación</i>	45
2.3.4.	<i>Efecto de la ubicación del sistema de postratamiento</i>	48
3.	HERRAMIENTAS DE TRABAJO	50
3.1.	MODELO.....	50
3.1.1.	<i>Modelo de pérdida de presión</i>	51
3.1.2.	<i>Modelo de transmisión de calor</i>	52
3.1.3.	<i>Modelo químico</i>	54
3.2.	ENSAYOS EXPERIMENTALES	57
3.3.	CALIBRACIÓN DEL MODELO	60
3.3.1.	<i>Calibración del modelo de pre-DOC</i>	60
3.3.2.	<i>Calibración del modelo de DOC</i>	63
4.	ANÁLISIS DE RESULTADOS	65
4.1.	WLTC FRÍO	66
4.1.1.	<i>Emisiones y eficiencias acumuladas durante el ciclo</i>	66
4.1.2.	<i>Pre-catalizador de oxidación diésel: Pre-DOC</i>	70
4.1.3.	<i>Catalizador de oxidación diésel:DOC</i>	72
4.2.	WLTC CALIENTE.....	75
4.2.1.	<i>Emisiones y eficiencias acumulativas durante el ciclo</i>	75
4.2.2.	<i>Pre-catalizador de oxidación diésel: Pre-DOC</i>	78
4.2.3.	<i>Catalizador de oxidación diésel: DOC.</i>	81
4.3.	ESTUDIO PARAMÉTRICO DEL PRE-DOC	84
4.3.1.	<i>WLTC frío</i>	85
4.3.2.	<i>WLTC caliente</i>	87
5.	CONCLUSIONES	89

6.	TRABAJOS FUTUROS	90
	REFERENCIAS.....	91

II. PRESUPUESTO

1.	PRESUPUESTOS PARCIALES	94
1.1.	COSTE DE MANO DE OBRA	94
1.2.	COSTE DE AMORTIZACIÓN DE LOS EQUIPOS Y LICENCIAS DE SOFTWARE	94
1.3.	COSTE DE MATERIAL CONSUMIDO	95
1.4.	COSTES INDIRECTOS.....	96
2.	PRESUPUESTO GLOBAL.....	96

III. PLIEGO DE CONDICIONES

1.	CONDICIONES TÉCNICAS	100
2.	CONDICIONES GENERALES	101
2.1.	ORDENANZA DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO.....	101
2.2.	DISPOSICIONES MÍNIMAS DE SEGURIDAD Y SALUD RELATIVAS AL TRABAJO CON EQUIPOS QUE INCLUYEN PANTALLAS	102

Índice de figuras

FIGURA 2.1. COMPOSICIÓN DE LOS GASES DE ESCAPE [3].	36
FIGURA 2.2. ESQUEMA DEL SISTEMA DEL POSTRATAMIENTO DEL MOTOR DIÉSEL.	41
FIGURA 2.3. PROCESO DE FILTRADO Y ESTRUCTURA DEL DPF [5].	42
FIGURA 2.4. ESQUEMA SIMPLIFICADO DE UN CATALIZADOR DE REDUCCIÓN SELECTIVA [7].	45
FIGURA 2.5. ESTRUCTURA DE UN DOC [8].	46
FIGURA 2.6. ESTRUCTURA DE LAS CELDAS MÁS COMUNES DE MONOLITO METÁLICO Y CERÁMICO [9].	47
FIGURA 2.7. ESTRUCTURA INTERNA DE UN DOC.	47
FIGURA 2.8. PRE-CATALIZADOR DE OXIDACIÓN DIÉSEL DEL ESTUDIO.	48
FIGURA 3.1. ESQUEMA DEL MODELO DE DOC [12].	51
FIGURA 3.2. ESQUEMA NODAL DEL MONOLITO [12].	53
FIGURA 3.3. RESISTENCIA TÉRMICA EQUIVALENTE DE LA SUPERFICIE.	53
FIGURA 3.4. ESQUEMA DE LA INSTALACIÓN DE LA SALA DE ENSAYOS.	58
FIGURA 3.5. RESULTADOS EXPERIMENTALES DEL PAR, VELOCIDAD DEL MOTOR Y ACELERADOR EN WLTC FRÍO.	59
FIGURA 3.6. SECCIÓN DE LA ESTRUCTURA DE LOS CANALES DEL PRE-DOC.	61
FIGURA 3.7. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DEL MODELO DE PRE-DOC FRENTE A LAS DEL EXPERIMENTO EN LOS CICLOS EN FRÍO CON LA CALIBRACIÓN FINAL.	63
FIGURA 3.8. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DEL MODELO DE PRE-DOC FRENTE A LAS DEL EXPERIMENTO EN LOS CICLOS EN CALIENTE CON LA CALIBRACIÓN FINAL.	63
FIGURA 3.9. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DEL MODELO DE DOC FRENTE A LAS DEL EXPERIMENTO EN LOS CICLOS EN FRÍO CON LA CALIBRACIÓN FINAL.	64
FIGURA 3.10. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DEL MODELO DE DOC FRENTE A LAS DEL EXPERIMENTO EN LOS CICLOS EN CALIENTE CON LA CALIBRACIÓN FINAL.	64
FIGURA 4.1: CONFIGURACIÓN PRE-TURBO.	65
FIGURA 4.2: CONFIGURACIÓN BASELINE.	65
FIGURA 4.3. EMISIONES ACUMULADAS DE CO A LA SALIDA DEL MOTOR (A), A LA ENTRADA DEL DOC (B) Y A LA SALIDA DEL DOC (C) DURANTE WLTC FRÍO.	67
FIGURA 4.4. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN ACUMULADAS DE CO DURANTE WLTC FRÍO.	67
FIGURA 4.5. EMISIONES ACUMULADAS DE HC A LA SALIDA DEL MOTOR (A), A LA ENTRADA DEL DOC (B) Y A LA SALIDA DEL DOC (C) DURANTE WLTC FRÍO.	68
FIGURA 4.6. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN ACUMULADAS DE HC DURANTE WLTC FRÍO.	69
FIGURA 4.7. EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DE CO DEL PRE-DOC PARA WLTC FRÍO.	70
FIGURA 4.8. EMISIONES INSTANTÁNEAS DE CO EN EL PRE-DOC PARA WLTC FRÍO.	70
FIGURA 4.9. TEMPERATURAS EN EL PRE-DOC PARA WLTC FRÍO.	70
FIGURA 4.10. EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DE HC DEL PRE-DOC PARA WLTC FRÍO.	71
FIGURA 4.11. EMISIONES INSTANTÁNEAS DE HC EN EL PRE-DOC PARA WLTC FRÍO.	71

FIGURA 4.12. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DE CO DEL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO Y BASELINE PARA WLTC FRÍO.....	72
FIGURA 4.13. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE CO EN EL DOC CONFIGURACIÓN BASELINE EN WLTC FRÍO.....	72
FIGURA 4.14. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE CO EN EL DOC PARA CONFIGURACIÓN PRE-TURBO EN WLTC FRÍO.....	72
FIGURA 4.15. TEMPERATURAS DE ENTRADA AL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO Y BASELINE EN WLTC FRÍO.....	73
FIGURA 4.16. TEMPERATURAS DE SALIDA DEL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO Y BASELINE EN WLTC FRÍO.....	73
FIGURA 4.17. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DE HC DEL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO Y BASELINE PARA WLTC FRÍO.....	74
FIGURA 4.18. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE HC EN EL DOC EN CONFIGURACIÓN BASELINE PARA WLTC FRÍO.....	74
FIGURA 4.19. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE HC EN EL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO PARA WLTC FRÍO.....	74
FIGURA 4.20. EMISIONES ACUMULADAS DE CO A LA SALIDA DEL MOTOR (A), A LA ENTRADA DEL DOC (B) Y A LA SALIDA DEL MOTOR (C) DURANTE WLTC CALIENTE.....	75
FIGURA 4.21. EFICIENCIAS ACUMULADAS DE CO DURANTE WLTC CALIENTE.....	76
FIGURA 4.22. EMISIONES ACUMULADAS DE HC A LA SALIDA DEL MOTOR (A), A LA ENTRADA DEL DOC (B) Y A LA SALIDA DEL MOTOR (C) DURANTE WLTC CALIENTE.....	77
FIGURA 4.23. EFICIENCIAS ACUMULADAS DE HC DURANTE WLTC CALIENTE.....	78
FIGURA 4.24. EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DEL CO DEL PRE-DOC PARA WLTC CALIENTE.....	78
FIGURA 4.25. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE CO EN EL PRE-DOC PARA WLTC CALIENTE.....	79
FIGURA 4.26. TEMPERATURAS EN EL PRE-DOC PARA WLTC CALIENTE.....	79
FIGURA 4.27. EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DE HC DEL PRE-DOC PARA WLTC CALIENTE.....	80
FIGURA 4.28. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE HC EN EL PRE-DOC PARA WLTC CALIENTE.....	80
FIGURA 4.29. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DEL DOC PARA WLTC CALIENTE.....	81
FIGURA 4.30. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE CO EN EL DOC EN CONFIGURACIÓN BASELINE PARA WLTC CALIENTE.....	81
FIGURA 4.31. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE CO EN EL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO PARA WLTC CALIENTE.....	81
FIGURA 4.32. TEMPERATURAS DE ENTRADA EL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO Y BASELINE PARA WLTC CALIENTE.....	82
FIGURA 4.33. TEMPERATURAS DE SALIDA AL DOC EN CONFIGURACIÓN PRE-TURBO Y BASELINE PARA WLTC CALIENTE.....	82
FIGURA 4.34. EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DE HC DEL DOC PARA WLTC CALIENTE.....	83
FIGURA 4.35. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE HC EN EL DOC CONFIGURACIÓN BASELINE PARA WLTC CALIENTE.....	83
FIGURA 4.36. EMISIONES INSTANTÉNEAS DE HC EN EL DOC CONFIGURACIÓN PRE-TURBO PARA WLTC CALIENTE.....	83
FIGURA 4.37. EVOLUCIÓN DE LAS EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DE CO (A) Y HC (B) EN FUNCIÓN DEL VOLUMEN PARA WLTC FRÍO.....	85

FIGURA 4.38. EVOLUCIÓN DEL TIEMPO DE RESIDENCIA (A), CAPACIDAD TÉRMICA (B), TEMPERATURA DE PARED (C) Y TÉRMINO DE INHIBICIÓN (D) EN FUNCIÓN DEL VOLUMEN PARA WLTC FRÍO. 85

FIGURA 4.39. EVOLUCIÓN DE LAS EFICIENCIAS DE CONVERSIÓN DE CO (A) Y HC (B) EN FUNCIÓN DEL VOLUMEN PARA WLTC CALIENTE 87

FIGURA 4.40. EVOLUCIÓN DEL TIEMPO DE RESIDENCIA (A), CAPACIDAD TÉRMICA (B), TEMPERATURA DE PARED (C) Y TÉRMINO DE INHIBICIÓN (D) EN FUNCIÓN DEL VOLUMEN PARA WLTC CALIENTE..... 87

Índice de tablas

TABLA 2.1. TABLA RESUMEN DE LOS LÍMITES DE EMISIONES PARA VEHÍCULOS LIGEROS CON MOTOR DIÉSEL [G/KM] [4].....	41
TABLA 3.1. TIEMPO COMPUTACIONAL DEL MODELO DE DOC EN LA SIMULACIÓN DE CICLO WLTC REFERIDO EN TIEMPO REAL [12].	50
TABLA 3.2. CONSTANTES CINÉTICAS DE LOS TÉRMINOS DE INHIBICIÓN.....	57
TABLA 3.3. CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES DEL MOTOR.	58
TABLA 3.4. CAPACIDAD TÉRMICA DEL SUSTRATO METÁLICO [13].	60
TABLA 3.5. DIMENSIONES GEOMÉTRICAS DEL PRE-CATALIZADOR.....	61
TABLA 3.6. AJUSTE FINAL DE LOS PARÁMETROS QUÍMICOS PARA EL MODELO DE PRE-DOC.....	62
TABLA 3.7. AJUSTE FINAL DE LOS PARÁMETROS QUÍMICOS PARA EL MODELO DE DOC.	63
TABLA 4.1. FASES WLTC.	66
TABLA 4.2. VARIACIÓN DEL VOLUMEN DEL PRE-DOC PARA EL ESTUDIO PARAMÉTRICO	84

Documento I:

MEMORIA

1. Introducción

En este apartado se presentan las causas que han llevado al tema de este trabajo de fin de grado, así como las investigaciones y trabajos que han sido fuente de ayuda e inspiración para su desarrollo, y los objetivos del mismo.

1.1. Motivación

La invención de los motores de combustión interna alternativos como tal, se puede fijar en 1876 para el motor Otto o encendido provocado (MEP), con la patente de Nicolaus Otto y en 1892 para el motor Diesel o de encendido por compresión (MEC). A partir de entonces han ido evolucionando hasta como se conocen hoy en día. Estas mejoras se han basado en la optimización de:

- Rendimiento. El rendimiento de los motores ha evolucionado desde valores muy bajos, llegando a alcanzar valores máximos del 55%. Estos valores son dependientes de muchos factores como, por ejemplo, el punto de operación, la energía química del combustible, etc.
- Consumo de combustible.
- Emisiones contaminantes.

El campo que ha marcado en los últimos años la evolución en el diseño de los motores ha sido la reducción de las emisiones contaminantes, ya que, la normativa ha ido cambiando continuamente y se ha convertido en más restrictiva.

La problemática actual con las emisiones ha provocado que el motor diésel quiera ser retirado como forma de propulsión de los vehículos, siendo sustituidos por los motores gasolina o los eléctricos. Este hecho ha forzado la investigación y el desarrollo de nuevos sistemas de postratamiento de los gases de escape, la modificación de estos y nuevas configuraciones de acoplamiento en la línea de escape.

Entre estas nuevas configuraciones, surge la posibilidad de colocar los sistemas de postratamiento aguas arriba de la turbina, es decir, entre el colector de escape del motor y la turbina; siendo esta localización el punto de partida de este estudio.

1.2. Objetivo del trabajo

El objetivo principal del presente trabajo de fin de grado es la evaluación de la influencia de un catalizador de oxidación diésel de flujo continuo situado aguas arriba de la turbina (pre-DOC), en la eficiencia de conversión del monóxido de carbono y de los hidrocarburos.

Para la realización del estudio se ha añadido el pre-DOC en la línea de postratamiento en la que ya se encontraba el DOC en su configuración estándar, es decir, ambos equipos han trabajado simultáneamente para finalmente poder comparar entre ambas configuraciones y analizar si la instalación del pre-DOC proporciona un aumento de la eficiencia de conversión de los contaminantes y, por lo tanto, es una solución viable.

El estudio se lleva a cabo mediante el modelado y posterior ajuste del modelo del DOC a los datos experimentales, por lo que el objetivo implica otros secundarios como la evaluación del pre-DOC a través de los resultados experimentales en combinación con el modelado.

Como objetivo final, se encuentra el estudio de dimensionado, a partir del cual se espera analizar la influencia de las variaciones de dimensiones del dispositivo y explorar la capacidad de mejora que permita la minimización de las emisiones contaminantes, concretamente el CO y HC, contaminantes en los cuales el catalizador tiene influencia. Mediante esta minimización se pretende cumplir con los límites de emisiones impuestos por la normativa EURO actual y futura, normativa que se explicará en el apartado 2.2. *Evolución de la normativa de las emisiones contaminantes* del presente documento.

1.3. Antecedentes

Este trabajo se puede englobar dentro del ámbito de investigación de otros trabajos que han dado lugar desde artículos hasta tesis doctorales. Se parte de estudios de los sistemas de postratamiento realizados por el Instituto Universitario de Investigación CMT-Motores Térmicos.

Concretamente como estudios antecesores al que en este trabajo se va a desarrollar, se encuentran los relacionados con el catalizador de oxidación diésel en la configuración estándar, aguas abajo de la turbina y con el filtro de partículas diésel situado aguas arriba (pre-DPF) y aguas abajo de la turbina. Como consecuencia de estos estudios se tiene el modelo VEMOD del catalizador de oxidación diésel en la configuración aguas debajo de la turbina, a partir del cual se desarrolla el modelo de DOC utilizado en el estudio. Entre estos trabajos se incluyen las tesis doctorales de Pedro Piqueras [1] y de Óscar García [2].

2. Marco teórico

En este apartado se trata de forma teórica la formación de las emisiones contaminantes de los motores diésel y la problemática que conllevan. Además, se expone la evolución que ha sufrido la normativa que regula estas emisiones y los sistemas de postratamiento que se utilizan para la reducción de las emisiones contaminantes y el cumplimiento de la normativa.

2.1. Emisiones contaminantes en motores diésel

La energía que se utiliza para el funcionamiento de los motores diésel proviene del proceso de combustión. Todo proceso de combustión tiene asociado la emisión de sustancias contaminantes. Aproximadamente el 60% de las emisiones contaminantes producidas son debidas al transporte, por tanto, la reducción de contaminantes es el elemento que más influencia tiene en el diseño de un motor de combustión. La problemática actual con las emisiones generada por los motores diésel deriva del efecto negativo que provocan en el medio ambiente y salud.

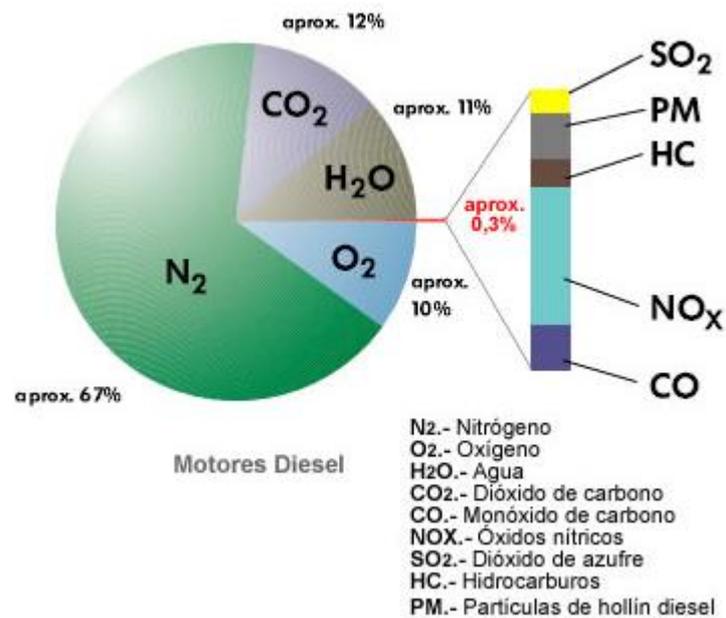


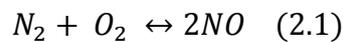
Figura 2.1. Composición de los gases de escape [3].

A continuación, se detallan los principales contaminantes derivados del proceso de combustión.

2.1.1. Formación y efectos de los óxidos de nitrógeno

El término NO_x engloba de forma general a los óxidos de nitrógeno, entre los que se encuentran el óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO_2). Se trata de uno de los contaminantes gaseosos que se forman en el motor, mayoritariamente, se forma el primero que se ha mencionado, el NO , ya que, *“su cinética química es dominante frente a la del NO_2 ”* [4]. En algunas ocasiones, se forman cantidades importantes de NO_2 debido a la conversión de NO a NO_2 .

Existen varios mecanismos de formación del NO : térmico, súbito y vía N_2O ; sin embargo, uno predomina frente al resto, se trata del mecanismo térmico. El mecanismo térmico tiene lugar a altas temperaturas aproximadamente del orden de 2000 K, debido a la oxidación del nitrógeno que se encuentra en el aire que entra en la cámara de combustión [4], según la reacción:



Por lo tanto, la formación de NO es un proceso dependiente de la temperatura, del nitrógeno y del oxígeno.

Los NO_x producen efectos perjudiciales tanto en el medio ambiente como en la salud. En el ámbito de la salud, estos contaminantes pueden producir desde dolor de cabeza, irritación del sistema respiratorio, disminución de la capacidad pulmonar, hasta daños irreparables en el tejido pulmonar, en caso de exposiciones prolongadas. En lo referente al medio ambiente, afecta a las plantas y es el precursor de la lluvia ácida y del smog fotoquímico al reaccionar con los rayos UV. De manera indirecta afecta a la arquitectura, ya que el ácido de la lluvia ácida deteriora las edificaciones.

2.1.2. Formación y efectos de las partículas

Partícula es toda materia en estado líquido o sólido que de forma pulverizada está presente en los gases de escape. La composición característica de las partículas emitidas por un motor diésel es: hollín (31-41%), hidrocarburos no quemados (7%), sulfatos y agua (14%), aceite sin quemar (20-40%) y cenizas y sustancias procedentes de aditivos (8-13%), aunque según las condiciones de funcionamiento puede variar.

La formación de las partículas parte de la formación de hollín en las zonas ricas de la cámara de combustión donde se alcancen temperaturas elevadas y haya poca presencia de oxígeno, en esta zona el combustible se descompone quedando convertido en carbón. Una vez formado el hollín, se le empiezan a agregar hidrocarburos no quemados provocando el crecimiento de la partícula.

Puede que sea el contaminante más visible, ya que en el ambiente provoca suciedad, llegando a generar en los núcleos urbanos nubes con efecto parecido a la niebla. Los problemas de salud que pueden causar en el ser humano residen en su tamaño. La

peligrosidad de ser inhalada es inversamente proporcional a su tamaño; siendo las más peligrosas las más pequeñas, ya que pueden penetrar profundamente en el aparato respiratorio llegando a causar cáncer.

2.1.3. Formación y efectos del monóxido de carbono

El monóxido de carbono (CO) es otro de los contaminantes gaseosos que se produce en el motor. El CO se forma a causa de la combustión incompleta del combustible que contiene carbono o hidrocarburo, es el paso intermedio de la oxidación de este. La formación del monóxido de carbono depende fundamentalmente del dosado de la mezcla, es decir, de la relación aire/combustible que entra en la cámara de combustión. Aunque el CO se forma principalmente en condiciones de mezcla rica, también puede originarse en mezclas pobres muy heterogéneas, como en el caso del motor diésel [3]. Cabe destacar que las emisiones de monóxido de carbono son mayores en los motores gasolina, ya que trabajan con dosados cercanos al estequiométrico y ricos.

El monóxido de carbono, como tal no tiene tan graves consecuencias para el medio ambiente como las que tiene para la salud de las personas. Si se habla del efecto que produce en el medio ambiente, es el precursor de uno de los gases de efecto invernadero, el dióxido de carbono, que origina el calentamiento global. Al reaccionar el monóxido de carbono, ya emitido, con el oxígeno se acaba de oxidar, produciendo una reacción exotérmica que libera mucho calor y dando como producto el dióxido de carbono. Cabe destacar que la reacción de oxidación del CO es lenta, a no ser que esté presente el radical OH, de ese modo la reacción tiene lugar de la siguiente manera:



El CO es un gas incoloro, inodoro y muy tóxico, por lo que la exposición a esta sustancia gaseosa puede traer consecuencias muy graves para la salud. La peligrosidad viene dada en función del tiempo de exposición. Penetra en el cuerpo mediante la respiración, una vez dentro, puede reaccionar con la sangre impidiendo que el oxígeno sea transportado por la hemoglobina, provocando mareos o incluso la muerte en los peores casos.

2.1.4. Formación y efectos de los hidrocarburos

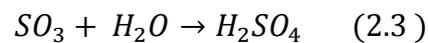
Los hidrocarburos no quemados o parcialmente quemados (HC) son otro tipo de contaminantes gaseosos que se producen por la combustión incompleta del combustible, igual que ocurre con el monóxido de carbono, la composición heterogénea de la mezcla influye en su formación. Los hidrocarburos se pueden clasificar en totales, aromáticos policíclicos y carbonílicos.

Según el tipo de hidrocarburo producen unos efectos u otros en la salud, los hay que son inofensivos, otros que producen alteraciones en el sistema nervioso central y otros que pueden llegar a causar cáncer. En la naturaleza producen alteraciones en los ecosistemas y hábitats de los organismos.

2.1.5. Otros contaminantes

Los óxidos de azufre (SO_x) son otros contaminantes gaseosos que se producen en menor medida en el proceso de combustión. La presencia de SO_x en los gases de escape es debida principalmente a la existencia de azufre en los combustibles, el azufre al entrar en contacto con el oxígeno durante la combustión reacciona produciendo SO_x . Principalmente se produce dióxido de azufre (SO_2) y en menores cantidades el trióxido de azufre (SO_3) al oxidarse el SO_2 .

Los efectos que provocan en la salud humana afectan sobre todo al sistema respiratorio, produciendo asma, bronquitis crónica. En casos de una exposición prolongada puede llegar provocar la muerte, y es causa del aumento de la morbilidad y mortalidad. En el medio ambiente, actúan como precursores de la lluvia ácida cuando el SO_3 reacciona con la humedad del ambiente, ya que se forma el ácido sulfúrico:



La presencia del azufre en el combustible, además de causar los efectos mencionados en la salud y en el medio ambiente, puede llegar a ser un problema para los catalizadores, ya que puede causar su desactivación.

Actualmente, las emisiones de SO_x producidas en los motores han disminuido ya que el contenido de azufre en el combustible ha disminuido a causa de la implantación de nuevas leyes, que se verán en el apartado 2.3, Normativa de emisiones.

2.1.6. Parámetros para la cuantificación de emisiones contaminantes

Existen diversas formas de cuantificar las emisiones contaminantes, en este apartado se exponen las más comunes:

- Partes por millón [ppm]. Es una unidad de medida de concentración, hace referencia a la cantidad de unidades que hay del contaminante por cada millón de unidades de los gases de escape.
- Fracción molar [-]. Es una unidad de medida de concentración, hace referencia a la cantidad de moles que hay del contaminante respecto a los moles totales de los gases de escape.

$$X_i = \frac{n_i}{n_T} \quad (2.4)$$

- Fracción másica [-]. Se define como la relación existente entre la masa del contaminante frente a la totalidad de la masa del conjunto de los gases de escape.

$$Y_i = \frac{m_i}{m_T} \quad (2.5)$$

- Índice de emisiones respecto al combustible [g/kg_{fuel}]. Esta forma de cuantificar las emisiones emitidas se calcula con la relación entre la masa de contaminante que se emiten en función de la masa de combustible que se consume.

- Distancia recorrida [g/km]. Es una forma de cuantificación usada en vehículos, establece la relación entre la masa de las emisiones respecto a la distancia recorrida por el vehículo expresada en kilómetros.
- Emisiones específicas [g/kWh]. Mide la cantidad de emisiones contaminantes en función de la potencia entregada por el motor de combustión.

2.2. Evolución de la normativa de las emisiones contaminantes

Como se ha visto en el apartado anterior, las emisiones causan problemas de salud y perjudican el medio ambiente, por ello se ha ido implantando una serie de normativa y legislación que regula las emisiones contaminantes de los motores. Esta normativa se ha ido actualizando y haciendo más restrictiva a causa del crecimiento de los niveles de contaminación en las últimas décadas. A continuación, se hace un barrido desde la primera norma que se implantó en Europa para los motores diésel, la EURO 1 hasta la actual.

La emisión de contaminantes se empieza a regular con la norma EURO 1 en 1992, con ella se implanta la obligación del uso de catalizadores de oxidación en los vehículos y establece el límite de partículas emitidas (PM) en 140 g/km; en 1996 es sustituida por la EURO 2, en la que se establece una reducción notable en el límite de emisiones de monóxido de carbono. En el año 2000 entra en vigor la EURO 3, es la primera actualización de la norma que establece un límite de emisiones de los óxidos de nitrógeno, siendo este el valor de 500mg/km; siendo sustituida en 2005 por la EURO 4 que establece el valor mínimo de emisiones de monóxido de carbono más restrictivo hasta la fecha en 500 mg/km. En 2009 se implanta la EURO 5, que implica la obligación de instalar filtros de partículas diésel (DPF).

Hasta este punto, los límites han sido establecidos según los ciclos NEDC (New European Driving Cycle), a partir de 2014 con la entrada en vigor de la EURO 6, estos límites se establecen a según los ciclos WLTP (World Light Duty Test Procedure). Los WLTP simulan unas condiciones de ensayo que se aproximan más a las condiciones de conducción reales teniendo en cuenta velocidades más altas, aceleraciones y desaceleraciones más dinámicas; siendo así estos ensayos más precisos y próximos a la realidad que los anteriores.

Con la EURO 6, actualmente actualizada a la EURO 6C, se introducen medidas más restrictivas, consiguiendo una reducción del 96% en algunos de los contaminantes. Se establece la obligación del uso de catalizadores SCR para la reducción de los óxidos de nitrógeno con AdBlue para los vehículos diésel. Las emisiones de NO_x se establecen en un límite de 80 mg/km; las de partículas en 5 mg/km; las de CO no sufren modificaciones desde la EURO 4 y el conjunto de emisiones de hidrocarburos más óxidos de nitrógeno se restringen a un valor límite de 170 mg/km.

Norma	CO	HC	HC + NO _x	NO _x	PM
EURO 1	2,72	-	0,97	-	0,14
EURO 2	1	-	0,90	-	0,10
EURO 3	0,64	-	0,56	0,50	0,05
EURO 4	0,50	-	0,30	0,25	0,025
EURO 5	0,50	-	0,23	0,18	0,005
EURO 6	0,50	-	0,17	0,08	0,005

Tabla 2.1. Tabla resumen de los límites de emisiones para vehículos ligeros con motor diésel [g/km] [4]

Cabe destacar que aunque las normas EURO no contemplan los límites de emisiones de los SO_x, aunque las emisiones de estos contaminantes se han reducido notablemente desde la entrada en vigor del “Real Decreto 61/2006 que modifica el real decreto 1700/2003, que a su vez transpone la Directiva 2003/30/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, por la que se modifica la Directiva 98/70/CE (relativa a la calidad de la gasolina y el gasóleo), desde el 1 de enero de 2009 el contenido máximo de azufre en las gasolinas y en los gasóleos de automoción (clase A) no puede superar las 10 ppm”. [4]

2.3. Sistemas de postratamiento

Como se ha visto en apartado 2.1, las emisiones contaminantes son un problema a nivel mundial, para poder cumplir con los límites de emisiones contaminantes del motor diésel, impuestos por la normativa (apartado 2.2), se instalan en la línea de escape del motor una serie de sistemas de postratamiento que reducen los niveles de contaminantes emitidos.

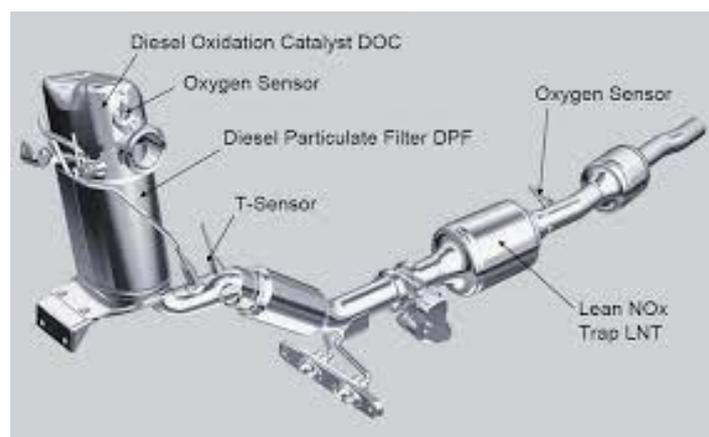


Figura 2.2. Esquema del sistema del postratamiento del motor diésel.

2.3.1. Filtros físicos

Los filtros físicos son dispositivos cuyo funcionamiento se basa en la retención de las partículas sólidas que contienen los gases de escape. Como cualquier filtro físico presentan el inconveniente de obstruirse, por lo que necesitan una regeneración periódica.

El DPF es el filtro de partículas diésel, del inglés *diesel particles filter*, está basado en el principio de funcionamiento de los filtros físicos; por lo que se trata de un dispositivo presente en la línea de postratamiento cuyo objetivo es la eliminación de las partículas de los gases de escape generadas en el proceso de combustión. El dispositivo se encuentra situado después del DOC. Se trata de un monolito cerámico, de sección circular u ovalada, formado por canales porosos que discurren paralelamente a lo largo de su longitud. El material de fabricación habitual del monolito era la cordierita, hasta que tras investigaciones se sustituyó por el carburo de silicio (SiC). El carburo de silicio presenta las ventajas frente a la cordierita de tener una temperatura de fusión y una porosidad mayor.

El filtrado se lleva a cabo gracias a la disposición de los canales que se encuentran cerrados alternativamente en los extremos del monolito, es decir, si la entrada del canal está taponada, la salida no lo está; y viceversa. El flujo de gases procedente de la salida del DOC entra al DPF por los canales abiertos, al estar la salida bloqueada es forzado a pasar a través de los poros de la pared del conducto, quedando atrapadas las partículas.

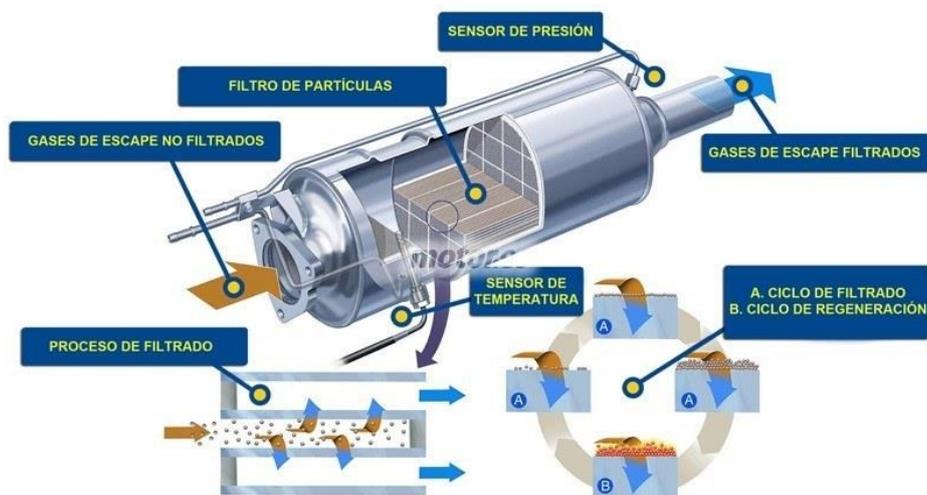


Figura 2.3. Proceso de filtrado y estructura del DPF [5].

Al estar basado en el funcionamiento de un filtro físico, presenta el problema de obstrucción debido a la deposición del hollín en las paredes impidiendo el filtrado, lo que conlleva a la saturación del dispositivo. Para solucionar este hecho, el DPF se diseña con un sistema de regeneración mediante el cual se eliminan las partículas que provocan la saturación. El problema deriva del hecho de en la conducción urbana, la temperatura de los gases de escape no llega a los 500 – 600 °C, temperatura a la cual el proceso de regeneración sería automático. Por ello se incorpora la regeneración activa, que consiste en ocasiones puntuales alcanzar las temperaturas de oxidación de las partículas mediante un aporte

térmico extra consiguiendo la liberación de los poros del monolito. Este aporte se puede realizar mediante una post-inyección de combustible en la cámara de combustión al finalizar la expansión o con una inyección directa en la línea de escape [4]. La localización posterior del DPF al DOC es debida a que el NO_2 que se forma en el DOC y el incremento de temperatura de los gases, debido al carácter exotérmico de las reacciones que ocurren en DOC, ayudan a la regeneración. Además, durante el proceso de regeneración se llegan a alcanzar temperaturas cercanas a $600\text{ }^\circ\text{C}$ que pueden producir problemas en el DOC si este se coloca después.

Actualmente, gracias a la investigación y el desarrollo se han implementado DPF catalizados mediante la incorporación de sustancias catalíticas al monolito. El DPF catalizado, además de oxidar las partículas de los gases de escape, también reducen las emisiones contaminantes gaseosas, lo que conduce a una línea de escape más compacta y económica [6].

2.3.2. Filtros químicos

Los filtros químicos son dispositivos que se utilizan como dispositivos para la oxidación de los óxidos de nitrógeno. Los NO_x se acumulan en el filtro cuando las condiciones de mezcla son pobres y se liberan más tarde cuando las condiciones de mezcla son ricas. Del mismo modo que ocurre con los filtros físicos, los filtros químicos se saturan y es necesaria una regeneración. Son una alternativa a los catalizadores de reducción que se explican en el apartado siguiente

El LNT, o Lean NO_x Tramp, es un filtro químico para la reducción de las emisiones de NO_x utilizado en motores que funcionan con mezcla pobre, como es el caso de los motores diésel. Su funcionamiento se basa en el almacenamiento mediante adsorción de los óxidos de nitrógeno en condiciones de mezcla pobre y la posterior liberación cuando las condiciones de mezcla sean ricas. Durante la etapa en la que los NO_x se almacenan en el sustrato y están en contacto con las partículas de catalizador se producen las reacciones de oxidación. Cuando ya no puede acumular más NO_x se satura y es necesaria una regeneración, para realizar esta regeneración se inyecta hidrocarburo en el escape, o en otros casos, directamente en el cilindro durante la etapa de expansión [6]. El proceso de regeneración es muy rápido, se realiza en menos de un segundo.

Este dispositivo presenta el problema de envenenamiento si el combustible utilizado contiene azufre en su composición.

El posicionamiento posterior al DOC influye de manera positiva en la eficiencia de conversión, ya que la reacción de reducción que tiene lugar en el DOC da lugar a la formación de NO_2 , que produce un aumento en esta eficiencia hasta alcanzar valores del 85%.

2.3.3. Reactores catalíticos

Se define catalizador a la sustancia que influye en la velocidad de reacción de una reacción química y la convierte en más rápida sin formar parte de los reactivos ni de los productos. Sin embargo, cuando se hace referencia a los reactores catalíticos, o simplemente catalizadores, se hace referencia al dispositivo físico que se sitúa en la línea de escape para acelerar las reacciones de oxidación o reducción de los contaminantes presentes en los gases de escape, debido a que la temperatura alcanzada en el colector de escape no ha sido suficiente para que las reacciones alcancen el equilibrio.

En términos generales, los reactores catalíticos están formados por un sustrato, que es la estructura física que realiza la función de soporte; un recubrimiento o washcoat, cuya función es aumentar el área sobre la que se deposita la sustancia catalítica, aumentando así la eficiencia de conversión y, por último, la sustancia catalítica.

Dependiendo de la función para la que están diseñados se dividen en reactores catalíticos de reducción y reactores catalíticos de oxidación.

2.3.3.1. Reactores catalíticos de reducción

Los reactores catalíticos de reducción se implementan en la línea de escape para la reducción de los óxidos de nitrógeno.

El SCR es el catalizador de reducción selectiva, del inglés Selective Catalytic Reduction, es el último de los sistemas de postratamiento incorporado a la línea de postratamiento de los gases de escape de los automóviles. Es una alternativa al LNT ya que, se trata de un reactor químico, cuya función es reducir la concentración de los óxidos de nitrógeno, dando como productos de la reacción agua y nitrógeno, mediante la inyección de un fluido. Este fluido es conocido como AdBlue® debido a la marca principal que lo comercializa y es simplemente una disolución de urea al 32,5% en agua destilada, con una temperatura de fusión de 132,5 °C y una temperatura de congelación de -11 °C. El AdBlue® se almacena en un depósito específico, posteriormente se inyecta y se deposita en la superficie del catalizador, al entrar en contacto con los gases de escape se produce la reacción, en la que los NO_x estos se pueden reducir hasta en un 90%. Hay que tener en cuenta la velocidad de inyección de la urea, ya que si se realiza a velocidades muy bajas los valores de conversión de NO_x pueden resultar inaceptablemente bajos; si por el contrario la inyección se lleva a velocidades elevadas puede ocasionar expulsiones de amoníaco a la atmósfera. Las condiciones óptimas para los SCR se enmarcan en un rango de temperaturas entre 250 y 450 °C.

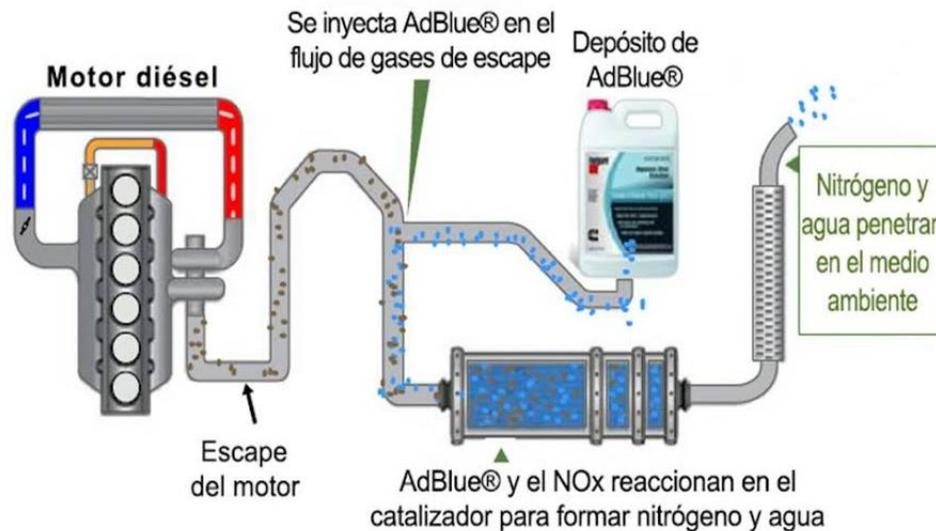


Figura 2.4. Esquema simplificado de un catalizador de reducción selectiva [7].

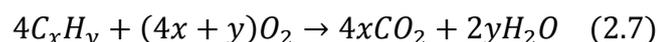
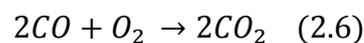
Si la temperatura de los gases es baja, entre 100 y 200 °C, presenta el inconveniente de producción nitrato de amonio que puede provocar la desactivación del catalizador. Además, al ser el sistema más complejo y de mayores dimensiones por los elementos auxiliares que utiliza para incrementar el rendimiento, su coste económico es elevado.

Del mismo modo que ocurre con el LNT, al estar posicionado después del DOC su eficiencia de conversión se ve incrementada.

2.3.3.2. Reactores catalíticos de oxidación

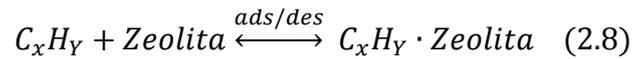
Los reactores catalíticos de oxidación están diseñados para la oxidación de los hidrocarburos no quemados y el monóxido de carbono. Este trabajo se centra en el estudio de un reactor catalítico de oxidación situado aguas arriba de la turbina.

El catalizador de oxidación diésel (DOC), del inglés Diesel Oxidation Catalyst, es un reactor catalítico de oxidación, cuyo objetivo es la oxidación del monóxido de carbono y de los hidrocarburos no quemados presentes en los gases de escape, reduciendo así las emisiones contaminantes. Las reacciones que tienen lugar en el son:



Se observa que como productos de las reacciones se obtiene agua y dióxido de carbono, ambos inocuos para la salud y no contaminantes, aunque el CO₂ actualmente está en el punto de mira por ser considerado gas precursor del efecto invernadero.

En lo relativo al HC, se debe tener en cuenta que no solo interviene el proceso de oxidación, sino que también intervienen los procesos de adsorción, cuando las temperaturas que se alcanzan no son muy altas, y de desorción:



Aprovechando las altas temperaturas de los gases de escape, la eficiencia de conversión del HC y el CO puede alcanzar valores del 90%.

En el DOC tiene lugar, aunque en menor medida, la reducción del óxido de nitrógeno que se busca deliberadamente para aumentar la eficiencia de los sistemas de reducción de los óxidos de nitrógeno, como el LNT y el SCR, y ayudar a la regeneración del DPF.

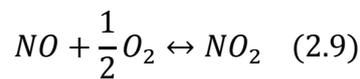


Figura 2.5. Estructura de un DOC [8].

El DOC consiste en un monolito cerámico o metálico de sección circular, formado por celdas que constituyen una estructura de panal de abejas formando canales paralelos que discurren a lo largo de toda la longitud del monolito, formando el sustrato o soporte. El cometido del sustrato es servir de soporte al recubrimiento sobre el cual se deposita el catalizador. El sustrato debe soportar altas temperaturas (superiores a los 1000 °C), tener baja inercia térmica y alta porosidad. La sección del canal o celda generalmente es cuadrada, aunque puede tener otras formas geométricas como triangular o hexagonal, dependiendo de la forma geométrica la superficie sobre la que se deposita el catalizador aumenta o disminuye, afectando a la eficiencia de conversión. En cuanto al material con el que está fabricado el soporte, se ha comentado que puede ser cerámico, fabricado normalmente de cordierita ($Al_4Mg_2O_{18}Si_5$) mediante el proceso de extrusión, o metálico, fabricado con una aleación de hierro, cromo y aluminio. Las celdas del monolito metálico suelen tener forma sinusoidal. El espesor de pared que separa los canales suele ser del orden de décimas de milímetro, ya que cuanto menor sea el espesor, menor será la inercia térmica y el DOC tardará menos tiempo en calentarse. Los sustratos metálicos tienen menor inercia térmica que los cerámicos, lo que puede reducir el tiempo de calentamiento del sustrato, por esa misma razón se enfrían antes y deben situarse lo más próximo posible al colector de escape del motor; sin embargo, los más utilizados son los cerámicos.

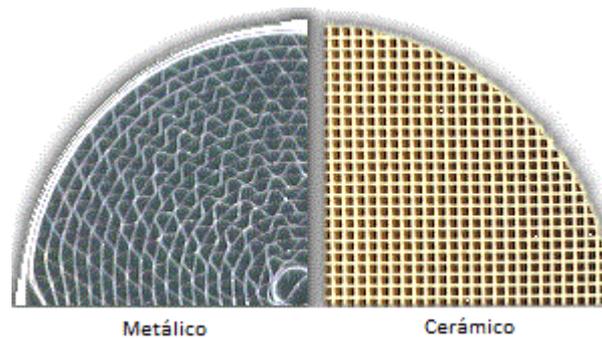


Figura 2.6. Estructura de las celdas más comunes de monolito metálico y cerámico [9].

Sobre las superficies interiores de los canales se aplica un recubrimiento poroso (washcoat). Este recubrimiento suele ser alúmina (Al_2O_3), cuyo objetivo es aumentar la superficie de contacto de los gases de escape con la sustancia catalítica, además de servir como medio de soporte de esta. El incremento del área de contacto de los gases de escape con el catalizador es posible gracias a la forma irregular que toma el washcoat al adherirse a las paredes del sustrato.

La última parte del DOC es el catalizador que acelera las reacciones de oxidación. Se trata básicamente de metales preciosos como el platino (Pt), paladio (Pd) o rodio (Rh), o una combinación de ellos. La cantidad que se debe depositar sobre el washcoat no es única, si no que varía en función del motor que sea. A tratarse de metales preciosos es el elemento que incrementa el coste del dispositivo, por ello a la hora del diseño del DOC se prioriza el aumento del rendimiento de los catalizadores.



Figura 2.7. Estructura interna de un DOC.

Del mismo modo que ocurre con el resto de los sistemas de postratamiento ya mencionados, los catalizadores de oxidación diésel presentan el problema de pérdida de eficiencia debido a fenómenos térmicos o al envenenamiento. Los fenómenos térmicos que provocan la desactivación del catalizador son el sinterizado y la aleación de las partículas catalíticas con el washcoat. El sinterizado se produce cuando las partículas de metal precioso se unen debido a las altas temperaturas que produce que la superficie que contiene metales preciosos disminuya en comparación con la masa y conlleva a una disminución de las superficies catalíticas en las que se lleva a cabo la reacción de forma más rápida. El envenenamiento puede ser selectivo o debido a la formación de depósitos de carbono. En el envenenamiento selectivo, los componentes derivados del azufre se unen a los núcleos de metales preciosos, una vez unidos no se pueden separar, hecho que reduce la superficie catalítica efectiva y por tanto su eficacia del DOC. En el envenenamiento por formación de depósitos de carbono se produce debido a que las partículas de HC que atraviesan el DOC

pueden situarse en la entrada de los poros del washcoat e impide la difusión de los gases de escape hasta los núcleos de la sustancia catalítica.

2.3.4. Efecto de la ubicación del sistema de postratamiento

Como ya se ha comentado, existen dos ubicaciones de un mismo sistema de postratamiento en la línea de escape del motor, aguas arriba de la turbina o aguas abajo, dependiendo de la ubicación se producen diferentes efectos en la reducción de los contaminantes y prestaciones del motor. Dado que el presente proyecto trata del estudio de un pre-catalizador de oxidación diésel, este apartado se centra en este sistema de postratamiento. Cabe destacar que debido a ubicación del pre-DOC entre el colector de escape y la turbina y el poco espacio existente, los pre-catalizadores tienen un tamaño reducido. En la figura 2.8, se muestra el pre-catalizador sobre el que se ha realizado el estudio.



Figura 2.8. Pre-catalizador de oxidación diésel del estudio.

Con la ubicación pre-turbo, se consiguen mayores temperaturas de los gases de escape puesto que el dispositivo se coloca a la salida del escape del motor, hecho que influye de manera positiva en la temperatura de light-off del DOC, temperatura a la cual se consigue alcanzar el 50% de la eficiencia de conversión, disminuyendo el tiempo que se tarda en alcanzarla. El flujo turbulento facilita el contacto entre los gases de escape y la superficie catalítica de las paredes del DOC.

Al ubicar el dispositivo antes de la turbina, se reduce la pérdida de presión a causa de una mayor densidad del gas de escape. Estas densidades mayores suponen para un mismo flujo másico, valores de velocidad del gas menores, lo que repercute en una menor pérdida de presión. Además, la configuración pre-turbo del sistema del catalizador no se ve afectada por la relación de expansión de la turbina. Dado que en el DOC se producen reacciones exotérmicas, la configuración pre-turbo incrementa la energía disponible en la turbina.

En condiciones de operación estacionarias, ubicar el DOC aguas arriba de la turbina presenta una ventaja en el consumo frente a la ubicación postturbo. Sin embargo, en condiciones transitorias de operación la ubicación pre-turbo presenta una desventaja, debido

a su alta inercia térmica, el dispositivo acumula energía, lo que reduce la energía disponible en la turbina durante estas condiciones. [2]

Cabe destacar que uno de los aspectos más importantes del catalizador son su durabilidad y resistencia, cuando el catalizador se ubica aguas arriba de la turbina, estos aspectos se vuelven aún más importantes, ya que, debe soportar condiciones del flujo más extremas en lo referente a la presión y la temperatura. Si el catalizador no presenta la resistencia y durabilidad adecuada, podría ocurrir la separación y desprendimientos de material, causando destrozos en la turbina.

3. Herramientas de trabajo

En este apartado se describen las herramientas utilizadas y la metodología seguida para realizar el estudio del proyecto.

3.1. Modelo

El modelado de los sistemas de postratamiento se basa en integrar los modelos de los sistemas en el software, denominado VEMOD (Virtual Engine Model), desarrollado por el Instituto de Investigación-CMT Motores Térmicos. Tiene el principal objetivo de cumplir con las normativas de emisiones actuales aproximándose a las condiciones reales de conducción, teniendo en cuenta las condiciones de operación del motor.

VEMOD es un modelo virtual del motor utilizado para simular el conjunto del motor con el sistema de postratamiento y los equipos principales, este hecho requiere que las herramientas de cálculo sean robustas y a su vez flexibles y de poco coste computacional, hecho que justifica que el modelo sea una herramienta computacional rápida. Los tiempos de cálculo respecto a la duración del ciclo se recogen en la siguiente tabla.

Paso de tiempo [s]	Tiempo de cálculo normalizado [-]
	DOC
2×10^{-2}	0,0003
1×10^{-4}	0,0617
3×10^{-5}	0,2039

Tabla 3.1. Tiempo computacional del modelo de DOC en la simulación de ciclo WLTC referido en tiempo real [12].

Como ejemplo para demostrar la rapidez del modelo, en las simulaciones que se realizan durante el estudio de ciclo WLTC cuya duración es 1800 segundos, el modelo logra el cálculo de las variables requeridas en menos de 120 segundos.

Además, una vez ajustado el modelo, permite simular diferentes configuraciones de los sistemas de postratamiento, a partir del mismo ensayo experimental variando diámetro, longitud, tamaño de celda, tipo de celda, material, etc.; lo que conlleva un ahorro económico, ya que sin el modelo se tendría que fabricar un catalizador con las características deseadas para realizar los ensayos experimentales, hecho que resultaría inviable.

Se asume que el modelo es 0 dimensional, no tiene resolución axial, lo que conlleva a un tiempo de cálculo más rápido.

Dado que el presente trabajo aborda el modelado de un DOC, este apartado se centra en el modelado de este, el cual se explica a partir del modelado de catalizadores de flujo continuo. El modelo de catalizador de flujo continuo se encarga de los procesos físicos y químicos principales para determinar el rendimiento del sistema en los referido a las emisiones. A su vez, el modelo está compuesto de 3 submodelos que resuelven la caída de presión, la transferencia de calor y las reacciones químicas.

Al ser un modelo de valor medio se asumen constantes a lo largo del monolito las propiedades del flujo. El modelo proporciona una descripción de las propiedades del sustrato y una predicción de las propiedades del flujo a la salida del catalizador. Es capaz de proporcionar el flujo másico que pasa por el monolito a partir de la resolución del modelo de la caída de presión. La composición del gas a la salida, como la eficiencia de conversión de los contaminantes, se calcula a partir del modelo químico. La temperatura de salida del gas, la del sustrato y la de pared se calculan a partir de la transferencia de calor y del calor liberado en las reacciones químicas. Para poder obtener las variables mencionadas, como datos principales de entrada se toman la temperatura, presión y composición a la entrada.

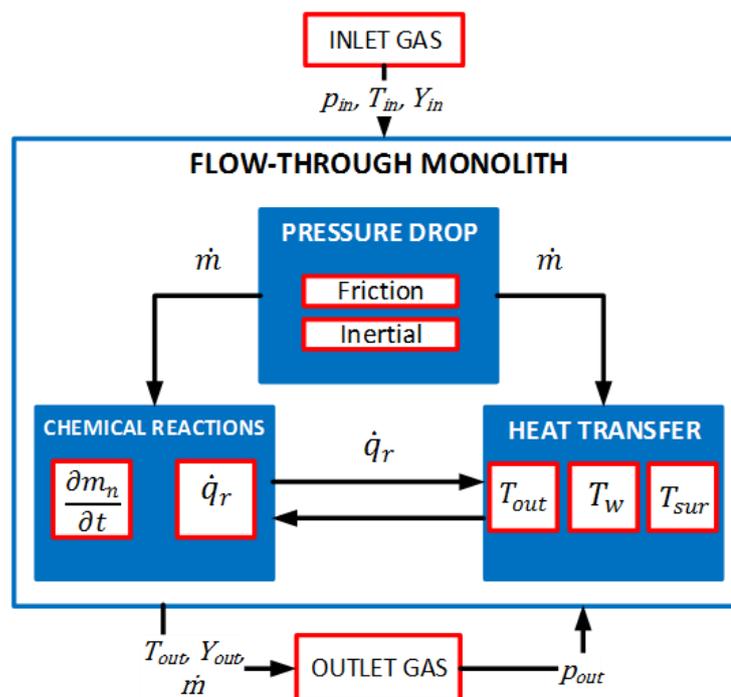


Figura 3.1. Esquema del modelo de DOC [12].

3.1.1. Modelo de pérdida de presión

La localización de los sistemas de postratamiento en la línea de escape implica una restricción del flujo relacionada con las características particulares de la geometría y de las propiedades del flujo. Las componentes de la caída de presión son varias, en el caso de los catalizadores de flujo continuo, son principalmente inerciales, dependiente de la velocidad del flujo. En menor parte se da la componente de fricción, debida a la fricción del flujo de gas con

las paredes del monolito. El flujo se ve afectado por una difusión tanto cuando entra como cuando sale de los canales. Asumiendo un flujo incompresible, la caída de presión se puede obtener como:

$$\Delta p_{cat} = \frac{1}{2} \zeta_{cat} \rho_{in} u_{in}^2 \quad (3.1)$$

Siendo ζ_{cat} el coeficiente de caída de presión del dispositivo. Se trata de un parámetro característico de la geometría y viene dado en función del número de Reynolds. Tomando la sección de entrada del monolito como la referencia para el cálculo del número de Reynolds y caracterizando experimentalmente el coeficiente de la caída de presión, se puede imponer la caída de presión como una condición de contorno para obtener la velocidad del flujo.

$$u_{in} = \sqrt{\frac{2 \cdot \Delta p_{cat}}{\zeta_{cat} \cdot \rho_{in}}} \quad (3.2)$$

A su vez, permite calcular el flujo másico que pasa por el catalizador en cada momento del ciclo a partir de la densidad del gas de entrada y de la superficie abierta del catalizador (S_{eff}).

$$\dot{m}_{cat} = \rho_{in} \cdot u_{in} \cdot S_{eff} \quad (3.3)$$

3.1.2. Modelo de transmisión de calor

El submodelo de la transmisión de calor aplica un enfoque nodal basado en la discretización de la ecuación general de la transmisión de calor.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \kappa + \dot{q}_r \quad (3.4)$$

Teniendo en cuenta las características de cada volumen de control y diferentes propiedades térmicas y el área de transmisión de calor en cada nodo, la temperatura de pared se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$T_{i,j}^{p+1} = \frac{\Delta t}{C_{i,j}} \left(\sum_{k=-1}^{+1} \frac{T_{i+k,j}^p - T_{i,j}^p}{R_{i+\frac{k}{\tau},j}} + \dot{q}_r \right) + T_{i,j}^p \quad (3.5)$$

Donde $C_{i,j}$ representa la capacidad térmica en el volumen de control del nodo (i,j) y R la resistencia térmica equivalente entre dos nodos colindantes.

El uso del modelo simple de la transferencia de calor ha conseguido un incremento de la atención debido al compromiso entre el coste computacional y la exactitud de la solución. Esta simplificación puede proporcionar una solución explícita de la temperatura de pared en

sistemas complejos, como se muestra en la ecuación 3.5. En los sistemas de postratamiento en los que el gas de escape intercambia calor con el ambiente por medio del sustrato y del recubrimiento exterior, estos modelos han encontrado un campo de aplicación. Es necesario definir una red representativa de resistencias y capacitancias equivalentes para tener en cuenta el intercambio de calor y la inercia térmica del sustrato y del recubrimiento exterior.

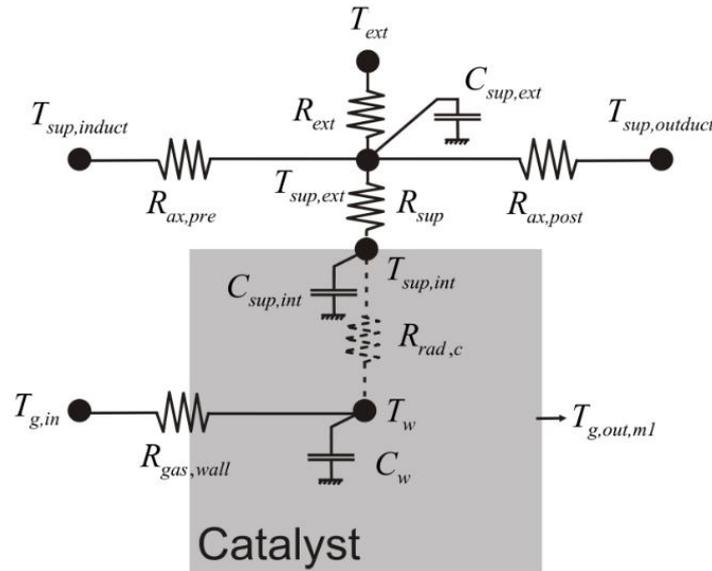


Figura 3.2. Esquema nodal del monolito [12].

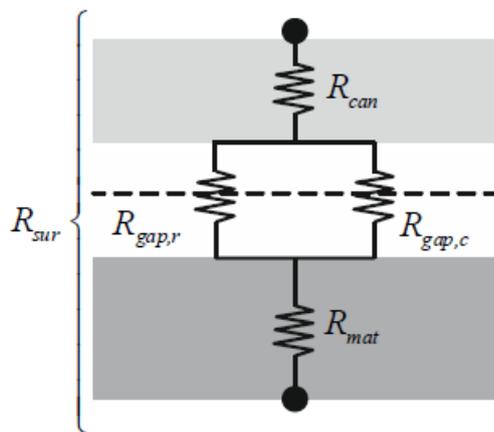


Figura 3.3. Resistencia térmica equivalente de la superficie.

La transmisión de calor se modela teniendo en cuenta las características geométricas particulares relacionadas con la transmisión de calor del gas a pared. El modelo resuelve la transmisión de calor en los nodos situados en el sustrato y en el recubrimiento exterior. La temperatura de pared (T_w) se estima para obtener la temperatura de salida del gas. La falta de resolución axial no permite el registro de los efectos locales con el submodelo propuesto. Independientemente, la discretización radial es posible. Permite describir el promedio del gradiente de temperaturas de pared hacia la periferia del monolito donde la temperatura

interna de la superficie ($T_{sur,int}$) se evalúa. La transmisión de calor a través del recubrimiento exterior se modela desde este nodo límite que representa a las distintas capas para poder calcular la temperatura superficial externa ($\bar{T}_{sur,ext}$).

La temperatura de pared se puede obtener con la ecuación siguiente:

$$T_w^{B,p+1} = \frac{\Delta t}{C_w^{B,p}} \left(\sum_k \frac{T_k - T_w^{B,p}}{R_k} + \dot{q}_r^p \right) + T_w^{B,p} \quad (3.6)$$

Donde B y p representan el haz de canales y el paso de tiempo al que pertenece cada variable.

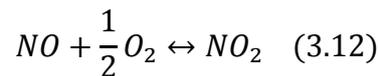
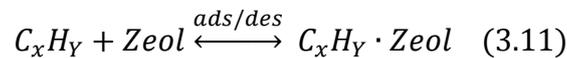
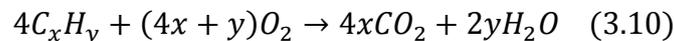
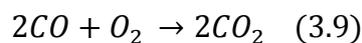
Las temperaturas internas y externas del recubrimiento exterior se calculan mediante las siguientes ecuaciones, respectivamente:

$$T_{sur,int}^{p+1} = \frac{\Delta t}{C_{sur,int}^p} \cdot \left[\frac{T_w^{B_{per},p} - T_{sur,int}^p}{R_{rad}^{B_{per},p}} + \frac{T_{sur,ext}^p - T_{sur,int}^p}{R_{sur}^p} \right] + T_{sur,int}^p \quad (3.7)$$

$$T_{sur,ext}^{p+1} = \frac{\Delta t}{C_{sur,int}^p} \cdot \left[\frac{T_{ext} - T_{sur,ext}^p}{R_{ext}^p} + \frac{T_{sur,int}^p - T_{sur,ext}^p}{R_{sur}^p} \right] + T_{sur,ext}^p \quad (3.8)$$

3.1.3. Modelo químico

En un catalizador de oxidación diésel tienen lugar muchas reacciones químicas, dado que el modelo es una simplificación, en el modelo químico se modelan solo las reacciones principales que tienen lugar en el dispositivo. Estas son las reacciones de oxidación del monóxido de carbono e hidrocarburos; la adsorción y desorción de los hidrocarburos, si el dispositivo contiene zeolita y la interconversión de NO a NO₂.



La adsorción y desorción de los hidrocarburos tienen lugar en ambos sentidos. En el caso de los hidrocarburos, a bajas temperaturas tiene mayor influencia la adsorción, a altas temperaturas tiene lugar la desorción.

Las velocidades de oxidación del CO y HC son mucho mayores que las velocidades de reducción; sin embargo, en la reacción de los NO_x, ambas velocidades son del mismo orden, por lo que el proceso puede ser reversible.

La eficiencia de conversión viene dada por la combinación de la oxidación y acumulación en un material absorbente, como la zeolita. El decano es el hidrocarburo utilizado para el modelado de la oxidación y adsorción. El calor de adsorción es dependiente de la temperatura y de la zeolita. El almacenamiento de HC ha sido modelado como una fisorción en la que el calor de adsorción se aproxima al calor de condensación.

Mediante la integración a lo largo de la longitud del monolito de las ecuaciones de transporte de las especies químicas en el gas (ecuación 3.13) y en el sustrato (ecuación 3.14) se obtiene la solución explícita de la concentración de contaminantes a la salida (ecuaciones 3.20 y 3.21), para ello se considera constante la concentración de O₂.

$$\text{Gas} \rightarrow \frac{dX_n}{dt} = -u_x \cdot \frac{dX_n}{dx} - Sp_{cat} \cdot k_{m,n} \cdot (X_n - X_{n,S}) \quad (3.13)$$

$$\text{Sustrato} \rightarrow \frac{dX_{p,S}}{dt} = v_v \cdot R_n - Sp_{wc} \cdot k_{m,n} \cdot (X_n - X_{n,S}) \quad (3.14)$$

Donde Sp_{cat} representa la superficie relacionada con la transmisión de masa desde el gas a la superficie del catalizador y Sp_{wc} , el área relacionada con la transmisión de masa desde la superficie del catalizador al washcoat. Se calculan mediante las ecuaciones 3.15 y 3.16 respectivamente.

$$Sp_{cat} = \frac{S_{cat}}{V_{gas}} \quad (3.15)$$

$$Sp_{wc} = \frac{S_{cat}}{V_{wc}} \quad (3.16)$$

En la conversión de las especies ocurren tres fenómenos dependientes de la temperatura que son la transferencia de masa, la difusión interna y la cinética química, en el modelo se considera de forma diferente. La tasa de reacción (R_n) que aparece en la ecuación 3.14 viene multiplicada por la eficiencia de la difusión interna:

$$R_{r,n} = \eta_{int,r,n} \frac{k_{r,n}}{G_{r,n}} \left(\prod_j X_j^{m_j} - \frac{\prod_i X_i^{m_i}}{k_{eq,r,n}} \right) \quad (3.17)$$

El coeficiente de la transferencia de masa se calcula mediante la ecuación siguiente y es función del número de Sherwood:

$$k_{m,n} = \frac{D_{m,n} Sh_n}{\alpha} \quad (3.18)$$

La cinética química viene dada por la ecuación de Arrhenius:

$$k_n = PF \cdot e^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (3.19)$$

Donde E_a es la energía de activación.

La velocidad que limita cada fenómeno puede determinarse según las diferencias en las energías de activación de cada uno de ellos. A bajas temperaturas la velocidad de reacción es más lenta en la cinética química que en la difusión interna, por lo que en las zonas de bajas temperaturas predomina la cinética química. A medida que aumenta la temperatura, los tramos de la reacción con mayor energía de activación y dependencia exponencial, aumentan rápidamente, en esta etapa gobierna la difusión interna. A altas temperaturas, la velocidad de la reactividad química y la de difusión interna se vuelven lo suficiente altas como para que la transferencia de masa, que tiene una dependencia baja con la temperatura sea la que predomine.

$$X_{CO,out} = X_{CO,in} \cdot e^{\left(1 - \frac{4}{\pi}\right) \frac{k_{ox,CO} \cdot \eta_{int,ox,CO} \cdot b_1 \cdot X_{O_2} \tau}{4}} \quad (3.20)$$

$$X_{HC,out} = \frac{(b_3 + b_2 \cdot X_{HC,in}) \cdot e^{b_2 \tau} - b_3}{b_2} \quad (3.21)$$

Donde b_1 , b_2 , b_3 , vienen dados por las ecuaciones siguientes:

$$b_1 = \frac{k_{m,CO}}{\frac{\alpha}{\pi} \cdot \left(1 - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \frac{k_{ox,CO} \cdot \eta_{int,ox,CO} \cdot X_{O_2}}{G_{ox,CO}} + k_{m,CO}} \quad (3.22)$$

$$b_2 = \frac{\left(1 - \frac{4}{\pi}\right) \cdot \left(k_{ads,HC} \cdot \eta_{int,ads,HC} \cdot (1 - \theta) \psi + \frac{k_{ox,HC} \cdot \eta_{int,ox,HC} \cdot X_{O_2}}{G_{ox,HC}}\right)}{k_{m,HC} \cdot X_{HC}} \quad (3.23)$$

$$\frac{\frac{\alpha}{\pi} \cdot \left(1 - \frac{\pi}{4}\right) \cdot (\eta_{int,ads,HC} \cdot k_{ads,HC} \cdot (1 - \theta) \psi + \frac{k_{ox,HC} \cdot \eta_{int,ox,HC} \cdot X_{O_2}}{G_{ox,HC}} + k_{m,HC})}{k_{m,HC} \cdot X_{HC}}$$

$$b_3 = \left(\frac{4}{\pi} - 1\right) \left(\eta_{int,des,HC} k_{des,HC} \theta \psi - \left(\eta_{int,ads,HC} (1 - \theta) \psi + \eta_{int,ox,HC} \frac{k_{ox,HC}}{G_{ox,HC}} X_{O_2} \right) \right) b_4 \quad (3.24)$$

Y b4 presente en la ecuación 3.21:

$$b_4 = \frac{\eta_{int,des,HC} k_{des,HC} \theta \psi}{\eta_{int,ads,HC} k_{ads,HC} (1 - \theta) \psi + \eta_{int,ox,HC} \frac{k_{ox,HC} X_{O_2}}{G_{ox,HC}} + \frac{\pi k_{m,HC}}{\alpha \left(1 - \frac{\pi}{4}\right)}} \quad (3.25)$$

Se debe tener en cuenta que existen especies que inhiben las reacciones de otras, por ello en el modelo están incluidos los términos de inhibición de las reacciones redox:

$$G_{ox,HC} = T_{in} (1 + k_1 X_{CO,s} + k_2 X_{HC,s})^2 (1 + k_3 X_{CO,s}^2 X_{HC,s}^2) (1 + k_4 X_{NO,s}^{0.7}) \quad (3.26)$$

$$G_{ox,CO} = T_{in} (1 + k_5 X_{CO,s} + k_6 X_{HC,s})^2 (1 + k_7 X_{CO,s}^2 X_{HC,s}^2) (1 + k_8 X_{NO,s}^{0.7}) \quad (3.27)$$

Donde k son constantes cinéticas obtenidas a partir de la ecuación de Arrhenius y se definen en la Tabla 3.2.

	Pf [s⁻²]	E_a [J/mol]
K₁	555	-7990
K₂	1,58x10 ³	-3x10 ³
K₃	2,98	-96534
K₄	4,79x10 ⁵	31036
K₅	555	-7990
K₆	1,58x10 ³	-3x10 ³
K₇	2,98	-96534
K₈	4,79x10 ⁵	31036

Tabla 3.2. Constantes cinéticas de los términos de inhibición.

3.2. Ensayos experimentales

Para la realización del modelado se parte de ensayos experimentales que ya habían sido previamente realizados en una sala de ensayos del Instituto-CMT Motores Térmicos. La sala de ensayos consta de una instalación formada por un motor diésel para automóviles de pasajeros, los correspondientes sistemas de postratamiento y los equipos de medida, tal y como se muestra en la figura 3.4.

Las características principales del motor se recogen en la Tabla 3.3.

Tipo	Motor diésel Euro 6 MDE
Volumen desplazado	1598 cm ³
Diámetro	79,7 mm
Carrera	80,1 mm
Número de cilindros	4 cilindros en línea
Número de válvulas por cilindro	4
Relación de compresión	16,0
Turbocompresor	VGT de una etapa con retroalimentación
Potencia máxima @ velocidad	100 kW @ 3500-4000 rpm
Par máximo @ velocidad	320 Nm @ 2000-2500 rpm

Tabla 3.3. Características principales del motor.

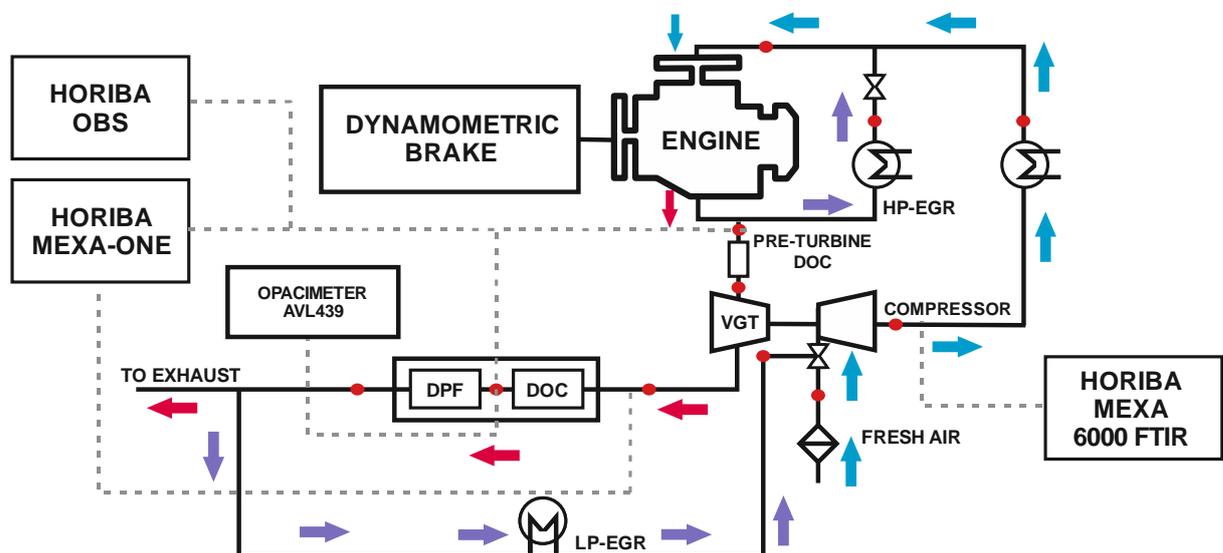


Figura 3.4. Esquema de la instalación de la sala de ensayos.

Se han instalado sensores en el motor con el fin de medir las magnitudes principales que definen el motor y el rendimiento del postratamiento en términos de temperatura y presión media en posiciones clave (correspondientes con los puntos rojos de la figura 3.4), el flujo másico de aire y combustible, velocidad del motor y del turbocompresor y el par motor. Horiba Mexa-ONE se ha utilizado para la medida de emisiones en diferentes repeticiones de los ensayos y Horiba Mexa FTIR para, medir CO₂ a la salida del compresor, es decir, la tasa de LR-EGR. Además, se instaló un opacímetro a la entrada del DPF cuya función es medir la opacidad del humo.

Se realizaron ensayos en frío (WLTC frío) y en caliente (WLTC caliente) con diversas configuraciones. Se realizaron varios ensayos en diferentes configuraciones, en frío se realizaron 2 repeticiones a la entrada del pre-DOC y a la entrada y salida del DOC en ambas configuraciones (pre-turbo y baseline). En caliente se realizaron dos repeticiones a la entrada

del pre-DOC, del DOC en configuración pre-turbo y salida del DOC en ambas, y 3 s a la entrada del DOC en baseline.

El motivo de la realización de varios ensayos para la misma configuración es tener repetitividad y poder aceptar los resultados del experimento, ya que si se solo se realizase un ensayo de cada no se podría contrastar con otros y no se podría advertir si los resultados son verídicos o hay fallos debido a los equipos de medida. En los siguientes gráficos se muestran los resultados del par, velocidad del motor y acelerador en WLTC frío de los ensayos experimentales para demostrar la repetitividad mencionada.

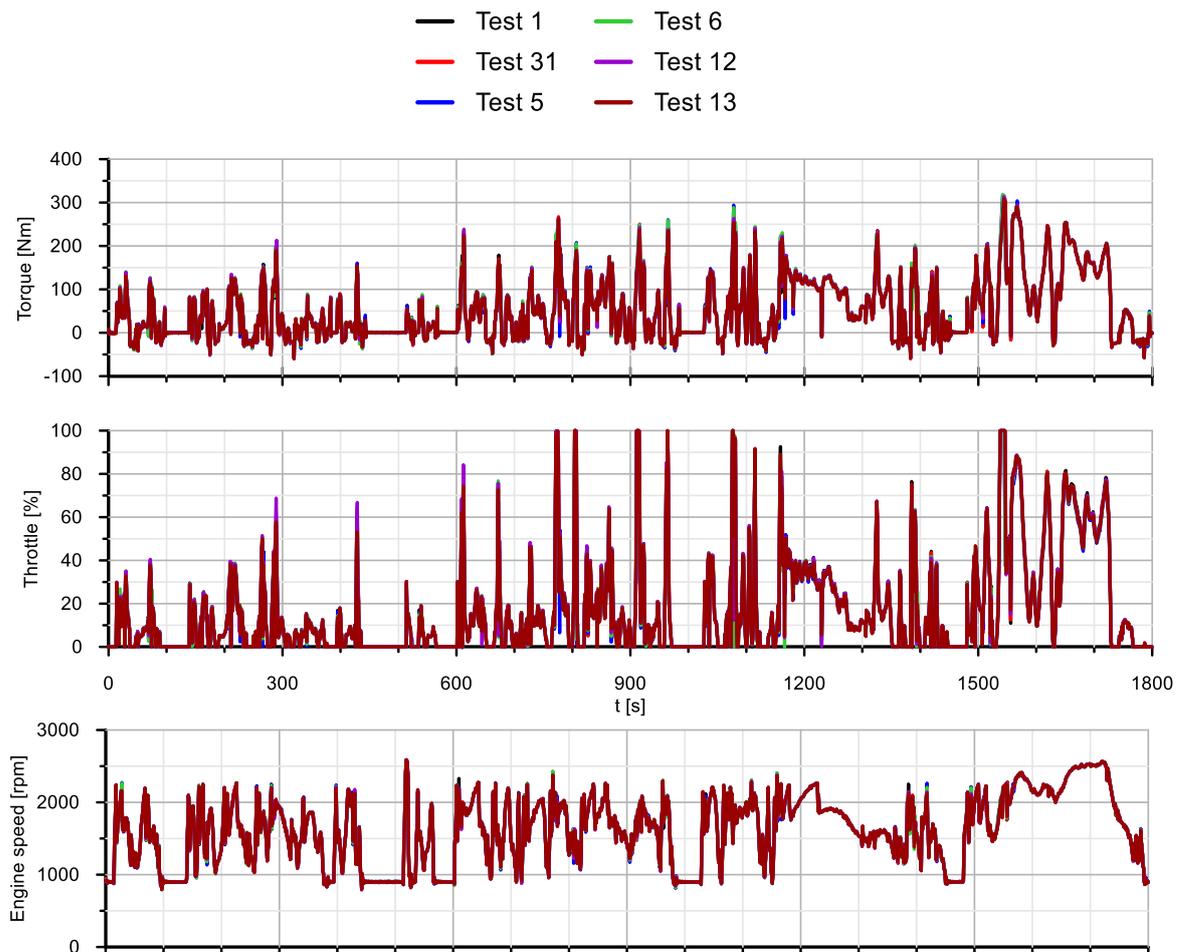


Figura 3.5. Resultados experimentales del par, velocidad del motor y acelerador en WLTC frío.

Cabe destacar que, al hacer referencia a ciclos en frío, no significa que el ensayo haya sido realizado en una sala a bajas temperaturas, sino que, ha sido realizado con el motor en frío que había estado sin funcionar antes del ensayo, se realizaba un ensayo al comenzar el día y no se realizaba otro hasta la mañana del día siguiente. Del mismo modo, al hacer referencia a ciclos en caliente, se hace referencia a que el motor había sido ensayado previamente y no se esperó a que se enfriase, se hicieron los ensayos uno detrás de otro.

Debido a la repetitividad de los ensayos se escoge uno de cada para el realizar el modelado, la elección se hace en base a que se encuentren en las mismas condiciones de temperatura y de pérdida de presión en el postratamiento.

3.3. Calibración del modelo

3.3.1. Calibración del modelo de pre-DOC

Partiendo de los ensayos experimentales se busca ajustar el modelo de DOC para que sea capaz de reproducir los ensayos y permita comprender lo que ocurre ya que, cuando se mide experimentalmente solamente se mide temperatura, entrada y salida de contaminantes, los que nos da la eficiencia de conversión; pero no se puede medir lo que pasa en el interior del DOC, por ello, el modelo puede ayudar a explicar o entender lo que ocurre dentro.

Además, cuando se realizaron los ensayos experimentales se vio que el hecho de instalar un pre-DOC en la línea de postratamiento aumentaba las emisiones de contaminantes a la entrada, aunque la eficiencia de conversión del pre-DOC era mayor que la del DOC, el motor emitía lo que hace necesario estudiar de que vale que el pre-DOC sea más eficiente, esto implica un redimensionado. Para no tener que volver a ensayar de nuevo se utiliza el modelo para realizar estudios que permitan observar las tendencias o las mejoras. Antes de lanzar un estudio paramétrico es necesario poseer la capacidad de reproducir los ensayos experimentales y poder aceptar los resultados del modelo. Para ello es necesaria la calibración del modelo.

Se parte de valores estándar y se pretende ajustar el modelo. Para ello se busca un equilibrio entre los ciclos en frío y en caliente, ajustando primero el frío ya que el caliente va a ir sobrado de temperatura y se realiza un proceso iterativo hasta conseguir un compromiso entre CO y HC debido a que los términos de oxidación de ambos están relacionados entre sí porque está gobernado por la temperatura en la pared. Si se aumenta la oxidación de uno el otro se retroalimenta.

En primer lugar, se lanza el modelo para la correlación estándar de la capacidad térmica del sustrato cerámico, pero para mejorarlo y acercarse a las condiciones reales del pre-DOC se cambia por la correspondiente correlación del sustrato metálico. El material del sustrato metálico es una aleación de hierro, cromo y aluminio (FeCrAlloy), cuya composición es un 70.7% de hierro, 23.5% de cromo y 5.8% de aluminio.

Temperatura [°C]	20	200	400	600	800	1000	1200	1400
Cp [kJ kg ⁻¹ K ⁻¹]	0,46	0,56	0,63	0,75	0,71	0,72	0,74	0,80

Tabla 3.4. Capacidad térmica del sustrato metálico [13].

A partir de los datos de la tabla y sabiendo que la correlación de la capacidad térmica del sustrato tiene la forma:

$$C_{p_{\text{sustrato}}} \left[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}} \right] = a_1 \cdot \frac{1}{T} + a_2 + a_3 \cdot T$$

Se escogen las temperaturas de 20 °C, 400 °C y 1000 °C para la obtención de la correlación, ya que con estas temperaturas se cubre el rango de temperaturas de operación del DOC.

$$(T_1 [\text{°C}], c_{p_1} [\text{kJ/kgK}]) = (20, 0.46)$$

$$(T_2 [\text{°C}], c_{p_2} [\text{kJ/kgK}]) = (400, 0.63)$$

$$(T_3 [\text{°C}], c_{p_3} [\text{kJ/kgK}]) = (1000, 0.72)$$

Se obtiene la correlación correspondiente con el sustrato metálico y se implementa en el modelo de DOC:

$$C_{p_{\text{sustrato}}} \left[\frac{\text{kJ}}{\text{kg K}} \right] = \frac{-76234,24}{T} + 702,16 + 0,0610474 \cdot T$$

Al partir de los dispositivos utilizados para ensayar se obtiene la información macrogeométrica, la información microgeométrica se obtiene utilizando un microscopio USB PCE-MM200, cuyo software permite ampliar la imagen y obtener las medidas con mayor resolución.

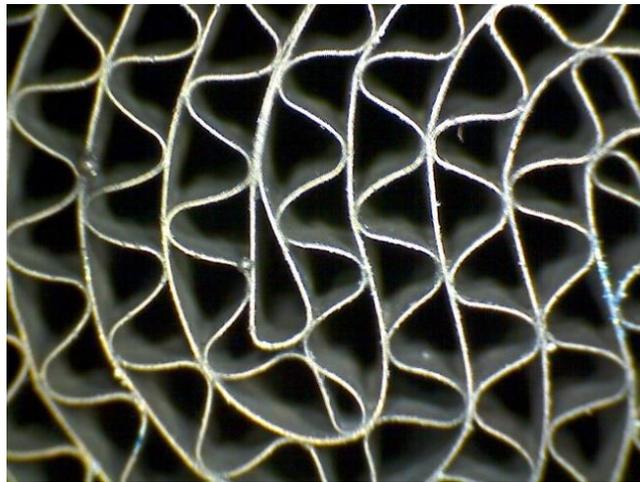


Figura 3.6. Sección de la estructura de los canales del pre-DOC.

Como puede observarse en la figura 3.6, se trata de canales con sección senoidal. Para el estudio y calibración se simplifica suponiendo que es equivalente a un triángulo equilátero.

Las características del pre-DOC se recogen en la Tabla 3.5.

Longitud [m]	0,085
Diámetro [m]	0,030
α (Ancho de celda) [m]	0,001869
Espesor de pared [m]	0,000121

Tabla 3.5. Dimensiones geométricas del pre-catalizador.

Con las características geométricas del pre-DOC implementadas en el modelo de DOC, se lanza el modelo para ver las tendencias que siguen las eficiencias de conversión proporcionadas por el modelo y analizar si estas se ajustan a las eficiencias dadas por los datos experimentales.

Para la ejecución del modelo se parte de datos experimentales de presión de entrada, temperatura del gas de entrada y fracciones másicas de contaminantes.

Para la calibración se utilizan las eficiencias de conversión acumuladas del monóxido de carbono y de los hidrocarburos. Se calcula la eficiencia experimental y la del modelo:

$$\text{Eficiencia de conversión acumulada}[\%] = \frac{AC_{in} - AC_{out}}{AC_{in}} \cdot 100$$

Siendo:

AC in: el acumulado del contaminante a la entrada del pre-DOC.

AC out: el acumulado del contaminante a la salida del pre-DOC.

A partir de este punto se realiza el proceso iterativo de ajuste mencionado anteriormente hasta encontrar un equilibrio entre frío y caliente y el monóxido de carbono e hidrocarburos, llegando al ajuste químico final mostrado en la Tabla 3.6.

	Pf [s⁻¹]	Ea [J/mol]
Adsorción HC	0,001	0
Desorción HC	3000	90000
Oxidación HC	1E21	115000
Oxidación CO	2,5E21	97445
K1 (Inhibición)	1850	-7990
Capacidad almacenamiento waschoat [mol/ m³]	10	

Tabla 3.6. Ajuste final de los parámetros químicos para el modelo de pre-DOC.

Finalmente se grafican las eficiencias de conversión de los contaminantes según el ajuste realizado.

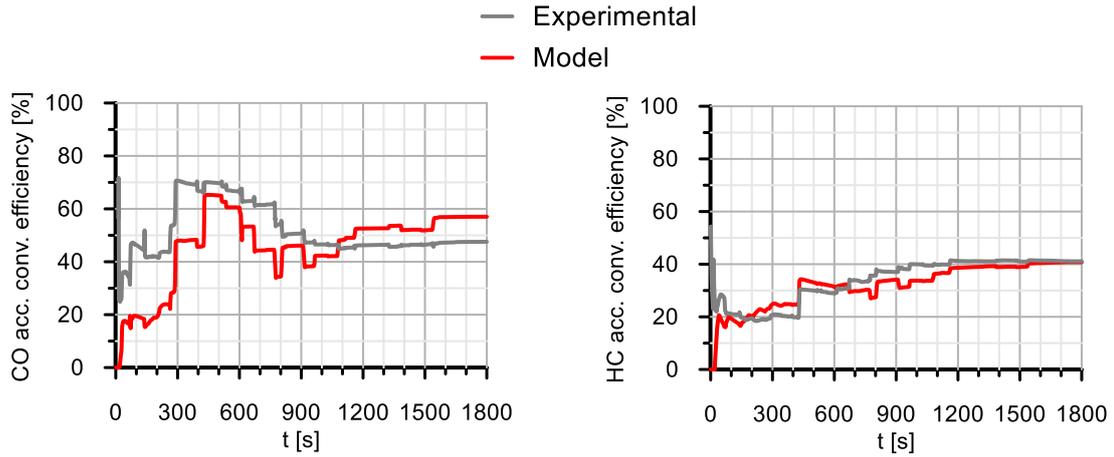


Figura 3.7. Eficiencias de conversión del modelo de pre-DOC frente a las del experimento en los ciclos en frío con la calibración final.

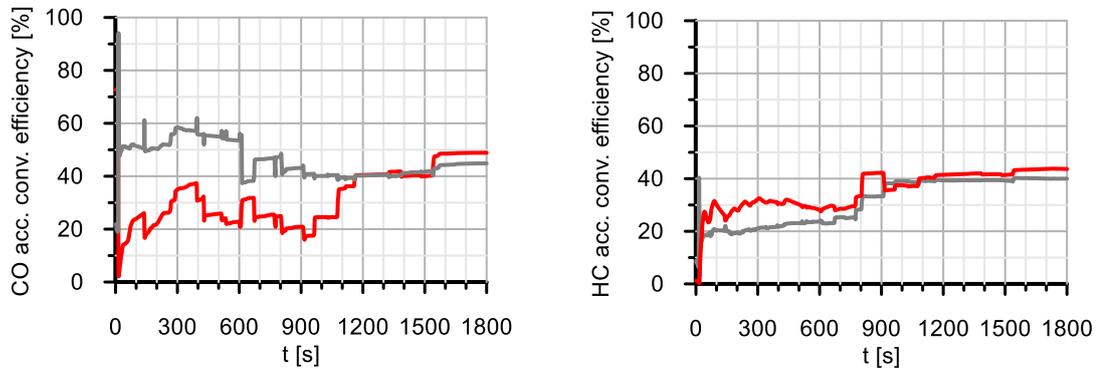


Figura 3.8. Eficiencias de conversión del modelo de pre-DOC frente a las del experimento en los ciclos en caliente con la calibración final.

3.3.2. Calibración del modelo de DOC

Partiendo del modelo de DOC se realiza una recalibración de este para mejorar el ajuste que se tenía. El proceso de calibración es el mismo que para el pre-DOC, se trata de un proceso iterativo con el cual se llega a un equilibrio entre los ciclos frío y caliente y entre el CO y el HC.

	Pf [s⁻¹]	Ea [J/mol]
Adsorción HC	10	0
Desorción HC	3000	90000
Oxidación HC	8E18	88000
Oxidación CO	1E19	85000
K1 (Inhibición)	555	-7990
Capacidad almacenamiento waschoat [mol/ m³]	120	

Tabla 3.7. Ajuste final de los parámetros químicos para el modelo de DOC.

Una vez lanzado el modelo se obtienen las eficiencias reflejadas en las siguientes figuras.

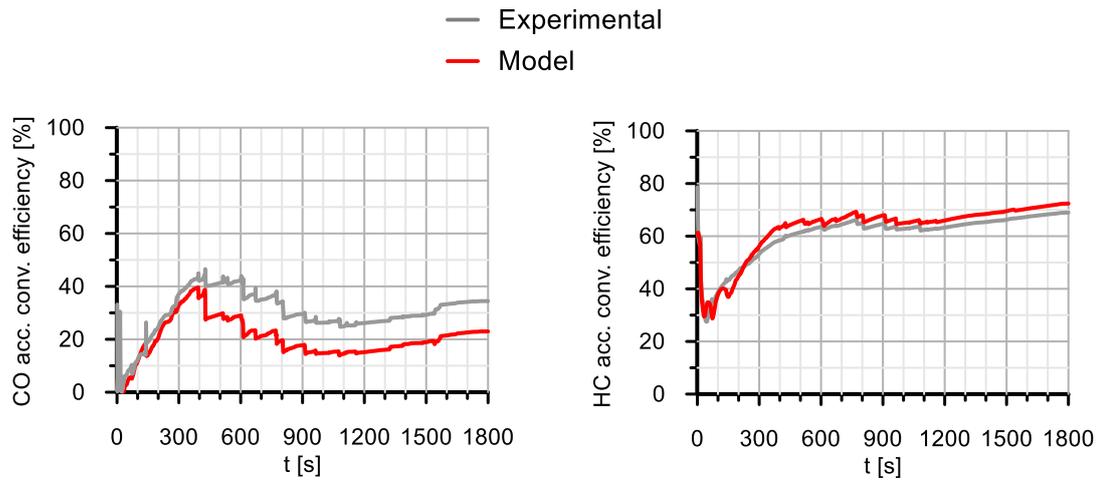


Figura 3.9. Eficiencias de conversión del modelo de DOC frente a las del experimento en los ciclos en frío con la calibración final.

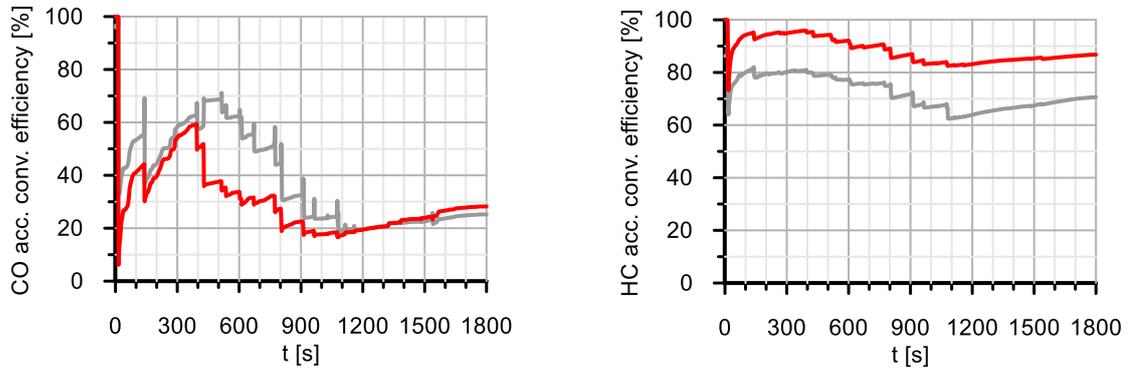


Figura 3.10. Eficiencias de conversión del modelo de DOC frente a las del experimento en los ciclos en caliente con la calibración final.

4. Análisis de resultados

En este apartado se muestran los resultados obtenidos en el estudio, para su análisis se dividen en ciclos en frío (WLTC frío) y ciclos en caliente (WLTC) y en monóxido de carbono e hidrocarburos a su vez.

Se analizan los resultados de eficiencias y emisiones obtenidos en las diferentes configuraciones. A continuación, se muestran dos esquemas muy simplificados de la línea de escape del motor (teniendo solo en cuenta el DOC y el pre-DOC), para ilustrar las diferentes configuraciones:

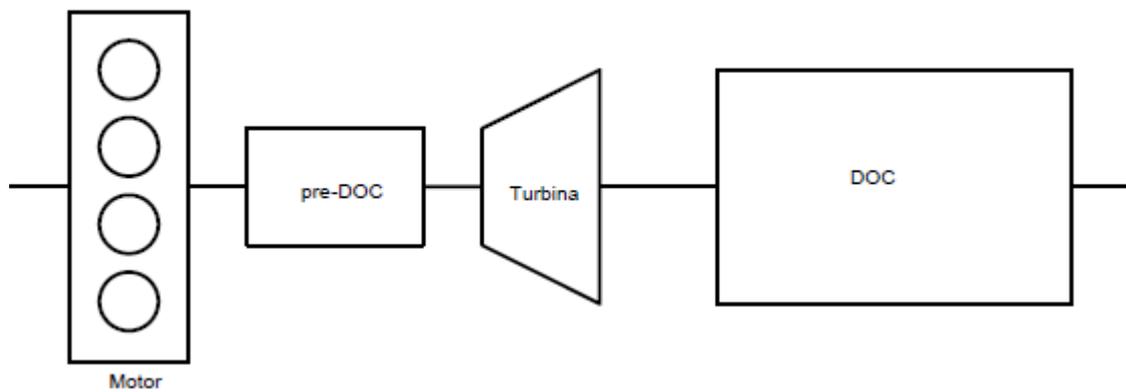


Figura 4.1: Configuración pre-turbo.

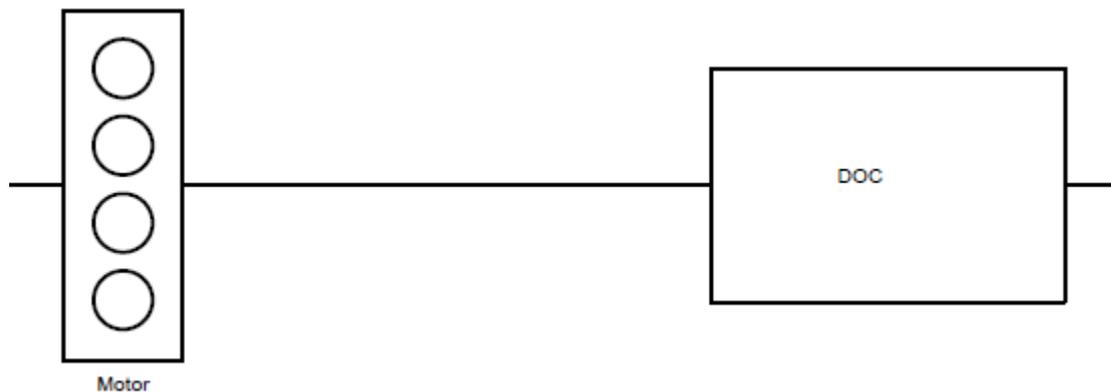


Figura 4.2: Configuración baseline.

El modo en que se divide el análisis de resultados es el siguiente:

- **Emisiones y eficiencias acumuladas experimentales durante el ciclo.** Las emisiones medidas experimentalmente se representan de forma acumulativa durante el ciclo, se representan las emisiones brutas del motor, las que entran al DOC y las de salida del DOC. Se representan las eficiencias acumuladas experimentales para cada uno de los equipos, en el resto de los apartados se analizarán los equipos por separado y para cada configuración. El ciclo se divide en 4 partes:

Fases WLTC	Time [s]
Low	0-589
Medium	590-1022
High	1023-1477
Extra high	1478-1800
Overall	0-1800

Tabla 4.1. Fases WLTC.

- **Pre-catalizador de oxidación diésel.** Se muestran los resultados obtenidos para el pre-DOC.
- **Catalizador de oxidación diésel.** Se muestran los resultados obtenidos para el DOC en las dos configuraciones.
- **Estudio paramétrico.** Se realiza un estudio paramétrico variando las dimensiones del pre-DOC (longitud y/o diámetro). Además, se realizan estudios en función del volumen, para ello, se calcula primero el volumen de referencia del pre-DOC.

$$V = \pi \cdot r^2 \cdot L \quad (4.1)$$

El volumen de referencia del pre-DOC, para las dimensiones del prototipo (L=0,085m y D=0,03m) es 0,060 l.

4.1. WLTC frío

4.1.1. Emisiones y eficiencias acumuladas durante el ciclo

Se analizan los resultados experimentales las emisiones de CO acumuladas durante el ciclo y las eficiencias de conversión para cada uno de los equipos para ver lo que ocurre.

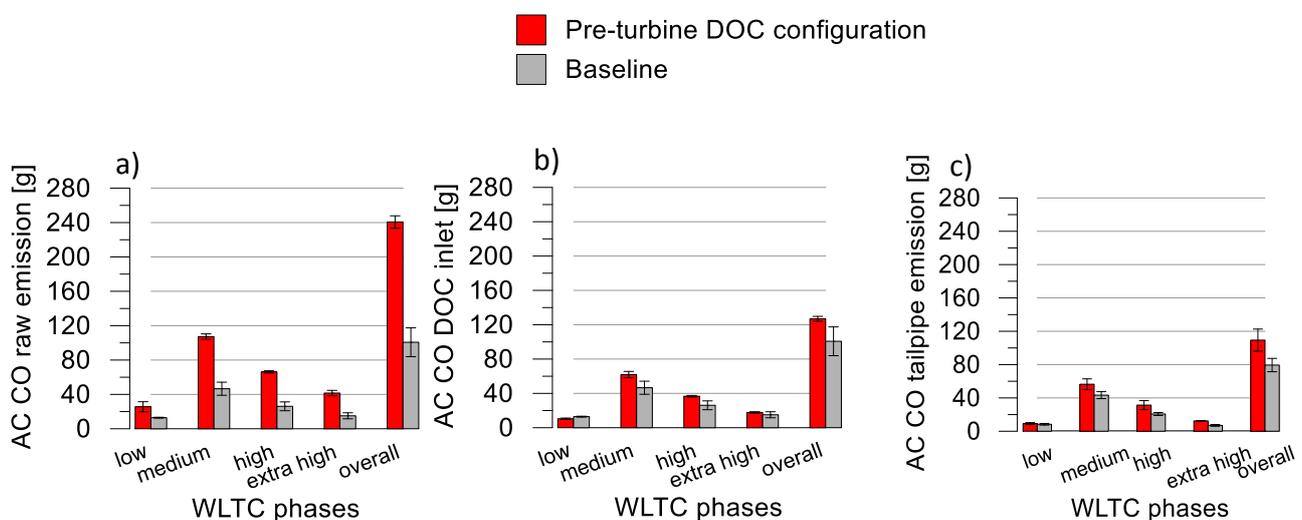


Figura 4.3. Emisiones acumuladas de CO a la salida del motor (a), a la entrada del DOC (b) y a la salida del DOC (c) durante WLTC frío.

En la figura 4.3 se representan las emisiones brutas que salen del motor (a), las que entran al DOC (b) y las que salen del DOC (c). Las emisiones brutas del motor y las de entrada al DOC en la configuración baseline son las mismas. Las emisiones de entrada al DOC en la configuración pre-turbo han pasado por el pre-DOC.

Se observa que las emisiones netas del motor son mayores en todas las fases del ciclo en la configuración pre-turbo. Ambas tienen la misma tendencia, alcanzan el máximo de las emisiones en la segunda fase y van decreciendo en el resto de fases.

En la figura 4.3b se observa que las emisiones que entran al DOC se han reducido en la configuración pre-turbo debido a su paso por el pre-DOC, aunque esta reducción no es lo suficientemente grande para que del DOC salgan las mismas emisiones en ambas configuraciones, es decir, se sigue emitiendo más en la configuración pre-turbo. Ambas configuraciones continúan manteniendo la misma tendencia del mismo modo que ocurre en las emisiones que salen del motor.

Finalmente, en la figura 4.3c se observan las emisiones una vez el flujo de los gases de escape ha pasado por el postratamiento. Se observa que existe una pequeña reducción de emisiones al pasar los gases por el DOC. Al final, con la configuración pre-turbo se emite más que en baseline.

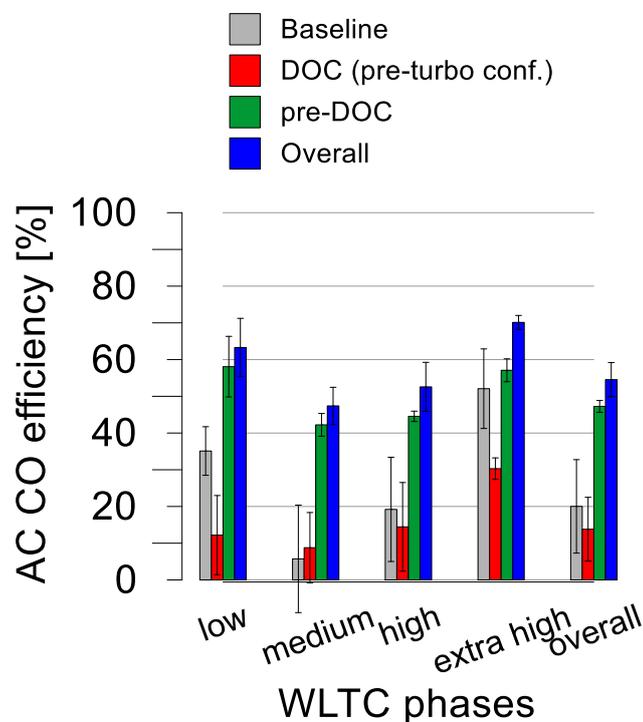


Figura 4.4. Eficiencias de conversión acumuladas de CO durante WLTC frío.

En la figura 4.4 se observan las eficiencias acumuladas del CO para cada una de las fases del ciclo. En gris se muestra la eficiencia del DOC en baseline, en rojo la eficiencia del pre-DOC, el verde la del pre-DOC y en azul la global, es decir, la eficiencia teniendo en cuenta tanto el pre-DOC como el DOC.

Todas las eficiencias siguen la misma tendencia. Se observa que la eficiencia en baseline es mayor que la del DOC en pre-turbo en todas las fases del ciclo excepto en la segunda fase, pero esto se cree que debido a un error de medición. La eficiencia del pre-DOC es mayor en todas las fases que las eficiencias del DOC.

Si se centra el análisis entre la eficiencias overall y baseline, se observa que el hecho de añadir el pre-DOC al postratamiento mejora la eficiencia de conversión, aunque como se muestra en la figura 4.3 las emisiones en la configuración pre-turbo son mayores.

A continuación, se analizan las emisiones y eficiencias de los hidrocarburos del mismo modo que se ha hecho con el monóxido de carbono.

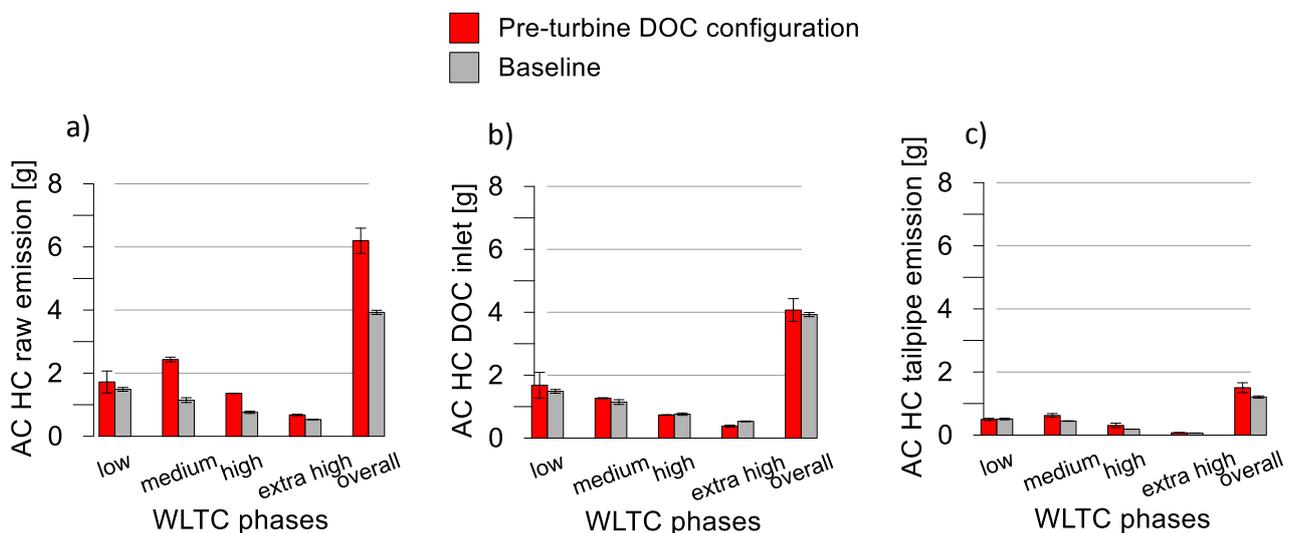


Figura 4.5. Emisiones acumuladas de HC a la salida del motor (a), a la entrada del DOC (b) y a la salida del DOC (c) durante WLTC frío.

Del mismo modo que corre con el CO, las emisiones brutas de HC del motor son mayores en la configuración baseline. La máxima diferencia entre ambas se da en la segunda fase del ciclo donde en la configuración pre-turbo se observa el valor máximo de emisiones. En este caso las tendencias no son las mismas, como ya se ha dicho en la configuración pre-turbo se tiene el máximo en la segunda fase y va disminuyendo a lo largo de las otras fases del ciclo; mientras que en la configuración baseline el máximo de emisiones se encuentra en la primera fase y después de esta van disminuyendo.

En la entrada al DOC, se observa la reducción de emisiones en la configuración baseline tras pasar por el pre-DOC. En este punto, las emisiones en ambas configuraciones tienen un valor muy similar, aunque las emisiones en pre-turbo continúan siendo mayores que en baseline excepto en la última fase del ciclo. Finalmente, las emisiones que entran al DOC en la

totalidad del ciclo en pre-turbo siguen siendo mayores que en baseline, aunque esta diferencia ha disminuido en comparación con la diferencia de las emisiones brutas del motor.

En la figura 4.5c se observa una notable reducción de las emisiones en ambas configuraciones tras pasar por el DOC. Las emisiones que salen del DOC tienen valores similares para ambas configuraciones siendo ligeramente superiores las emisiones en pre-turbo.

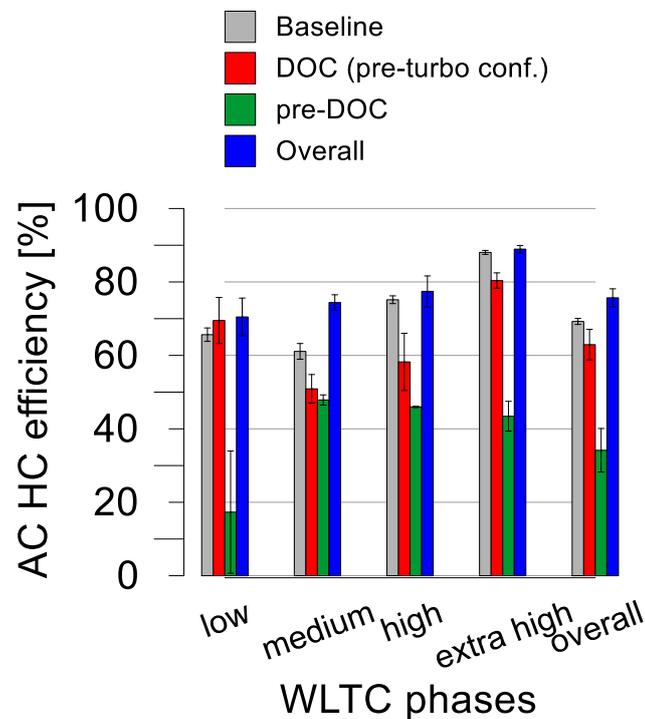


Figura 4.6. Eficiencias de conversión acumuladas de HC durante WLTC frío.

En la figura 4.6 se observan las eficiencias de conversión acumuladas de HC en cada fase del ciclo frío. Se observa que la eficiencia del DOC en baseline es mayor que la del DOC en pre-turbo excepto en la primera fase del ciclo, esto se justifica observando en la figura 4.5 que la reducción total de las emisiones en la primera fase del ciclo desde que salen del motor hasta que salen del DOC es mayor en pre-turbo que en baseline.

En este caso se observa que la eficiencia de conversión del pre-DOC es menor que las eficiencias del DOC, aunque finalmente en la eficiencia global del postratamiento se observa un aumento de la eficiencia con respecto a baseline, por lo que el pre-DOC ayuda a la conversión de los contaminantes.

Si se comparan las tendencias de las emisiones acumuladas durante el ciclo del monóxido de carbono con las de los hidrocarburos, se observa que en el caso del monóxido de carbono la segunda fase es la más crítica por ser la que más contaminantes emite tanto a la entrada del pre- como a la entrada y salida del DOC. Sin embargo en el caso de los hidrocarburos se observa que las emisiones van decreciendo por fases.

4.1.2. Pre-catalizador de oxidación diésel: Pre-DOC

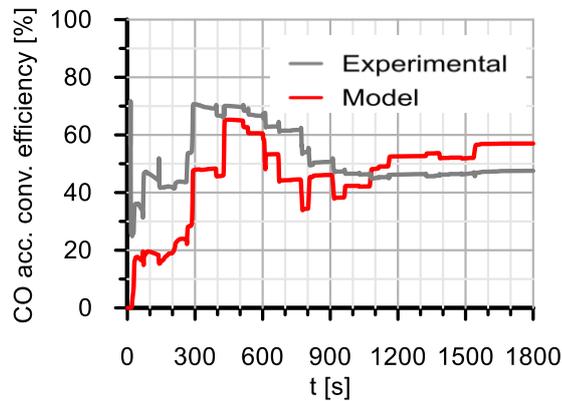


Figura 4.7. Eficiencia de conversión de CO del pre-DOC para WLTC frío.

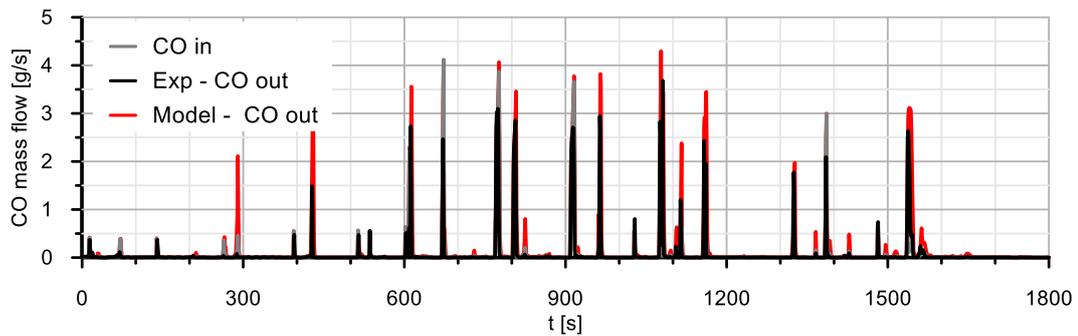


Figura 4.8. Emisiones instantáneas de CO en el pre-DOC para WLTC frío.

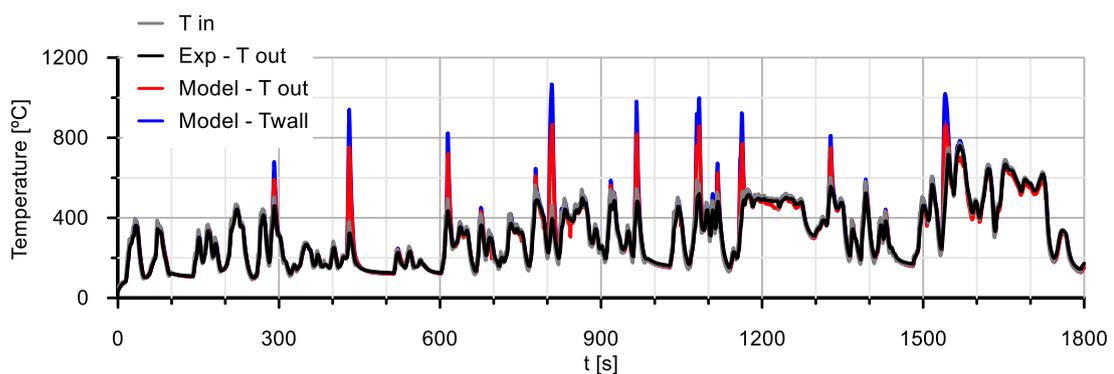


Figura 4.9. Temperaturas en el pre-DOC para WLTC frío.

En la figura se 4.7 se muestra la evolución de la eficiencia de conversión del monóxido de carbono con el tiempo, donde se observa que el modelo captura bien la tendencia del experimento, por lo que se puede afirmar que el modelo está bien ajustado. Se puede apreciar que el modelo se queda por debajo del experimento, esto se justifica con la ayuda de la figura 4.8 en la que se observa que en los picos de emisiones de CO el modelo no quema tanto como

el experimento. Que el modelo no queme tanto no es por el hecho de tener menor temperatura. En la figura 4.9 se observa que la temperatura de salida del modelo en los instantes donde se producen los picos de emisiones del modelo a la salida es mayor que la del experimento por lo que debería quemar más. Esta diferencia de temperatura no es debida a que el modelo lo prediga así, sino que el termopar que mide la temperatura experimentalmente no posee la resolución suficiente para alcanzar los picos que se observan en el modelo y mide una temperatura promedio.

A continuación, se muestra el análisis de las eficiencias y emisiones para el caso de los hidrocarburos.

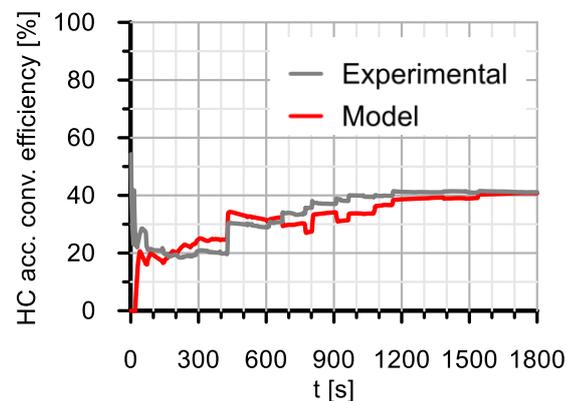


Figura 4.10. Eficiencia de conversión de HC del pre-DOC para WLTC frío.

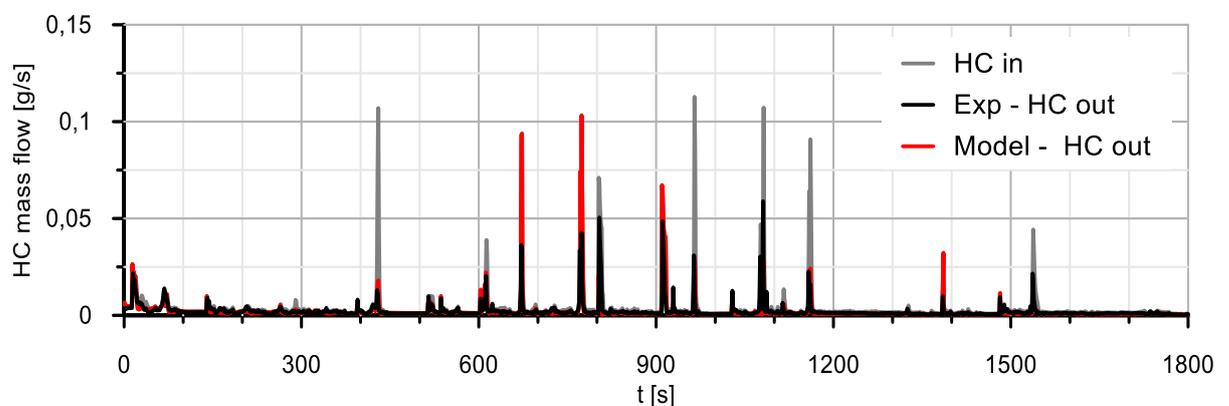


Figura 4.11. Emisiones instantáneas de HC en el pre-DOC para WLTC frío.

En la figura 4.10 se muestra la evolución de la eficiencia de conversión de los hidrocarburos con el tiempo, se observa que el modelo se ajusta bien a la tendencia del experimento quedando por debajo de la experimental en algunos tramos. La justificación es la misma que para el caso del monóxido de carbono, en esos puntos en los que el modelo queda por debajo del experimento se ve en la figura 4.11 que los picos de las emisiones instantáneas del modelo a la salida son mayores que la del experimento.

La respuesta en temperaturas corresponde con la misma para el caso del monóxido de carbono, y se puede ver en la figura 4.9.

4.1.3. Catalizador de oxidación diésel:DOC

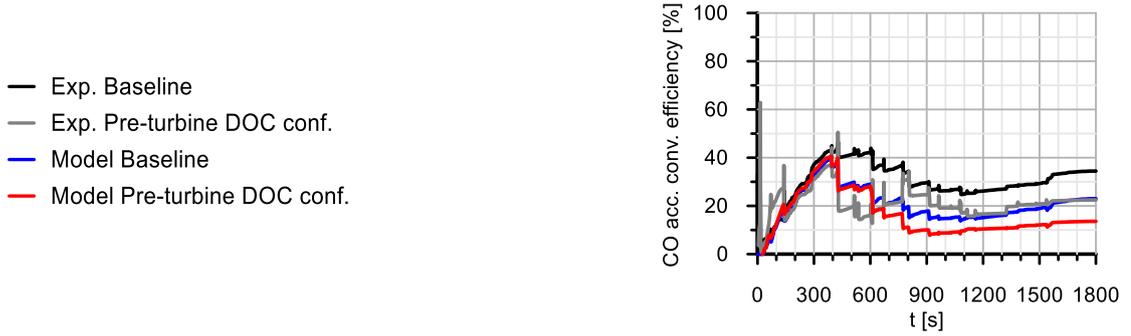


Figura 4.12. Eficiencias de conversión de CO del DOC en configuración pre-turbo y baseline para WLTC frío.

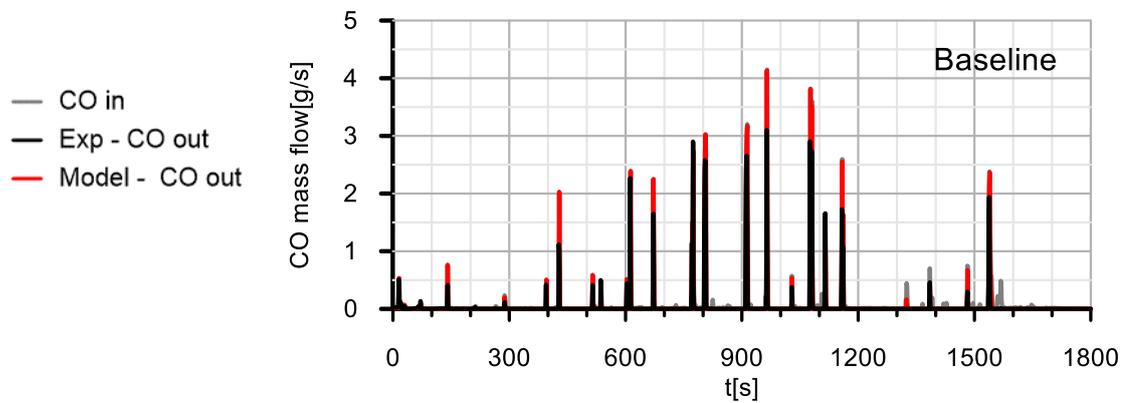


Figura 4.13. Emisiones instantáneas de CO en el DOC configuración baseline en WLTC frío.

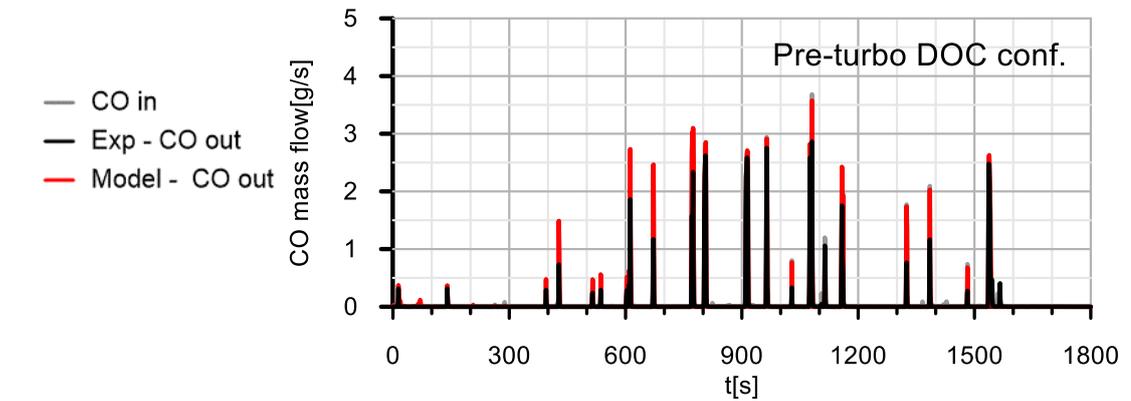


Figura 4.14. Emisiones instantáneas de CO en el DOC para configuración pre-turbo en WLTC frío.

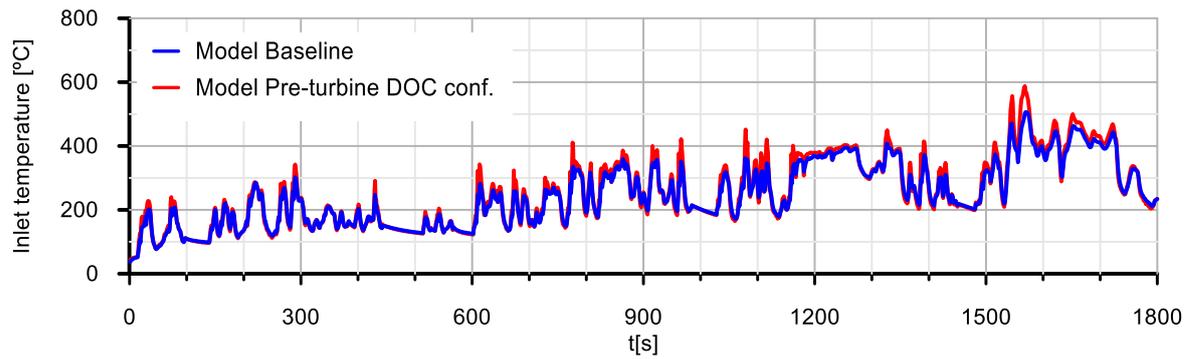


Figura 4.15. Temperaturas de entrada al DOC en configuración pre-turbo y baseline en WLTC frío.

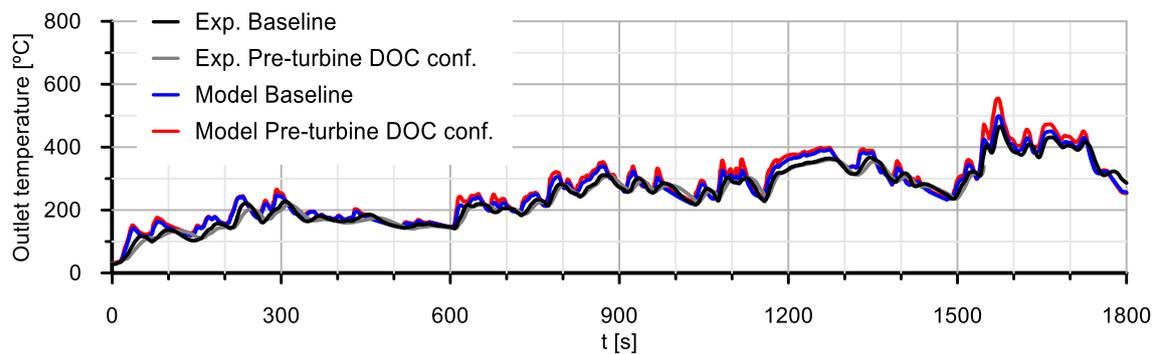


Figura 4.16. Temperaturas de salida del DOC en configuración pre-turbo y baseline en WLTC frío.

En la figura 4.12 se muestran la evolución con el tiempo de las eficiencias de conversión del monóxido de carbono en el DOC en ambas configuraciones. Se muestran tanto las eficiencias obtenidas con los datos experimentales como las eficiencias del modelado. Se observa que el modelado se ajusta bastante bien al experimento tanto en baseline como en la configuración pre-turbo.

Se observa que hay instantes en los que el modelado queda por debajo del experimento, esto se justifica con las figuras 4.13 y 4.14 correspondientes a las emisiones instantáneas de CO en el DOC para baseline y pre-turbo respectivamente. En las cuales se observa que los picos de monóxido de carbono a la salida dados por el modelo son mayores que los dados por el experimento. Además, al comparar ambas figuras, se observa que los picos en pre-turbo son mayores que los picos en baseline lo que implica que se emitirá más al final si se calcula el acumulado, hecho que confirma lo analizado experimentalmente en las emisiones acumuladas.

En cuanto a la respuesta en temperatura, se observa en la figura 4.15 que la temperatura de entrada al DOC en pre-turbo es mayor en baseline, esto corresponde a que el gas proviene del pre-DOC y en él tienen lugar reacciones exotérmicas que elevan la temperatura del gas y por lo tanto la temperatura a la entrada del DOC.

En la figura 4.16 se muestran las temperaturas de salida del gas del DOC tanto para el experimento como para el modelado, en pre-turbo se observan mayores temperaturas.

A continuación, se muestran las mismas gráficas de HC que se han mostrado para el monóxido de carbono. Las temperaturas son las mismas que las de las figuras 4.15 y 4.16.

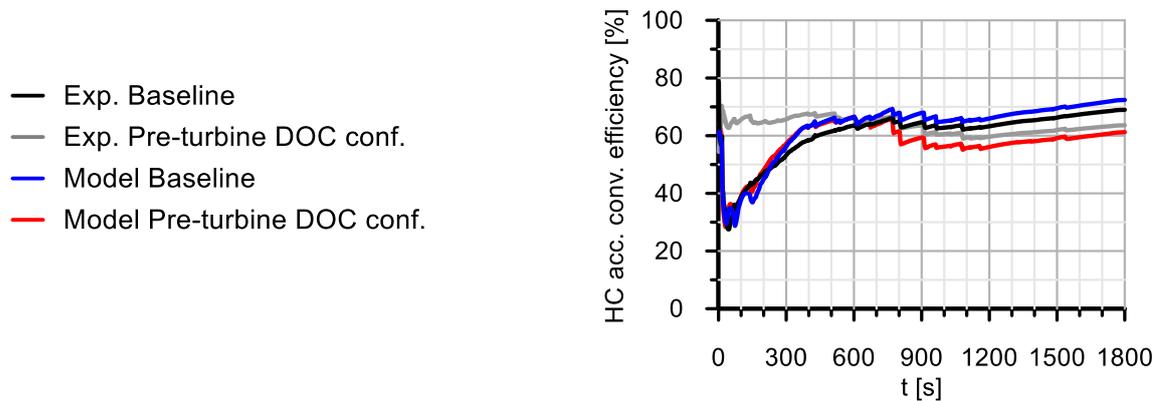


Figura 4.17. Eficiencias de conversión de HC del DOC en configuración pre-turbo y baseline para WLTC frío.

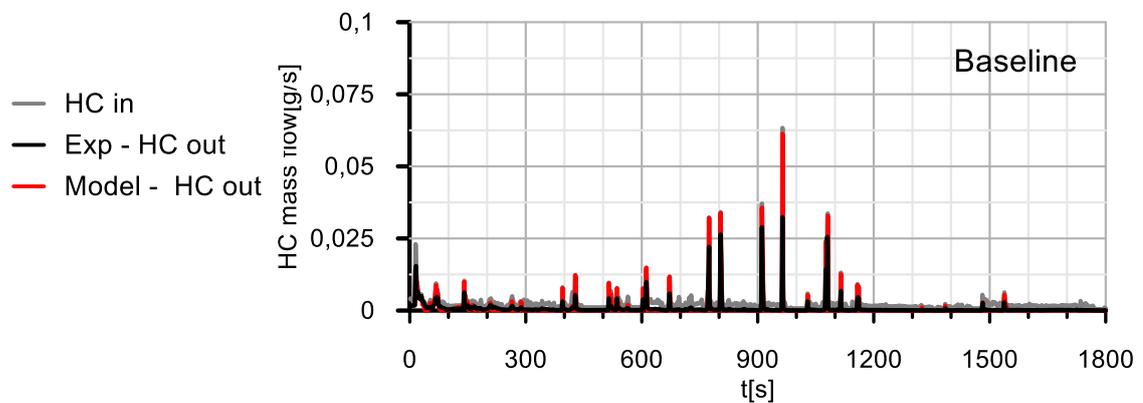


Figura 4.18. Emisiones instantáneas de HC en el DOC en configuración baseline para WLTC frío.

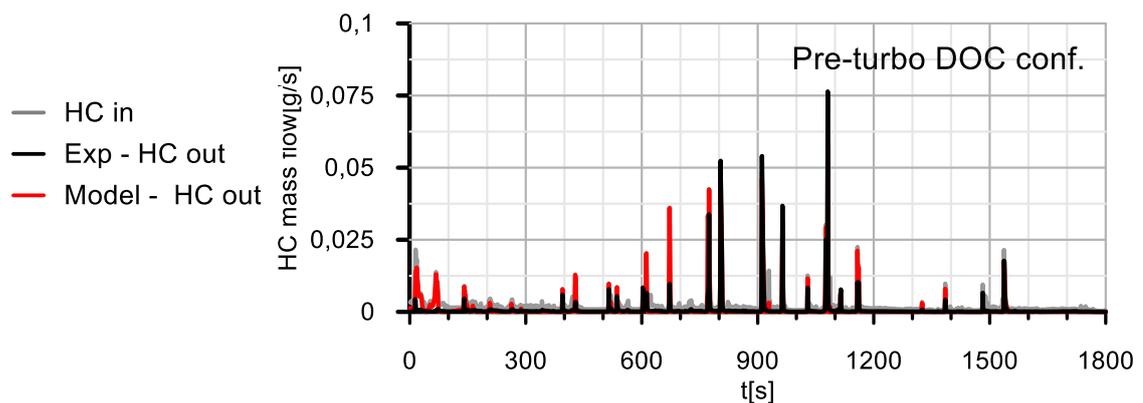


Figura 4.19. Emisiones instantáneas de HC en el DOC en configuración pre-turbo para WLTC frío.

En la figura 4.17 se muestran las eficiencias de conversión de los hidrocarburos. Se puede ver que el modelo se adapta a los resultados experimentales. Destaca que, en pre-turbo los resultados del modelo quedan por debajo de la eficiencia experimental, si se observa la figura 4.15 donde se muestran las emisiones instantáneas de los hidrocarburos justifica este hecho, ya que los picos de emisiones de salida dados por el modelo son mayores que los medidos experimentalmente.

Al comparar las emisiones instantáneas en baseline con las emisiones en pre-turbo se observa que estas últimas son mayores, por lo que se corrobora lo analizado experimentalmente en las emisiones acumuladas durante el ciclo.

4.2. WLTC caliente

4.2.1. Emisiones y eficiencias acumulativas durante el ciclo

A continuación, se analizan los resultados de las emisiones y eficiencias acumuladas durante el ciclo del mismo modo que se ha realizado con WLTC frío, analizando primero el CO y posteriormente el HC.

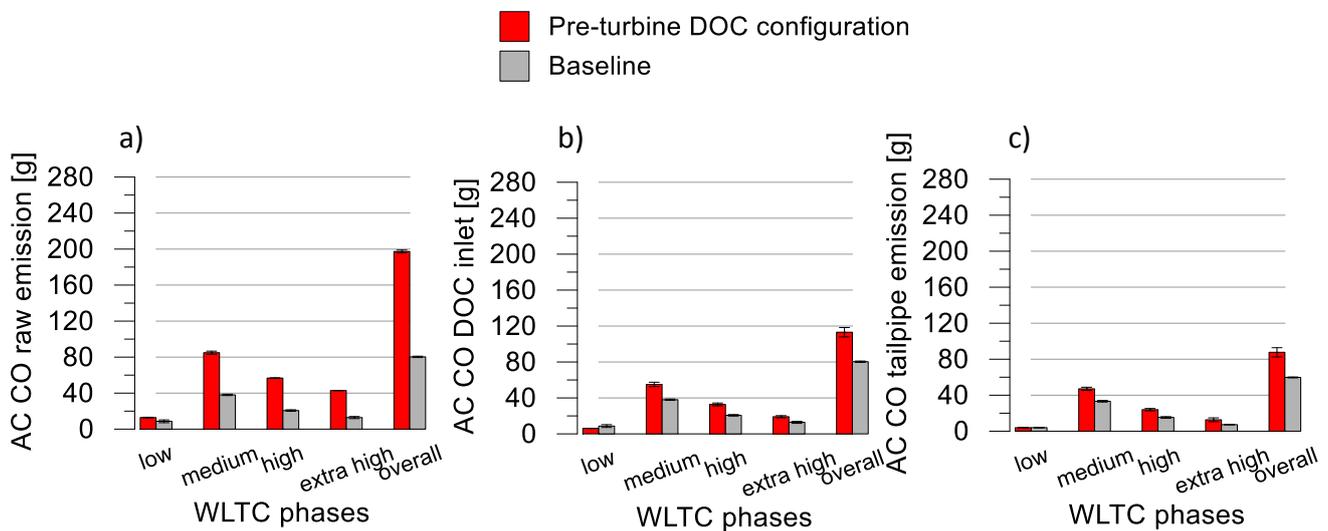


Figura 4.20. Emisiones acumuladas de CO a la salida del motor (a), a la entrada del DOC (b) y a la salida del motor (c) durante WLTC caliente.

En la figura 4.20a se observa que las emisiones que salen del motor son mayores en la configuración pre-turbo. Las emisiones tienen la misma tendencia, alcanzan el máximo de las emisiones en la segunda fase y van decreciendo en el resto de fases hasta el final del ciclo.

En la figura 4.20b se observa que las emisiones que entran al DOC se han reducido en la configuración pre-turbo a causa de su paso por el pre-DOC, esta reducción de emisiones no es suficiente para reducir los niveles e igualarlos a la configuración baseline. Ambas configuraciones continúan manteniendo la misma tendencia del mismo modo que ocurre en las emisiones que salen del motor.

En la figura 4.20c se observan las emisiones a la salida del DOC donde se ve que existe una reducción de emisiones respecto a la entrada del DOC tanto para baseline como para pre-turbo, aunque esta reducción no es notablemente alta en ninguna de las configuraciones. Finalmente, se emite más CO en pre-turbo.

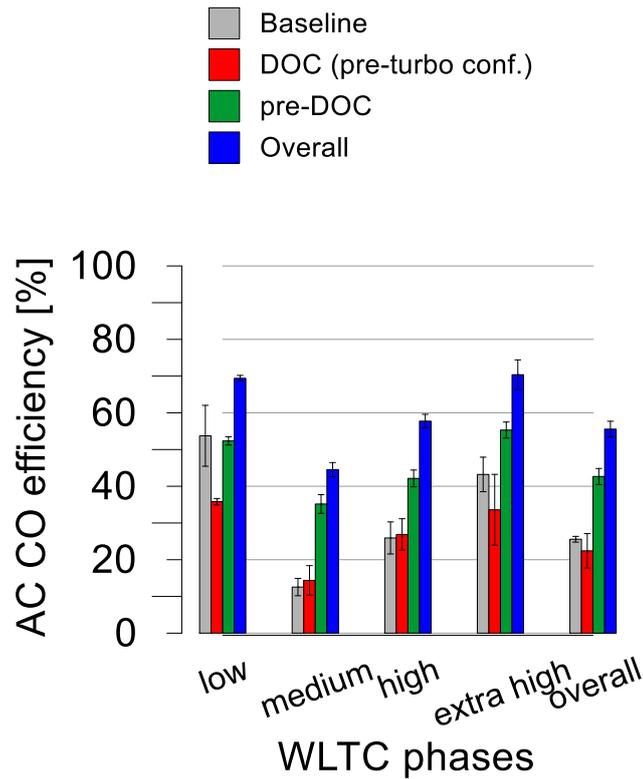


Figura 4.21. Eficiencias acumuladas de CO durante WLTC caliente.

Si se comparan entre sí las eficiencias acumuladas del DOC en ambas configuraciones se observa que no siguen una tendencia clara, ya que en la primera y última fase la eficiencia en baseline es mayor que la eficiencia en pre-turbo, sin embargo, en la segunda y tercera ocurre al contrario. Aunque la diferencia entre ambos en la primera y cuarta fase es mayor que en las otras dos.

Excepto en la primera fase donde la eficiencia del pre-DOC queda por debajo del DOC en baseline, en el resto de fases la eficiencia de conversión del pre-DOC es mayor que la del DOC en ambas configuraciones.

Finalmente, si se compara las eficiencias entre baseline y overall, se observa que la eficiencia de esta última durante cada una de las fases es mayor.

El análisis para el caso de los hidrocarburos es análogo al caso del monóxido de carbono.

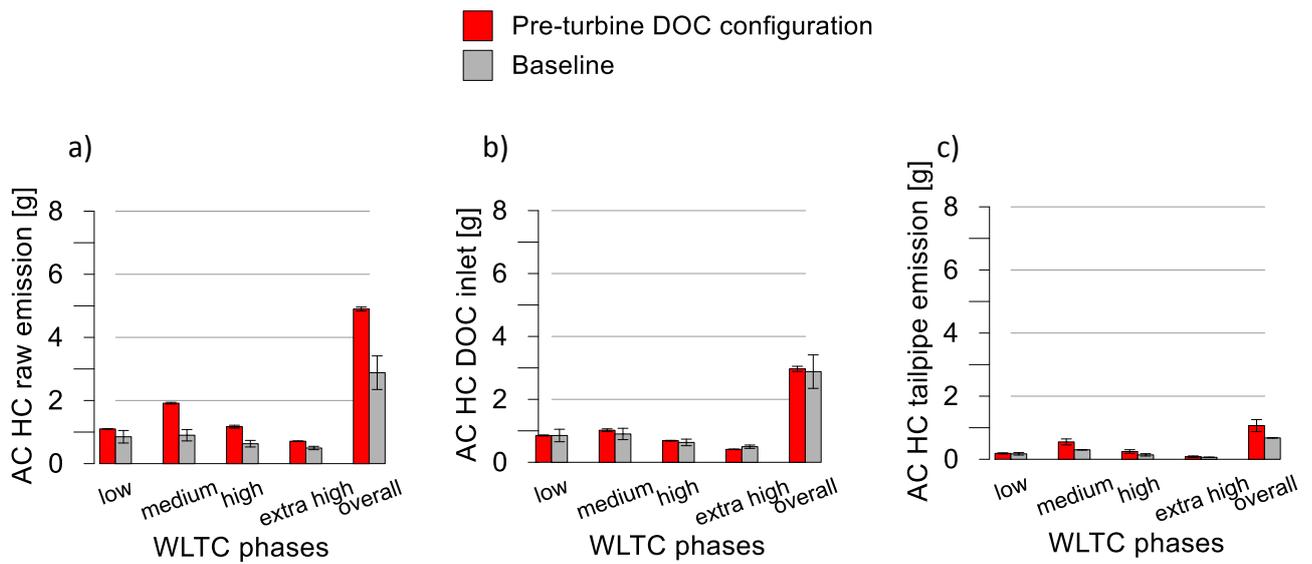


Figura 4.22. Emisiones acumuladas de HC a la salida del motor (a), a la entrada del DOC (b) y a la salida del motor (c) durante WLTC caliente.

Del mismo modo que ocurre con el CO, las emisiones del motor de HC son mayores en la configuración pre-turbo. Las emisiones en ambas configuraciones tienen la misma tendencia, tienen su máximo en la segunda fase del ciclo y son menores en el resto de las fases hasta el final, se observa que es en la última fase del ciclo donde se tiene el valor mínimo de emisiones.

En la figura 4.22b de entrada al DOC se observa que las emisiones de entrada tienen valores similares para ambas configuraciones, lo que demuestra que el pre-DOC realiza su cometido de reducir las emisiones. Continúan manteniendo la misma tendencia que se ha descrito en el párrafo anterior.

Finalmente, en la salida del DOC se observa que aun habiendo entrado en el DOC unos niveles de emisiones muy similares entre sí en ambas configuraciones, a la salida del DOC se emite más en la configuración pre-turbo, lo que demuestra que la eficiencia de conversión del DOC en baseline es mayor que la del pre-DOC.

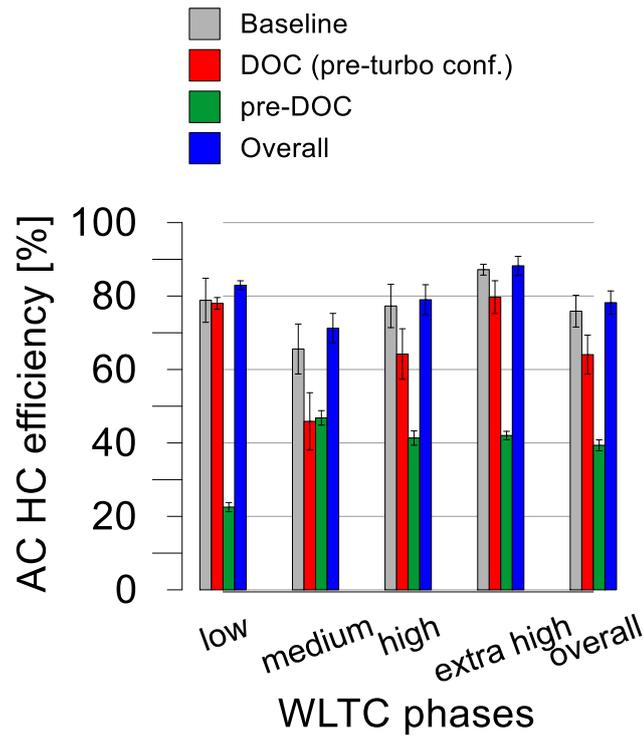


Figura 4.23. Eficiencias acumuladas de HC durante WLTC caliente.

Como ya se ha observado en el resto de las figuras correspondientes a las eficiencias acumuladas durante el ciclo, si se comparan las eficiencias de conversión del DOC en baseline y en pre-turbo la eficiencia en baseline es mayor.

El hecho de añadir el pre-DOC repercute aumentando la eficiencia de conversión global, esto se ve al comparar las series baseline (gris) y overall (azul).

4.2.2. Pre-catalizador de oxidación diésel: Pre-DOC

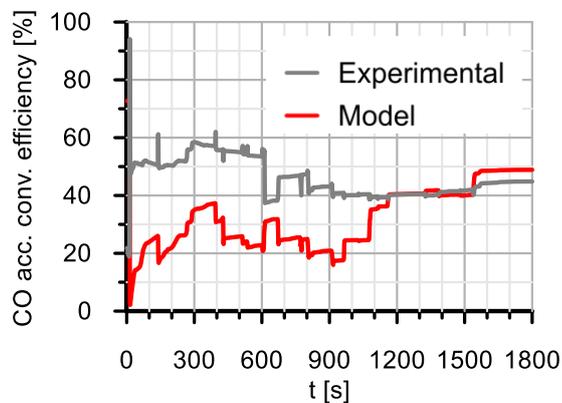


Figura 4.24. Eficiencia de conversión del CO del pre-DOC para WLTC caliente.

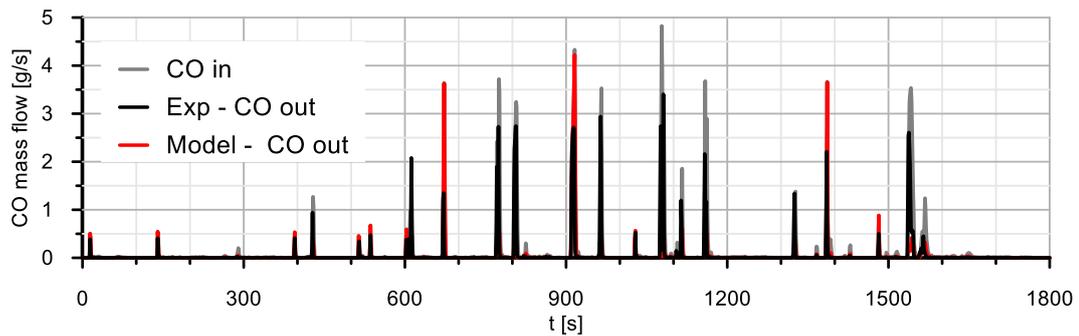


Figura 4.25. Emisiones instantáneas de CO en el pre-DOC para WLTC caliente.

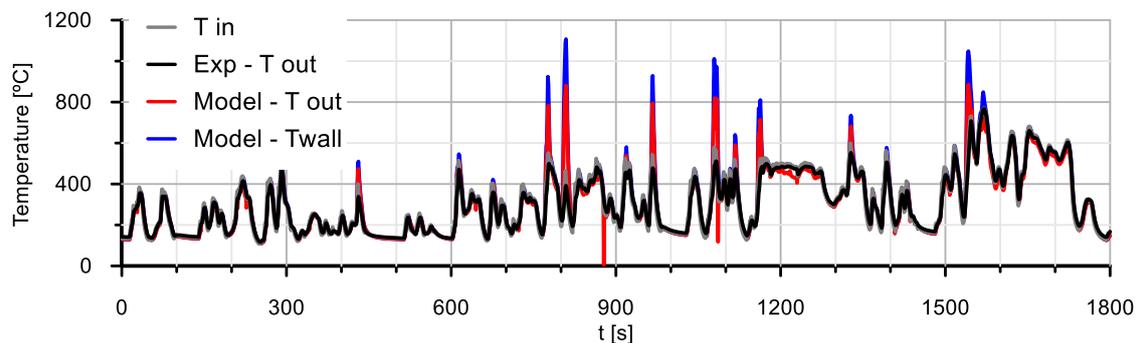


Figura 4.26. Temperaturas en el pre-DOC para WLTC caliente.

El análisis para el ciclo en caliente es equivalente al realizado en el apartado 4.1.2 correspondiente con el análisis del ciclo en frío.

En la figura 4.24 se muestra cómo se adapta la eficiencia calculada con los resultados del modelo a la experimental. Se observa que pilla la tendencia, pero queda por debajo del experimento. Esto es debido a que en las emisiones instantáneas (figura 4.25) los picos de emisiones de CO son mayores en el modelo.

Del mismo modo que ocurre en el ciclo en frío, se observa en la figura 4.26 donde se muestran las temperaturas de entrada, de pared y de salida tanto del experimento como del modelo, que se tienen picos de temperatura muy altos en la temperatura de salida dada por el modelo en comparación con la experimental. Esta diferencia es causada por el sensor que mide experimentalmente la temperatura, que no posee la capacidad de captar esos picos, por lo que realmente la diferencia de temperaturas no es tan brusca.

A continuación, se muestran los resultados para el caso de los hidrocarburos. La respuesta en temperaturas es la misma que para el caso de monóxido de carbono.

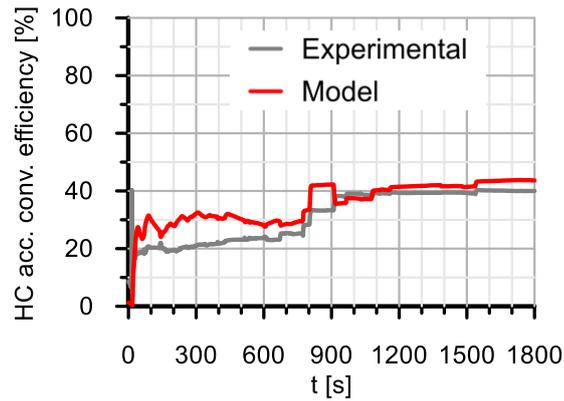


Figura 4.27. Eficiencia de conversión de HC del pre-DOC para WLTC caliente.

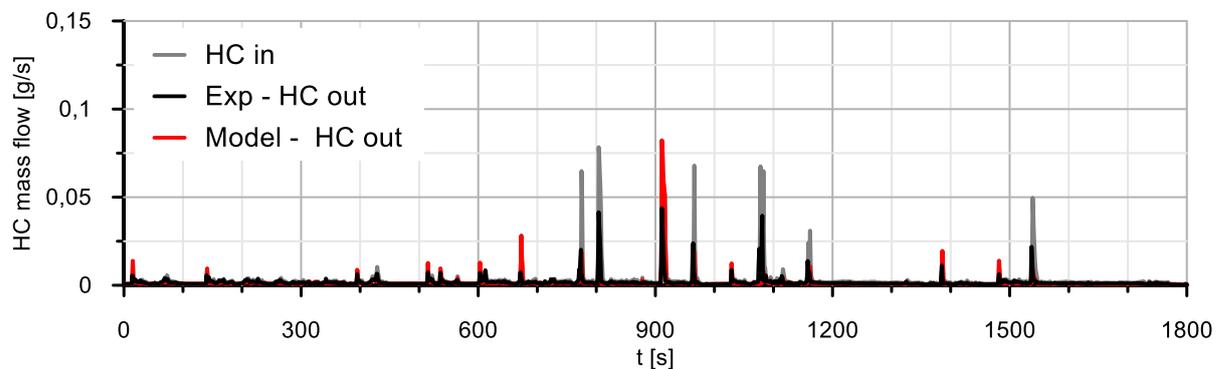


Figura 4.28. Emisiones instantáneas de HC en el pre-DOC para WLTC caliente.

En la figura 4.27 se observa la evolución de las eficiencias de conversión de los hidrocarburos con el tiempo, se observa como la tendencia del modelo se adapta a la del experimento. En la figura 4.28 se muestran las emisiones instantáneas de los hidrocarburos y se observa que del mismo modo que ocurre con el monóxido de carbono el modelo muestra mayores picos de emisiones a la salida en comparación con el experimento.

Finalmente, si se hace una comparación entre los ciclos en frío y caliente se observa que en caliente quemamos más contaminantes ya que se dispone de una mayor temperatura a la entrada y el tiempo que tarda en alcanzarse la temperatura crítica para que tenga lugar la reacción es la menor.

4.2.3. Catalizador de oxidación diésel: DOC.

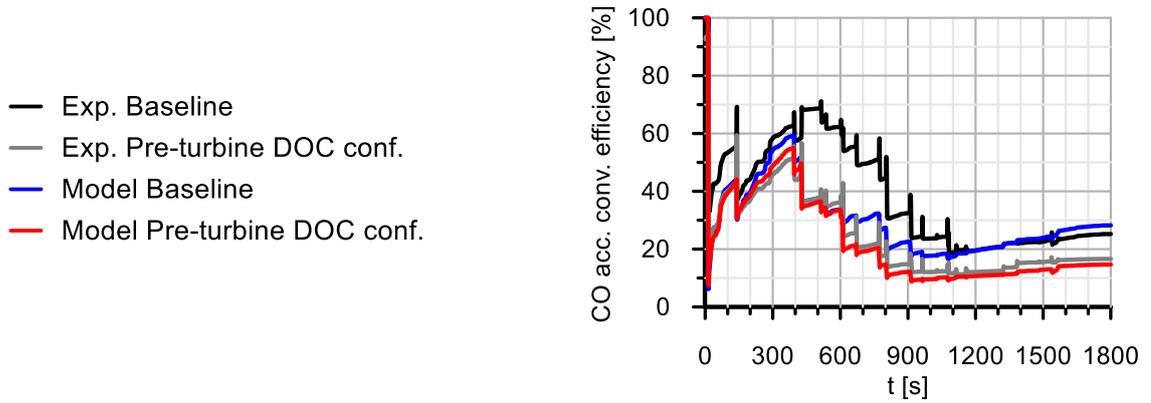


Figura 4.29. Eficiencias de conversión del DOC para WLTC caliente.

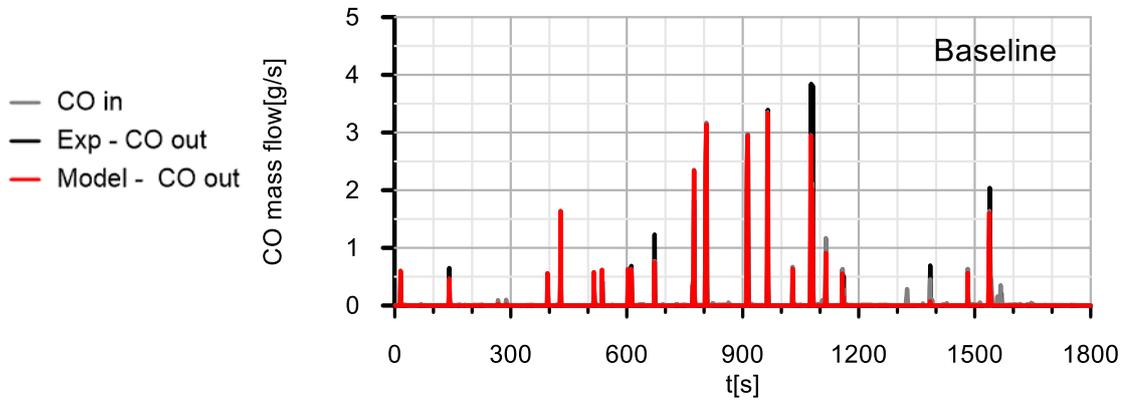


Figura 4.30. Emisiones instantáneas de CO en el DOC en configuración baseline para WLTC caliente.

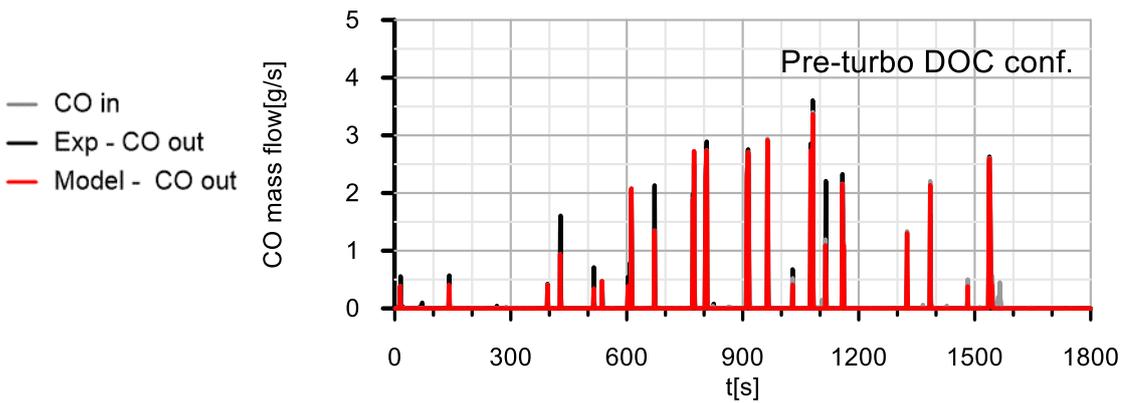


Figura 4.31. Emisiones instantáneas de CO en el DOC en configuración pre-turbo para WLTC caliente.

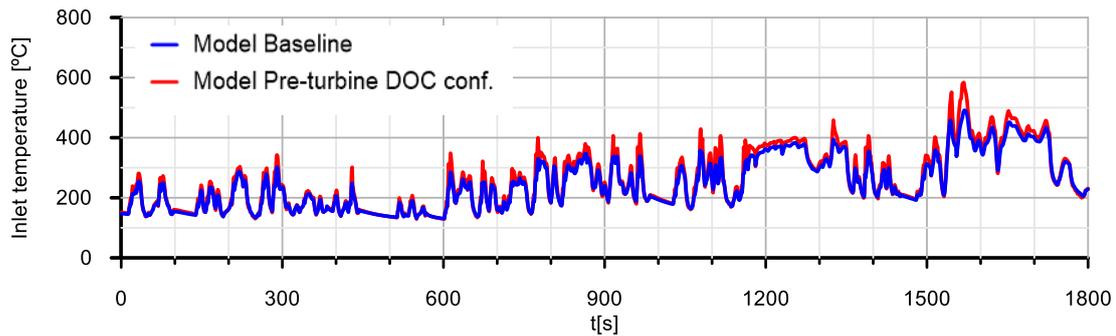


Figura 4.32. Temperaturas de entrada al DOC en configuración pre-turbo y baseline para WLTC caliente.

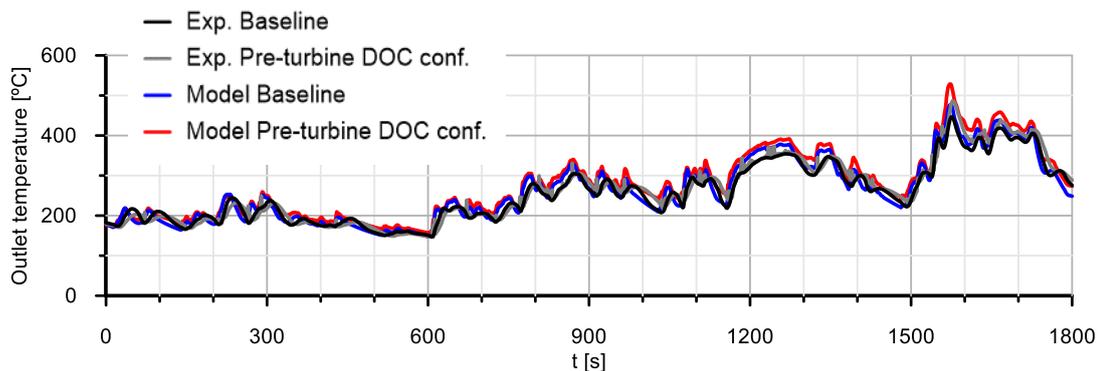


Figura 4.33. Temperaturas de salida al DOC en configuración pre-turbo y baseline para WLTC caliente.

En la figura 4.29 se muestra la evolución de las eficiencias de conversión del monóxido de carbono en el DOC para ambas configuraciones. Se observa cómo el modelado del DOC en baseline se adapta a la tendencia del experimento. En los puntos en los que queda por debajo del experimento, se ve en la figura 4.30 correspondiente con las emisiones instantáneas que el modelo quema menos, ya que los picos de emisiones son mayores que los del experimento.

En el caso de la configuración pre-turbo se observa que tanto la tendencia como los valores de la eficiencia dada por el modelo se adaptan casi perfectamente a la eficiencia experimental. Esto se ve reflejado en la figura 4.31 donde se muestran las emisiones instantáneas en pre-turbo y se ve como los picos de emisiones son similares en el modelo y en el experimento.

Observando la figura 4.29 se confirma lo analizado en las eficiencias acumuladas durante el ciclo en el experimento, que la eficiencia del DOC en baseline es mayor que la eficiencia en pre-turbo.

En la figura 4.32 se observa que la temperatura de entrada al DOC correspondiente con la configuración pre-turbo es más alta que la temperatura de entrada correspondiente con baseline. En la figura 4.33 se muestran las temperaturas de entrada al DOC y las de salida para las dos configuraciones. En ella se observa que las tendencias de la temperatura dada por el modelo corresponden con las tendencias de las experimentales.

A continuación, se realiza el mismo análisis para los hidrocarburos.

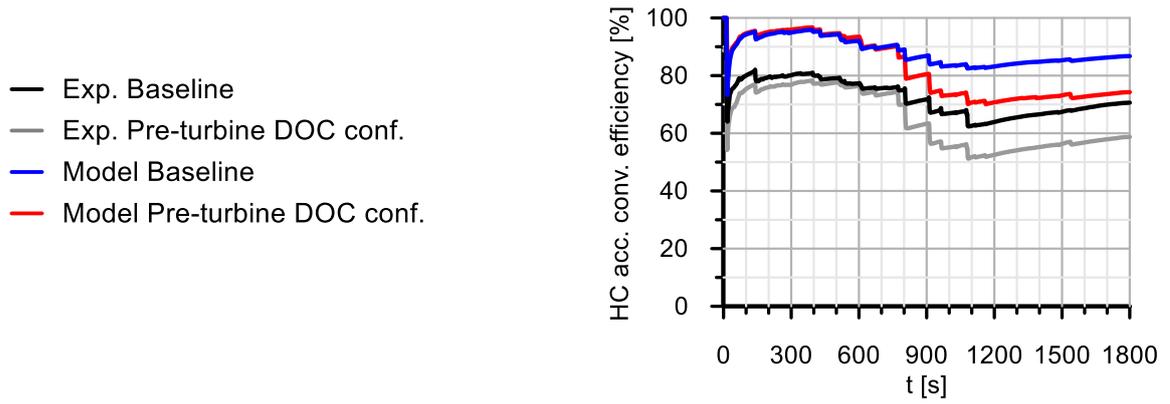


Figura 4.34. Eficiencias de conversión de HC del DOC para WLTC caliente.

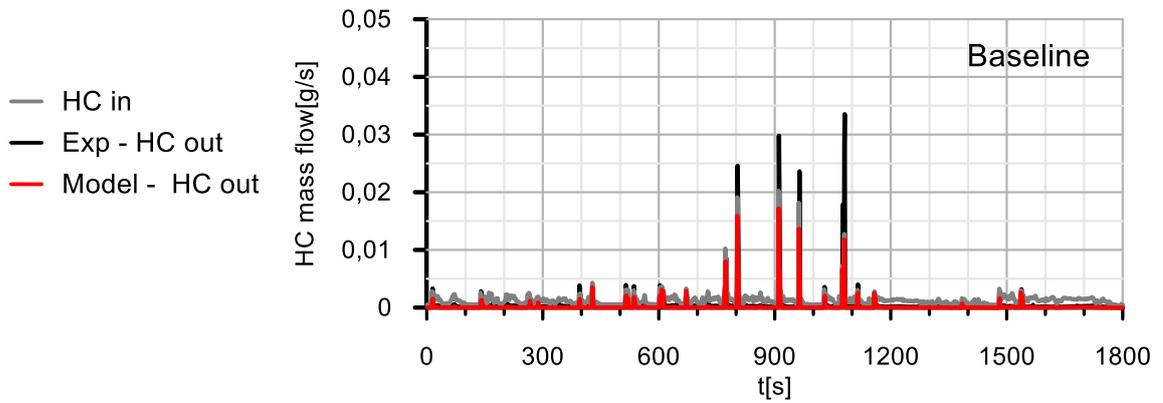


Figura 4.35. Emisiones instantáneas de HC en el DOC configuración baseline para WLTC caliente.

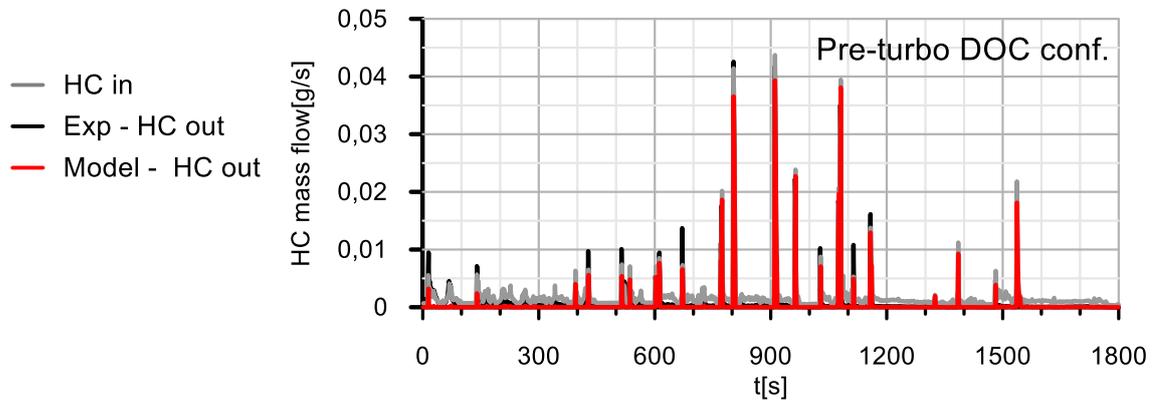


Figura 4.36. Emisiones instantáneas de HC en el DOC configuración pre-turbo para WLTC caliente.

En la figura 4.35 se muestra la evolución de las eficiencias de conversión de los hidrocarburos con el tiempo. Se observa como las eficiencias dadas por el modelo se adaptan a la tendencia del experimente, sobrestimando la eficiencia. Esta sobrestimación es debida a que el ciclo es en caliente y va sobrado de temperatura.

La sobrestimación mencionada puede verse reflejada en las figuras 4.35 y 4.36 correspondientes con las emisiones instantáneas de HC en baseline y pre-turbo

respectivamente. Se observa que en ambas el modelo llega a quemar más que el experimento, ya que las emisiones a la salida del modelo son iguales o menores que las experimentales.

Las temperaturas son las mismas que en el caso de los hidrocarburos y están reflejadas en las figuras 4.32 y 4.33.

4.3. Estudio paramétrico del pre-DOC.

Como se ha visto, la presencia del pre-DOC en el postratamiento aumenta la eficiencia de conversión, pero a su vez incrementa las emisiones en el escape, por ello y para ver la influencia del volumen en la eficiencia se lanzan estudios paramétricos variando el volumen. Se lanzan cuatro casos de estudio, dos de ellos con un volumen doble al de referencia y los otros dos con un volumen cuádruple. En la tabla 4.2 se muestran las variaciones de las dimensiones que se han realizado para obtener los volúmenes que se van a estudiar.

	Diámetro [m]	Longitud [m]	Volumen [l]
Case 0	D (D=0,03)	L (L=0,085)	0,060
Case 1	D	2 L	0,120
Case 2	1,4 D	L	0,120
Case 3	2 D	L	0,240
Case 4	D	4 L	0,240

Tabla 4.2. Variación del volumen del pre-DOC para el estudio paramétrico

4.3.1. WLTC frío

En este apartado se muestran los resultados obtenidos para el estudio paramétrico en WLTC frío

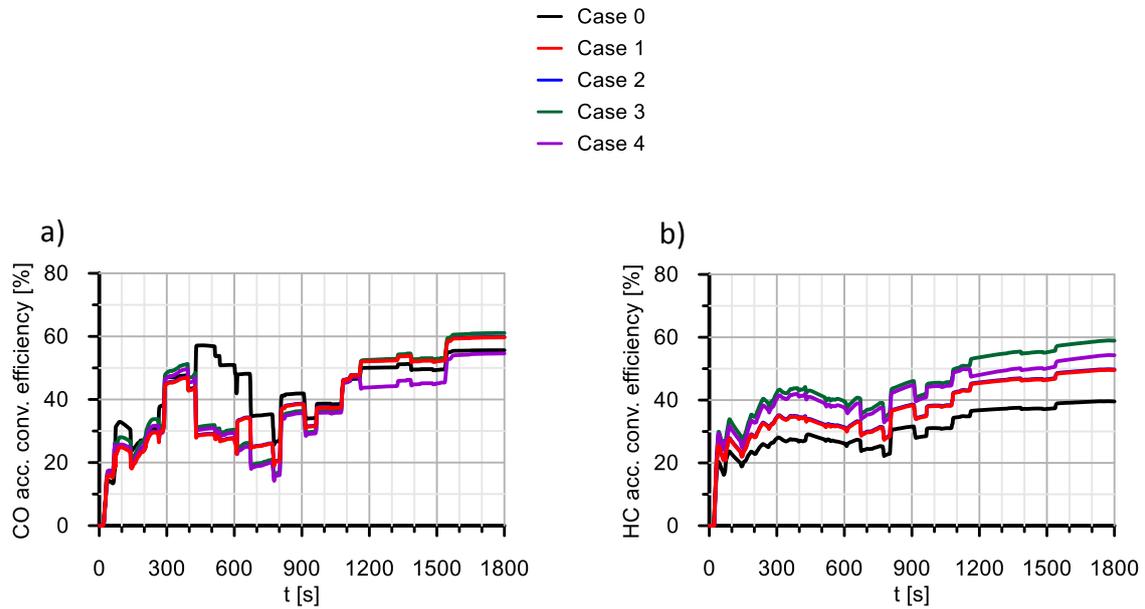


Figura 4.37. Evolución de las eficiencias de conversión de CO (a) y HC (b) en función del volumen para WLTC frío.

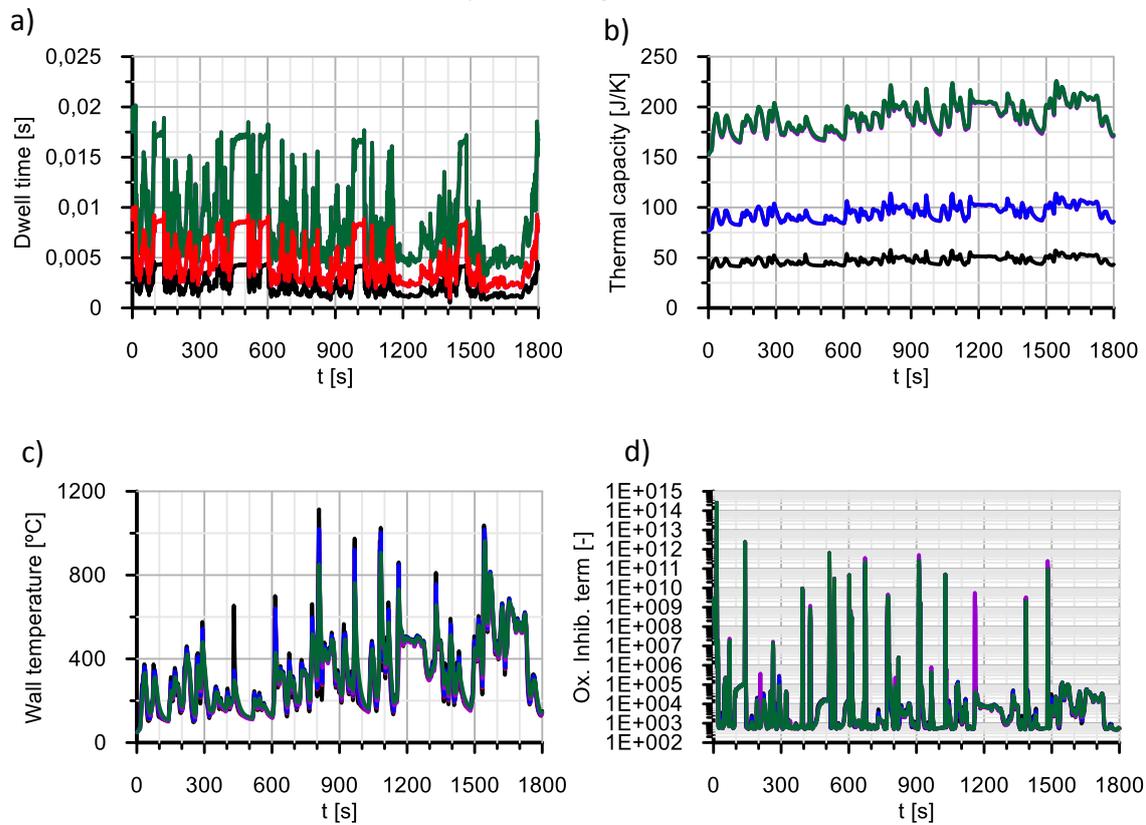


Figura 4.38. Evolución del tiempo de residencia (a), capacidad térmica (b), temperatura de pared (c) y término de inhibición (d) en función del volumen para WLTC frío.

En la figura 4.37 se observa que, al aumentar el volumen, las eficiencias de conversión tanto del monóxido de carbono como de los hidrocarburos aumentan debido al aumento del tiempo de residencia. Al aumentar el volumen, el gas está más tiempo dentro del catalizador por lo que tiene más tiempo para que las reacciones de oxidación tengan lugar. Este aumento del tiempo de residencia en función del aumento del volumen puede advertirse en la figura 4.38a.

Si se analizan los hidrocarburos se observa que las eficiencias correspondientes a la variación del volumen siguen la misma tendencia que el caso de referencia. Conforme se aumenta el volumen, la eficiencia de conversión también aumenta, al observar la figura 4.37b se ve que las eficiencias de conversión correspondientes con un volumen de 0,240 l son mayores que las correspondientes con uno de 0,120 l.

En el caso del monóxido de carbono, al aumentar el volumen se observa que hay un cambio de tendencia respecto a la eficiencia de referencia. Con un volumen doble al de referencia es capaz de obtener la misma eficiencia que para un volumen 4 veces mayor, esto es debido a que al ser un volumen más reducido posee menor inercia térmica y permite que alcance antes la temperatura crítica ($T_{light\ off}$) para que empiece a quemarse el CO. El monóxido de carbono es el contaminante determinante, es decir, es el que primero empieza a quemarse y una vez que empieza a quemarse los hidrocarburos se retroalimentan, pero su $T_{light\ off}$ es menor. Esto se refleja en las temperaturas de pared, en las que se observa que el caso de mayor inercia amortigua los picos de temperatura, lo que conlleva a que localmente haya menor temperatura para que se lleve a cabo la reacción. Esto a su vez se refleja en los picos de inhibición y en que por consiguiente se quema menos. Todo está retroalimentado, se quema menos porque hay menos temperatura, a su vez hay menos temperatura porque al haber más volumen se necesita más tiempo para calentarlo.

4.3.2. WLTC caliente

A continuación, se muestran los resultados del estudio paramétrico para el WLTC caliente.

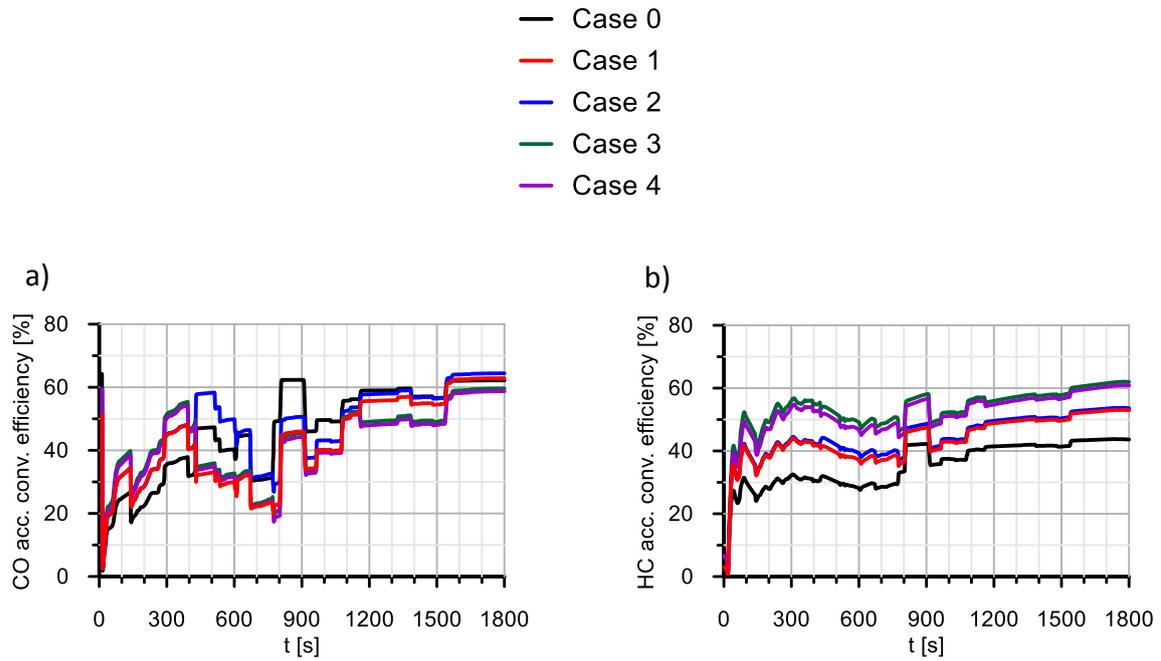


Figura 4.39. Evolución de las eficiencias de conversión de CO (a) y HC (b) en función del volumen para WLTC caliente

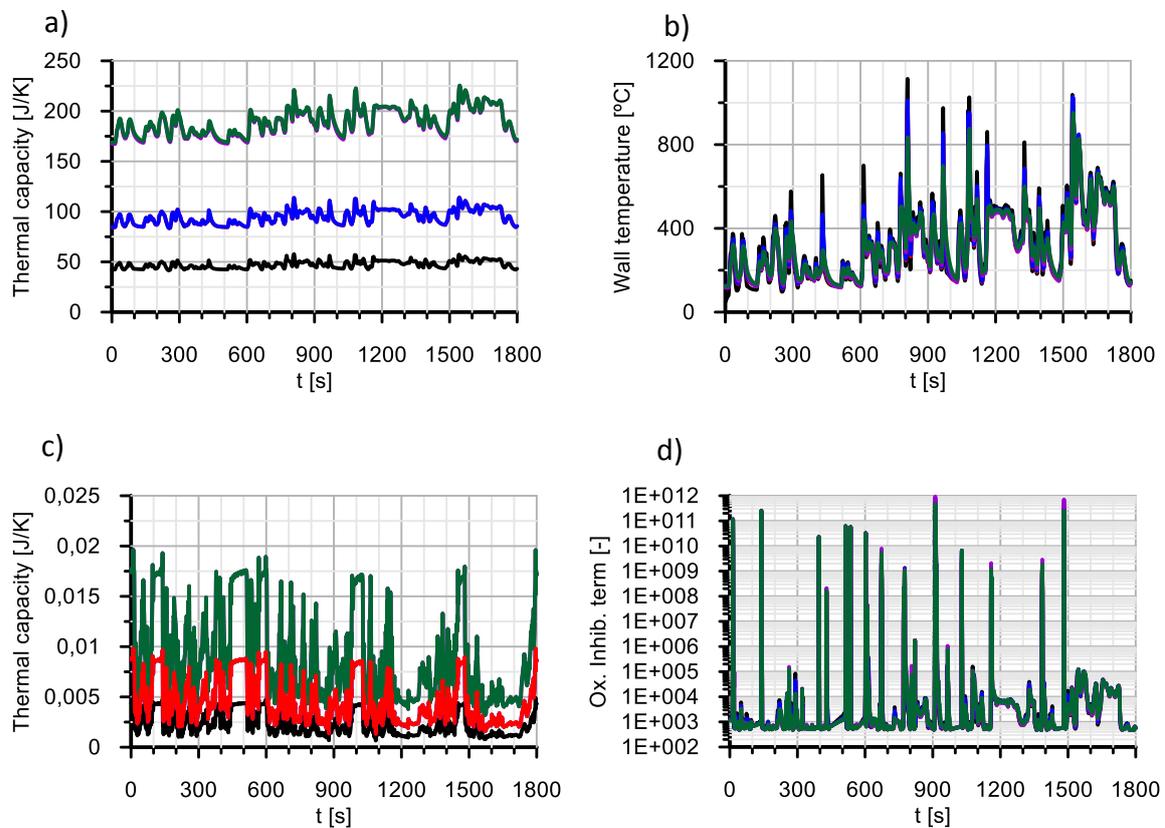


Figura 4.40. Evolución del tiempo de residencia (a), capacidad térmica (b), temperatura de pared (c) y término de inhibición (d) en función del volumen para WLTC caliente.

El análisis para el ciclo en caliente es análogo al análisis para el ciclo en frío.

Se observa que al aumentar el volumen las eficiencias de conversión del monóxido de carbono y de los hidrocarburos aumenta. Las eficiencias de los hidrocarburos aumentan manteniendo la tendencia de la eficiencia de referencia.

En el caso del CO como ya se ha comentado, hay un cambio de tendencia respecto a la de referencia. Además, se observa que los casos en los que se varía el diámetro para aumentar el volumen la eficiencia va mejor que en los casos en los que se aumenta la longitud. Esto es debido a que además de aumentar el tiempo de residencia se aumenta el número de canales y por consiguiente la superficie catalítica.

Si se comparan el ciclo en frío con el caliente, se observa que en caliente las eficiencias son algo mayores debido a que se tiene mayor temperatura de entrada, por lo tanto, se tarda menos en alcanzar la temperatura crítica de activación y la reacción tiene lugar antes.

5. Conclusiones

Una vez se ha realizado el estudio y analizados los resultados obtenidos se pueden extraer una serie de conclusiones:

- La presencia del pre-DOC evaluado experimentalmente en la línea de postratamiento genera un aumento de las emisiones en el motor. Con su uso se produce a su vez un aumento de las eficiencias de conversión del monóxido de carbono y de los hidrocarburos, sin embargo, este incremento no es suficiente para compensar el aumento de emisiones. Este incremento es mayor para los ciclos en frío, reduciéndose la emisión en el caso en caliente.
- El modelo de DOC es capaz de reproducir con bastante precisión la respuesta del catalizador, siguiendo las tendencias en ambas configuraciones. Por tanto, se dispone de una herramienta robusta e útil con poco coste computacional (tiempo real), permitiendo realizar estudios de análisis y pre-diseño, reduciendo la carga experimental.
- Mediante los estudios paramétricos se obtiene que al aumentar el volumen del pre-DOC se mejora la eficiencia de conversión tanto para CO como HC, por el aumento del tiempo de residencia, para que las reacciones tengan lugar. Sin embargo, el aumento de volumen conlleva un aumento de la inercia térmica del equipo, que supone mayor tiempo para alcanzar las temperaturas de activación.
- Se consiguen mejores prestaciones del pre-DOC incrementando el volumen mediante la variación de diámetro, debido a que además de aumentar el tiempo de residencia, se aumenta el número de canales. Esto supone además una ventaja en cuestiones de acople frente a incrementar la longitud, ya que el espacio disponible entre el escape del motor y la turbina para el pre-catalizador es restringido.

6. Trabajos futuros

Una vez realizado el estudio del presente documento, se pueden realizar una serie de trabajos futuros que se engloban dentro del ámbito de la investigación.

Con la continuación de estos estudios podría llegarse a unas dimensiones de longitud y diámetro óptimas para alcanzar unas eficiencias de conversión que sean capaces de compensar el aumento de emisiones. Se ha realizado el estudio paramétrico macroscópico, en un futuro podrían realizarse estudios microscópicos en los que se varíe el ancho de celda y espesor de pared.

Se ha estudiado el modelo de DOC aislado, un trabajo futuro sería implementar este modelo en el modelo virtual del motor (VEMOD) y evaluar de forma global el motor con el sistema de postratamiento para estudiar el conjunto.

Referencias

1. Pedro Piqueras Cabrera, *Contribución al modelado termofluidodinámico de filtros de partículas diésel de flujo de pared*, 2010
2. Óscar García Alfonso, *Análisis teórico-experimental de la arquitectura pre-turbo de sistemas de post-tratamiento en MCI*, 2013.
3. <http://www.aficionadosalamecanica.net/emision-gases-escape.htm> (21/05/19)
4. J. M. Desantes and F. Payri, *Motores de combustión interna alternativos*, Universitat Politècnica de València, 2011.
5. <http://cocheseco.com/wp-content/uploads/2015/04/esquema-filtro-particulas.jpg>, (17/05/2019)
6. Enrique José Sanchis Pacheco, *Modelado de la oxidación del hollín en filtros de partículas diésel*, 2019.
7. <http://www.adquim.com/adblue-la-clave-del-plan-de-prevencion-y-descontaminacion-atmosferica-de-la-rm-ppda/>, (23/05/19)
8. <http://planetadelmotor.com/reviews/todo-lo-que-ienes-que-saber-sobre-el-catalizador/>, (04/06/2019)
9. <https://archiwum.allegro.pl/oferta/opel-insignia-wklad-metalowy-katalizator-euro-4-i7634396645.html> (21/06/2019)
10. Carberry B., Grasi G., Guerin S., Jayat F. y Konieczny R. *Pre-turbocharger catalyst- Fast catalyst light-off evaluation*. SAE Technical Paper 2055-01-2142, 2005.
11. Johnson, T., *Review of Vehicular Emissions Trends*, Sae int. J. Engines 8(3): 2015, doi: 10.4271/2015-01-0993
12. *Lumped approach for Flow-Through and wall-flow monolithic reactors modelling for real-time automotive applications*. SAE 2018-01-0954, 2018.
13. <https://www.kanthal.com/en/products/material-datasheets/strip/kanthal-a-1/> (08/09/2019)

Documento II:
PRESUPUESTO

En este documento se recoge el presupuesto global originado por la realización del proyecto “*Estudio del impacto del uso de pre-catalizador de oxidación pre-turbo en la eficiencia de conversión de CO y HC*”. Para la realización del cálculo del presupuesto global, los costes se desglosan en costes parciales derivados de la mano de obra, los materiales utilizados, la amortización de los equipos y software y los costes generales.

Cabe destacar que para la realización del cálculo del presupuesto se debe tener en cuenta la duración del proyecto establecido en cuatro meses.

1. Presupuestos parciales

1.1. Coste de mano de obra

En el coste de mano de obra se tiene en cuenta la dirección del tutor del proyecto siendo este profesor y doctor del departamento, el apoyo del doctorando y el autor del proyecto, en concepto de becario.

En el cálculo de los costes de mano de obra se incluyen las horas dedicadas por el alumno becario en la realización del proyecto, las horas dedicadas a reuniones para el seguimiento del estado del proyecto junto con el tutor y doctorando, así como las horas dedicadas por el doctorando a la explicación y desarrollo del proyecto. Tal cantidad de horas se multiplica por el coste unitario que corresponde a cada uno de los participantes en el proyecto en función de su rango.

Concepto	Unidades	Cantidad	Coste unitario [€/h]	Coste [€]
Profesor tutor	h	16,00	39,50	632,00
Doctorando	h	120,00	19,75	2370,00
Becario	h	312,50	11,85	3703,13
COSTE TOTAL DE MANO DE OBRA				6705,13

1.2. Coste de amortización de los equipos y licencias de software

En este apartado se incluyen los costes derivados de los equipos y herramientas utilizadas para la realización del proyecto. Se debe tener en cuenta que los equipos y licencias utilizados no han sido adquiridos única y exclusivamente para la realización del presente estudio; sino que serán utilizados en futuros proyectos del *Departamento de Máquinas y Motores Térmicos durante su vida útil*, por lo que se realiza la amortización de estos. Además, los equipos y licencias no se han adquirido para este proyecto, sino que ya eran propiedad del departamento, por lo que el coste inicial no se añade al presente presupuesto.

Antes de realizar la amortización se debe tener en cuenta el coste inicial de compra de los productos, así como la cantidad utilizada de cada uno de ellos:

Concepto	Unidad	Cantidad	Coste unitario	
			[€/ud]	Coste [€]
Ordenador	ud	1,00	650,00	650,00
Microscopio electrónico PCE-MM200	ud	1,00	103,00	103,00
Licencia Grapher 10	ud	1,00	387,10	387,10
Licencia Microsoft Office 2016	ud	1,00	181,70	181,70
Licencia Visual Studio 2017	ud	1,00	395,00	395,00

La amortización se calcula en base a la ecuación siguiente:

$$\text{Coste de amortización} = \frac{\text{Coste inicial [€]}}{\text{Vida útil [años]}} \cdot \text{Tiempo de uso [años]}$$

Se establece un periodo de vida útil para cada uno de los equipos y licencias y un tiempo de uso durante el proyecto de 1/3 años, ya que el proyecto se fijó con una duración de 4 meses.

Concepto	Coste inicial [€]	Vida útil [años]	Tiempo de utilización [años]	Coste amortización [€]
Ordenador	650,00	5,00	0,33	43,33
Microscopio electrónico PCE-MM200	103,00	5,00	0,33	6,87
Licencia Grapher 10	490,00	5,00	0,33	32,67
Licencia Microsoft Office 2016	230,00	5,00	0,33	15,33
Licencia Visual Studio 2017	500,00	5,00	0,33	33,33
COSTE TOTAL DE AMORTIZACIÓN DE EQUIPOS Y SOFTWARE				131,53

1.3. Coste de material consumido

En este apartado se incluyen los costes de material empleado durante el periodo de realización del proyecto.

Concepto	Unidad	Cantidad	Coste unitario	
			[€/ud]	Coste [€]
Libreta	ud	1,00	1,50	1,50
Bolígrafo	ud	4,00	0,75	3,00
COSTE TOTAL DE MATERIAL CONSUMIDO				4,50

1.4. Costes indirectos

Para la obtención de todos los costes de los que depende el presupuesto es necesario añadir los costes indirectos. Estos se calculan como un tanto por cien de la suma de los gastos derivados de la mano de obra, amortización de equipos y licencias y materiales consumidos. Este porcentaje se establece en un 15%.

COSTE TOTAL DE MANO DE OBRA	6.705,13 €
COSTE TOTAL DE EQUIPOS INFORMÁTICOS Y SOFTWARE	1.973,00 €
COSTE TOTAL DE MATERIAL CONSUMIDO	4,50 €
COSTE TOTAL MANO DE OBRA, EQUIPOS Y MATERIAL	8.682,63 €

		Coste mano obra, equipos y material [€]	Coste [€]
COSTES INDIRECTOS	15%	8682,63	1302,39

2. Presupuesto global

Finalmente, el presupuesto global del proyecto se obtiene teniendo en cuenta los costes parciales calculados. Se debe tener en cuenta que estos costes han sido calculados sin tener en cuenta el Impuesto sobre el Valor Añadido, por lo que en este apartado se calculará para poder obtener el coste global del proyecto.

COSTE TOTAL DE MANO DE OBRA	6.705,13 €
COSTE TOTAL DE EQUIPOS INFORMÁTICOS Y SOFTWARE	1.973,00 €
COSTE TOTAL DE MATERIAL CONSUMIDO	4,50 €
COSTES INDIRECTOS	1.302,39 €
SUBTOTAL	9.985,02 €
21% IVA	2.096,85 €
COSTE GLOBAL DEL PROYECTO	12.081,87 €

El presupuesto global del proyecto “Estudio del impacto del uso de pre-catalizador de oxidación pre-turbo en la eficiencia de conversión de CO y HC” asciende a DOCE MIL OCHENTAÍÚN EUROS CON OCHENTA Y SIETE CÉNTIMOS.

Documento III:
PLIEGO DE CONDICIONES

En este documento se especifican las condiciones técnicas y generales de trabajo que se deben cumplir para la realización del estudio requerido.

1. Condiciones técnicas

Las condiciones técnicas de trabajo se dividen en dos grupos en función del equipo físico o hardware y los programas o software que se han utilizado para la realización del estudio.

El equipo físico tiene que cumplir una serie de condiciones entre las cuales, debe tener la capacidad de soportar la ejecución del modelo y el procesado de datos. El dispositivo empleado tiene las siguientes características.

- Fabricante: Samsung Electronics.
- Procesador: Intel® Core™ i3-3120M CPU @ 2.50 GHz 2.50 GHz.
- Memoria (RAM): 4,00 GB.
- Tipo de sistema: Sistema operativo de 64 bits, procesador x64.
- Sistema operativo: Windows 8.1.

El software utilizado es un conjunto de programas informáticos cuya función es la ejecución del modelo y obtención de datos, procesado de datos y redacción de los 3 documentos que conforman el proyecto.

El programa esencial para la realización del estudio es Visual Studio 2017, puesto que se ha utilizado para la ejecución del modelo y obtención de los datos necesarios.

Para el procesado de los datos obtenidos se utiliza Microsoft Excel versión 2016. Además, se utiliza Grapher 10 para realizar las gráficas que se han expuesto en el documento de la memoria.

Durante la duración del proyecto, se han realizado varias reuniones con el tutor, como seguimiento para conocer el estado del estudio, en estas reuniones se han expuesto los datos que hasta ese momento se habían obtenido. Para estas presentaciones se ha utilizado Microsoft Power Point versión 2016.

Finalmente, para la redacción de la memoria, presupuesto y pliego de condiciones, se ha utilizado Microsoft Word versión 2016.

2. Condiciones generales

2.1. Ordenanza de seguridad e higiene en el trabajo

La ordenanza general de seguridad e higiene en el trabajo se encuentra recogida en el BOE num. 64, del 16 de marzo de 1971, cuyo objetivo es preservar un ambiente de trabajo adecuado y seguro para los trabajadores, con tal de evitar riesgos y accidentes.

Artículo 11. Obligaciones y derechos de los trabajadores.

En este artículo se incluyen las obligaciones y derechos de los trabajadores, cuyo objetivo es minimizar los riesgos profesionales en la empresa y el mantenimiento de los niveles máximos de higiene. Entre estas obligaciones, los trabajadores deben:

- Cuidar y mantener su higiene personal, para evitar la transmisión de virus o bacterias que puedan causar enfermedades o molestias a los compañeros de trabajo.
- Realizar un uso responsable y correcto de los medios de protección personal y garantizar la conservación de estos.
- Prestar ayuda en caso de que ocurran accidentes en el lugar de trabajo, si fuese necesario.
- Avisar a los superiores o responsables de las averías o imperfecciones que se observen y puedan causar peligros.

Artículo 29. Iluminación de emergencia.

En los espacios de trabajo se instalarán los medios de iluminación de emergencia apropiados, en función de las dimensiones del espacio, capaces de mantener una intensidad de 5 lux durante una hora, mediante una fuente de energía independiente de la fuente de energía principal que abastece a los sistemas e iluminación general.

Artículo 82. Prevención y extinción de incendios.

En los espacios y puestos de trabajo que exista peligro de incendio se tomarán medidas para su prevención.

- En los lugares donde existan conducciones de agua a presión, se deberán instalar bocas de agua accesibles a los puestos de trabajo y al personal y a una distancia conveniente unas de otras, colocando en su proximidad mangueras para poder hacer uso de ellas.
- En los lugares donde no existan conducciones de agua a presión se dispondrá de depósitos con un volumen de agua capaz de extinguir los posibles incendios.
- En incendios que afecten a instalaciones eléctricas no se utilizará agua, espuma química o soda ácida.
- Se dispondrán extintores móviles accesibles a los trabajadores. Estos extintores estarán cargados de espuma química o física, mezcla de ambas o polvo seco, con

el fin de extinguir el incendio en función del origen del fuego. Se establecerán revisiones periódicas para ver el estado y revisiones y recargas después de haberse utilizado, según la normativa de la empresa constructora.

- En los incendios causados sobre polvos de aluminio o magnesio se prohíbe el uso de agua para extinguirlos. Se utilizarán arenas finas y secas que serán almacenadas en lugares cercanos a los puestos de trabajo.
- En los espacios de trabajo con un alto riesgo de incendio, se establece la prohibición de fumar o introducir dispositivos de ignición.
- La empresa abastecerá a sus trabajadores de material individual protector contra incendios, tales como calzado especial, guantes y trajes ignífugos.

2.2. Disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas

Además de la ordenanza citada en el apartado 2.1., se debe tener en cuenta que el trabajo desarrollado ha sido completamente computacional, por lo que en el puesto de trabajo se han utilizado pantallas de visualización. Estos puestos de trabajo pueden derivar en riesgos para la salud como problemas de visión y problemas debidos a malas y/o permanentes posturas. Para minimizar estos riesgos, existe el Real Decreto 488/1997, de 14 de abril, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas de visualización según las disposiciones de la Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de riesgos Laborales. Las condiciones mínimas que establece el Real Decreto se manifiestan a continuación.

Equipo

- La utilización del equipo no debe ser origen de riesgo para los trabajadores.
- La pantalla deberá tener unos caracteres que estén bien definidos y tener unas dimensiones suficientes. Las imágenes que aparezcan en pantallas deberán ser estables y sin destellos. La luminosidad de la pantalla deberá poder ajustarse en función de las condiciones del entorno. Deberá ser orientable e inclinable en función de las necesidades del usuario y no deberá tener reflejos que puedan incomodar o afectar al usuario.
- El teclado deberá ser independiente de la pantalla para que el usuario pueda colocarse de una manera cómoda. Deberá existir espacio delante del teclado para que el usuario pueda apoyar los brazos y manos. Además, la superficie del teclado no deberá reflejar. Las teclas que lo componen deberán poder ser utilizadas con facilidad y legibles desde la postura normal de trabajo.
- La mesa o superficie deberán estar fabricadas o revestidas de materiales que eviten reflejos. Las dimensiones de la mesa serán las suficientes para que el usuario pueda adoptar una postura cómoda de trabajo y pueda disponer de espacio suficiente para

tener sobre ella la pantalla, teclado y el material de apoyo necesario para la correcta realización de la tarea.

- El asiento de trabajo deberá ser estable, cómodo y proporcionar al usuario libertad de movimientos. La altura y respaldo deberán ser ajustables en función de las necesidades.

Entorno

- El espacio de trabajo deberá tener las dimensiones suficientes para poder efectuar movimientos en el puesto de trabajo.
- La iluminación deberá garantizar niveles de iluminación adecuados y ser compatible con la propia luminosidad de la pantalla para evitar reflejos. Podrán utilizarse fuentes de iluminación generales e iluminaciones especiales, tales como lámparas particulares en el puesto de trabajo.
- Los puestos de trabajo deberán orientarse dentro del espacio de tal forma que las ventanas y otras aberturas por las cuales entre luz no ocasionen deslumbramientos ni reflejen en las pantallas de trabajo. Además, las ventanas deberán estar equipadas con persianas o mecanismos para la regulación de la luz solar que penetre en el espacio de trabajo.
- El ruido que los equipos de trabajo deberán ser mínimo con tal de no provocar trastornos en los usuarios del equipo.
- El calor que puedan desprender los equipos no deberá causar calor adicional con tal de no causar molestias a los trabajadores.
- Las emisiones y radiaciones, excluyendo la parte visible del espectro electromagnético, deberán reducirse a niveles insignificantes para no afectar a la seguridad y salud.
- La humedad deberá mantenerse dentro de unos límites admisibles para garantizar la comodidad.

Interconexión ordenador/persona.

- El programa deberá ser adaptado a la actividad que deba realizarse.
- El programa deberá poder adaptarse al nivel de conocimientos del usuario.
- Los equipos deberán proporcionar a los trabajadores instrucciones sobre su desarrollo.
- La velocidad a la cual se muestra la información deberá adaptarse a los operadores.
- Los principios de ergonomía deberán aplicarse en particular al tratamiento de la información por parte de la persona.