



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA
Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

TRABAJO FIN DE GRADO

Modelado CFD del proceso de inyección de urea-agua en el sistema de escape de un motor de combustión

AUTORA
Arantxa Pons Estruch

TUTOR
Pedro Martí Gómez-Aldaraví

COTUTOR
Javier Marco Gimeno

GRADO EN INGENIERÍA AEROESPACIAL
Curso 2019-2020

Valencia, Septiembre 2020.

“Si una persona no tiene sueños, no tiene razón de vivir. Soñar es necesario aun cuando el sueño va más allá de la realidad. Para mí, soñar es uno de los principios de la vida.”

Ayrton Senna

Resumen

Actualmente, con las nuevas tendencias sobre normativas de emisiones, cada vez más restrictivas, en las cuales se limita la emisión de óxidos de nitrógeno (NO_x), se han centrado todos los esfuerzos tecnológicos en solucionar esta problemática, como los sistemas de reducción catalítica SCR (Selective Catalytic Reduction). Así, conseguir un funcionamiento óptimo de este sistema va a lograr que los nuevos motores cumplan la actual normativa Euro VI.

Los sistemas SCR consisten en inyectar una disolución de urea en agua, conocida como Urea Water Solution (UWS) o comercialmente, AdBlue, la cual se mezcla con los gases de escape del sistema de escape del motor, y realizando una serie de reacciones químicas en el catalizador consigue reducir las emisiones de NO_x.

El objetivo de este proyecto es realizar un estudio computacional mediante CFD (Computational Fluid Dynamics) de un SCR en condiciones similares a las de un escape de un motor de combustión. Se centrará en la caracterización y análisis del chorro inyectado al sistema, así como la variación de diferentes parámetros que afectan al proceso.

Con el trabajo realizado se pretende optimizar la mezcla UWS así como su integración en el sistema para obtener un sistema eficiente.

Palabras clave: SCR, AdBlue, UWS, inyección de urea, CFD

Abstract

Currently, with the emergence of new trends in emission regulations, increasingly restrictive, in which the emission of nitrogen oxides (NO_x) is limited, all technological efforts have been focused on solving this problem, such as SCR (Selective Catalytic Reduction). Thus, accomplishing an optimum operation of this system will achieve that the new engines meet the current Euro VI regulation.

SCR systems consist of injecting a dissolution of urea in water, known as Urea Water Solution (UWS) or commercially, AdBlue, which is mixed with the exhaust gases from the engine's exhaust system. Furthermore, carrying out a series of chemical reactions in the catalyst succeed in a reduction of NO_x emissions.

The aim of this project is to carry out a computational study by means of CFD (Computational Fluid Dynamics) of a SCR in similar conditions to those of a combustion engine exhaust. It will focus on the characterization and analysis of the jet injected into the system, as well as the variation of different parameters that affect the process.

The work realized seeks to optimize the UWS blend along with its integration in the system to obtain an efficient system.

Keywords: SCR, AdBlue, UWS, urea injection, CFD

Resum

Actualment, amb les noves tendències sobre normatives d' emissions, cada vegada més restrictives, en les quals es limita l'emissió d'òxids de nitrogen (NOx), s'han centrat tots els esforços tecnològics en solucionar aquesta problemàtica, com els sistemes de reducció catalítica SCR (Selective Catalytic Reduction). Així, aconseguir un funcionament òptim d' aquest sistema s' aconseguirà que els nous motors complisquen l'actual normativa Euro VI.

Els sistemes SCR consisteixen en injectar una dissolució d' urea en aigua, coneguda com a Urea Water Solution (UWS) o comercialment, AdBlue, la qual es mescla amb els gasos d' escapament del sistema d' escapament del motor, i realitzant una sèrie de reaccions químiques en el catalitzador aconseguix reduir les emissions de NOx.

L' objectiu d'aquest projecte és realitzar un estudi computacional mitjançant CFD (Computational Fluid Dynamics) d' un SCR en condicions similars a les d'un escapament d'un motor de combustió. Es centrarà en la caracterització i anàlisi del raig injectat al sistema, així com la variació de diferents paràmetres que afecten el procés.

Amb el treball realitzat es pretén optimitzar la mescla UWS així com la seua integració al sistema, per a obtindre un sistema eficient.

Paraules clau: SCR, AdBlue, UWS, injecció dúrea, CFD

Índice general

I	MEMORIA	1
1.	Introducción.	3
1.1.	Antecedentes	3
1.2.	Objetivos	3
1.3.	Justificación	4
1.4.	Estructura del proyecto	4
1.4.1.	Memoria	4
1.4.2.	Pliego de condiciones	5
1.4.3.	Presupuesto	5
2.	Marco teórico	7
2.1.	Motores de combustión interna alternativos (MCIA)	7
2.1.1.	Clasificación de los MCIA	7
2.2.	Contaminantes en los MCIA	9
2.3.	Normativa	10
2.4.	Reducción de emisiones en vehículos Diésel	11
2.4.1.	Estrategias activas	11
2.4.2.	Estrategias pasivas	13
2.5.	Los óxidos de nitrógeno o NO_x	16
2.6.	Sistemas de reducción catalítica selectiva (SCR)	18
2.7.	Bases teóricas para la medida de sprays	21
2.7.1.	Flujo de cantidad de movimiento de un chorro	21
2.7.2.	Masa inyectada por ciclo	22
2.7.3.	Velocidad y área efectivas	22
2.7.4.	Coeficientes de flujo	24

3. Metodología CFD	27
3.1. Geometría	27
3.2. Mallado	28
3.2.1. AMR	30
3.3. Algoritmos numéricos	30
3.3.1. Ecuaciones para el cálculo CFD	31
3.3.2. Modelos de turbulencia	32
3.4. Modelado del spray	33
3.5. Mezcla Urea-agua	35
4. Resultados	37
4.1. Condiciones de contorno	38
4.2. Validación datos	38
4.3. Efecto en la distribución de las gotas del spray	38
4.3.1. Variación de presión de inyección	39
4.3.2. Variación de la velocidad de flujo cruzado	43
4.3.3. Variación de la temperatura	46
4.4. Efecto en el tamaño de gota	49
4.4.1. Variación de la presión	50
4.4.2. Variación de la velocidad de flujo cruzado	52
4.4.3. Variación de la temperatura	54
4.5. Efecto en la velocidad	56
4.5.1. Variación de la presión	56
4.5.2. Variación de la velocidad de flujo cruzado	58
4.5.3. Variación de la temperatura	60
5. Conclusiones	63
5.1. Trabajos futuros	64
II PLIEGO DE CONDICIONES	67
6. Pliego de condiciones	69
6.1. Introducción	69
6.2. Anexo I. Condiciones generales de seguridad en los lugares de trabajo	69
6.3. Anexo II. Orden, limpieza y mantenimiento	71

6.4. Anexo III. Condiciones ambientales de los lugares de trabajo	71
6.5. Anexo IV. Iluminación de los lugares de trabajo	71
6.6. Sobre el impacto en la huella de carbono	72
III PRESUPUESTO	75
7. Presupuesto	77
7.1. Costes de personal	77
7.1.1. Ingeniero Junior	77
7.1.2. Ingeniero Superior	78
7.1.3. Ingeniero Coordinador de Proyecto	78
7.2. Costes de material	79
7.2.1. Licencias de software	79
7.2.2. Coste del equipo	79
7.2.3. Coste de la estación de cálculo	79
7.2.4. Coste del material de oficina	79
7.2.5. Coste eléctrico	79
7.2.6. Costes de material totales	80
7.3. Coste final	80

Índice de figuras

2.1. Diagrama P-V del ciclo Otto.	8
2.2. Diagrama P-V del ciclo Diésel.	8
2.3. Composición de los gases de escape.	10
2.4. Proceso de recirculación de gases de escape.	12
2.5. Catalizador de oxidación.	13
2.6. Proceso de catalizador de reducción.	14
2.7. Proceso de funcionamiento catalizador de tres vías.	15
2.8. Funcionamiento del filtro de partículas.	16
2.9. Flujo en la sección de salida de un orificio de inyección.	18
2.10. Proceso de un sistema de reducción catalítica selectiva.	19
2.11. Proceso de un sistema de reducción catalítica selectiva.	20
2.12. Flujo en la sección de salida de un orificio de inyección.	22
2.13. Flujo en la sección de salida de un orificio de inyección caso simplificado.	23
3.1. Geometría del modelo 3D.	28
3.2. Geometría de las celdas de la malla.	29
3.3. Malla del modelo 3D.	29
3.4. Modelo de Kuhnke.	34
4.1. Localización de la posición de las ventanas.	37
4.2. Distribución de las gotas en el instante 0.0037 s tras el inicio de la inyección.	39
4.3. Evolución de la penetración con respecto el tiempo.	39
4.4. Variación de la distribución de las gotas según la presión en el instante 0.001 s tras el inicio de la inyección.	41
4.5. Variación de la distribución de las gotas según la presión en el instante 0.002 s tras el inicio de la inyección.	42

4.6. Variación de la distribución de las gotas según la velocidad de cruce en el instante 0.001 s tras el inicio de la inyección.	44
4.7. Variación de la distribución de las gotas según la velocidad de cruce en el instante 0.002 s tras el inicio de la inyección.	45
4.8. Evolución de la penetración con respecto la velocidad de flujo cruzado.	46
4.9. Evolución de la penetración con respecto la temperatura.	46
4.10. Variación de la distribución de las gotas según la temperatura en el instante 0.001 s tras el inicio de la inyección.	47
4.11. Variación de la distribución de las gotas según la temperatura en el instante 0.002 s tras el inicio de la inyección.	48
4.12. Radio de las gotas según la presión después de 0.002 segundos.	50
4.13. Evolución de la probabilidad de diámetro de las gotas según la presión.	51
4.14. Radio de las gotas según la velocidad de flujo cruzado después de 0.002 segundos.	52
4.15. Evolución de la probabilidad de diámetro de las gotas según la velocidad de flujo cruzado.	53
4.16. Radio de la gota del según la temperatura después de 0.002 segundos.	54
4.17. Evolución de la probabilidad de diámetro de las gotas según la temperatura.	55
4.18. Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en X según la presión.	56
4.19. Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en Y según la presión.	57
4.20. Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en X según la velocidad de flujo cruzado.	58
4.21. Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en Y según la velocidad de flujo cruzado.	59
4.22. Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en X según la temperatura.	60
4.23. Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en Y según la temperatura.	61

Índice de tablas

2.1. Límite de emisiones permitidas para turismos Diesel (g/km) para las normativas EURO.	11
2.2. Límite de emisiones permitidas para turismos gasolina (g/km) para las normativas EURO.	11
2.3. Los NO_x en el medio ambiente.	17
3.1. Características de la mezcla Urea-Agua.	35
4.1. Parámetros variables de los diferentes estudios.	38
6.1. Cálculo del impacto sobre la huella de carbono.	72
7.1. Costes Ingeniero Junior.	77
7.2. Costes Ingeniero Superior.	78
7.3. Costes Ingeniero Coordinador de Proyecto.	78
7.4. Costes del personal.	78
7.5. Coste eléctrico.	80
7.6. Costes de material.	80
7.7. Costes final del proyecto.	80

Parte I

MEMORIA

Capítulo 1

Introducción.

1.1. Antecedentes

La Cátedra de Máquinas Térmicas (CMT) es un centro de investigación y educación, con más de 40 años de investigación, dedicado al desarrollo de motores de combustión. Se han realizado múltiples estudios para la optimización del funcionamiento del motor, experimentalmente, teóricamente y de forma computacional para empresas como Nissan, Jaguar Land Rover, Ford o Renfe.

El estudio de inyección de urea está tomando importancia recientemente debido a los sistemas SCR (Selective Catalytic Reduction) incorporados en los turismos y vehículos ligeros. Se puede decir que es un estudio relativamente nuevo para este centro, ya que se han llevado a cabo pocos estudios relacionados con la inyección de urea. El primero que se realizó fue el Trabajo Fin de Grado de Valero Marco, J. [1], en Junio de 2012, en el que se estudia un sistema SCR en diferentes condiciones realistas, así como el análisis y las propiedades físicas de la mezcla comercial inyectada, el AdBlue. El experimento se visualizó mediante varios endoscopios situados en distintos puntos del escape, para caracterizar la mezcla desde la urea-agua desde la inyección hasta el escape.

Posteriormente, Salvador Griñán Egea [5], en julio de 2017, también trabajó en su proyecto de Final de Grado en el diseño y montaje de una instalación de flujo de aire, donde se simulan las condiciones de escape de un vehículo junto con una maqueta de visualización para facilitar la visualización del estudio en los primeros instantes de la inyección. Este trabajo fue continuado por José Pérez Rodrigo [4] en su Trabajo Fin de Grado en Julio de 2018 y posteriormente por Jorge Garaulet Belda [6].

1.2. Objetivos

Este trabajo pretende analizar cómo influyen diferentes parámetros en el desarrollo del chorro de urea que se inyecta en los gases de escape. Se variarán la temperatura, presión y velocidad de inyección para determinar los diámetros y velocidades de las gotas de urea para cada condición experimental.

El estudio se realizará mediante el software CONVERGETM [11], donde se validará

un caso con los estudios experimentales efectuados con la técnica PIV por el equipo del Instituto Universitario CMT-Motores Térmicos. El análisis de los resultados se realizará mediante Python y ParaView donde se podrán comparar los diferentes casos. Si los resultados obtenidos se corresponden a la realidad, esto supondrá un ahorro en coste experimental ya que se podrá estudiar el caso mediante cálculo computacional.

El trabajo realizado tiene un ámbito académico y es el objetivo final para obtener el título de Grado en Ingeniería Aeroespacial en la Escuela Superior de Ingeniería de Diseño de la Universidad Politécnica de Valencia.

1.3. Justificación

La tecnología de Reducción Catalítica Selectiva (SCR) empezó a usarse en motores en estacionarios de plantas térmicas de producción de energía en la década de los 70 en Japón. Posteriormente, este procedimiento empezó a implantarse en las plantas de Estados Unidos y Europa. Debido a los problemas medio ambientales producidos por la acción del hombre, la normativa de reducción de emisiones contaminantes se ha hecho mas restrictiva cada vez, por lo que se ha tenido que implementar el uso de amoníaco (NH_3) en los vehículos Diésel. En 2008, con la implantación de la normativa europea Euro V, se empezó implementando para vehículos pesados como camiones o autobuses. Desde 2014, se implantó la normativa Euro VI que provocó la necesidad de instalar este sistema también en vehículos ligeros y turismos, todos ellos con motor Diésel.

En los vehículos pesados, se instala un depósito extra para añadir un depósito para el AdBlue (mezcla comercial de urea ($(NH_2)_2CO$) y agua(H_2O)) y el conducto e inyector. Esto es un problema para los vehículos pequeños, ya que no disponen de tanto espacio para acoplar el sistema SCR y una mezcla incompleta de la urea con el flujo de escape provocaría la formación de partículas sólidas dañinas para el correcto funcionamiento del sistema de escape.

Para ello, se realiza un estudio de diferentes parámetros para que los gases de escape y la urea estén completamente homogeneizados y poder optimizar este proceso.

1.4. Estructura del proyecto

Para poder abastecer las necesidades del presente trabajo, este se organizará en tres documentos principales, la memoria, el pliego de condiciones y el presupuesto.

1.4.1. Memoria

En este documento se muestran los conocimientos previos al trabajo realizado necesarios para la comprensión de este, el procedimiento que se ha seguido para la elaboración, los resultados y conclusiones finales. Está estructurado según:

- **Introducción.** Se presentan los objetivos principales a través de los que se va a orientar el trabajo, además de los antecedentes y las metodologías seguidas como base del mismo.

- **Marco teórico.** Se contextualiza el proyecto mediante su revisión histórica, además de introducir los contaminantes existentes, la normativa existente y las técnicas para evitar su formación.
- **Modelado CFD.** Se estudia en detalle el preproceso del cálculo computacional, analizando el tipo de mallado y parámetros que se deben introducir para la resolución del caso, en concreto, aplicado al software CFD CONVERGETM.
- **Postratamiento y análisis de resultados.** En este apartado se procesarán todos los datos e imágenes extraídos de las simulaciones para poder analizarlos conjuntamente.
- **Conclusiones.** Por último, se detallan los resultados obtenidos y las posibles mejoras para posibles trabajos futuros.

1.4.2. Pliego de condiciones

En esta parte se explica y detalla el correcto cumplimiento de las ordenanzas de seguridad e higiene aplicadas durante el desarrollo del trabajo.

1.4.3. Presupuesto

Se detallan los costes del proyecto, estructurados según su procedencia. En los costes de personal se incluyen todas las personas que han participado en el estudio, y en el coste de material, los recursos y licencias utilizados.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Motores de combustión interna alternativos (MCIA)

Un motor de combustión interna o de explosión es un tipo de máquina que obtiene energía mecánica directamente de la energía química de un combustible que se quema dentro de la cámara de combustión. Cuando el combustible mezclado con oxígeno en el motor arde, se produce una explosión que mueve el pistón, desplazándolo en el interior de un cilindro y haciendo girar un cigüeñal, obteniendo finalmente un movimiento de rotación.

El primer motor de gasolina de cuatro tiempos con encendido por chispa y accionamiento por pistones alternativos fue patentado por Nikolaus August Otto en 1876.

El motor diésel fue inventado en 1893 por el ingeniero alemán Rudolf Diesel. Durante años estuvo trabajando para poder utilizar otros combustibles diferentes a la gasolina, basados en principios de los motores de compresión sin ignición por chispa, como se producía en las máquinas de vapor y que poseen una mayor prestación. Posteriormente, MAN produjo el primer motor conforme a los estudios de Rudolf Diesel, utilizando para su funcionamiento un combustible poco volátil, el llamado aceite liviano, más conocido como fueloil.

2.1.1. Clasificación de los MCIA

Los motores de combustión alternativos se pueden clasificar de diferentes formas atendiendo a sus características, según el número o la disposición de los cilindros, el tipo de combustible, el tipo de refrigeración, según ciclos de trabajo o proceso de renovación de la carga. Esto no implica que sean excluyentes entre ellas, por lo que hay una gama muy amplia de motores.

Siguiendo el criterio del proceso de combustión, se hay dos tipos de motores [12].

- **Motores de encendido provocado (MEP).** En la culata del motor se instala una bujía, la cual produce una chispa después de la compresión del combustible y enciende la mezcla de aire y combustible para la explosión. Estos motores son los que funcionan mediante el ciclo Otto, mostrado en la Figura 2.1, usando gasolina como combustible.

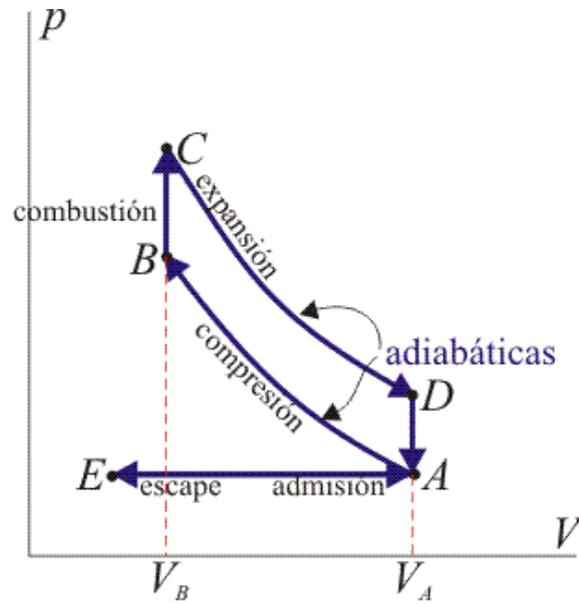


Figura 2.1: Diagrama P-V del ciclo Otto.

- **Motores de encendido por compresión (MEC).** El combustible se enciende por el calor y la presión cuando se inyecta en la cámara de combustión. Estos motores son los Diésel que usa gasóleo como combustible y siguen el esquema de funcionamiento del ciclo Diésel (Figura 2.2).

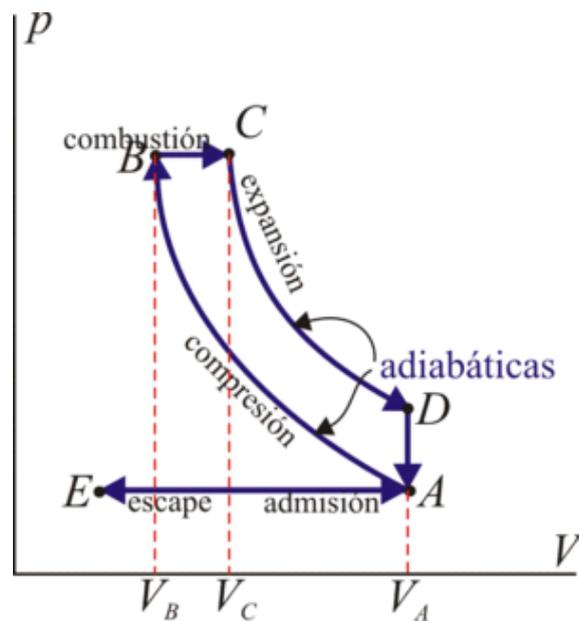


Figura 2.2: Diagrama P-V del ciclo Diésel.

2.2. Contaminantes en los MCIA

En los últimos años el sector del automóvil ha estado en el punto de mira de todos los gobiernos. Esto se debe a los contaminantes que se emiten, sobre todo los motores de encendido por compresión, conocidos como motores Diesel. Tantas son las restricciones impuestas para disminuir estas emisiones, que las marcas automovilísticas han empleado gran parte de sus esfuerzos a desarrollar métodos en los que las partículas contaminantes sean aptas para poder circular según las normativas. Todo esto unido a la gran demanda de los clientes por tener una buena eficiencia.

Entre los principales contaminantes producidos por los motores de combustión interna (MCIA) se encuentran:

- **Monóxido de carbono (CO):** Se produce cuanto hay combustiones lentas en zonas con dosados muy pobres y por oxidaciones incompletas en zonas con dosados ricos. Este compuesto es tóxico ya que ralentiza la oxidación de los tejidos en la sangre sustituyendo al oxígeno, agrava insuficiencias cardíacas y produce problemas sensoriales. A partir de un 0.3 % de volumen en el aire, es mortal [13]. Estas emisiones se producen sobre todo en motores de encendido provocado (MEP).
- **Óxidos de Nitrógeno (NO_x):** Se generan al oxidarse el nitrógeno sobrante en las reacciones de dosados pobres. Tiene efectos sobre la salud como problemas respiratorios, tos o dolor de cabeza, así como efectos sobre el clima, reduciendo el ozono en la estratosfera. Se abordará en profundidad estos gases más adelante en el presente documento.
- **Hidróxido de Carbono (HC):** Se puede formar a partir del apagado de la llama por la combustión incompleta en zonas con dosado rico o pobre o por efecto de pared y pequeños volúmenes, por la difusión y oxidación o por el cortocircuito de mezcla fresca. Los hidrocarburos pueden tener una composición muy variada y dependiendo de esta puede tener unos efectos u otros sobre la salud, predominando sus consecuencias cancerígenas.
- **Humos:** Estos son las partículas en suspensión de los gases de escapes procedentes de un motor Diesel de tamaño 0.005-30 μm . Producen un aumento en la suciedad ambiental y tienen efectos sobre el sistema respiratorio.
- **Partículas:** Se considera cualquier material que se acumule en un medio filtrante determinado tras diluir los gases de escape con aire filtrado limpio, siempre que la temperatura no supere los 52°C [13].

Ya que los motores MEP y MEC tienen un funcionamiento y características diferentes, también es diferente la composición de los gases de escape. En la Figura 2.3 se puede comparar los gases resultantes de la combustión de gasolina y la combustión Diésel.

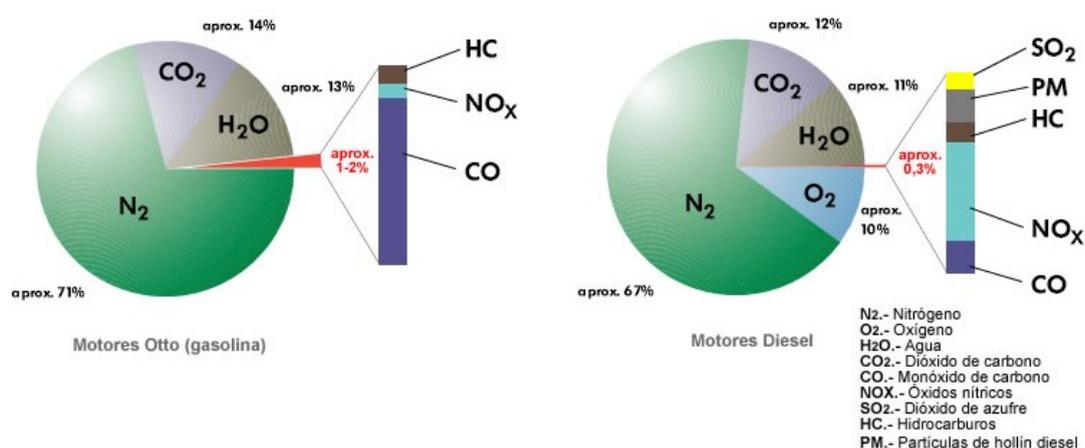


Figura 2.3: Composición de los gases de escape.

2.3. Normativa

Debido al creciente volumen de las emisiones al planeta en los últimos tiempos, las organizaciones competentes aprobaron una serie de medidas para asegurar la reducción de contaminación emitida. La primera ley de control de las emisiones de contaminantes para los países de la Unión Europea fue la Euro 0, que entró en vigor en 1988. A partir de esta, a medida que pasaron los años y ante el desarrollo tecnológico producido, se fueron creando nuevas leyes cada vez más restrictivas.

La normativa Euro 1 se introdujo en 1992, en la cual se obligaba a instalar catalizadores para reducir y transformar los gases de combustión del vehículo. Pero esto provocaba fallos en el motor de gasolina, por lo que pronto se eliminó el plomo de las gasolinas y se sustituyó por metil-terbutil-éter (MTBE).

Entre los años 1992 y 2005, la normativa EURO siguió evolucionando con la 2, 3 y 4 siendo más restrictiva con las emisiones. Se disminuyó el tamaño del motor para que consumiera menos combustible usando la sobrealimentación con turbinas y compresores, se añadieron más marchas a las cajas de transmisión para rebajar el régimen del motor y generar menos monóxido de carbono, etc.

En 2009, la Euro 5 obligó a los vehículos diésel a instalar filtros antipartículas FAP o DPF para retener las partículas en suspensión.

La Euro 6 entró en vigor en 2014 aunque se ha ido revisando a lo largo del tiempo permitiendo una menor emisión de contaminantes. Esta provocó la introducción de catalizadores SCR con AdBlue para los coches Diésel.

En las Tablas 2.1 y 2.2 se muestran las emisiones contaminantes permitidas (en g/km) para los turismos según el tipo de combustible utilizado.

Normativa	Año	CO	HC	HC+NO _x	NO _x	PM
Euro 1	1992	2.72	-	0.97	-	0.14
Euro 2	1996	1	-	0.7	-	0.08
Euro 3	2000	0.64	-	0.56	0.5	0.05
Euro 4	2005	0.5	-	0.3	0.25	0.025
Euro 5	2009	0.5	-	0.23	0.18	0.005
Euro 6	2014	0.5	-	0.17	0.08	0.005

Tabla 2.1: Límite de emisiones permitidas para turismos Diesel (g/km) para las normativas EURO.

Normativa	Año	CO	HC	HC+NO _x	NO _x	PM
Euro 1	1992	2.72	-	0.97	-	-
Euro 2	1996	2.2	-	0.5	-	-
Euro 3	2000	2.3	0.2	-	0.15	-
Euro 4	2005	1	0.1	-	0.08	-
Euro 5	2009	1	0.1	-	0.06	0.005
Euro 6	2014	1	0.1	-	0.06	0.005

Tabla 2.2: Límite de emisiones permitidas para turismos gasolina (g/km) para las normativas EURO.

2.4. Reducción de emisiones en vehículos Diésel

En los motores de combustión interna existen varias estrategias de diseño y funcionamiento para reducir o minimizar las emisiones contaminantes. La problemática de los motores Diésel se relaciona con la formación de emisiones contaminantes que emite el motor a la atmósfera. Se forman los óxidos de nitrógeno en el escape debido a las altas temperaturas y presiones y a la presencia de oxígeno, aunque estas condiciones también favorecen la disminución de emisiones contaminantes, tales como, monóxido de carbono y partículas.

2.4.1. Estrategias activas

El objetivo de estas estrategias es la reducción de las emisiones contaminantes. Para conseguir esto, se actúa sobre el origen de la fuente del contaminante, por lo que se relacionan directamente con el diseño del motor y sus componentes [13].

- **Sistema de inyección.** La inyección del combustible tiene influencia en el proceso de combustión ya que modifica el chorro de inyección del combustible. Así, se pueden variar diferentes parámetros del proceso, como por ejemplo mejorar el proceso de mezcla y evaporación, acelerándose así la combustión y disminuyendo la formación

de hollín mediante un aumento de presión de inyección que supone una atomización más fina, aunque se incrementa la formación de NO_x .

- Sistema de recirculación de gases de escape (EGR).** Este método consiste en actuar sobre la temperatura de la llama, donde se evacuan los gases residuales del ciclo anterior y después vuelven a entrar al cilindro. Estos gases recirculados reducen la masa de aire caliente expulsada a la atmósfera para pasar a la admisión y subir la temperatura del aire de admisión. Esto no favorece el proceso de combustión, puesto que se reduce la velocidad de combustión debido a la presencia de compuestos que no reaccionan. Al mismo tiempo disminuye la temperatura de los gases de escape y disminuir la emisión de NO_x , concretamente el NO . Sin embargo, esta reducción de emisiones NO_x se realiza a costa de aumentar las partículas y los hidrocarburos sin quemar a altos grados de carga, por lo que es importante que el sistema EGR trabaje a bajos o medios grados de carga. Todo ello se muestra en la Figura 2.4 de forma esquemática.

EGR de baja presión

Recirculación de los gases de escape a través de un circuito frío

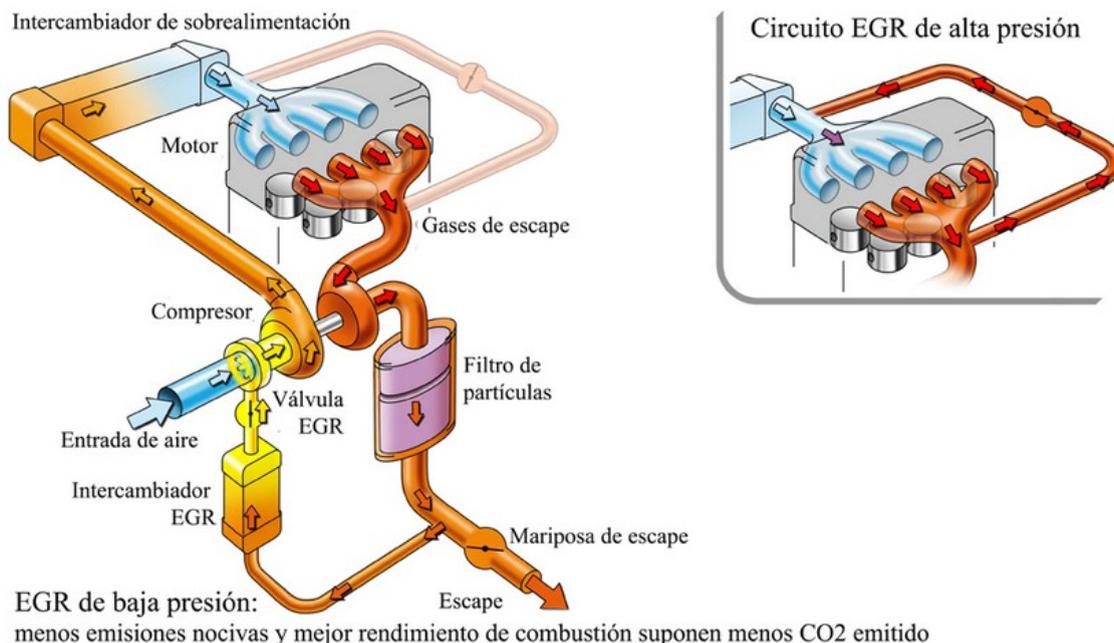


Figura 2.4: Proceso de recirculación de gases de escape.

- Enfriamiento del aire de la admisión.** El objetivo es reducir la temperatura del aire que entra a la admisión y la temperatura de combustión. Para ello se usa un intercambiador de calor o un intercooler (para los motores sobrealimentados) los cuales reducen la emisión de NO_x .
- Diseño de la cámara de combustión.** La geometría de la cámara de combustión tiene como premisa favorecer la turbulencia de manera que aumente la interacción entre el chorro y los patrones de flujo. Por esto, todos los componentes deben estar

diseñados de tal forma para que conjuntamente obtengan las prestaciones y emisiones deseadas.

2.4.2. Estrategias pasivas

Existe otro tipo de sistemas los cuales se centran en reducir las emisiones que ya se han creado. Son unos sistemas de postratamiento como los catalizadores y los filtros que se colocan a la salida del motor y tratan químicamente los gases de escape. El otro tipo de sistemas lo constituyen los filtros, que también se ubican en la línea de escape. Pueden ser tanto físicos como químicos, y tienen la misión de acumular las especies no deseadas para después deshacerse de ellas sin emitirlas a la atmósfera.

Tanto catalizadores como filtros se incorporan conjuntamente con estrategias activas. Del mismo modo, los motores diésel pueden incorporar uno o más tipos de filtros y catalizadores, en función del tipo de motor y de la normativa vigente de la aplicación a la que da servicio el motor.

- **Catalizadores de oxidación.** Consiste en oxidar las especies contaminantes de los CO y los HC sin quemar para obtener CO_2 . Los NO también se oxidan aunque se convierten en NO_2 , por lo que no se reduce la emisión de los NO_x sino que se cambia el tipo de óxido de nitrógeno que se emite, como se muestra en la Figura 2.5. Los agentes catalizadores son el platino y el paladio.

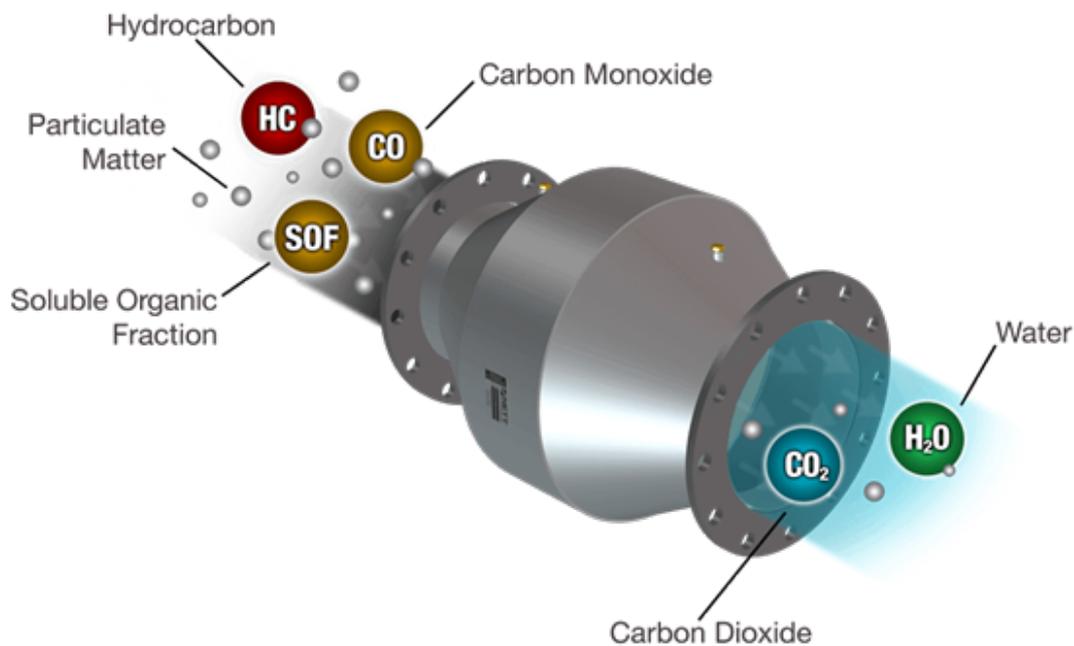


Figura 2.5: Catalizador de oxidación.

- **Catalizadores de reducción.** Se usa el agente catalizador Rodio para reducir los NO_x a nitrógeno molecular. A diferencia de los de oxidación, estos no pueden

funcionar con una atmósfera que contenga oxígeno, por lo que solo pueden trabajar en motores con mezcla rica. Como se puede ver en la Figura 2.6, para su funcionamiento es necesario instalar posteriormente al catalizador de reducción una entrada de aire fresco y un catalizador de oxidación.

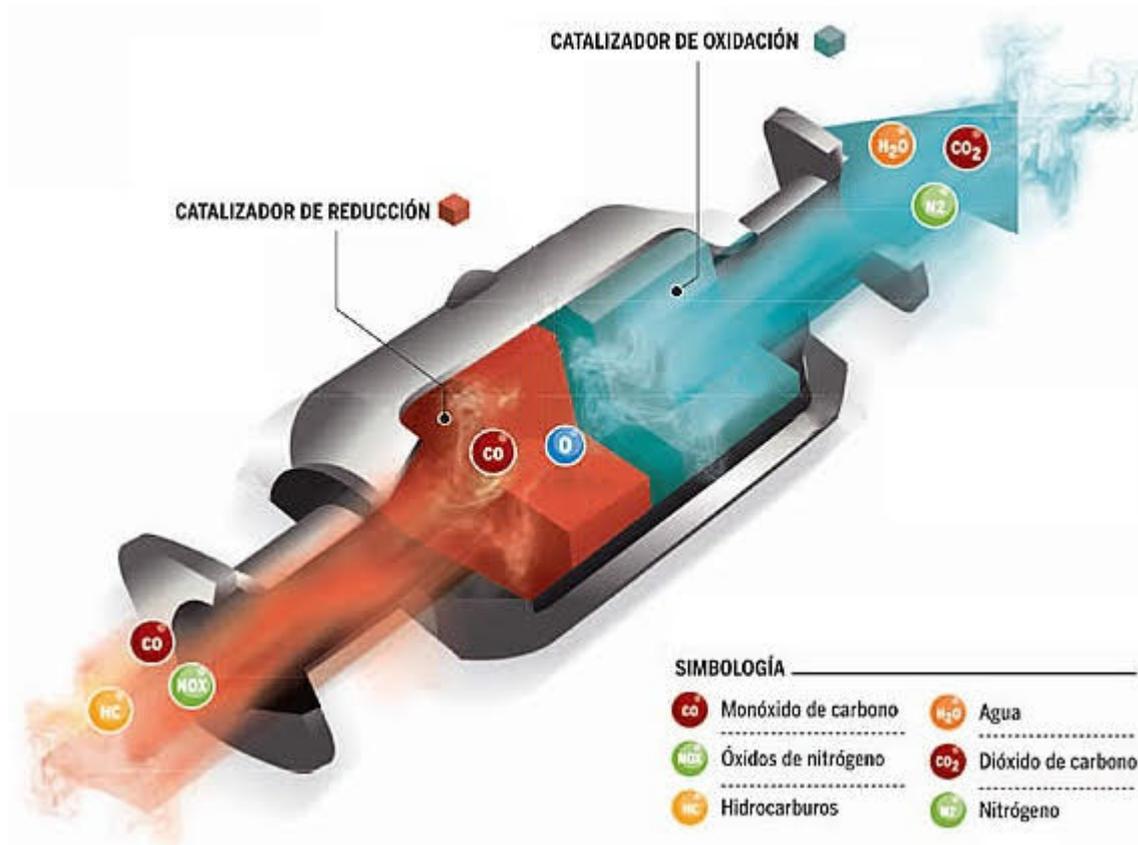


Figura 2.6: Proceso de catalizador de reducción.

- **Catalizadores de tres vías.** Actúa conjuntamente sobre la oxidación de los CO y HC sin quemar y sobre la reducción de NO_x . En la Figura 2.7 se puede ver el proceso descrito. Como agentes catalizadores emplean paladio, platino y rodio. Para su funcionamiento requiere un dosado estequiométrico por lo que solo se puede usar en motores de gasolina convencionales.
- **Reactores de reducción catalítica selectiva (SCR).** Este método de reducir las emisiones contaminantes es el que se va a estudiar más profundamente a lo largo de este documento y consiste en reducir los óxidos de nitrógeno a nitrógeno molecular en atmósferas ricas en oxígeno. Requiere titanio y vanadio como agentes catalizadores además de consumo de amoníaco. Por su alta toxicidad y peligrosidad, se añade una fase previa de generación de amoníaco a partir de urea, que es el componente que se debe suministrar.
- **Sistemas de almacenamiento químico de NO_x o trampa de NO_x .** Estos sistemas atrapan las moléculas de NO_2 mediante filtros químicos por absorción química. Estructuralmente se asemejan a los catalizadores de tres vías pero estos incluyen un

agente, el óxido de bario (BaO), que consigue que el NO_2 se rompa. En atmósferas ricas en oxígeno el sistema oxida el CO y los HC sin quemar y también el NO para producir NO_2 . En los motores Diésel esta tecnología recibe el nombre de NSR (NO_x Storage - reduction) o LNT (Lean NO_x Trap).

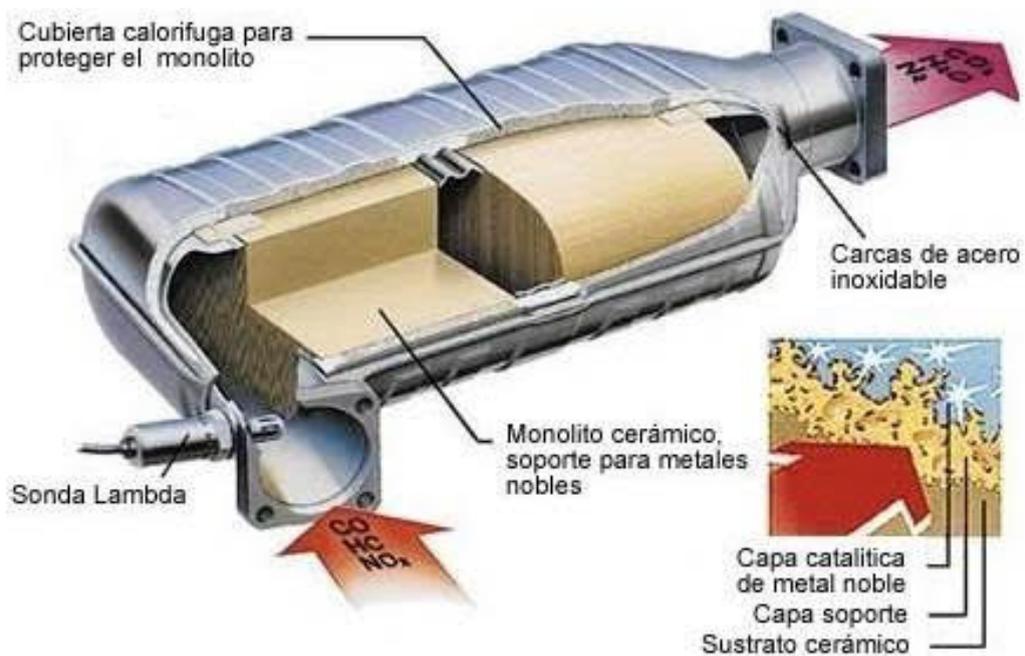


Figura 2.7: Proceso de funcionamiento catalizador de tres vías.

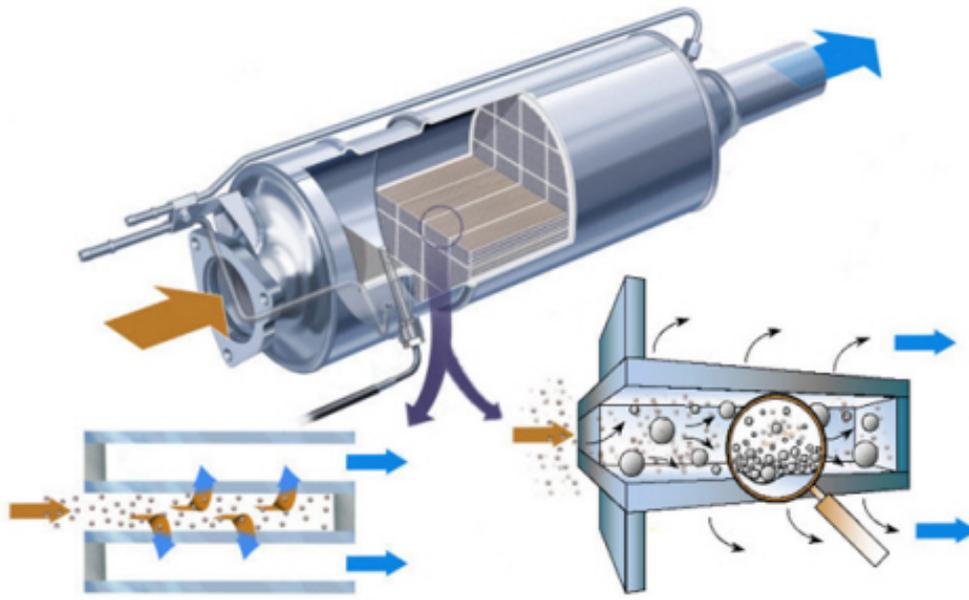


Figura 2.8: Funcionamiento del filtro de partículas.

- **Filtro de partículas.** La misión de los filtros es recoger las partículas provenientes del hollín, los hidrocarburos, los sulfatos, el agua y una pequeña cantidad de cenizas. Los del tipo *Wall Flow* consisten en una estructura monolítica de material cerámico y sección cilíndrica u ovalada, con un gran número de canales paralelos y reducida sección transversal, que atraviesa longitudinalmente el monolito y que tienen sus extremos sellados alternativamente, obligando al flujo del gas a atravesar la pared porosa del monolito, actuando de medio filtrante, como se muestra en la Figura 2.8.

2.5. Los óxidos de nitrógeno o NO_x

Los óxidos de nitrógeno, representados químicamente como NO_x son una agrupación de diferentes componentes, principalmente compuestos por monóxido de nitrógeno (NO) y dióxido de nitrógeno (NO_2). Estos se generan por la combustión de combustibles fósiles y de biomasa, en la fabricación de los ácidos nítrico y sulfúrico, en diferentes procesos industriales de nitrificación, como consecuencia de tormentas eléctricas, en la oxidación de NH_3 por la descomposición microbiana de proteínas en el suelo y por la actividad volcánica [13].

Dentro de esta agrupación, existen más compuestos como se muestra en la Tabla 2.3.

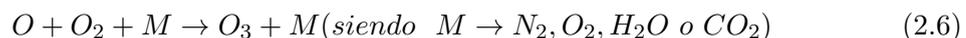
Nombre	Fórmula	Descripción
Óxido nítrico	N_2O	Gas incoloro, inodoro, no reactivo y muy estable en la atmósfera con vida en la atmósfera de unos 110-168 años.
Óxido nítrico	NO	Gas tóxico, incoloro, inodoro y no inflamable.
Dióxido de nitrógeno	NO_2	Está en equilibrio. Es pardo y paramagnético.
Tetróxido de dinitrógeno	N_2O_4	Está en equilibrio. Es incoloro y diamagnético.
Trióxido de dinitrógeno	N_2O_3	Solo es estable en estado sólido, a partir de 102°C. Es azul pálido.
Pentóxido de dinitrógeno	N_2O_5	Se descompone fácilmente en NO_2 y O_2 . Es sólido y blanco.

Tabla 2.3: Los NO_x en el medio ambiente.

Como ya se ha expuesto anteriormente, los óxidos de nitrógeno son extremadamente nocivos para el medio ambiente y representan un grave riesgo para la salud. El 80 % de las emisiones de NO_x son en forma de NO , que a su vez se convierte lentamente a NO_2 , mediante oxidación fotoquímica a través de radicales peróxidos o de oxidantes atmosféricos como el ozono. El NO_2 , a su vez, es un precursor de los ácidos nítrico y nitroso, los cuales contribuyen a la lluvia ácida, que es el resultado de la reacción de NO_2 con agua, a través de radicales $HO_2\cdot$ y $OH\cdot$, según las siguientes reacciones:



También contribuyen a la contaminación fotoquímica del aire al favorecer la formación de ozono:



Prácticamente no existe un proceso atmosférico donde no intervengan estos óxidos, en la Figura 2.9 se muestran un esquema del ciclo de los óxidos de nitrógeno presentes en el medio ambiente y como se transforman.

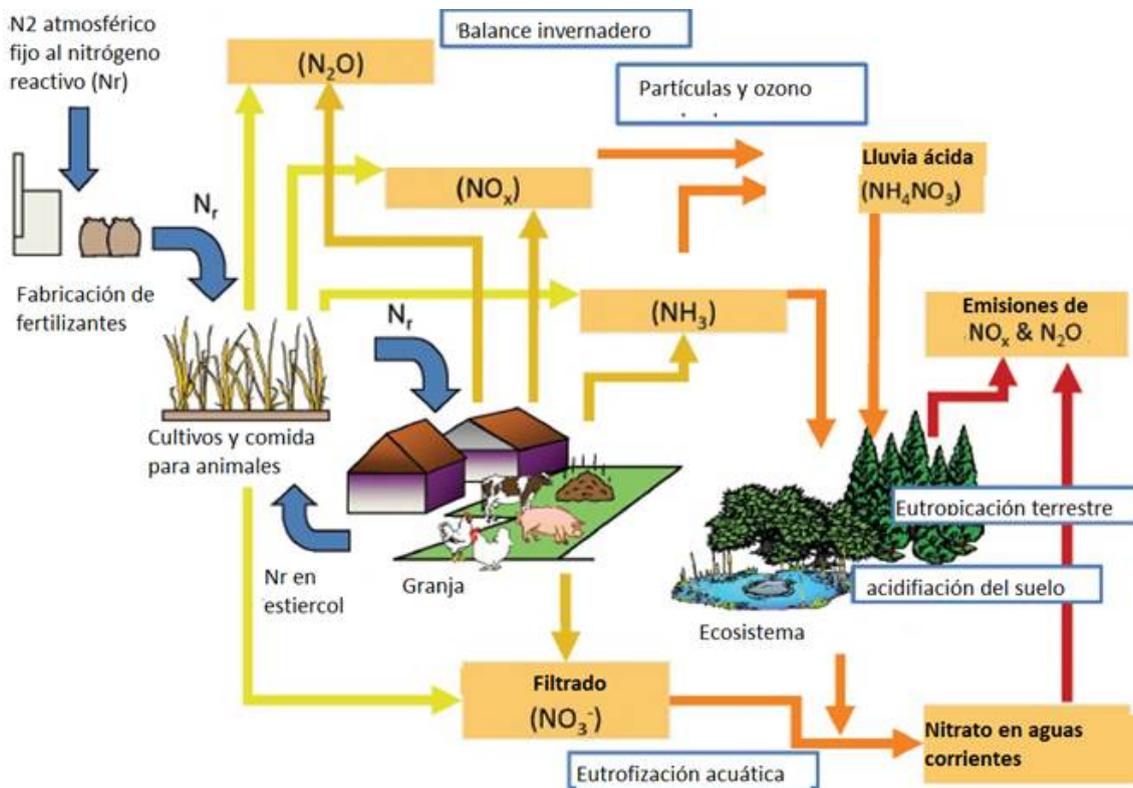


Figura 2.9: Flujo en la sección de salida de un orificio de inyección.

En cuanto a los efectos de los óxidos de nitrógeno sobre la salud humana, estos intervienen en prácticamente todos los procesos fisiológicos. Los principales efectos sobre la salud provocados por cada uno de los diferentes compuestos son:

- NO : reacciona con la hemoglobina para formar metahemoglobina y produce cianosis y posible fallecimiento.
- NO_2 : Afecta por inhalación y es el causante de edemas pulmonares. Se vuelve letal a partir de 200 ppm aunque frente a exposiciones crónicas bajas puede producir ataques de tos, dolores de cabeza, pérdida de apetito y problemas gastrointestinales.
- N_2O : Este gas se ha usado durante mucho tiempo como anestésico, también conocido como *gas de la risa*. La exposición puede provocar polineuropatía y mielopatía.

2.6. Sistemas de reducción catalítica selectiva (SCR)

El sistema de reducción catalítica selectiva es una forma de convertir los óxidos de nitrógeno, con la ayuda de un catalizador, en nitrógeno di-atómico (N_2) y agua (H_2O). Estos sistemas se utilizan para tratar emisiones de óxidos de nitrógeno creadas por calderas de carbón, motores y turbinas de combustión de gas natural y motores diésel. Los primeros sistemas SCR comenzaron a usarse en motores estacionarios y marinos, en los cuales se inyectaba directamente amoníaco (NH_3) sin diluir. Debido a que transportar y almacenar

amoniaco resulta peligroso, se usa una dilución de urea al 32,5 % en agua, comercialmente conocida como AdBlue, que se almacena y posteriormente se descompone en amoniaco.

El sistema de reducción catalítica selectiva es uno de los productos más complejos para el tratamiento de emisiones. La complejidad deriva de la tecnología avanzada de control que se requiere para asegurar un rendimiento óptimo del sistema, ya que las necesidades de tratamiento dependen en gran medida del funcionamiento en tiempo real de los motores. Existen diferentes procesos aunque son muy similares entre sí, en la Figura 2.10 se representa el diagrama de flujo simplificado de una planta típica.

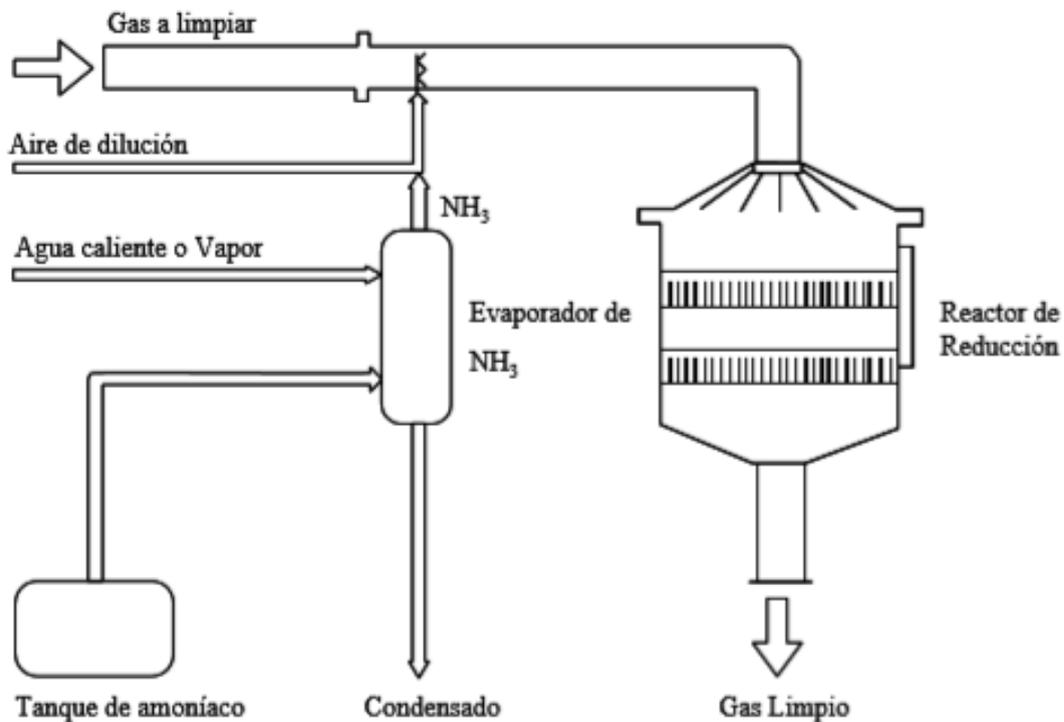


Figura 2.10: Proceso de un sistema de reducción catalítica selectiva.

Para la reducción selectiva catalítica (SCR) es necesario el uso de catalizadores que absorban y almacenen NH_3 a bajas temperaturas ($T < 200^\circ C$) para desorber posteriormente a temperaturas más altas ($T = 200-800^\circ C$). Se produce por las sucesivas termólisis e hidrólisis de solución de agua y urea. El esquema básico de un sistema SCR mostrado en la Figura 2.11 se compone de una sucesión de catalizadores en el que se producen reacciones en cada uno de ellos.

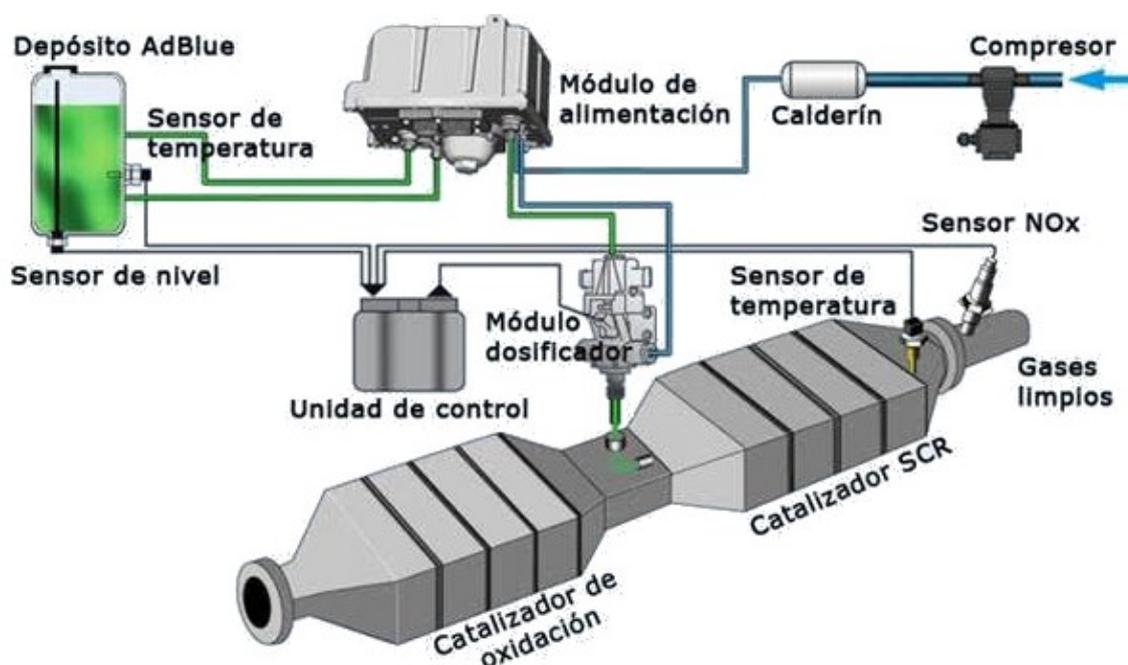
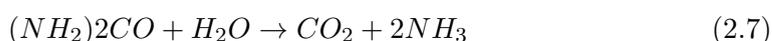


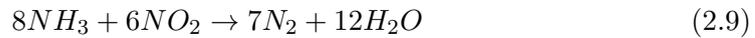
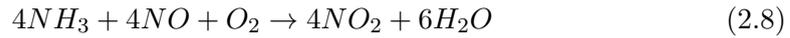
Figura 2.11: Proceso de un sistema de reducción catalítica selectiva.

Los componentes que forman el sistema son:

- **Depósito de urea.** De unos 20 litros de capacidad para soportar una autonomía de unos 20000 km.
- **Inyector de urea.** Está colocado en el tubo de escape antes del catalizador. Inserta el spray de AdBlue para que se produzca la reacción química.
- **Unidad de control.** Calcula la cantidad necesaria de urea que se necesita en cada momento para que la reacción sea estequiométrica, es decir, que todas las moléculas reaccionen entre sí. Así como también tiene la función de controlar la cantidad de urea disponible en el depósito, mediante parámetros como el estado operativo del motor, la temperatura de los gases y el porcentaje de NO_x en los gases de escape.
- **Tramo de termólisis.** Se descompone la mezcla urea-agua en en amoníaco (NH_3) y en ácido iso-ciánico ($HNCO$).
- **Tramo de termólisis y hidrólisis.** Se sitúa antes de los catalizadores de reducción. La mezcla de urea-agua procedente de un tanque de almacenamiento se diluye en aire y se inyecta junto con el gas a limpiar en el reactor, compuesto habitualmente por dos capas de catalizador, generalmente óxidos de titanio soportados sobre sílice. El proceso de termólisis descompone el AdBlue en amoníaco (NH_3) y en ácido iso-ciánico ($HNCO$) y posteriormente mediante la hidrólisis, se descompone el ácido iso-ciánico ($HNCO$) en dióxido de carbono (CO_2) y en amoníaco (NH_3), produciéndose la reacción:



- **Catalizador SCR.** En este catalizador el amoníaco reacciona con los óxidos de nitrógeno convirtiéndolos en nitrógeno (N_2) y agua (H_2O). Está formado por una mezcla de óxidos de vanadio y de titanio. Las reacciones que se producen son:



- **Catalizador de limpieza.** A la salida del catalizador SRG se coloca un catalizador de oxidación de amoníaco y un sensor de detección de NO_x para controlar la precisión de inyección ya que si se inyecta urea en exceso, se podría emitir amoníaco en el escape.

2.7. Bases teóricas para la medida de sprays

Para poder modelar mejor el chorro, se va a hacer un estudio de los parámetros que afectan a este ya que el proceso de inyección y la física del flujo interno influyen sobre su comportamiento.

El flujo de cantidad de movimiento (fCdM) de un chorro de inyección es uno de los parámetros más importantes a la hora de estudiar el proceso de inyección, ya que de él dependen las características del chorro como penetración, ángulo o aire englobado.

2.7.1. Flujo de cantidad de movimiento de un chorro

La cantidad de movimiento, o momento lineal, es una magnitud física de tipo vectorial que describe el movimiento de un cuerpo. Se define como el producto de la masa del cuerpo y su velocidad en un instante determinado [7].

Este concepto trasladado a un fluido a través de una sección se obtiene el producto del flujo másico y la velocidad, un flujo de cantidad de movimiento (fCdM) [7]. Para una superficie de control A_0 , se define como:

$$\dot{M} = \int_{A_0} \rho V(V \cdot n) dA \quad (2.10)$$

donde A_0 es el área geométrica, \dot{M} es el fCdM, V es la velocidad y dA y n son el diferencial de área y su vector unitario normal correspondiente.

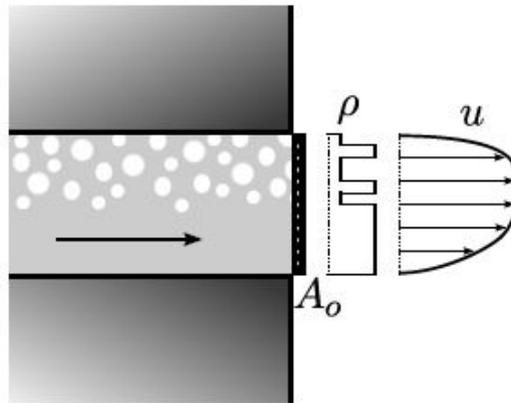


Figura 2.12: Flujo en la sección de salida de un orificio de inyección.

A lo largo del presente documento, se considerará únicamente la componente axial, por lo tanto, \dot{M} equivaldrá al fCdM en dirección axial. Como se muestra en la Figura 2.12, si se aplica la ecuación (2.10) en la sección de salida de un orificio de inyección, y considerando únicamente la componente axial perpendicular a la superficie de control, se obtiene:

$$\dot{M} = \int_{A_o} \rho u^2 dA \quad (2.11)$$

donde u es la componente de la velocidad en dirección axial y ρ es el perfil de densidades, constante e igual a la densidad del líquido siempre que no aparezca cavitación.

2.7.2. Masa inyectada por ciclo

Uno de los parámetros del flujo a través de un orificio es el flujo másico, el cual se define como:

$$\dot{m} = \int_{A_o} \rho (\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) dA \quad (2.12)$$

Al igual que para el fCdM, para el caso particular de la sección de salida del orificio de inyección, se obtiene:

$$\dot{m} = \int_{A_o} \rho u dA \quad (2.13)$$

2.7.3. Velocidad y área efectivas

A la salida de un orificio, el flujo real se determinará por el perfil de velocidad y de densidad del fluido. Aunque se desconocen las características de estos perfiles, es posible representar un flujo simplificado mediante la definición de:

- **Área efectiva de paso** A_{ef} , menor a la área geométrica debido a que el perfil de velocidad no es uniforme, la cavitación en la salida del orificio y el fenómeno de separación completa del flujo.
- **Velocidad efectiva** u_{ef} , uniforme en toda la sección.
- **Densidad constante** ρ_f , igual a la del fluido.

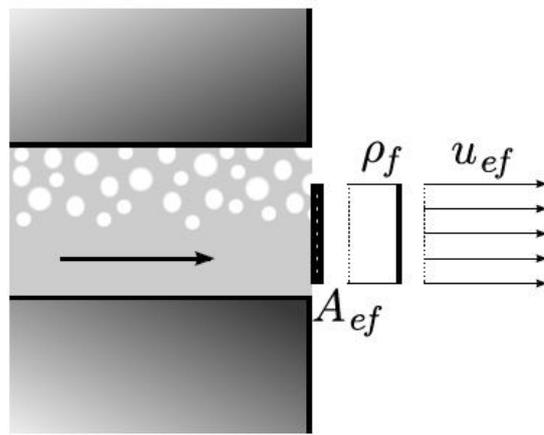


Figura 2.13: Flujo en la sección de salida de un orificio de inyección caso simplificado.

Los parámetros del caso simplificado (Figura 2.13) sólo serán válidos cuando el fCdM y el flujo másico sean iguales a los reales (Figura 2.12). Por tanto, se deberá adaptar las ecuaciones integrales del fCdM (2.11) y flujo másico (2.13).

$$\dot{M} = A_{ef} \rho_f u_{ef}^2 \quad (2.14)$$

$$\dot{m} = A_{ef} \rho_f u_{ef} \quad (2.15)$$

A partir de estas dos ecuaciones se puede obtener la velocidad, área y diámetro efectivo, suponiendo forma esférica.

$$u_{ef} = \frac{\dot{M}}{\dot{m}} \quad (2.16)$$

$$A_{ef} = \frac{\dot{m}^2}{\rho_f \dot{M}} \quad (2.17)$$

$$D_{ef} = \sqrt{\frac{4 A_{ef}}{\pi}} \quad (2.18)$$

2.7.4. Coeficientes de flujo

Para poder adimensionalizar los parámetros anteriormente definidos, se establecerá una serie de coeficientes.

COEFICIENTE DE VELOCIDAD

Relaciona la velocidad efectiva con la velocidad máxima teórica.

$$C_v = \frac{u_{ef}}{u_{teo}} = \frac{u_{ef}}{\sqrt{2 \frac{\Delta p}{\rho_f}}} \quad (2.19)$$

COEFICIENTE DE ÁREA

Este coeficiente relaciona el área efectiva con el área geométrica. Evalúa la disminución de área y se calcula con la ecuación

$$C_a = \frac{A_{ef}}{A_0} \quad (2.20)$$

COEFICIENTE DE DESCARGA

El coeficiente de descarga se define como el caudal másico real entre el caudal máximo teórico, el cual se considera un flujo con velocidad máxima teórica y con área geométrica.

$$C_d = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{teo}} = \frac{\dot{m}}{A_0 \rho_f u_{teo}} = \frac{\dot{m}}{A_0 \sqrt{2 \rho_f \Delta p}} \quad (2.21)$$

COEFICIENTE DE MOMENTO O fCdM

Este coeficiente se define como el fCdM real frente al máximo teórico, considerando las mismas condiciones de flujo para el máximo teórico que para el coeficiente de descarga.

$$C_m = \frac{\dot{M}}{\dot{M}_{teo}} = \frac{\dot{M}}{A_0 \rho_f u_{teo}^2} = \frac{\dot{M}}{2 A_0 \Delta p} \quad (2.22)$$

RELACIÓN ENTRE LOS COEFICIENTES

Para obtener una relación entre los diferentes coeficientes obtenidos, se sustituirá en la ecuación del c_d 2.21 el valor del flujo másico en función de los parámetros efectivos 2.15 y posteriormente se combinará con las ecuaciones del coeficiente de área 2.20 y de velocidad 2.19.

$$C_d = \frac{A_{ef} \rho_f u_{ef}}{A_0 \rho_f u_{teo}} = C_a C_v \quad (2.23)$$

Si se sigue el mismo procedimiento para el coeficiente de fCdM, se obtiene:

$$C_m = C_a C_v^2 \quad (2.24)$$

Y finalmente combinando estas dos reacciones, se consigue:

$$C_v = \frac{C_m}{C_d} \quad (2.25)$$

EFFECTO EN LA PENETRACIÓN DEL SPRAY

La curva de penetración en función del tiempo es una de las características de los chorros que se suelen medir. La penetración (S) se calcula como la posición de la gota más alejada del contorno de pulverización, refiriéndose al que se sitúa más alejado en la dirección de inyección (coordenada axial Y).

CONVERGE calcula la penetración como la masa total de las celdas líquidas desde el inyector y luego multiplica esta masa por la fracción de líquido penetrado para producir la masa de pulverización penetrada. Empezando por el centro del inyector, CONVERGE suma la masa de las parcelas del líquido hasta llegar a la masa de pulverización penetrada [17]. En el presente estudio se ha usado la penetración basada en el 99 % de la masa líquida.

Capítulo 3

Metodología CFD

El análisis del problema empieza con un modelo matemático, pero para simplificar el problema se va a suponer un modelo físico. Esto significa que este modelo físico incluye las condiciones de contorno de la zona que se quiere estudiar así como las propiedades del flujo, condiciones iniciales y dominio. En toda la región de interés deben cumplirse las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía y continuidad.

El modelo numérico consiste en dividir el dominio de cómputo en un gran número de celdas o volúmenes de control mediante una malla. En cada celda se aplica el método de volúmenes finitos, esto es, las ecuaciones diferenciales de conservación que describen el movimiento del fluido se aproximan con ecuaciones algebraicas que relacionan las variables como presión, velocidad o temperatura de la celda con los valores de las celdas adyacentes. Estas ecuaciones se resuelven numéricamente para obtener la configuración del flujo resolviendo la malla.

3.1. Geometría

La geometría es el punto inicial del problema ya que describe la forma. Esta consiste en la representación de la zona que se estudia así como su dominio. Hay que tener en cuenta que cuando más simple sea esta, menor coste computacional tendrá el estudio aunque a veces esta puede hacer que sea difícil mallar una zona determinada.

Para este estudio, se van a replicar los resultados experimentales obtenidos en el CMT [8], [9], donde se usa una geometría simple consistente en un cubo de lados $0.07 \times 0.07 \times 0.18$ m, aunque para ahorrar coste computacional este se ha simplificado en $0.07 \times 0.07 \times 0.07$ m. Este cubo está compuesto por una entrada de flujo, que se sitúa opuesta a la salida y en los laterales, techo y suelo las cuatro paredes, mostrado en la Figura 3.1. En el centro de la pared superior se sitúa el inyector de la mezcla de urea y agua.

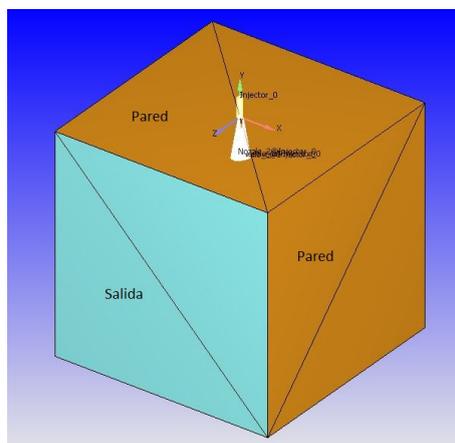


Figura 3.1: Geometría del modelo 3D.

3.2. Mallado

La generación de la malla representa un proceso importante en la etapa de preproceso de las simulaciones, ya que de su tamaño y nivel de refinamiento depende que durante la simulación se alcancen resultados de manera más o menos precisa. Esta designa los volúmenes o elementos en los que se calcula el flujo y representa discretamente la geometría del problema. La calidad del mallado es de fundamental importancia para obtener un buen resultado. La densidad de malla debe ser suficiente para capturar todas las características relevantes del flujo y la malla adyacente a una pared debe ser suficientemente fina para resolver el flujo en la capa límite.

Habitualmente, la obtención de las mallas para las simulaciones CFD es compleja ya que necesita de un proceso para alcanzar la malla óptima. Se debe reducir el valor de la asimetría (*skewness*) de las celdas para evitar errores computacionales, así como el cambio de tamaño entre celdas adyacentes debe ser gradual y la relación de aspecto próxima a 1. En la Figura 3.2 muestran diferentes tipos de celdas.

La malla óptima para el estudio CFD de mayor precisión numérica y velocidad computacional es la cartesiana [14], en la que todos los elementos son “bloques” exactamente iguales, y de lados paralelos a las tres direcciones principales XYZ.

El modelo computacional usado para las simulaciones del chorro urea-agua se han obtenido mediante CONVERGETM. Este software es un código de CFD usado generalmente para cálculo tridimensional, con flujo incompresible o compresible, con fluidos con reacciones químicas en complejas geometrías en estacionario o transitorio, con geometrías fijas o móviles. El código puede manipular un determinado número de especies y reacciones químicas, así como sprays líquidos con flujos transitorios, laminares o turbulentos.

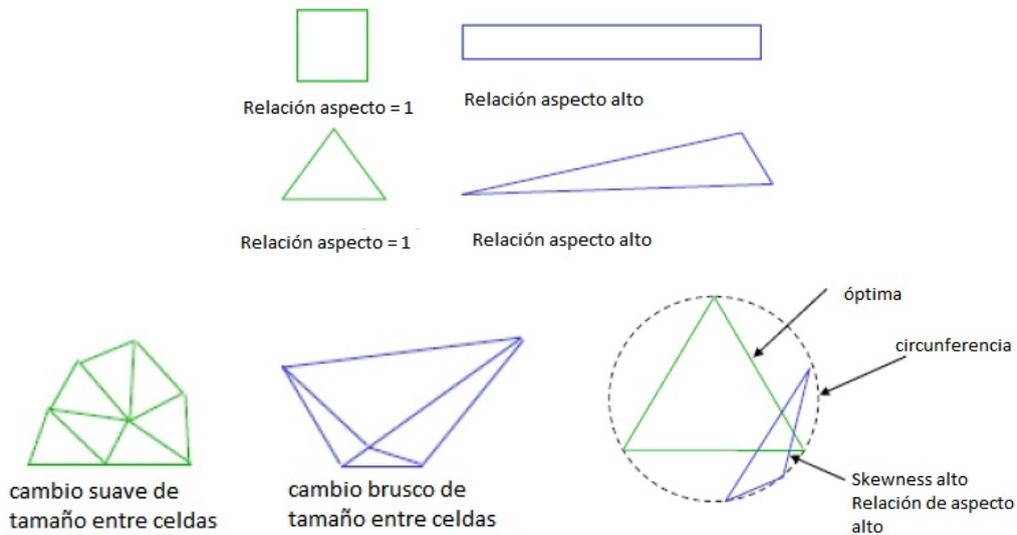


Figura 3.2: Geometría de las celdas de la malla.

Para el presente estudio, se ha usado una malla cartesiana para la geometría de la cámara, generada mediante los diferenciales de X, Y y Z establecidas previamente, obteniendo el resultado mostrado en la Figura 3.3. El tamaño base de celda que se ha establecido ha sido de $7.5 \cdot 10^4$ metros en todos sus lados (dx, dy y dz). Así se obtendrán aproximadamente unas $8.2 \cdot 10^5$ celdas, un valor óptimo para el cual se consigue la independencia de malla sin aumentar excesivamente el coste computacional.

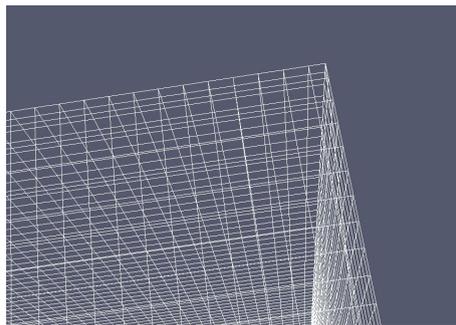


Figura 3.3: Malla del modelo 3D.

Este software tiene la característica de usar un método cartesiano de corte-celda en la malla para adaptarla a la geometría de interés mientras se mantiene la precisión de la forma de la frontera. Esta aproximación permite usar celdas ortogonales simples y automatizar completamente el proceso de generación de la malla. Este proceso se ha usado anteriormente en diversos estudios con simulaciones relacionando superficies curvas, sprays y reacciones químicas [10], [5].

3.2.1. AMR

En toda simulación de flujo, se desea estudiar en mayor profundidad las zonas del dominio donde se presenta un flujo crítico, el cual es inestable, donde un mínimo cambio en la energía específica causaría un cambio significativo en los resultados, por lo que en esta zona se refina la malla. Esto es, el tamaño de las celdas es más pequeño donde se quiere resolver el flujo con mayor precisión e implica un mayor tiempo de cálculo. En las otras zonas del dominio donde no se centra el estudio del flujo, el mallado puede ser más grueso, esto implica celdas más grandes y menor coste computacional. Por tanto, la malla estará refinada cerca del inyector y del spray y el tamaño de celda irá aumentando conforme se aleje de estas zonas de interés.

En muchos casos de ingeniería, es difícil determinar cuál es la zona más crítica del flujo. Entonces es de gran utilidad usar el refinamiento adaptativo de malla (AMR). Un AMR óptimo se consigue mediante un buen algoritmo que permita refinar la malla en las zonas donde queda flujo sin resolver o donde se usa el modelado *Sub-Grid Field (SGS)*. El solver del software estima la magnitud del SGS para determinar donde se añaden más celdas dependiendo del valor que se ha especificado anteriormente. Este proceso puede producirse para disminuir o aumentar el número de celdas de una región.

Para este caso, se ha establecido un AMR en función de la velocidad, imponiendo un número máximo de celdas de $2 \cdot 10^6$ y se usa cuando el recuento de celdas supere las 10. Se puede observar fácilmente como en las proximidades del inyector y en la salida del spray, la malla tiene un tamaño de celda menor y va aumentando conforme se aleja de esta zona.

3.3. Algoritmos numéricos

La mecánica de fluidos computacional CFD (Computational Fluid Dynamics) se ha usado recientemente para simular comportamientos de fluidos en el ámbito de la ingeniería e investigación. Esta ha ido en auge gracias a la mejora progresiva de las máquinas de cálculo necesarias por su gran complejidad.

Su metodología consiste en usar un conjunto de métodos numéricos y algoritmos para aproximar el comportamiento real de un fluido. La fiabilidad de sus resultados depende directamente con el valor de las diferentes variables introducidas, como longitud, rugosidad y coeficientes de pérdidas entre otros.

En el planteamiento de un problema CFD se parte desde el modelo matemático del fenómeno físico que se desea estudiar. Este generalmente suele ser expresado en forma de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales o ecuaciones integro-diferenciales junto con las condiciones de contorno. En el caso de la dinámica de fluidos computacional, dependiendo de la aplicación, se utilizan las ecuaciones de Navier-Stokes o sus simplificaciones.

Posteriormente, una vez definido el problema matemático, se procede a discretizar temporal y espacialmente para convertir las ecuaciones en algebraicas. Se obtiene una serie discreta de valores tanto en el espacio como en el tiempo.

3.3.1. Ecuaciones para el cálculo CFD

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

Las ecuaciones necesarias para resolver el problema del movimiento de los fluidos se desarrollarán a continuación.

ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

La primera ecuación que se va a estudiar está basada en el principio de la conservación de la masa. Según este principio, a lo largo de un fluido, la masa ni se crea ni se destruye sino que se conserva, siendo igual a la entrada y a la salida de sistema. El primer término de esta ecuación muestra la variación de masa por unidad de volumen y tiempo en un punto determinado, y el segundo término hace referencia a la variación de velocidad del fluido.

$$\frac{d\rho}{dt} + \vec{\nabla}(\rho\vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

donde ρ es la densidad del fluido y \vec{v} es la velocidad del fluido en un punto (x,y,z) del espacio en un tiempo t determinado.

ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO

La ecuación de cantidad de movimiento de un fluido se obtiene a partir de la segunda ley de Newton, donde para un volumen finito, la variación de la cantidad de movimiento de la masa es igual a la resultante de las fuerzas que actúan sobre ese volumen. En la ecuación el primer término representa la variación temporal de la cantidad de movimiento dentro del volumen finito y el segundo término representa la cantidad de movimiento que entra y sale al sistema.

$$\frac{d(\rho\vec{v})}{dt} + \nabla(\rho\vec{v} * \vec{v}) = -\nabla P + \nabla\vec{\tau} + \rho\vec{g} + \vec{F} \quad (3.2)$$

Siendo $\rho\vec{g}$ la fuerza gravitacional, \vec{F} las fuerzas externas que se producen y $\nabla\vec{\tau}$ muestra la variación en el tensor del fluido.

ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE LA ENERGÍA

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

$$\rho \frac{d}{dt} \left(e + \frac{v^2}{2} \right) = -\nabla(pv) + \nabla(\tau'v) + \rho f v + \nabla(k\nabla T) \quad (3.3)$$

siendo $\nabla(k\nabla T)$ la variación de la energía cinética turbulenta.

ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE LAS ESPECIES

Mediante la ecuación de la conservación de las especies se obtiene la fracción másica de todas las especies que se encuentran en el dominio.

$$Y_i = \frac{M_i}{M_t} = \frac{\rho_i}{\rho_t} \quad (3.4)$$

Donde M_i es la masa de la especie i en una celda determinada, M_t es la masa total que existe en esa celda, ρ_i es la densidad de la especie i en la celda y ρ_t es la densidad total que existe en dicha celda.

3.3.2. Modelos de turbulencia

La turbulencia es un régimen del flujo en el que las partículas fluidas interactúan de manera que se vuelve caótico, no estacionario y aleatorio [6]. Se trata de un fenómeno tridimensional que se caracteriza por la baja capacidad de difusión y alta convección de cantidad de movimiento, por las rápidas fluctuaciones de velocidad y presión y por la elevada transferencia de masa y calor. Cabe destacar que el comportamiento turbulento del flujo está directamente relacionado con el número de Reynolds.

Los fenómenos turbulentos se caracterizan por su estructura compuesta de torbellino de diferente tamaño. Los torbellinos más grandes, mediante un mecanismo de dispersión, rompen en torbellinos más pequeños. Con este proceso se transmite la energía de las escalas mayores a las menores hasta alcanzar una escala suficientemente pequeña tal que la energía cinética puede ser disipada por la viscosidad del fluido de manera efectiva. A esta teoría se le denomina cascada de energía, y fue propuesta por A. N. Kolmogorov.

La turbulencia también está incluida en las ecuaciones de Navier-Stokes. Debido a la dificultad que presenta la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes, así como las distintas escalas de la turbulencia, se busca simplificar el problema de manera que sea accesible mediante métodos numéricos sin tan alto coste computacional. En estos términos, Reynolds presentó un método que descomponía las variables fluidas en dos componentes: la media y la desviación. Mediante este método se pueden estimar los efectos de la turbulencia y se le conoce como RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes).

Los modelos RANS que permite utilizar el software CONVERGE son el Standard k- ϵ , RNG k- ϵ , Generalized RNG k- ϵ , Rapid distortion RNG k- ϵ , k- ω SST, Realizable k- ϵ .

Las ecuaciones de transporte se resuelven usando la Presión Implícita con División del Operador (PISO). En las resoluciones RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) se promedian las ecuaciones de Navier Stokes para tener en cuenta los efectos de escalas de movimiento pequeñas y se modela la turbulencia, por tanto las escalas pequeñas están modeladas. El modelo turbulento que se usa es el RNG k- ϵ , este añade dos ecuaciones de transporte extra para representar las propiedades turbulentas del flujo, en este caso se usa la energía cinética turbulenta, k y la disipación turbulenta ϵ , que determina la escala de la turbulencia.

La viscosidad se determina a partir de una escala de turbulencia única, por lo que la difusión turbulenta calculada es solo la que ocurre en la escala especificada. Al añadir el enfoque RNG, se modifica la ecuación ϵ que intenta explicar las diferentes escalas de movimiento a través de cambios en el producto.

Las ecuaciones de transporte de k y ϵ considerando la flotabilidad nula son:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \epsilon \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon}^* \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (3.6)$$

donde:

$$C_{2\epsilon}^* = C_{2\epsilon} + \frac{C_\eta \nu^3 (1 - \frac{\eta}{\eta_0})}{1 + \beta \eta^3} \quad (3.7)$$

$$\eta = \frac{S_{ij} \sqrt{2k}}{\epsilon} \quad (3.8)$$

Las constantes se establecen según el procedimiento RNG.

3.4. Modelado del spray

El spray se modela mediante una distribución de parcela cerca del centro con el modelo de O'Rourke también para dispersión turbulenta. La evaporación es el proceso de cambio de fase de líquido a vapor. Consiste en la rotura de la tensión superficial de las gotas de agua mediante la energía alcanzada por el flujo de forma lenta. Las temperaturas elevadas favorecen el proceso de evaporación. Para determinar el ratio de tiempo para cambiar el tamaño de gota se usa el modelo de Chiang [11], el cual usa las correlaciones:

$$Nu_d = 1.275(1 + B_d)^{-0.678} Re_d^{0.438} Pr_d^{0.619} \quad (3.9)$$

$$Sh_d = 1.2224(1 + B_d)^{-0.568} Re_d^{0.365} Pr_d^{0.492} \quad (3.10)$$

La inestabilidad de Kelvin-Helmholtz (KH) se basa en un análisis de estabilidad del chorro de líquido. El análisis considera la estabilidad de un chorro de líquido, cilíndrico, viscoso, de radio r_0 que sale de un orificio circular a una velocidad U hacia un gas estancado, incompresible, no viscoso, de densidad ρ_g . El líquido tiene una densidad ρ_l y una viscosidad μ_l y se utiliza un sistema de coordenadas polares cilíndricas que se mueve con el chorro.

Además del mecanismo de ruptura de KH, también se cree que la inestabilidad de Rayleigh-Taylor (RT) es responsable de la ruptura de las gotas. Se cree que las ondas RT inestables se producen debido a la rápida desaceleración de las gotas debido a la magnitud de la fuerza de arrastre. Las implementaciones típicas del modelo de ruptura RT ignoran tanto la viscosidad del gas como del líquido.

Estos dos modelos combinados son los que se usa para modelar la rotura de las gotas.

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

Uno de los modelos que se usa para estudiar este efecto es el *Kuhnke film splash model*. Este considera la temperatura y la humedad de la pared (grosor de la película de la pared) para determinar la extensión de la salpicadura de la gota/película creada. Funciona comparando el número K del conjunto del fluido.

$$K = \frac{(\rho d)^{\frac{3}{4}} U^{\frac{5}{4}}}{\sigma^{\frac{1}{2}} \mu^{\frac{1}{4}}} = We^{\frac{5}{8}} La^{\frac{1}{8}} \quad (3.11)$$

En la Figura 3.4 se muestra un esquema de las condiciones bajo las cuales las parcelas se someterán a cada tipo de interacción de gota/película, dependiendo de los valores de K de la parcela del fluido y de T^* [21].

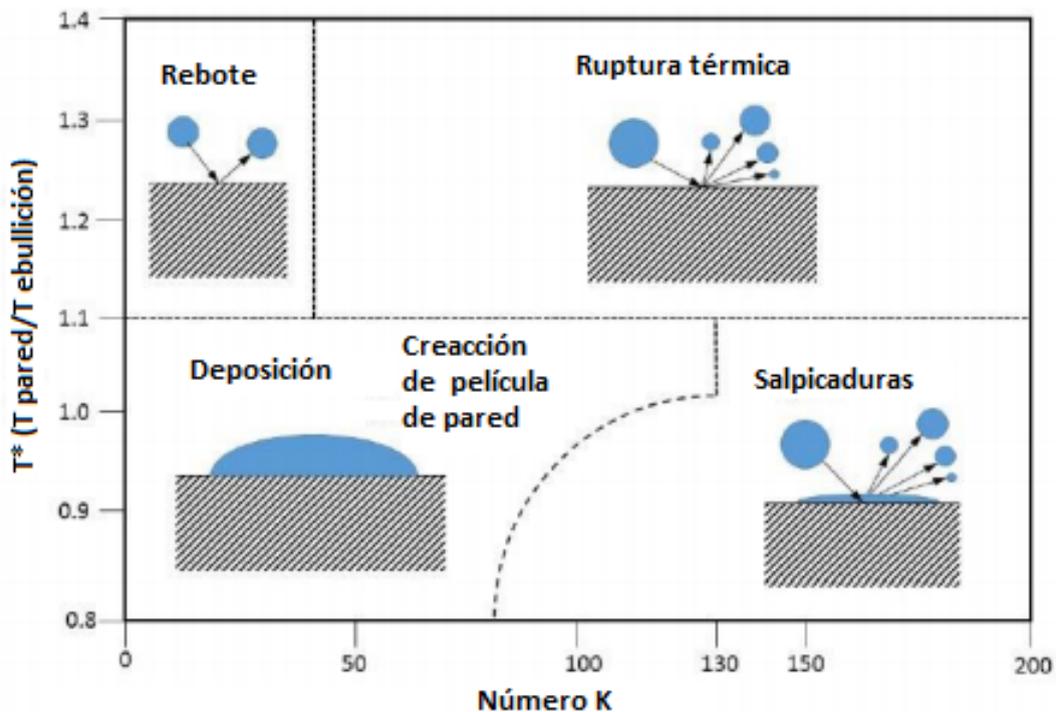


Figura 3.4: Modelo de Kuhnke.

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

3.5. Mezcla Urea-agua

En este estudio, el spray que sale del inyector es una mezcla de fluidos compuesto por Urea ($(NH_2)_2CO$) y Agua (H_2O). Esta mezcla está compuesta de un 32.5 % de $(NH_2)_2CO$ y un 67.5% H_2O . El spray resultante se modela como una mezcla de ambos líquidos con sus características correspondientes. Las propiedades de esta mezcla se recogen en la Tabla 3.1.

Características	
Densidad (20°C)	1.0895 g/cm ³
Índice de refracción (20°C)	1.3829
Temperatura de operación óptima	10-25°C
Temperatura de congelación	-11°C
pH	9,5
Punto de inflamación.	>100°C
Viscosidad (15°C)	1,4 mPa·s
Tensión superficial	0,2 % 35 DYN / CM ²

Tabla 3.1: Características de la mezcla Urea-Agua.

Los datos anteriores aplicados para las características del flujo se han validado en previos estudios [1], [8], [9].

Capítulo 4

Resultados

En este apartado se va a analizar y representar los resultados obtenidos para las simulaciones realizadas según la metodología explicada en apartados anteriores.

Se han seleccionado tres ventanas de medida para visualizar el tamaño de las gotas, como se puede ver en la Figura 4.1. La primera posición (P1) se encuentra a 4 mm en dirección Y de la salida del inyector, la segunda posición (P2) se encuentra a 30 mm de la salida del inyector en dirección Y, y la posición 3 (P3) está a 30 mm en dirección Y de la salida del inyector y a 7 mm en dirección X del eje central. Estas ventanas tienen un tamaño de 4.1 mm de altura y 3.8 mm de ancho, coincidiendo con las ventanas que se han estudiado experimentalmente [1] [8] [9].

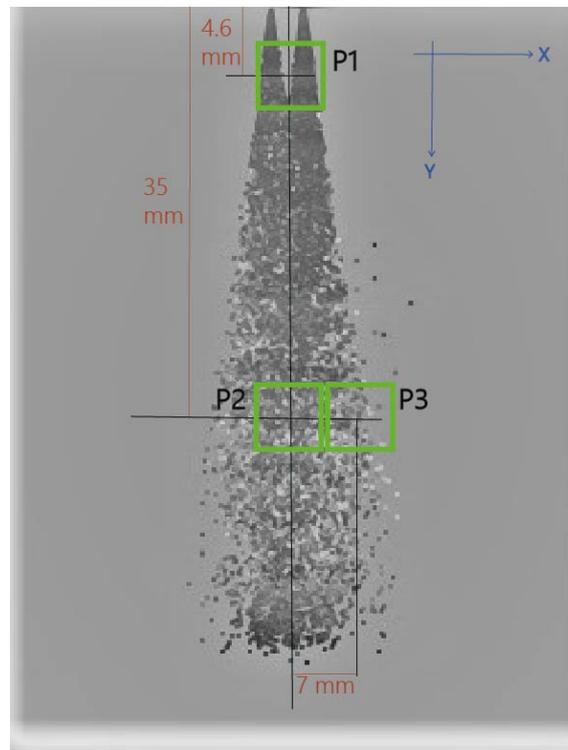


Figura 4.1: Localización de la posición de las ventanas.

4.1. Condiciones de contorno

Para realizar el estudio, se va a usar un caso base y a partir de este se van a variar los parámetros de presión, temperatura y flujo másico para ver como afecta al comportamiento del chorro con el flujo interior. Estos casos tendrán los parámetros establecidos en la Tabla 4.1.

Caso	Presión (bar)	Temperatura (°C)	Flujo másico (kg/h)
BASE	6	180	40
1	4	180	40
2	8	180	40
3	6	350	40
4	6	180	100
5	6	180	350

Tabla 4.1: Parámetros variables de los diferentes estudios.

4.2. Validación datos

Los valores globales obtenidos en este trabajo están en el mismo orden de magnitud que los encontrados por otros autores [1], [9], [7], [8].

Los valores para la penetración obtenidos en este estudio mediante CFD son muy similares a los obtenidos experimentalmente por Perez, J. [4], en el cual establecía que con una temperatura de 180°C, un gasto másico de 40 kg/h, la penetración a los 2 ms resultaba 0.040, 0.038, 0.025 mm para las presiones de 8, 6 y 4 bar respectivamente. Por tanto, estos resultados son muy similares a los mostrados en la Figura 4.3.

En cuanto al diámetro de gota, Payri, R. [9] es estudió experimentalmente como influía la presión en este con una temperatura de 180°C, un gasto másico de 40 kg/h. En la posición P1, estableció que se llegaba a una probabilidad de gota máximo de 0.007 con las gotas con un diámetro de unos 60 μm , y que no había una influencia clara de la presión de inyección en esta distribución. En este caso se han obtenido resultados muy similares ya que en la Figura 4.13a, en la que se obtiene una máxima probabilidad de gotas de 0.009 de diámetro 80 μm y la tendencia es la misma.

4.3. Efecto en la distribución de las gotas del spray

Para el caso base de 6 bares de presión de inyección, 180°C de temperatura, con tiempo de inyección 5 ms y con un flujo másico de 40 kg/h de flujo cruzado, el chorro llega a chocar con la pared de la base a los 0.037 segundos de inyección, como se muestra en la Figura 4.2. Esto no interesa que llegue a suceder ya que modifica el comportamiento del chorro. Por tanto, se realizará el estudio de este apartado para los tiempos 0.001 s y 0.002 s.

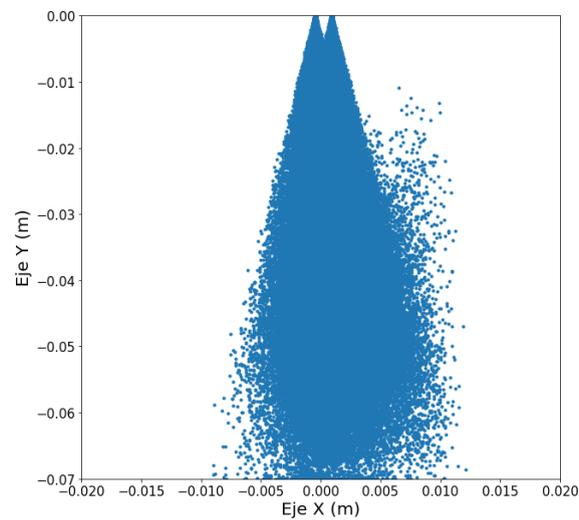


Figura 4.2: Distribución de las gotas en el instante 0.0037 s tras el inicio de la inyección.

4.3.1. Variación de presión de inyección

En la Figura 4.3 se demuestra el efecto de la presión de inyección sobre la penetración del spray. Es notable que cuanto mayor sea la presión de inyección, más rápido avanza el chorro debido al mayor impulso que se genera. Se produce un cambio de pendiente en los primeros instantes de inyección, lo cual se debe a la estabilización del flujo inyectado.

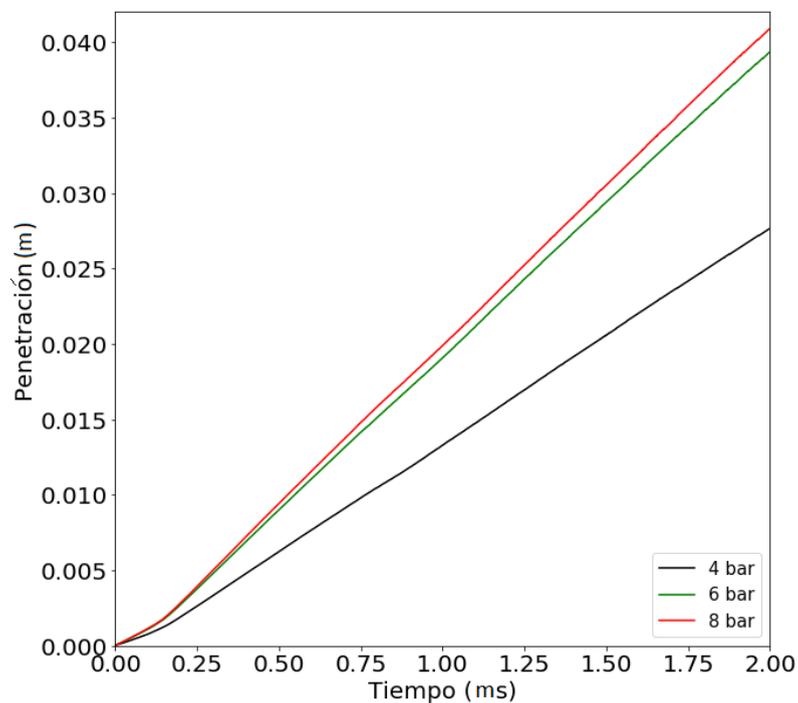


Figura 4.3: Evolución de la penetración con respecto el tiempo.

La Figura 4.4 muestra tres imágenes después de 0.001s de inyección. Se observa en todos los casos que el proceso de inyección aún no está estabilizado ya que aparecen unas discontinuidades en la forma del perfil del flujo inyectado. Para el caso base de 6 bares de presión de inyección (Figura 4.4b), el ángulo de difusión del spray es de 14.92° . Si se reduce la presión de inyección a 4 bares, (Figura 4.4a) se produce una variación muy pequeña en el ángulo de difusión del chorro a 15.53° , y al igual pasa al aumentar la presión de inyección a 8 bares (Figura 4.4c), el ángulo de difusión vertical tampoco experimenta una variación destacable, siendo de 15.64° .

La Figura 4.5 muestra el caso después de 0.002 segundos. En este punto, el proceso de inyección ya está estabilizado, donde no influye la apertura o cierre de la aguja. Para la primera imagen (Figura 4.5a), con 4 bares de presión de inyección, el ángulo de difusión del spray es de 15.17° . En la Figura 4.5b se muestra el spray cuando se aplica una presión de 6 bares, obteniendo un ángulo de 15.40° , ligeramente mayor al anterior comentado. Por último, para una presión de 8 bares (Figura 4.5c), el ángulo de difusión obtenido es de 14.90° .

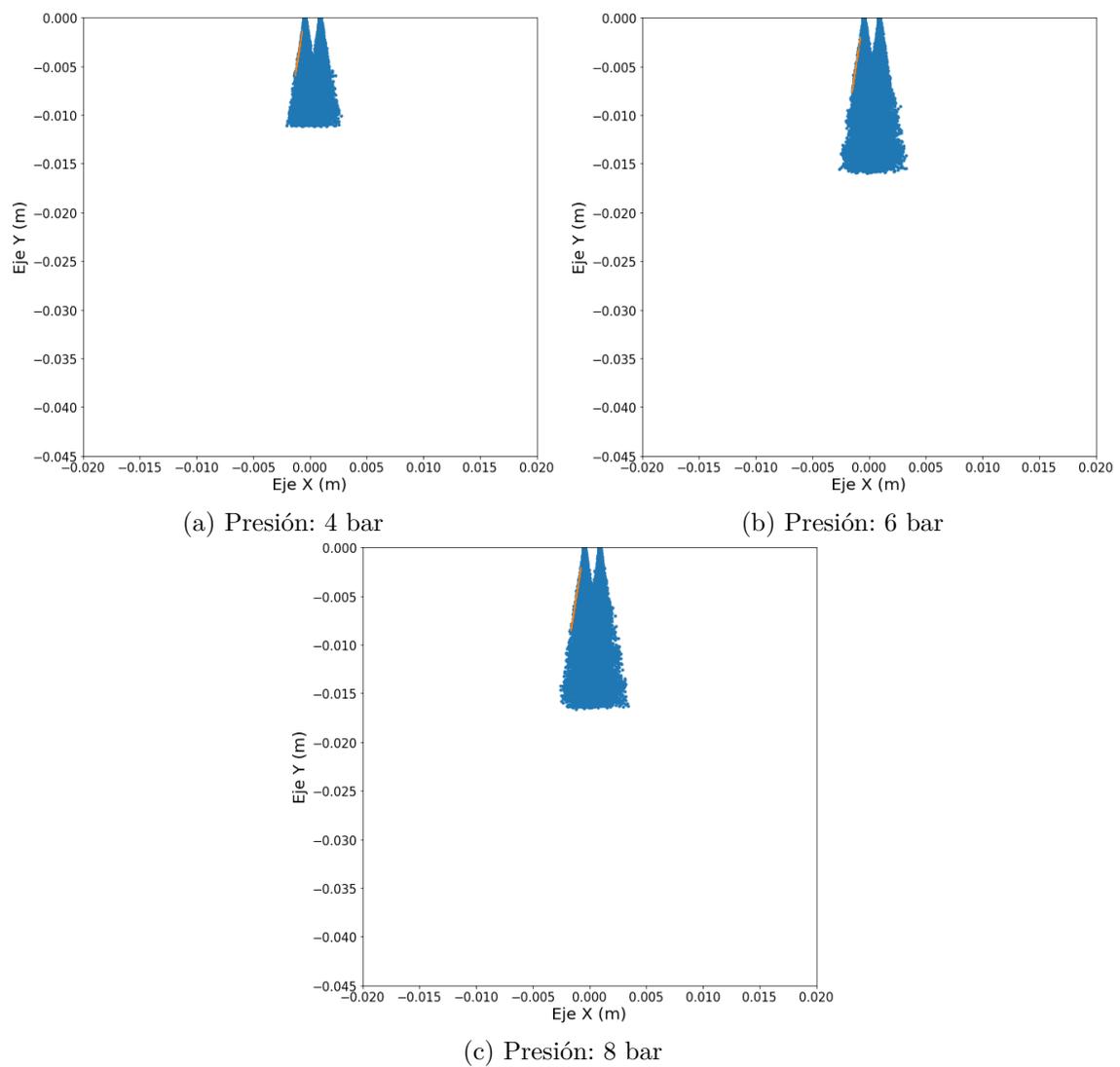


Figura 4.4: Variación de la distribución de las gotas según la presión en el instante 0.001 s tras el inicio de la inyección.

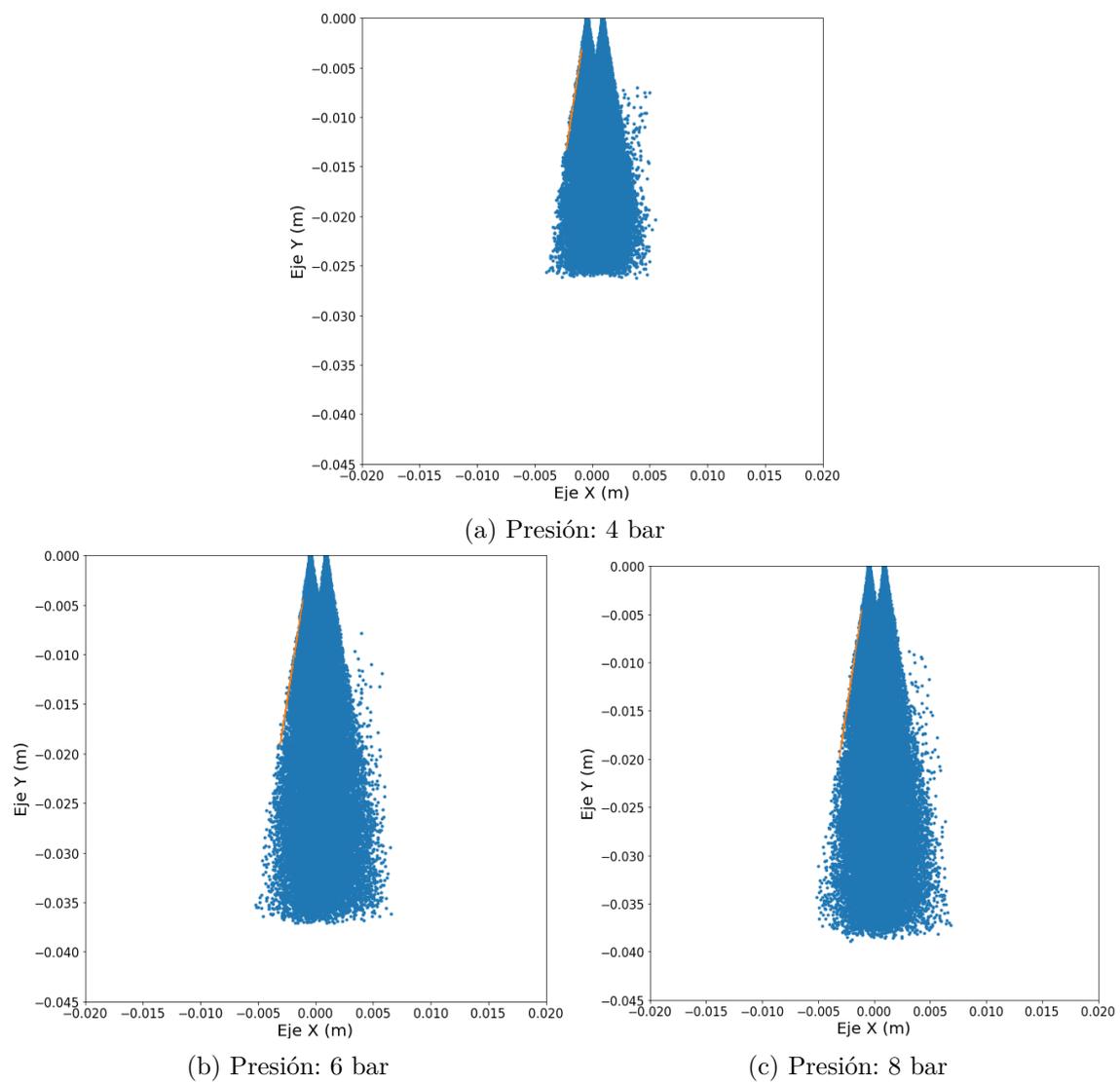


Figura 4.5: Variación de la distribución de las gotas según la presión en el instante 0.002 s tras el inicio de la inyección.

4.3.2. Variación de la velocidad de flujo cruzado

Para estudiar como afecta la velocidad de cruce en la cámara, se variará el flujo másico a 40 kg/h, 100 kg/h y 350 kg/h.

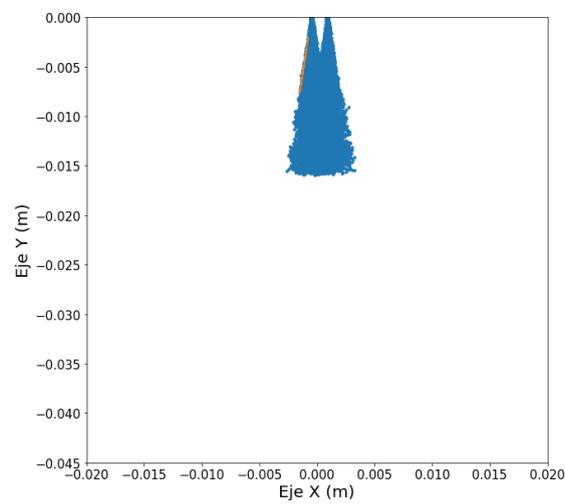
Así, a los 0.001 segundos de empezar la inyección, se observa que aunque la distribución de las gotas en el eje X se mantiene constante para los tres casos (Figura 4.6). Como se ha visto anteriormente, para una velocidad de cruce de 40 kg/h, el ángulo de difusión es de 14.92° , aumentando para cuando el flujo cruzado entra a 100 kg/h a 15.53° y a 13.75° cuando la velocidad es de 350 kg/h. Esta tendencia no uniforme entre la velocidad del flujo cruzado y el ángulo de difusión se debe a que en este instante de la inyección, el spray aun no se ha estabilizado y depende aún de la apertura del inyector.

La estela del spray 0.001 segundos después de la inyección se ve importantemente afectada por la variación de la velocidad de flujo cruzado. En el caso base, con 40kg/h de velocidad, esta va de los -0.003 metros a los 0.0035 metros en el eje X, siendo el 0 el origen entre ambos inyectores (Figura 4.6a). Esto se ve modificado al aumentar la velocidad de aire cruzado, para 100 kg/h, (Figura 4.6b), las gotas del spray van de los -0.002 metros a los 0.014 metros en el eje X, y finalmente para 350 kg/h, el spray inyectado se comporta formando una clara estela hacia la salida de los gases (Figura 4.6c), situándose entre los -0.002 metros a los 0.015 metros.

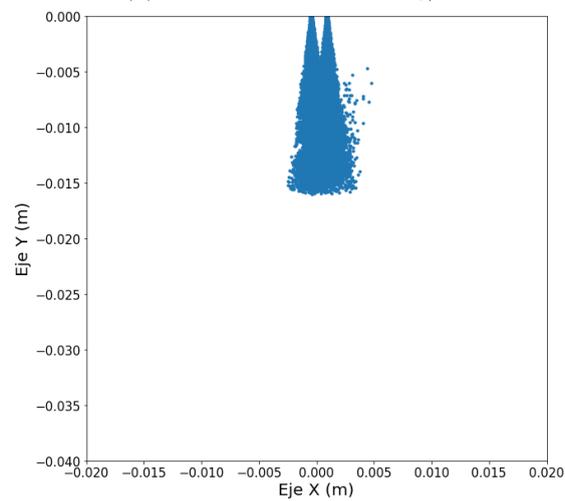
Después de los 0.002 segundos de inyección, la estela ya está estabilizada. Para el caso de 40 kg/h de velocidad de flujo cruzado se consigue un ángulo de difusión de 15.40° . Este ángulo se ve disminuido a 13.89° con 100 kg/h, y con 350 kg/h de velocidad, el ángulo sigue la tendencia decreciente hasta alcanzar los 12.86° . Ahora, el ángulo de difusión disminuye según aumenta la velocidad de flujo cruzado.

Con la inyección ya estabilizada después de 0.002 segundos, el efecto de la estela tiene el mismo comportamiento que en el inicio de la inyección (Figura 4.6). El rango al que llegan las gotas del spray en el eje X con 40 kg/h se sitúa entre los -0.005 m y los 0.0065 m (Figura 4.7a), variando para los 100 kg/h a -0.005 metros y 0.0012 metros (Figura 4.7b) y finalmente con una estela bien definida para los 350 kg/h (Figura 4.7c) en un rango de entre -0.003 metros y 0.035 metros.

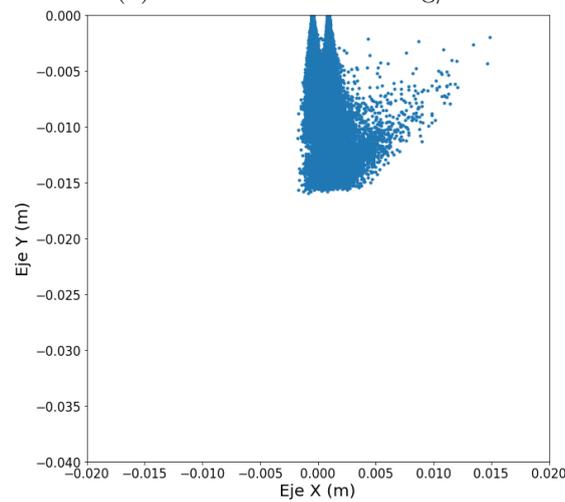
El aumento de flujo cruzado produce una menor penetración del flujo. En la Figura 4.8 se aprecia una desaceleración de las curvas de penetración, representativa de la interacción del spray inyectado con el flujo cruzado que va a través de la tubería, que tiende a desviar el rocío en la dirección del gas, disminuyendo la velocidad del chorro en el eje vertical.



(a) Velocidad cruce: 40 kg/h

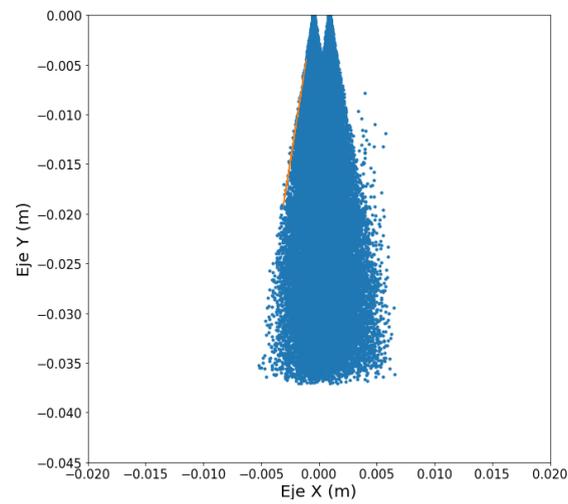


(b) Velocidad cruce: 100 kg/h

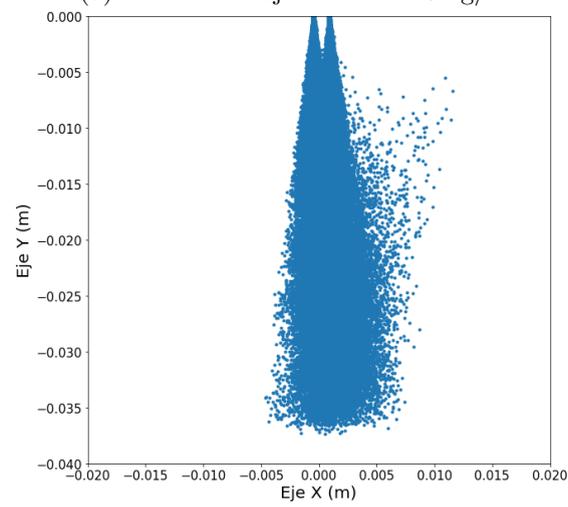


(c) Velocidad cruce: 350 kg/h

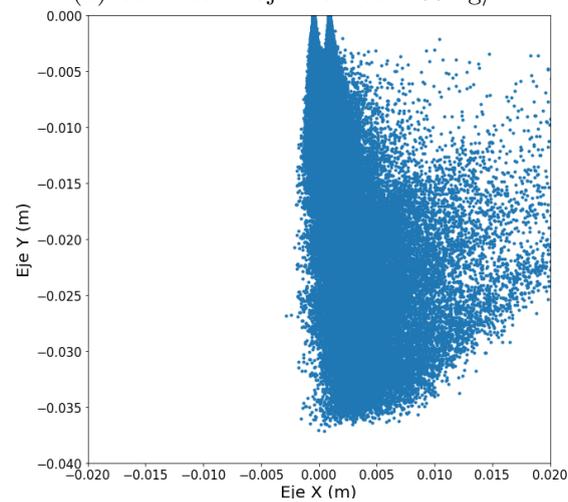
Figura 4.6: Variación de la distribución de las gotas según la velocidad de cruce en el instante 0.001 s tras el inicio de la inyección.



(a) Velocidad flujo cruzado: 40 kg/h



(b) Velocidad flujo cruzado: 100 kg/h



(c) Velocidad flujo cruzado: 350 kg/h

Figura 4.7: Variación de la distribución de las gotas según la velocidad de cruce en el instante 0.002 s tras el inicio de la inyección.

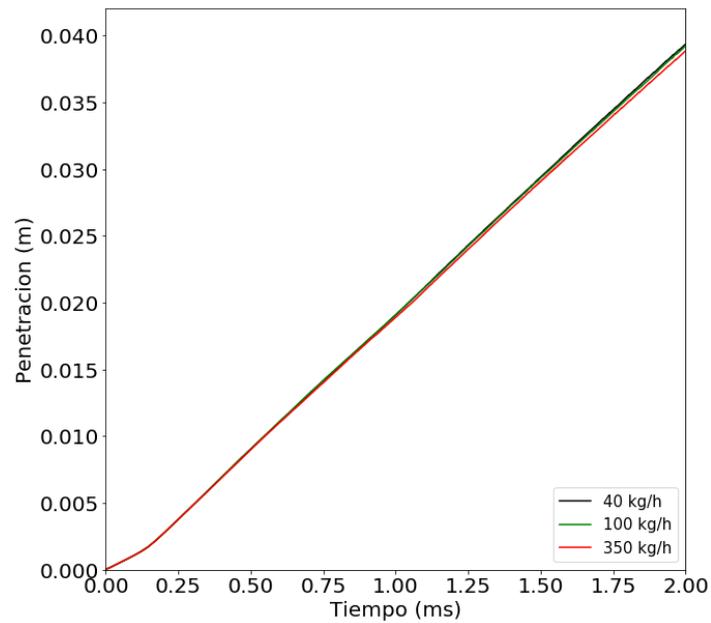


Figura 4.8: Evolución de la penetración con respecto la velocidad de flujo cruzado.

4.3.3. Variación de la temperatura

A continuación, se va a estudiar la influencia en la distribución de las gotas de la temperatura del gas ambiente donde se descarga la mezcla urea-agua. Para ello se ha mantenido constante la presión de inyección, la velocidad de flujo cruzado y la cantidad de masa inyectada, variando la temperatura en 350 °C y 180 °C.

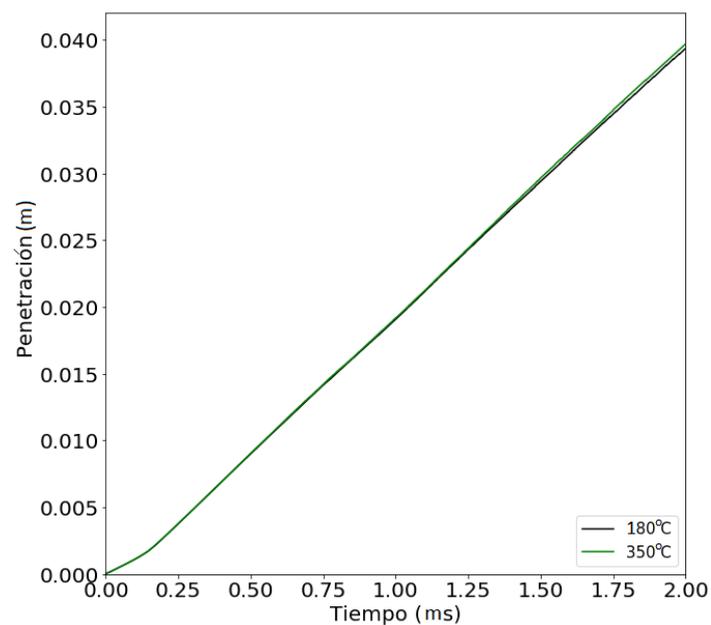
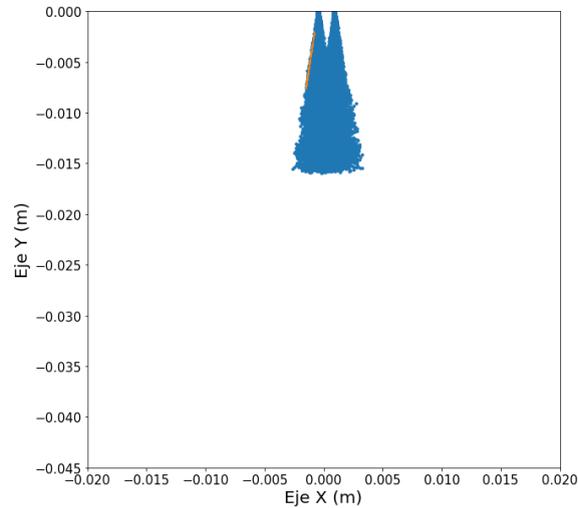


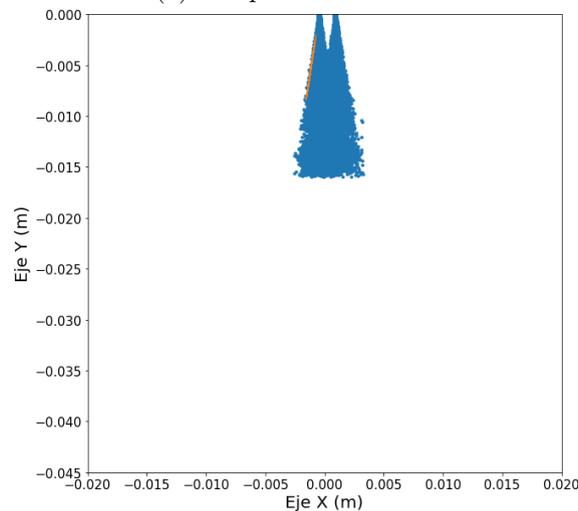
Figura 4.9: Evolución de la penetración con respecto la temperatura.

Al inyectar el flujo en la cámara a 350 °C después de 0.001 segundos, el chorro de forma casi despreciable su difusión vertical, ya que se provoca un ángulo de difusión de 14.77°, frente a los 14.92° que se producen con 180 °C. En cambio, como se aprecia en la Figura 4.10, el alcance en el eje X se mantiene constante para ambos casos con 0.0032 metros.

A los 0.002 segundos de inyección, la tendencia es similar (Figura 4.11). El ángulo de difusión del chorro para 180 °C es de 15.40°, disminuyendo para 350 °C hasta los 15.10°, mientras que el alcance horizontal del chorro se mantiene constante.



(a) Temperatura: 180°C

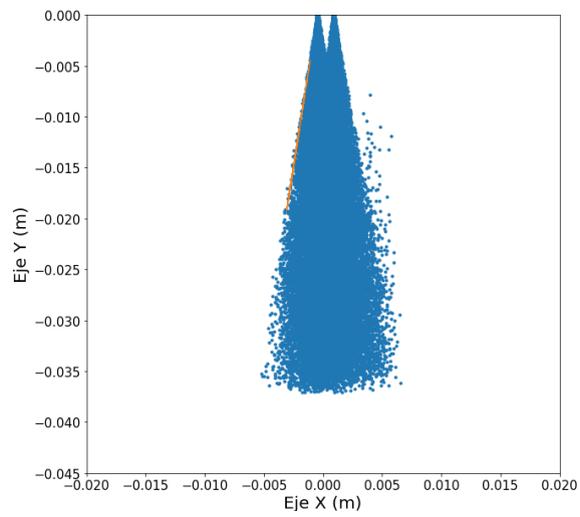


(b) Temperatura: 350°C

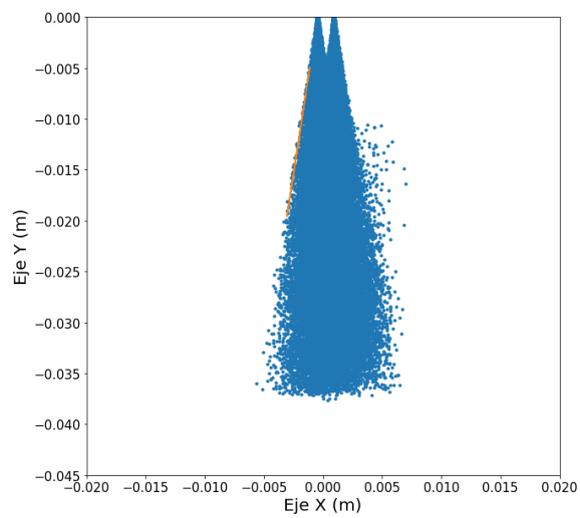
Figura 4.10: Variación de la distribución de las gotas según la temperatura en el instante 0.001 s tras el inicio de la inyección.

El efecto que tiene la temperatura en la penetración del flujo es casi inapreciable. En la Figura 4.9 se muestra dos casos con variación de temperatura del gas en 180 y 350°C. Se observa que la penetración es ligeramente superior para la temperatura de 350 °C. Esto podría indicar que la evaporación permaneció casi inalterada en esas condiciones de operación aunque al reducir la temperatura, se reduce la densidad y el chorro debería tener

menos oposición a ser inyectado.



(a) Temperatura: 180°C



(b) Temperatura: 350°C

Figura 4.11: Variación de la distribución de las gotas según la temperatura en el instante 0.002 s tras el inicio de la inyección.

4.4. Efecto en el tamaño de gota

Para simplificar el cálculo de este estudio, se puede suponer que las gotas tienen forma esférica, como demostró previamente Postroti en [16] aunque hay algunas que tienen forma de ligamentos en lugar de forma esférica. Esta suposición no afecta sustantivamente al resultado que se va a obtener.

4.4.1. Variación de la presión

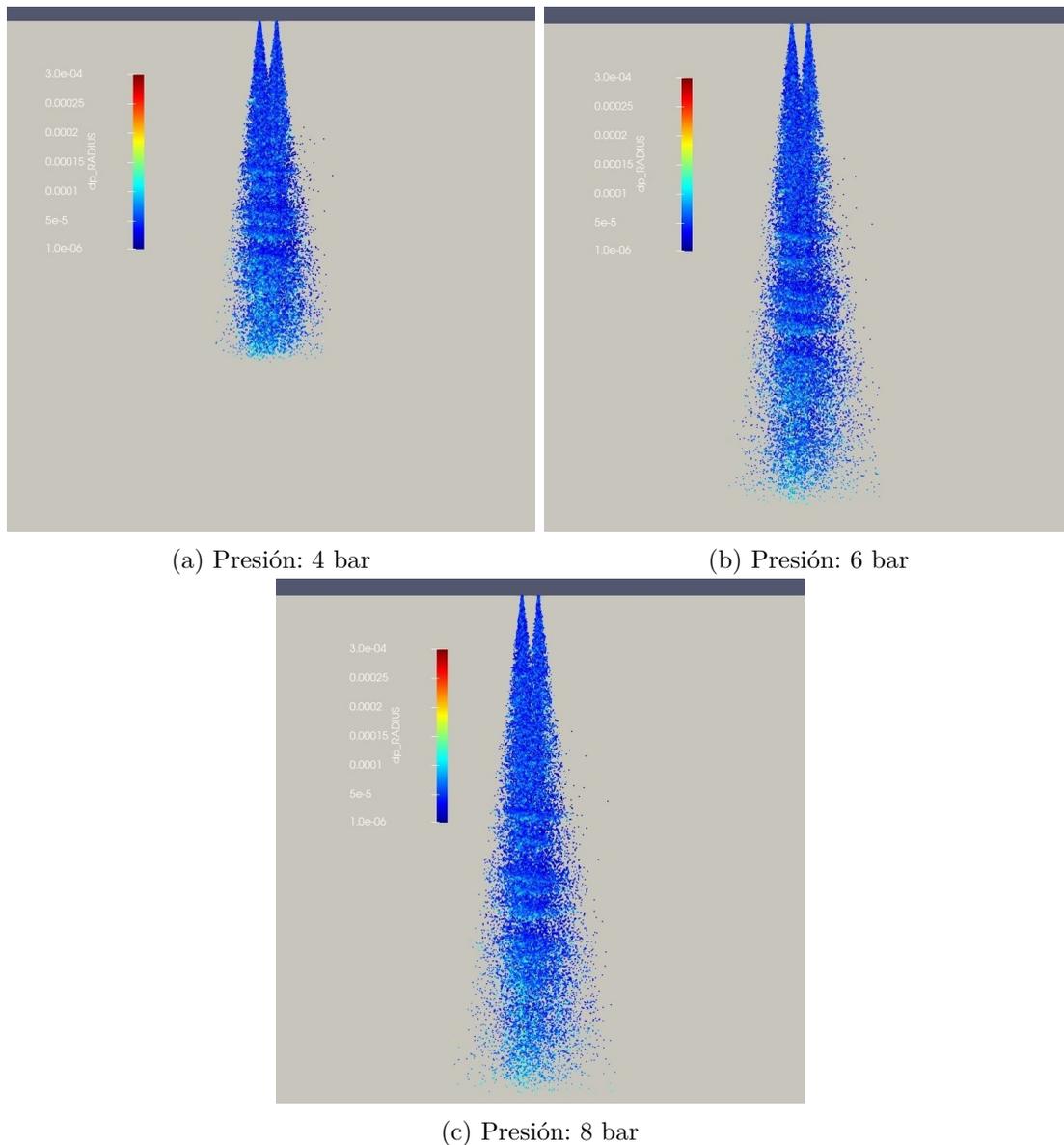
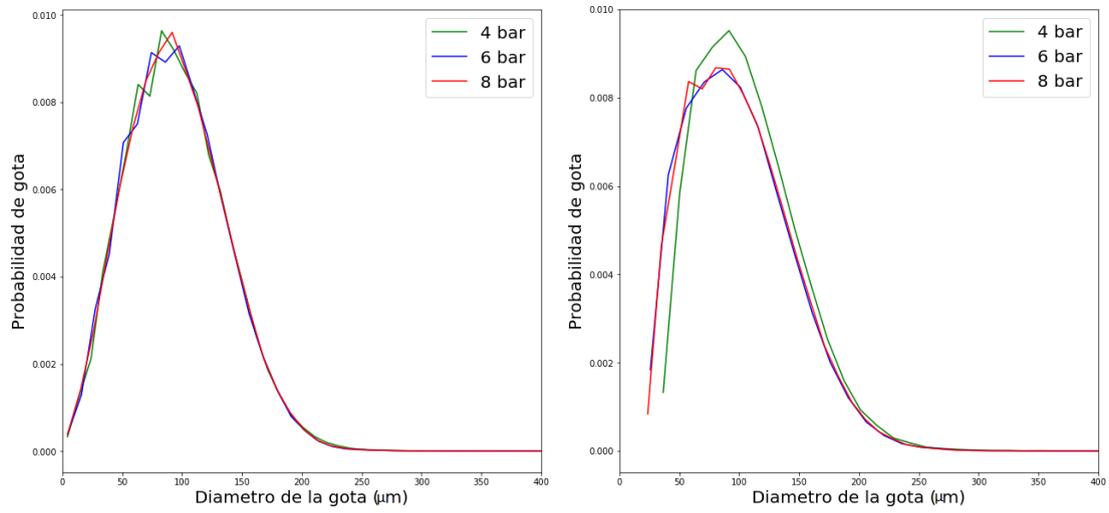


Figura 4.12: Radio de las gotas según la presión después de 0.002 segundos.

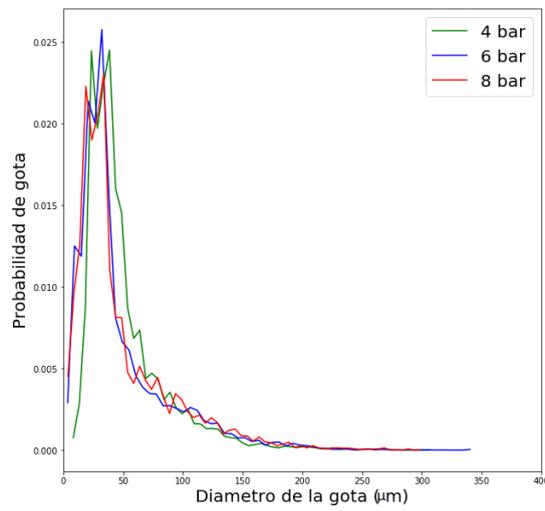
Al estudiar el tamaño de gotas respecto a la presión de inyección del flujo Urea-Agua, se observa en las Figuras 4.12 y 4.13 que en la posición cercana a la salida de la boquilla (P1), la presión tiene no tiene apenas influencia en la distribución del tamaño de las gotas.

En la zona media del chorro, en las posiciones P2 (4.13b) y P3 (4.13c), se puede observar que las diferencias debidas a la presión de inyección son más notorias que en la zona inicial de descarga. Cuanto mayor sea la presión de inyección, se promueve una mejor atomización, lo que produce una distribución del diámetro de las gotas más estrecha.



(a) Posición P1

(b) Posición P2

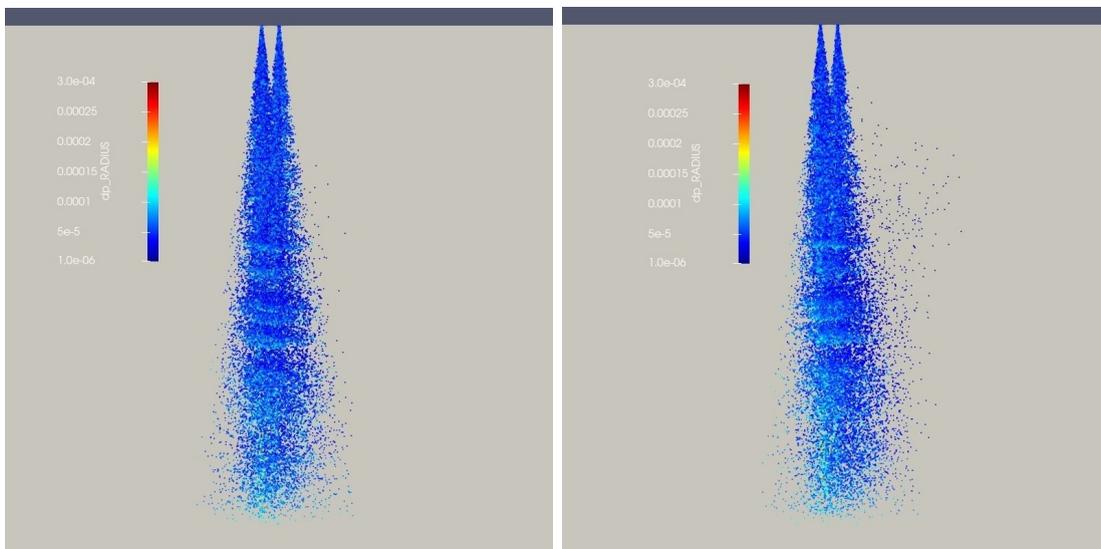


(c) Posición P3

Figura 4.13: Evolución de la probabilidad de diámetro de las gotas según la presión.

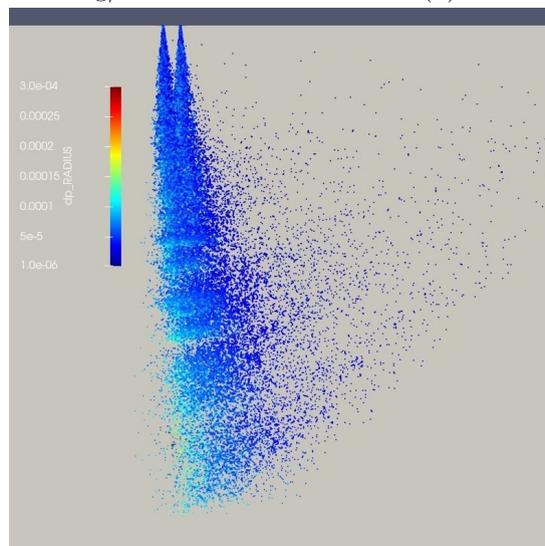
4.4.2. Variación de la velocidad de flujo cruzado

El tamaño de gota también se ve afectado por la velocidad de flujo cruzado que entra en la cámara. En la Figura 4.14 se puede observar que en el caso de flujo cruzado a 350 kg/h de gasto másico (Figura 4.14c), en la zona de la izquierda, por donde entra el flujo, el diámetro de las gotas es mayor. En cambio, según avanza la estela, este tamaño va disminuyendo. Lo mismo ocurre para velocidades inferiores de flujo de entrada, aunque como no influye tan fuerte este flujo, la distribución del tamaño de las gotas se comporta de forma similar.



(a) Velocidad: 40 kg/h

(b) Velocidad: 100 kg/h



(c) Velocidad: 350 kg/h

Figura 4.14: Radio de las gotas según la velocidad de flujo cruzado después de 0.002 segundos.

La distribución de la probabilidad del diámetro de las gotas en la posición de salida del inyector (P1, 4.15a) es la misma para las tres velocidades de flujo cruzado. En cambio, para la zona media del chorro, (P2, 4.15b y P3, 4.15c) el diámetro de las gotas es mayor según aumenta del gasto másico del flujo cruzado ya que las gotas de menor tamaño son arrastradas aguas abajo del dominio (fuera de P2, hacia P3), mientras que las de mayor tamaño y, por tanto, mayor inercia, no se ven demasiado afectadas y siguen apareciendo en P2.

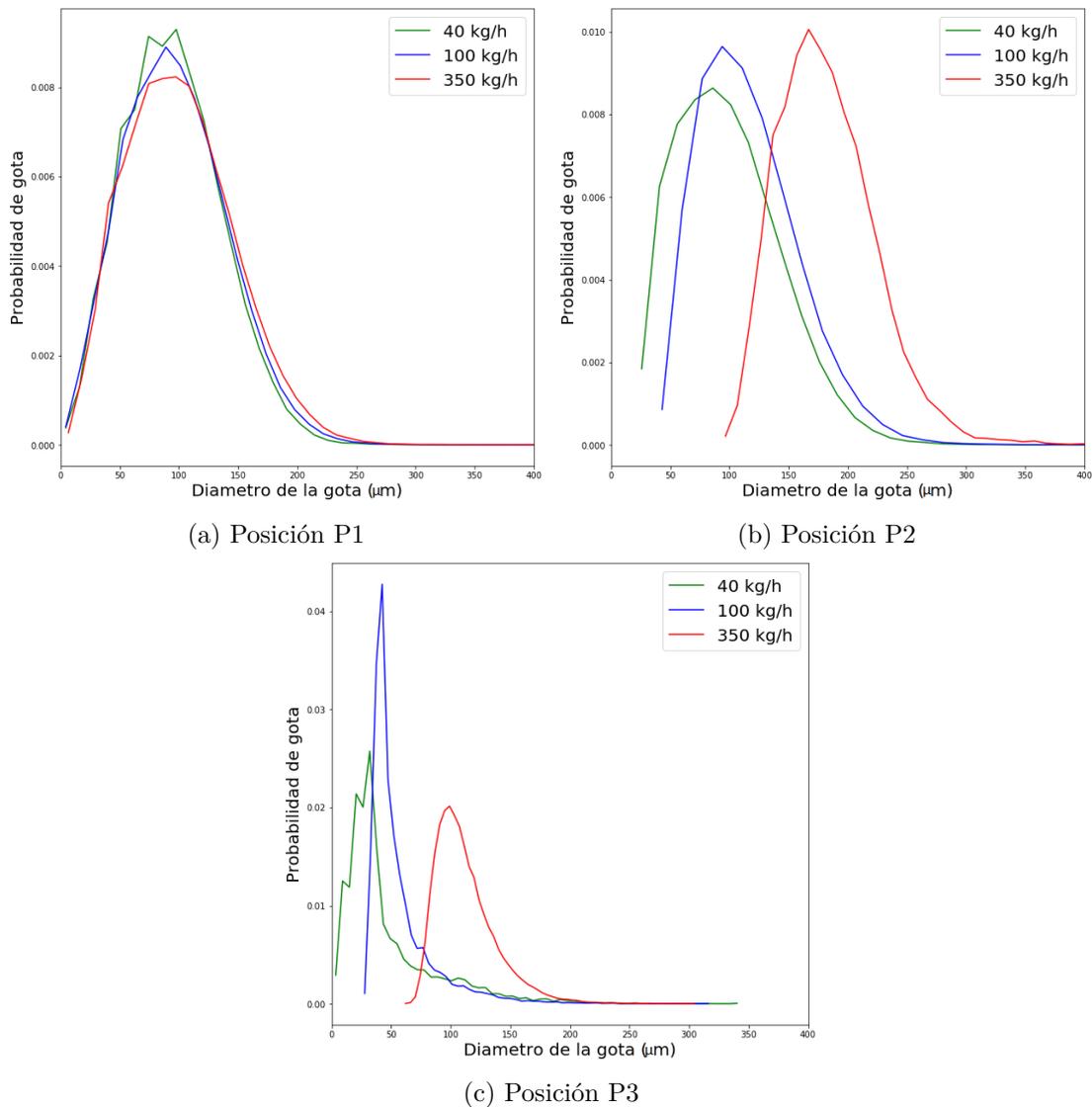


Figura 4.15: Evolución de la probabilidad de diámetro de las gotas según la velocidad de flujo cruzado.

4.4.3. Variación de la temperatura

La variación de temperatura del fluido inyectado no afecta significativamente en el tamaño de las gotas según se observa en las Figuras 4.16 y 4.17.

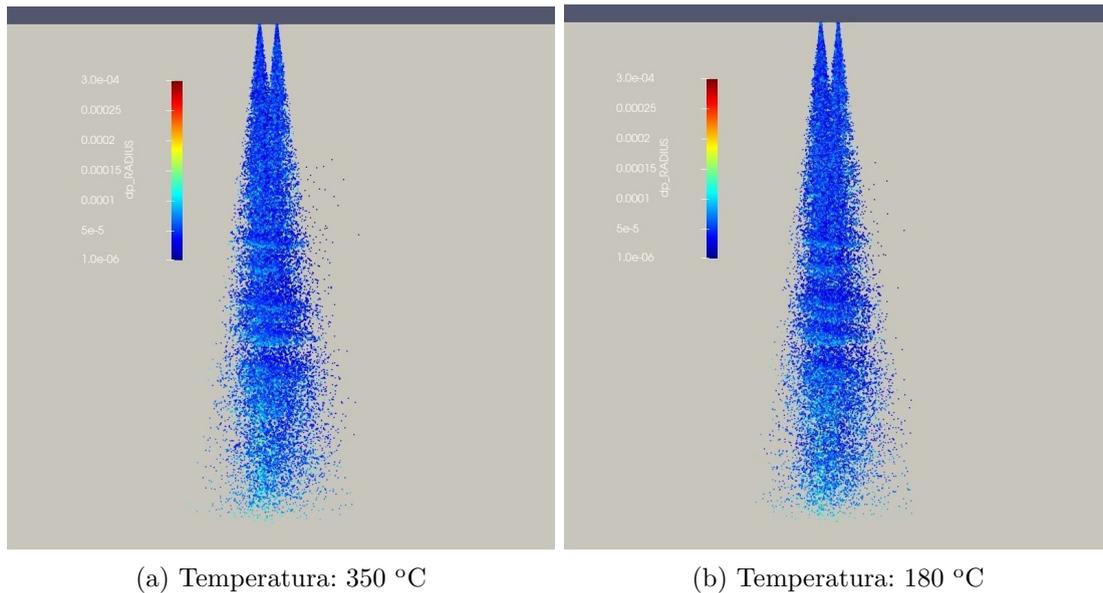
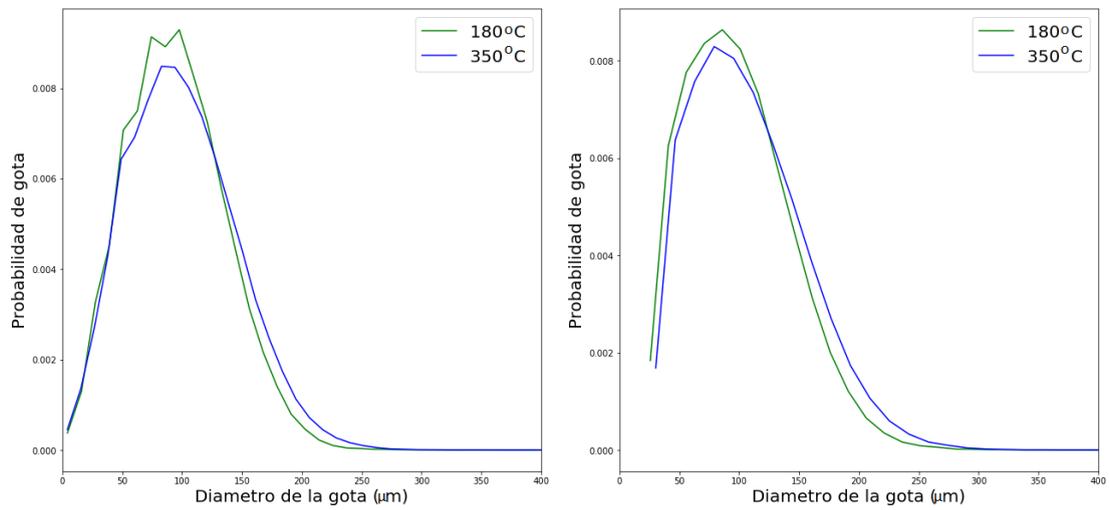


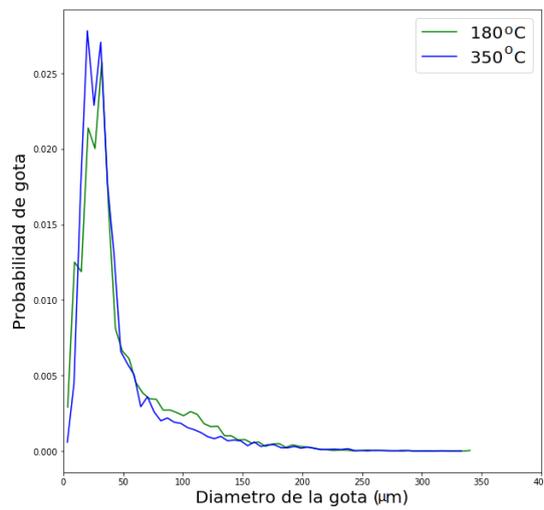
Figura 4.16: Radio de la gota del según la temperatura después de 0.002 segundos.

A medida que la región estudiada se aleja de la boquilla del inyector (P2, 4.17b y P3, 4.17c), un aumento en la temperatura del flujo promueve la evaporación de las gotas y se registran diámetros ligeramente menores.



(a) Posición P1

(b) Posición P2



(c) Posición P3

Figura 4.17: Evolución de la probabilidad de diámetro de las gotas según la temperatura.

4.5. Efecto en la velocidad

En este subapartado se va a analizar el efecto de la velocidad de flujo cruzado sobre la velocidad, tanto del eje X como del eje Y.

4.5.1. Variación de la presión

Para observar la influencia de la presión respecto la velocidad, se ha realizado un estudio con distintas presiones (4, 6 y 8 bar). Antes de analizar las imágenes, el concepto teórico indica que un aumento de la presión de inyección provocará que el flujo tenga mayor energía en el eje Y, lo que se debería de traducir en un aumento de velocidad en ese eje y en el eje X.

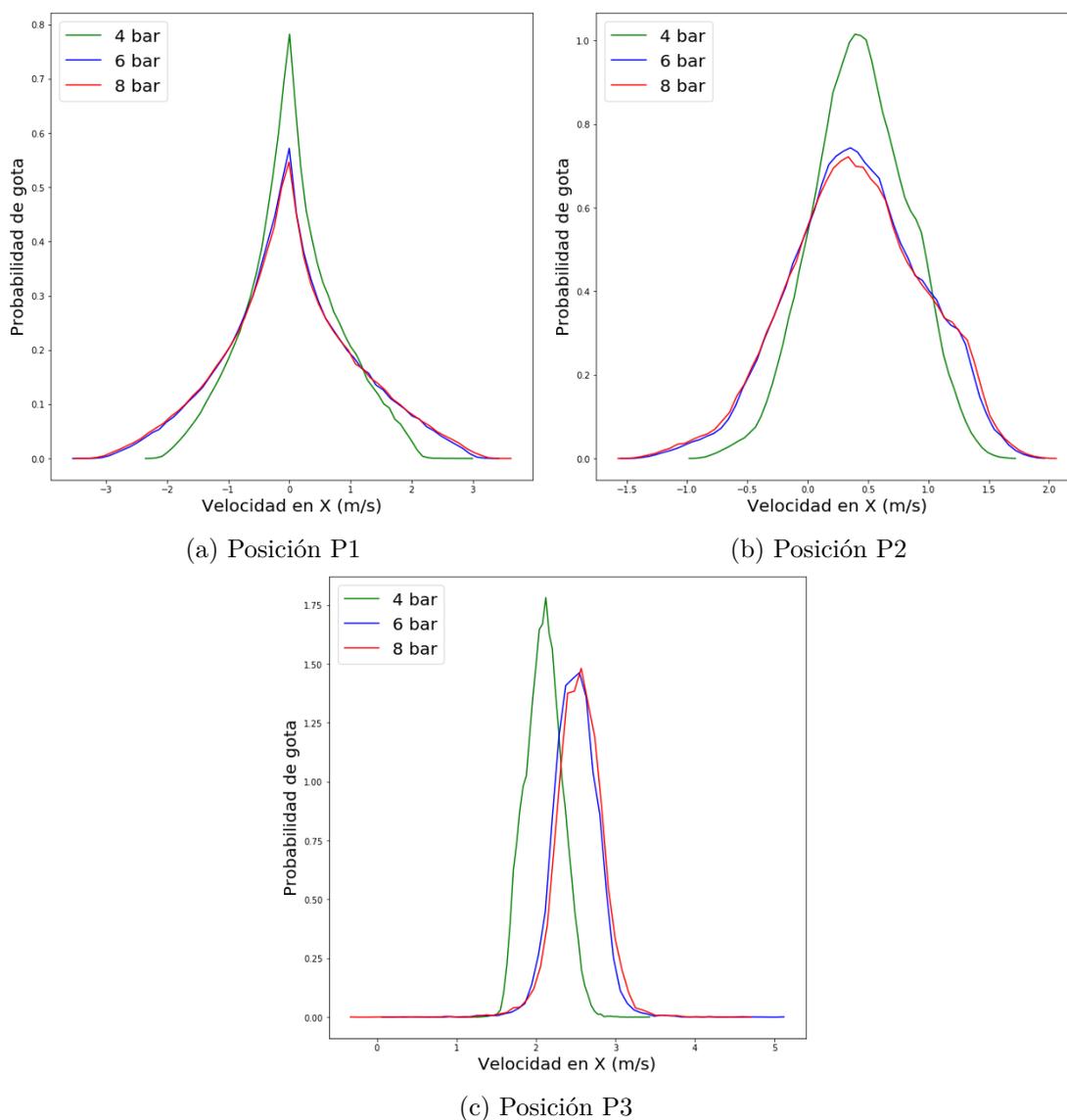


Figura 4.18: Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en X según la presión.

La Figura 4.18 muestra la influencia de la presión respecto la velocidad en el eje X. En las posiciones P1 y P2, el aumento de la presión provoca que se aumente el rango de velocidades en X. En la posición P3 se observa un aumento de velocidad en el eje X al aumentar la presión ya que las distribuciones aparecen desplazadas hacia la derecha (Figura 4.18c). Esto se debe a que en esta posición aparecen las gotas más cercanas al límites que debido al esparcimiento inicial de la inyección tienen una velocidad sobre el eje X elevada. En esta posición (P3) se reduce el rango de velocidades observado en P2 y P3.

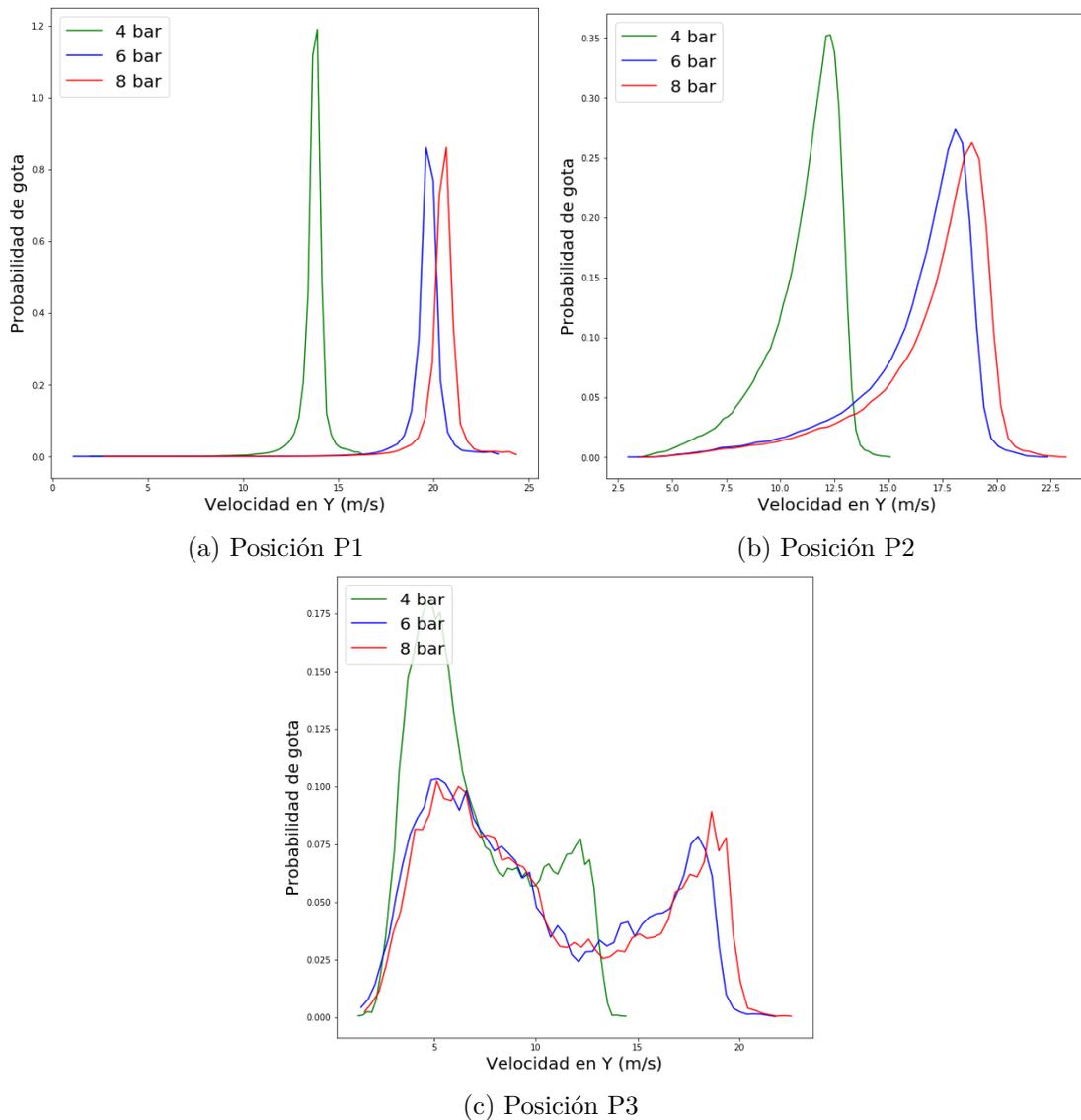


Figura 4.19: Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en Y según la presión.

Respecto a la velocidad en el eje Y (Figura 4.19), en la posición P1, P2 y P3 se observa, como se comentó, que un aumento de presión efectivamente provoca un aumento en la velocidad en el eje Y. Sin embargo, en la posición P3 se observa que se obtiene un rango de velocidades más amplio que en las otras posiciones estudiadas.

4.5.2. Variación de la velocidad de flujo cruzado

El efecto que produce una variación de la velocidad de flujo cruzado es bastante importante en la probabilidad de la distribución de velocidades en el eje X. Esto se aprecia claramente para las posiciones P2 y P3 en la Figura 4.20. Se observa una clara relación entre la variación de flujo másico y la velocidad, en la que aumenta la velocidad en el eje X proporcionalmente a el gasto másico del flujo cruzado. En la posición P3 se observa como a mayor velocidad de flujo cruzado, mayor es el rango de velocidades a las que se desplazan las gotas ya que las gotas pequeñas adquieren rápidamente la velocidad del flujo y gotas grandes no se ven mayormente afectadas.

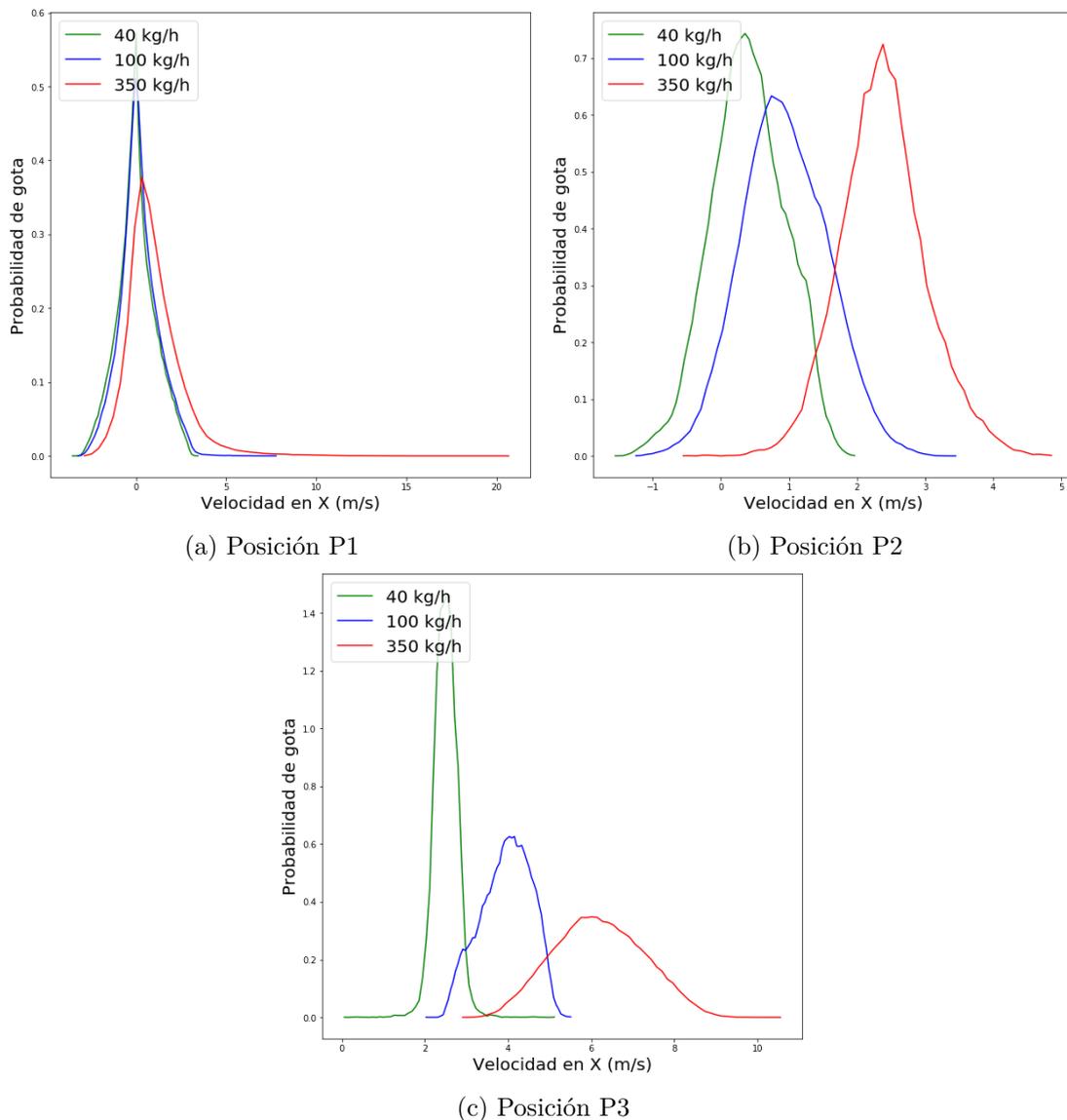


Figura 4.20: Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en X según la velocidad de flujo cruzado.

Por otro lado, en la posición inmediata a la salida del inyector (P1, Figura 4.20a), la distribución de las velocidades y valores de esta es muy similar para todas las velocidades de flujo cruzado. Esto se debe a que en ese punto, la influencia de la presión de inyección es mucho mayor a la del flujo cruzado que entra en la cámara.

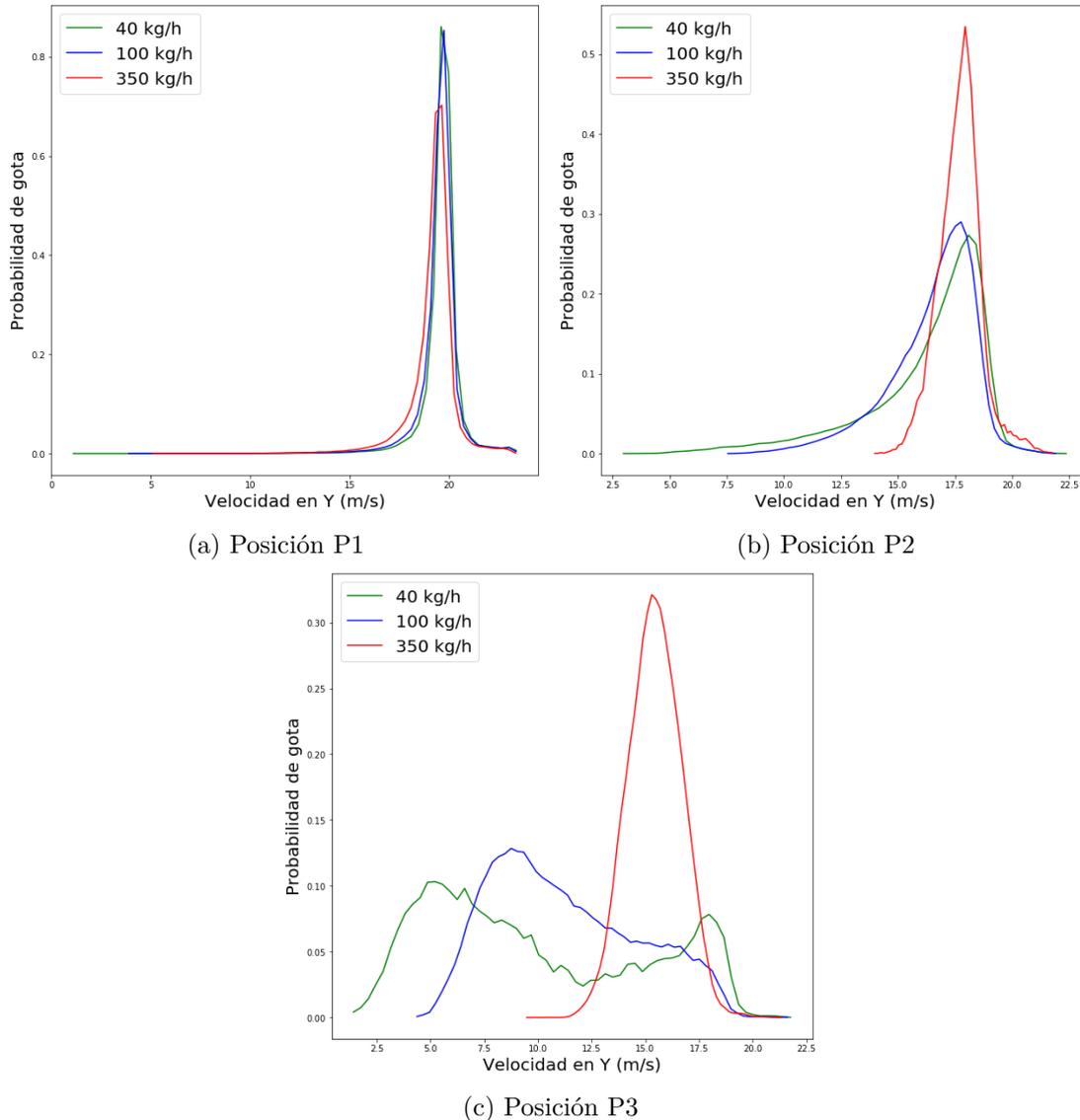


Figura 4.21: Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en Y según la velocidad de flujo cruzado.

Respecto a la velocidad en el eje Y (Figura 4.21), para todas las velocidades de flujo cruzado se observa que tienen una velocidad en el eje Y similar. Esta variación únicamente afecta al rango de velocidades en el eje Y a la que se desplazan las gotas para las posiciones P2 y P3.

4.5.3. Variación de la temperatura

Para observar el efecto de la temperatura del flujo en las velocidades tanto del eje X como del Y, se debe tener en cuenta la ecuación del gasto másico 2.15. Según esta, un aumento de temperatura del aire conlleva a que se reduzca su densidad ya que se mantiene constante el gasto másico y el área.

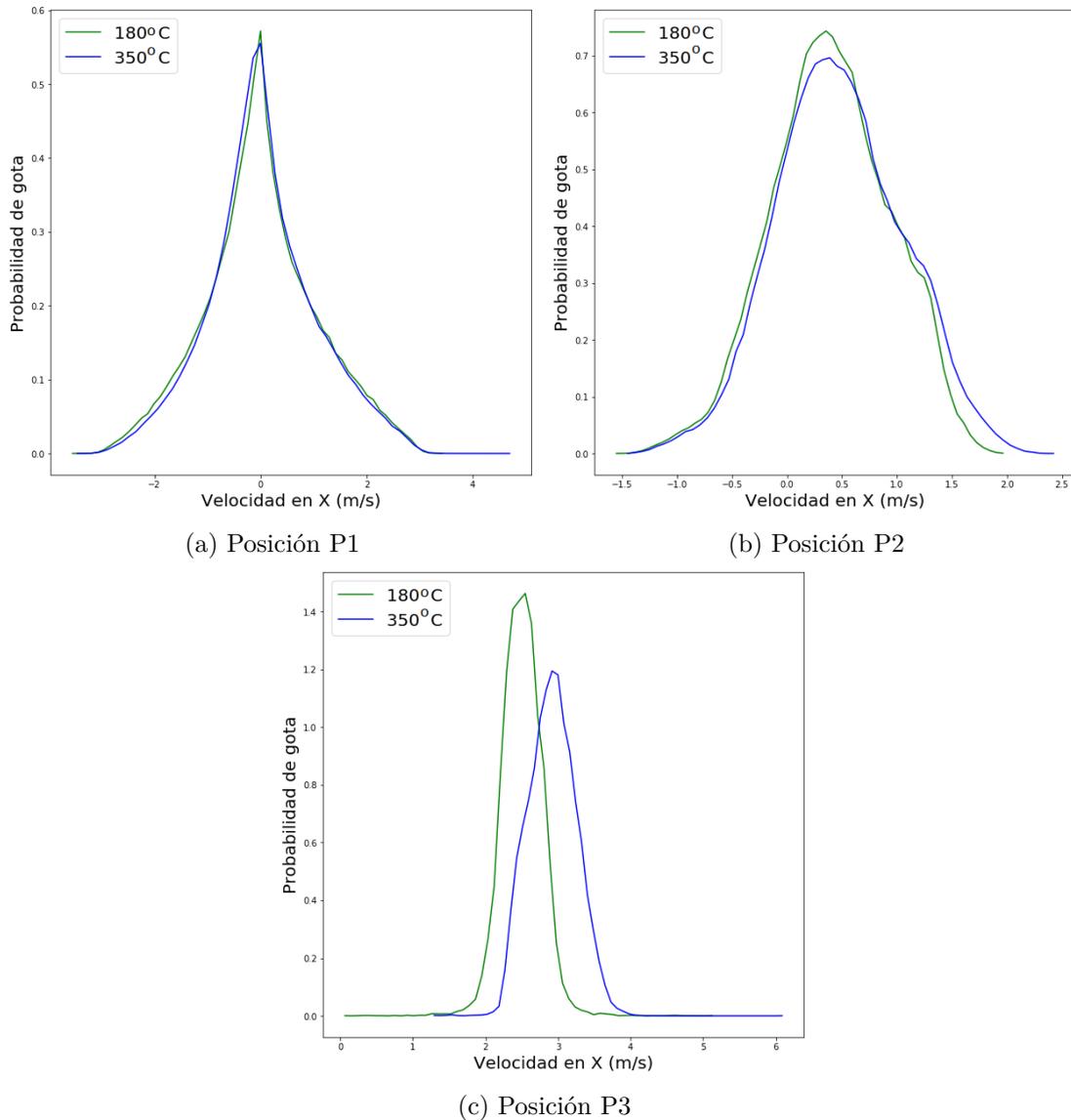


Figura 4.22: Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en X según la temperatura.

En la velocidad del eje X (Figura 4.22), se observa que en la posición P1 Y P2 esta variación no tiene ningún efecto considerable. Sin embargo, en la posición P3 se observa un aumento de de velocidad de las gotas en el eje X. Así, las gotas tienden a formar una estela en el sentido positivo del eje Y, tal y como se observó en las Figuras 4.10 y 4.11.

El descenso de la densidad del aire afecta también a su viscosidad facilitando la penetración de las gotas, lo que conlleva a aumentar ligeramente la velocidad de las gotas en el eje Y, como se observa en la Figura 4.23.

Exceptuando la posición P3, los resultados obtenidos en las distribuciones tanto de velocidad en el eje X (Figura 4.22) como de velocidad en el eje Y (Figura 4.23) para las posiciones P1 y P2 tienen la misma forma y un rango de valores de velocidades muy similares.

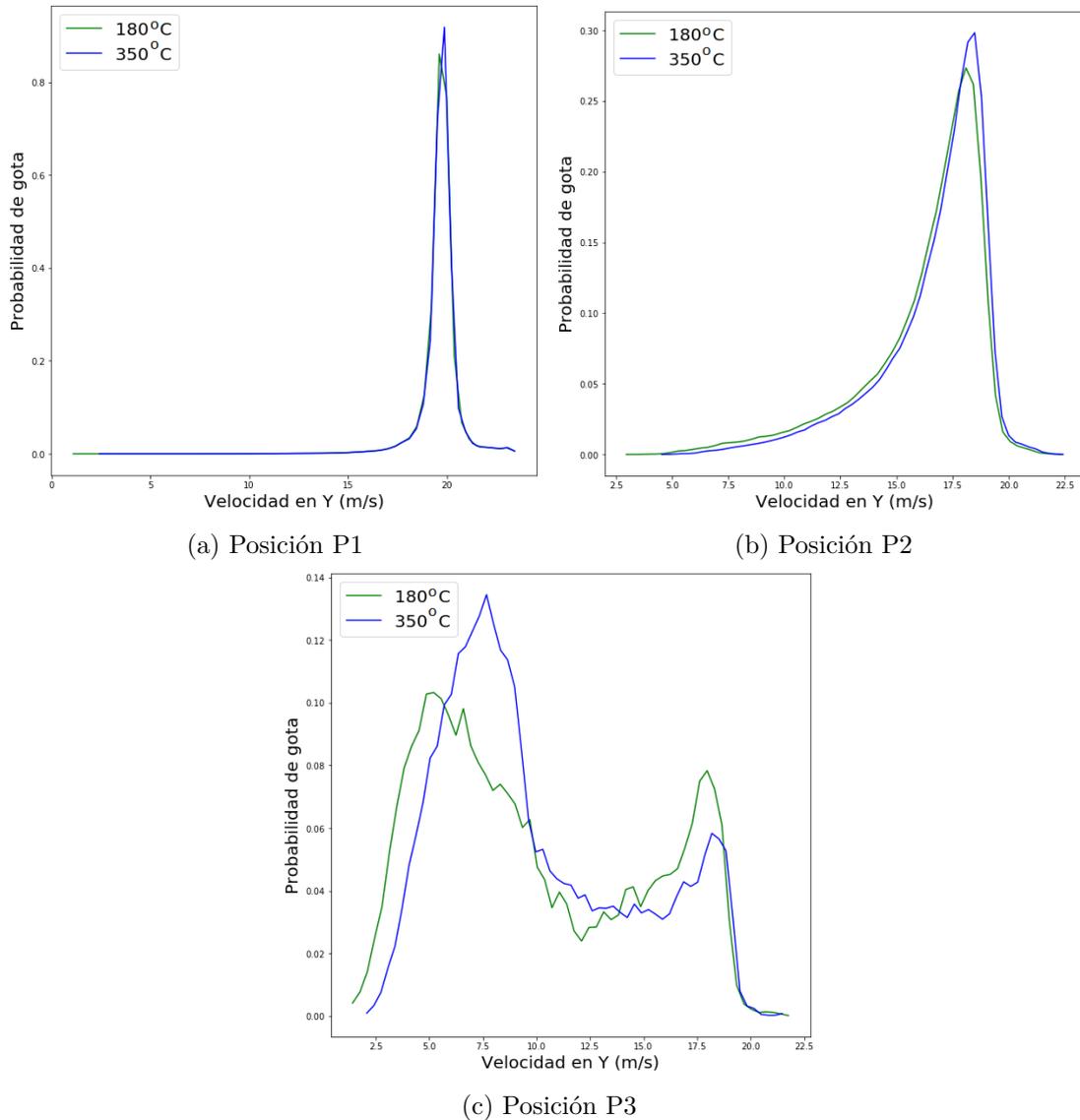


Figura 4.23: Evolución de la probabilidad de velocidad de las gotas en Y según la temperatura.

Capítulo 5

Conclusiones

En este último apartado, se va a tratar de sintetizar y relacionar las diferentes ideas que se han mostrado en todos los apartados anteriores. Así, observando el trabajo en su conjunto, se podrán identificar las conclusiones más generales.

Hay que destacar la metodología empleada a lo largo del desarrollo del trabajo. El modelado CFD ayuda a efectuar una contribución significativa a mejorar la comprensión de los mecanismos físicos que gobiernan los complejos fenómenos que se han estudiado, así como reducir el tiempo y coste empleado en realizar el estudio respecto a uno experimental.

Tal y como se ha demostrado, la metodología empleada reproduce los experimentos de la literatura.

Cambiar las condiciones del estudio afecta considerablemente al desarrollo del mismo. La variación de la presión de inyección produce una variación del diámetro y la velocidad. La velocidad en el eje X y Y es dependiente de la presión, así como un aumento de la presión de inyección del chorro provoca una reducción del diámetro de las gotas de forma significativa en la parte media del chorro (P2 y P3). De las tres presiones estudiadas, las gotas tienen menor tamaño en la posición P3, ya que solo las gotas pequeñas se ven arrastradas por el flujo de aire fuera del núcleo del chorro. Además, el rango de velocidades de ambos ejes aumenta al incrementar la presión de inyección, obteniendo una mayor variedad de velocidades.

El efecto que tiene el flujo cruzado es que cuando mayor es, se producen velocidades mayores de gota en el eje X, por tanto, las gotas más pequeñas empiezan a crear una estela en dirección positiva del eje X, saliéndose de las ventanas de estudio definidas, mientras que las más grandes se ven menos afectadas.

Por otro lado, la temperatura del gas no influye significativamente en la forma en la que se desarrolla el spray de Agua-Urea según la penetración, la velocidad y el tamaño de la gota estudiados en el presente documento.

Para concluir, se puede decir que una combinación optimizada de presión, temperatura y velocidad de flujo cruzado podría conducir a mejoras significativas en la evaporación y mezcla general de la pulverización antes de llegar al catalizador. Así como gracias a los datos recopilados, se proporciona una comprensión básica de la física de la pulverización.

5.1. Trabajos futuros

Uno de los mayores problemas de los sistemas SRC es cuando la Urea presente en el AdBlue no llega a descomponerse totalmente en NH_3 , que provoca que la urea se solidifique formando cristales que obstruyen el sistema de alimentación de urea y el sistema de escape. Para poder reducir este efecto, se plantea un estudio de reducción de los depósitos de urea.

Otro trabajo posible sería realizar pruebas en la inclinación del inyector ya que el portainyector permite una inclinación de 45° . Esto modificaría como se mezcla el spray con el flujo de entrada en la cámara.

Bibliografía

- [1] VALERO MARCO, J., *Caracterización de las propiedades del AdBlue y su proceso de inyección en un sistema de reducción de NOx (SCR)*, València, 2012.
- [2] GRIÑÁN EGEA, S., *Diseño de una instalación experimental para el estudio de la inyección de urea en condiciones de gases de escape de un motor de combustión*, València, 2017.
- [3] GARAULET BELDA, J., *Análisis del proceso de inyección de urea a partir de técnicas ópticas en condiciones de escape de un motor*, València, 2019.
- [4] PÉREZ RODRIGO, J., *Estudio experimental de la inyección de urea en condiciones de operación de un motor de combustión*, València, 2018.
- [5] ORTIZ RUIZ, C., *Análisis de sistemas de reducción catalítica selectiva con inyección de urea mediante CFD*, València, 2018.
- [6] ZUAZAGA CALVO, A., *Sobre las actuaciones aerodinámicas del perfil SD7003 a bajo número de Reynolds*, València, 2019.
- [7] LÓPEZ SÁNCHEZ, J. J., *Estudio teórico-experimental del chorro libre diésel no evaporativo y de su interacción con el movimiento del aire*, València, 2003.
- [8] PAYRI, R., BRACHO, G., GIMENO, J. y MORENO, A., *Investigation of urea-water solution atomization process in engine exhaust-like conditions*, València, 2019.
- [9] PAYRI, R., BRACHO, G., GIMENO, J. y MORENO, A., *Spray Characterization of the Urea-Water Solution (UWS) Injected in a Hot Air Stream Analogous to SCR System Operating Conditions*, SAE Technical Paper 2019-01-0738, 2019.
- [10] DRENNAN, S., KUMAR, G., QUAN, S. y WANG, M., *Application of Automatic Meshing to Urea-Water Injection Simulation for Engine Aftertreatment*, SAE Technical Paper 2015-01-1057, 2015.
- [11] CONVERGETM. <https://convergecf.com>, Marzo, 2020.
- [12] Automoción Online. <https://automociononline.com/formacion-online/motores/tipos-de-motores-de-combustion-interna/>, Junio 2020.
- [13] PAYRI, R. y DESANTES, J.M., *Motores de combustión interna alternativos*, Editorial Universitat Politècnica de València, 2012.

- [14] BLAZEK, J., *Computational Fluid Dynamics: Principles And Applications*, Elsevier, 2005.
- [15] Overleaf. <https://www.overleaf.com/>, Mayo, 2020.
- [16] POSTRIOTI, L., BRIZI, G., UNGARO, C., MOSSER, M., AND BIANCONI, F., *A Methodology to Investigate the Behaviour of Urea-Water Sprays in High Temperature Air Flow for SCR De-NOx applications*, Fuel 150(x):548-557, 2015.
- [17] *CONVERGE 3.0 Manual*, Octubre, 2019.
- [18] España. Real Decreto 486/1997, de 14 de Abril. Boletín Oficial del Estado, 23 de abril de 1997, núm. 97, pp. 12918 a 12926. <https://www.boe.es/eli/es/rd/1997/04/14/486>, Septiembre, 2020.
- [19] Ministerio del Medio Ambiente. <https://mma.gob.cl/cambio-climatico/cc-02-7-huella-de-carbono/>, Septiembre, 2020.
- [20] Carbon Footprint TM. <https://www.carbonfootprint.com/calculator.aspx>, Septiembre, 2020.
- [21] ZHENG, G., *CFD Modeling of Urea Spray and Deposits for SCR Systems*, SAE Technical Paper 2016-01-8077, 2016,

Parte II

PLIEGO DE CONDICIONES

Capítulo 6

Pliego de condiciones

6.1. Introducción

El presente documento tiene como objetivo explicar y detallar el correcto cumplimiento de las ordenanzas de seguridad, higiene y salud aplicadas durante el desarrollo del Trabajo de Fin de Grado.

Estas ordenanzas son estándares basados en el Real Decreto 486/1997 del 14 de Abril [18], por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en los lugares de trabajo, en donde se aplican las disposiciones del artículo 6 de la Ley 31/1995 del 8 de noviembre de prevención de Riesgos Laborales. Salvo que se especifique lo contrario, todos los artículos y anexos mencionados en el Pliego de Condiciones pertenecen a este Real Decreto. Se mencionaran sólo aquellos capítulos, artículos, anexos o apartados que sean aplicables al tipo de trabajo desarrollado.

Dado que en estas regulaciones se tratan los aspectos relacionados con las condiciones de los lugares de trabajo, se aplicarán dichas condiciones al edificio 6D de la Universitat Politècnica de València (Camino de Vera s/n, 46022, Valencia, Comunidad Valenciana). En este edificio se sitúan las instalaciones del instituto CMT-Motores Térmicos y el Departamento de Máquinas y Motores Térmicos, donde se situó el puesto de trabajo y las distintas tareas relacionadas con el Trabajo Fin de Grado, en concreto en la quinta planta del edificio.

6.2. Anexo I. Condiciones generales de seguridad en los lugares de trabajo

El Anexo I regula las condiciones generales de seguridad en los lugares de trabajo.

El Apartado 1 especifica los requisitos sobre la seguridad estructural del edificio. Todos sus elementos, estructurales o de servicio, incluidas las plataformas de trabajo, escaleras y escalas, deberán tener la solidez y la resistencia necesarias para soportar las cargas o esfuerzos a que sean sometidos, y deberán disponer de un sistema de armado, sujeción o apoyo que asegure su estabilidad. Además, se prohíbe sobrecargar los elementos citados en el apartado anterior. La zona de trabajo cumple con todas estas disposiciones.

El Apartado 2 trata sobre los espacios de trabajo y zonas peligrosas, especifica las dimensiones de la zona de trabajo que deberán permitir que los trabajadores realicen su trabajo sin riesgos para su seguridad y salud y en condiciones ergonómicas aceptables. Asimismo, la separación entre los elementos materiales existentes en el puesto de trabajo será suficiente para que los trabajadores puedan ejecutar su labor en condiciones de seguridad, salud y bienestar. Todas estas disposiciones se cumplen en la zona de trabajo.

El Apartado 3 sobre los suelos, aberturas y desniveles y barandilla, especifica que los suelos de los locales de trabajo deberán ser fijos, estables y no resbaladizos, sin irregularidades ni pendientes peligrosas. Por otro lado, las aberturas y desniveles se deberán proteger en caso de suponer un riesgo de caída mediante barandillas u otros sistemas de protección de seguridad equivalente. Asimismo, estas barandillas empleadas como elemento de seguridad, deberán ser de materiales rígidos de una altura mínima de 90 centímetros, y garantizando la imposibilidad de paso o deslizamiento por debajo de las mismas o la caída de objetos sobre personas. Todas estas disposiciones se han cumplido en la zona de trabajo.

El apartado 4 sobre ventanas, vanos de iluminación cenital y dispositivos de ventilación. Se deberán poder manipular de forma segura las operaciones de apertura, cierre, ajuste o fijación de ventanas, vanos de iluminación cenital y dispositivos de ventilación. Para los trabajadores que realicen la tarea de limpieza de estos no deberán asumir un riesgo o para los que se encuentren en el edificio y sus alrededores. Asimismo, los tabiques transparentes o translúcidos deberán claramente señalizados y fabricados con materiales seguros, o bien estar separados de dichos puestos y vías. Todas estas disposiciones se han cumplido en la zona de trabajo.

El apartado 5 sobre las vías de circulación de los lugares de trabajo, tanto las situadas en el exterior de los edificios y locales como en el interior de los mismos, incluidas las puertas, pasillos, escaleras, escalas fijas, rampas y muelles de carga. Se cumplen todas sus disposiciones ya que deben poder utilizarse conforme a su uso previsto, de forma fácil y con total seguridad para los peatones o vehículos que circulen por ellas y para el personal que trabaje en sus proximidades. Sus dimensiones, cantidad, colocación y sus condiciones constructivas deberán adecuarse al número potencial de usuarios y a las características de la actividad y del lugar de trabajo.

Las puertas y portones, rampas, escaleras fijas y de servicio cumplen lo estipulado por los apartados 6, 7, 8 y 9, sobre las correctas señalizaciones de los elementos que puedan suponer un peligro para los trabajadores y las dimensiones dispuestas. Estas condiciones se cumplen en la zona de trabajo.

El apartado 10 sobre las vías y salidas de evacuación, así como las vías de circulación y las puertas que den acceso a ellas, se ajustarán a lo dispuesto en su normativa específica. La cantidad de vías y salidas de evacuación, distribución y dimensiones, así como su señalización deberán garantizar las condiciones de máxima seguridad. Todas estas disposiciones se han cumplido en la zona de trabajo.

El apartado 11 sobre las condiciones de protección contra incendios deberán ajustarse a lo dispuesto en la normativa que resulte de aplicación sobre condiciones de protección contra incendios. Se cumplen todas las estipulaciones sobre seguridad, de manera que se garantizan que los dispositivos de lucha contra incendios son de fácil acceso y manipulación.

El apartado 12 referente a la instalación eléctrica, se cumple todo lo especificado en su normativa específica, sin representar riesgos de accidente.

El apartado 13 estipula que los trabajadores minusválidos, deberán estar acondicionados para que dichos trabajadores puedan utilizarlos. Estas condiciones se cumplen en la zona de trabajo.

6.3. Anexo II. Orden, limpieza y mantenimiento

El Anexo II regula las condiciones de orden, limpieza y mantenimiento del puesto de trabajo.

Las condiciones estipuladas en este Anexo se cumplen en el edificio que ha constituido el lugar de trabajo ya que asegura que las zonas de paso, salidas y vías de circulación y emergencia permanecen libres de obstáculos de forma que sea posible utilizarlas sin dificultades en todo momento. Además, todas las zonas de trabajo se limpian periódicamente y siempre que sea necesario para mantenerlos en todo momento en condiciones higiénicas adecuadas.

Estas operaciones de limpieza no suponen por si mismas una fuente de riesgo para los trabajadores que las efectúen o para terceros. Además, las instalaciones son objeto de un mantenimiento periódico, de forma que sus condiciones de funcionamiento satisfagan siempre las especificaciones del proyecto, y se mantienen las condiciones de ventilación en buen estado de funcionamiento.

6.4. Anexo III. Condiciones ambientales de los lugares de trabajo

El Anexo III presenta disposiciones sobre las condiciones ambientales de los lugares de trabajo.

La exposición a las condiciones ambientales de los lugares de trabajo no debe suponer un riesgo para la seguridad y la salud de los trabajadores, además de que no constituyen una fuente de incomodidad o molestia. La temperatura de lugar de trabajo estará comprendida entre 17 °C y 27 °C, y la humedad relativa se sitúa siempre entre el 30 % y el 100 %. Se cumplen todas las condiciones citadas anteriormente en el lugar de trabajo. Además, no se sobrepasan las corrientes de aire de 0,25 m/s. En cuanto a la ventilación del lugar del trabajo aseguran una efectiva renovación del aire del local de trabajo.

6.5. Anexo IV. Iluminación de los lugares de trabajo

El Anexo IV regula la iluminación de los lugares de trabajo.

La iluminación de cada zona o parte de un lugar de trabajo deberá adaptarse a las características de la actividad que se efectúe en ella. Para ello se deben tener en cuenta los riesgos para la seguridad y salud de los trabajadores dependientes de las condiciones de visibilidad y las exigencias visuales de las tareas desarrolladas. Se cuenta tanto con iluminación natural complementada con iluminación artificial.

Los niveles mínimos de iluminación se cumplen, sin suponer en ningún caso ningún riesgo para la seguridad o salud de los trabajadores. Se cuenta además con una distribución de los niveles de iluminación lo más uniforme posible, con unos niveles y contrastes de luminancia adecuados a las exigencias visuales de la tarea, sin deslumbramientos directos ni indirectos causados por objetos próximos a las zonas de trabajo, y sin sistemas de luz que impidan la correcta visualización del entorno o que supongan un riesgo de accidente. Se dispone, asimismo, de un alumbrado de emergencia de evacuación y de seguridad, Las estipulaciones que se realizan en los diversos apartados se cumplen.

6.6. Sobre el impacto en la huella de carbono

La huella de carbono nace como una medida de cuantificar y generar un indicador del impacto que una actividad o proceso tiene sobre el cambio climático, más allá de los grandes emisores. Se define como el conjunto de emisiones de gases de efecto invernadero producidas, directa o indirectamente, por personas, organizaciones, productos, eventos o regiones geográficas, en términos de CO_2 equivalentes, y sirve como una útil herramienta de gestión para conocer las conductas o acciones que están contribuyendo a aumentar nuestras emisiones, cómo podemos mejorarlas y realizar un uso más eficiente de los recursos [19].

La realización de este proyecto conlleva un impacto en esta huella de carbono. El objetivo, es poder reducir este impacto implementando una estrategia de reducción, o compensar las emisiones, de manera que se pueda colaborar en el freno del cambio climático. Para ello, se debe conocer qué efecto produce la realización de las tareas relacionadas con el desarrollo del trabajo.

Para poder calcular la huella de carbono personal, se utiliza una calculadora, Carbon Footprint [20], avalada por numerosas empresas, institutos, y por la normativa ISO.

Para el cálculo de la huella de carbono personal en la elaboración del trabajo, se consideran los cálculos realizados en la Parte III, PRESUPUESTO, donde han contribuido las variables recogidas en la Tabla 6.1.

	<i>Total</i>	<i>Emisión de CO_2 (T)</i>
Consumo eléctrico	396 kWh	0.09
Equipo informático	199.8 €/año	0.12
Estación de cálculo	625 €/año	0.37
EMISIÓN TOTAL		0.58

Tabla 6.1: Cálculo del impacto sobre la huella de carbono.

Todo ello en total conlleva una huella de carbono anual de 0,58 toneladas de CO_2 . El mayor componente de emisiones es la estación de cálculo ya que tiene un elevado valor económico, seguido del portátil.

En este calculo no se han considerado otros factores, ya sea la compra y consumo de productos alimenticios o el gasto en educación, ya que estos no afectan directamente al desarrollo del trabajo.

Parte III

PRESUPUESTO

Capítulo 7

Presupuesto

En este capítulo se va a describir los costes necesarios para el proyecto “Modelado CFD del proceso de inyección de urea-agua en el sistema de escape de un motor de combustión”. Ya que no hay confección de un producto, solamente se considerará el estudio del desarrollo de una investigación, el cuál se compone de dos grandes grupos, los costes de personal y los de materia.

7.1. Costes de personal

A continuación, se muestran los gastos derivados de la mano de obra, es decir, los honorarios de los miembros componentes del equipo de trabajo presente en este proyecto. Para este caso, el equipo se compone de un ingeniero coordinador del proyecto doctor por la UPV; un ingeniero superior, siendo alumno de doctorado; y un graduado en ingeniería en formación.

7.1.1. Ingeniero Junior

Para calcular los costes de una empresa por un Ingeniero Junior, se va a especificar en la Tabla 7.1 el coste desglosado.

	<i>Importe (€)</i>
Salario bruto	18000
Seguridad social (23.6 %)	4248
Desempleo (5.5 %)	990
Form. Profesional (0.6 %)	108
Form. Gar. Profesional (0.3 %)	54
SUBTOTAL	23400

Tabla 7.1: Costes Ingeniero Junior.

Considerando doce meses de trabajo y 22 días laborales por mes, con jornadas diarias de 8 horas, se obtiene un valor de 10.08€/h.

7.1.2. Ingeniero Superior

En la Tabla 7.2 se desglosa el coste para una empresa de un Ingeniero Superior.

	<i>Importe (€)</i>
Salario bruto	30000
Seguridad social (23.6 %)	7080
Desempleo (5.5 %)	1650
Form. Profesional (0.6 %)	180
Form. Gar. Profesional (0.3 %)	90
SUBTOTAL	39000

Tabla 7.2: Costes Ingeniero Superior.

Considerando doce meses de trabajo y 22 días laborales por mes, con jornadas diarias de 8 horas, se obtiene un valor de 18.46€/h.

7.1.3. Ingeniero Coordinador de Proyecto

En la Tabla 7.3 se desglosa el coste para una empresa de un Ingeniero Coordinador de Proyecto.

	<i>Importe (€)</i>
Salario bruto	50000
Seguridad social (23.6 %)	11800
Desempleo (5.5 %)	2750
Form. Profesional (0.6 %)	300
Form. Gar. Profesional (0.3 %)	150
SUBTOTAL	65000

Tabla 7.3: Costes Ingeniero Coordinador de Proyecto.

Considerando doce meses de trabajo y 22 días laborales por mes, con jornadas diarias de 8 horas, se obtiene un valor de 30.77€/h.

Resumiendo en la Tabla 7.4 las horas empleadas por cada persona y el coste de cada una de ellas, se obtiene el coste total del personal empleado para el proyecto.

	<i>C_h (€/h)</i>	<i>Horas (h)</i>	<i>Total (€)</i>
Ingeniero Junior	10.08	575	5796
Ingeniero Superior	18.46	80	1476.80
Ingeniero Coordinador	30.77	40	1230.80
SUBTOTAL			8503.60

Tabla 7.4: Costes del personal.

7.2. Costes de material

7.2.1. Licencias de software

Para la realización de este proyecto, se ha utilizado el software CONVERGETM. Este tiene un coste anual de 35000€, por lo que el coste por hora es:

$$C_h = \frac{35000}{8760} = 4.00e/h \quad (7.1)$$

Para procesar los datos obtenidos se ha utilizado Python y ParaView. Estos dos software son de licencia gratuita por lo que no supone ningún coste adicional.

La parte de escritura, se ha realizado mediante el conversor de texto online para LaTeX, Overleaf [15], el cual es gratuito.

7.2.2. Coste del equipo

El equipo en el que se ha trabajado tiene un valor de 999€. Si se considera que este tiene una vida media útil de cinco años, el coste por hora es:

$$C_h = \frac{999}{8760 \times 5} = 0.02e/h \quad (7.2)$$

7.2.3. Coste de la estación de cálculo

En esta estación se han obtenido los resultados de las simulaciones realizadas y tiene un valor de 5000€. Si se considera que este tiene una vida media útil de ocho años, el coste por hora es:

$$C_h = \frac{5000}{8760 \times 8} = 0.07e/h \quad (7.3)$$

7.2.4. Coste del material de oficina

Para realizar anotaciones, se ha usado varios bolígrafos y una libreta tamaño A4. El precio de este material se redondeará a 5€.

7.2.5. Coste eléctrico

Para el cálculo del consumo eléctrico, se considera individualmente el consumo específico en [W] de cada elemento empleado en la realización del proyecto. El coste de la electricidad se estima en 0,115 €/kWh, y se le añade un 5,113% de impuestos.

	<i>Consumo (W)</i>	<i>Tiempo (h)</i>	<i>Energía total (kWh)</i>	<i>Importe (€)</i>
Portátil	50	240	12	1.38
Estación de cálculo	100	100	10	1.15
Luz	300	340	102	11.73
Ventilación	800	340	272	31.28
SUBTOTAL			396	45.54
SUBTOTAL (CON IMPUESTOS)				45.77

Tabla 7.5: Coste eléctrico.

7.2.6. Costes de material totales

En la Tabla 7.6 se resume el coste por horas y el total de horas utilizadas, obteniendo el coste total del material utilizado para el proyecto.

	<i>C_h (€/h)</i>	<i>Horas (h)</i>	<i>Total (€)</i>
Licencias de software	4	80	320.00
Coste del equipo	0.02	240	4.80
Coste de la estación de cálculo	0.07	100	7
Coste de material de oficina	-	-	5
Coste eléctrico	-	-	45.77
SUBTOTAL			382.57

Tabla 7.6: Costes de material.

7.3. Coste final

Por ultimo, se detalla en la Tabla 7.7 el coste total del proyecto.

	<i>Importe (€)</i>
Coste personal	8503.60
Coste material	382.57
TOTAL	8886.17

Tabla 7.7: Costes final del proyecto.

Por lo que el coste total del proyecto asciende a:

OCHO MIL OCHOCIENTOS OCHENTA Y SEIS EUROS CON DIECISIETE CÉNTIMOS