



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Estudio del campo lejano de chorros de Urea-Agua y de la
formación de películas líquidas y depósitos en la línea de
escape

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Aeroespacial

AUTOR/A: Ruiz Villar, Raúl

Tutor/a: Martí Gómez-Aldaraví, Pedro

CURSO ACADÉMICO: 2021/2022



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

ESTUDIO DEL CAMPO LEJANO DE CHORROS DE UREA-AGUA Y
DE LA FORMACIÓN DE PELÍCULAS LÍQUIDAS Y DEPÓSITOS EN
LA LÍNEA DE ESCAPE

TRABAJO FINAL DEL

Grado en Ingeniería Aeroespacial

REALIZADO POR

Raúl Ruiz Villar

TUTORIZADO POR

Pedro Martí Gómez-Aldaraví

Javier Marco Gimeno

CURSO ACADÉMICO: 2021/2022

A mis padres, a mis hermanos y a mi sobrina.

Resumen

Durante las últimas décadas, la mayor preocupación por el medio ambiente ha desencadenado un endurecimiento en materia de normativa anticontaminante. Las limitaciones impuestas en las emisiones de óxidos de nitrógeno ha promovido el desarrollo de sistemas de post-tratamiento de gases de escape con el fin de reducirlos. Ejemplo de ellos es la Reducción Catalítica Selectiva, donde las características del chorro, compuesto por una solución urea-agua, y la interacción entre este y las paredes de la geometría donde se inyecta pueden afectar de forma notable a la eficiencia del sistema. Además, la interacción chorro/pared puede provocar la formación de películas líquidas y depósitos en la línea de escape que pueden acabar suponiendo un severo problema en los sistemas de post-tratamiento, llegando incluso a obstruirla por completo.

Con el propósito de comprender la mezcla de la solución urea-agua con el aire circundante en presencia de paredes y estudiar la formación de películas líquidas en las mismas se ha desarrollado un estudio paramétrico imponiendo diferentes condiciones operativas. Dicho estudio se ha efectuado por medio de simulaciones computacionales empleando el *software* comercial CONVERGE CFD v3.0. Así, el objetivo principal del presente trabajo es recrear el proceso de inyección del chorro, los procesos químicos a los que se somete y su interacción con la pared para así determinar cuales son las condiciones más favorables para maximizar la cantidad de amoníaco generado a la vez que se evalúa el impacto de las condiciones de operación sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional.

Abstract

During the last decades, nitrogen oxides emission limitations have become stricter, which has promoted the development of exhaust gas post-treatment systems in order to reduce these emissions. One example of such systems is Selective Catalytic Reduction, where the characteristics of the spray, made up of an urea-water solution, can significantly affect the efficiency of these systems. In addition, the spray/wall interaction can cause the formation of liquid films and deposits in the exhaust line that can be a serious problem in after-treatment systems, even completely clogging it.

A parametric study imposing different operating conditions has been developed in order to understand the mixing of the urea-water solution with the surrounding air in the presence of walls and to study the formation of liquid films on them. This study has been carried out through simulations using the commercial software CONVERGE CFD v3.0. Thus, the main objective of the present study is to recreate the spray injection process, the chemical processes that it undergoes, and its interaction with the walls to analyze the most favorable conditions to maximize the amount of ammonia generated during the injection process at the same time that it is evaluated the impact of the operating conditions on the formation of liquid films on the walls of the computational geometry.

Índice general

| | |
|---|----------|
| Índice general | VII |
| Índice de figuras | XIV |
| Índice de tablas | XVI |
| Lista de Símbolos | XVII |
| I Memoria | 1 |
| 1 Planteamiento del trabajo | 3 |
| 1.1 Introducción | 3 |
| 1.2 Objetivos | 5 |
| 1.3 Contenidos | 6 |
| 2 Marco teórico | 9 |
| 2.1 Óxidos de nitrógeno: formación y efectos | 9 |
| 2.1.1 Óxido nítrico (NO) | 10 |
| 2.1.2 Dióxido de nitrógeno (NO ₂) | 11 |
| 2.1.3 Óxido nitroso (N ₂ O) | 12 |
| 2.2 Post-tratamiento de gases de escape | 13 |
| 2.2.1 Reactores catalíticos | 14 |
| 2.2.2 Reactores químicos | 15 |

| | |
|--|----|
| 3 Metodología | 19 |
| 3.1 Dominio y geometría | 19 |
| 3.2 Estrategia de mallado | 20 |
| 3.3 Modelos y propiedades del fluido | 22 |
| 3.3.1 Propiedades del fluido | 22 |
| 3.3.2 Modelo de turbulencia | 23 |
| 3.3.3 Modelo químico y de combustión | 24 |
| 3.3.4 Modelado del chorro | 24 |
| 3.4 Condiciones de contorno | 33 |
| 3.5 Condiciones iniciales | 34 |
| 3.6 Esquemas de discretización y aspectos numéricos | 36 |
| 3.7 Estudio paramétrico | 38 |
| 4 Resultados | 41 |
| 4.1 Generación de amoniaco | 41 |
| 4.1.1 Generación de amoniaco en función del ángulo de inyección | 42 |
| 4.1.2 Generación de amoniaco en función de la presión de inyección | 43 |
| 4.1.3 Generación de amoniaco en función del gasto másico de aire | 45 |
| 4.2 Tasa de generación de amoniaco | 47 |
| 4.2.1 Tasa de generación de amoniaco en función del ángulo de inyección | 48 |
| 4.2.2 Tasa de generación de amoniaco en función de la presión de inyección | 49 |
| 4.2.3 Tasa de generación de amoniaco en función del gasto másico de aire | 51 |
| 4.3 Formación de películas | 53 |
| 4.3.1 Evolución temporal de la masa de película líquida acumulada | 53 |
| 4.3.2 Masa total que impacta en las paredes | 55 |
| 4.3.3 Masa de película acumulada | 57 |
| 5 Conclusiones y desarrollos futuros | 63 |
| 5.1 Conclusiones | 63 |
| 5.2 Desarrollos futuros | 66 |
| 6 Bibliografía | 69 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| A | Modelos computacionales de interacción chorro/pared | 73 |
| A.1 | Modelo de rebote/deslizamiento | 73 |
| A.2 | Modelo de película en la pared | 74 |
| A.2.1 | Ecuación de cantidad de movimiento de la película | 74 |
| A.2.2 | Rebote gota/película | 74 |
| A.2.3 | Salpicadura gota/película: Modelo O'Rourke | 74 |
| A.2.4 | Salpicadura gota/película: Modelo Kuhnke | 75 |
| A.2.5 | Salpicadura gota/película: Modelo Bai-Gosman | 77 |
| A.2.6 | Transferencia de calor chorro/pared: Modelo Wruck | 78 |
| A.2.7 | Separación de la película | 78 |
| A.3 | Modelo de desvanecimiento de las gotas | 78 |
| B | Distancias radial y axial | 79 |
| B.1 | ¿Qué son? | 79 |
| B.2 | Medida de las distancias radial y axial | 80 |
| B.2.1 | Criterios para la definición de las distancias radial y axial | 82 |
| C | Simulaciones adicionales para la validación | 83 |
| C.1 | Modelo de salpicadura gota/película | 83 |
| C.2 | <i>Turbulent Kinetic Energy</i> | 84 |
| C.3 | Otros estudios | 85 |
| C.3.1 | Presión de inyección | 85 |
| C.3.2 | Modelo de fuerza de arrastre | 88 |
| II | Pliego de condiciones | 89 |
| 1 | Pliego de condiciones generales | 91 |
| 2 | Pliego de condiciones de especificaciones técnicas | 99 |
| 2.1 | Especificaciones de los recursos | 99 |
| 2.2 | Condiciones de calidad | 102 |
| 2.3 | Condiciones de garantía y mantenimiento | 102 |
| 2.4 | Reclamaciones | 102 |
| 2.5 | Condiciones legales y contractuales | 103 |

| | |
|---|------------|
| 2.6 Revisión de los precios | 103 |
| 2.7 Fianza. | 103 |
| 2.8 Aceptación | 103 |
| | |
| III Presupuesto | 105 |
| | |
| 1 Presupuesto | 107 |
| 1.1 Desglose de recursos. | 107 |
| 1.2 Desglose de costes unitarios | 109 |
| 1.2.1 Coste de personal unitario | 109 |
| 1.2.2 Coste de <i>hardware</i> informático unitario. | 110 |
| 1.2.3 Coste de <i>software</i> informático unitario | 110 |
| 1.2.4 Coste de las instalaciones. | 112 |
| 1.2.5 Coste de material de oficina unitario | 112 |
| 1.3 Presupuesto total. | 113 |
| | |
| A Nociones básicas para el cálculo del presupuesto | 117 |
| A.1 Coste de amortización | 117 |
| A.2 Tasa horaria. | 118 |

Índice de figuras

| | |
|--|----|
| 1.1. Emisiones de GHG en Europa entre 1990 y 2019, por sector [2]. | 3 |
| 1.2. Emisiones de NO _x en Europa entre 2000 y 2018, por sector [3]. | 4 |
| 2.1. Esquema de un catalizador SCR con urea para motores Diesel [15]. | 15 |
| 3.1. Cámara de inyección experimental [24]. | 20 |
| 3.2. Geometría computacional. | 20 |
| 3.3. Malla de la geometría computacional en la región próxima al inyector. | 21 |
| 3.4. Instalación experimental empleada por Shahariar y Lim [23]. | 26 |
| 3.5. Recreación computacional de la instalación experimental empleada por Shahariar y Lim [23]. | 26 |
| 3.6. Comparación de las curvas de penetración entre los resultados experimentales y computacionales para la validación del modelo de salpicadura gota/película. | 28 |
| 3.7. Comparación de las curvas de distancia radial y axial entre los resultados experimentales y computacionales para la validación del modelo de salpicadura gota/película aplicando el criterio del tanto por ciento. | 29 |
| 3.8. Comparación de las curvas de distancia radial y axial entre los resultados experimentales y computacionales para la validación del modelo de salpicadura gota/película aplicando el criterio de la parcela más alejada. | 30 |
| 3.9. Perfil de inyección empleado en la simulación. | 32 |
| 3.10. Contornos de la geometría computacional. | 33 |

| | |
|---|----|
| 3.11. Posición de la línea de monitorización dentro de la geometría computacional. | 34 |
| 3.12. Evolución temporal de la presión y la velocidad en los puntos monitorizados para un gasto másico a la entrada de 40 kg/h. | 35 |
| 3.13. Evolución de la presión y la velocidad en los puntos monitorizados para un gasto másico a la entrada de 200 kg/h. | 36 |
| 3.14. Representación gráfica del ángulo de inyección: (a) 30°, (b) 90°. | 39 |
| 4.1. Evolución temporal de la masa de amoniaco en el dominio computacional en función del ángulo de inyección, para una presión de inyección de 6 bar y un gasto másico de aire de 40 kg/h. | 43 |
| 4.2. Evolución temporal de la masa de amoniaco en el dominio computacional en función de presión de inyección, para dos ángulos de inyección y un gasto másico de aire de 40 kg/h. | 44 |
| 4.3. Evolución temporal de la masa de amoniaco en el dominio computacional, adimensionalizada con la masa inyectada, en función de la presión de inyección, para dos ángulos de inyección y un gasto másico de aire de 40 kg/h. | 45 |
| 4.4. Evolución temporal de la masa de amoniaco en el dominio computacional en función del gasto másico de aire, para un ángulo de inyección de 90° y tres presiones de inyección. | 46 |
| 4.5. Proceso de linealización de la tasa de generación de amoniaco. | 47 |
| 4.6. Efecto del ángulo de inyección en la tasa de generación de amoniaco. | 49 |
| 4.7. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección en la tasa de generación de amoniaco. | 51 |
| 4.8. Efecto del ángulo de inyección, de la presión de inyección y del gasto másico de aire en la tasa de generación de amoniaco. | 52 |
| 4.9. Evolución temporal de la masa de película líquida acumulada en las paredes de la geometría computacional en función del ángulo de inyección para una presión de inyección de 6 bar y un gasto másico de aire de 40 kg/h. | 54 |
| 4.10. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la masa total del chorro que impacta en las paredes de la geometría computacional para dos gastos másicos de aire dados. | 56 |

| | |
|--|----|
| 4.11. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la masa total del chorro que impacta en las paredes de la geometría computacional adimensionalizada con la masa inyectada para dos gastos máxicos de aire dados. | 56 |
| 4.12. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional para un gasto máxico de aire de 40 kg/h. | 58 |
| 4.13. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre el cociente entre la masa de película acumulada y la masa inyectada para un gasto máxico de aire de 40 kg/h. | 59 |
| 4.14. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional para un gasto máxico de aire de 200 kg/h. | 60 |
| 4.15. Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre el cociente entre la masa de película acumulada y la masa inyectada para un gasto máxico de aire de 200 kg/h. | 61 |
| A.1. Representación conceptual de las cuatro interacciones gota/pared para una pared seca disponibles en el modelo Kuhnke [26]. | 76 |
| A.2. Valores críticos del número K en el modelo Kuhnke para una pared seca a diferentes (T_{wall}/T_{boil}) ratios de temperatura [26]. | 76 |
| A.3. Datos usados en el modelo Kuhnke: valores del número K para una pared mojada a diferentes espesores dimensionales de película en la pared [26]. | 77 |
| B.1. Definición de las distancias radial y axial efectuada por Shahariar y Lim [23]. | 79 |
| B.2. Medida de la distancia radial de forma computacional. | 81 |
| B.3. Medida de la distancia axial de forma computacional. | 81 |
| C.1. Comparación de las curvas de distancia radial y axial usando el modelo de salpicadura gota/película Kuhnke y variando el parámetro T^* | 84 |
| C.2. Comparación de las curvas de distancia radial y axial usando el modelo de salpicadura gota/película Bai-Gosman y variando el parámetro T^* | 85 |

| | |
|--|----|
| C.3. Comparación de las curvas de distancia radial y axial variando el parámetro TKE. | 86 |
| C.4. Comparación de las curvas de penetración variando la presión de inyección. | 87 |
| C.5. Comparación de las curvas de distancia radial y axial variando la presión de inyección. | 87 |
| C.6. Comparación de las curvas de penetración variando el modelo de fuerza de arrastre. | 88 |

Índice de tablas

| | |
|---|-----|
| 3.1. Estrategia de mallado seguida en las simulaciones. | 21 |
| 3.2. Valores insertados en CONVERGE para generar la malla. | 22 |
| 3.3. Caracterización del fluido gaseoso. | 22 |
| 3.4. Caracterización del fluido líquido. | 23 |
| 3.5. Parámetros introducidos para la modelización de la turbulencia. | 23 |
| 3.6. Parámetros introducidos para la modelización de las colisiones. | 24 |
| 3.7. Parámetros introducidos para la modelización de la interacción chorro/pared. | 25 |
| 3.8. Condiciones experimentales [23] y características del inyector [30]. | 26 |
| 3.9. Características del inyector empleado en la simulación. | 32 |
| 3.10. Condiciones de contorno. | 33 |
| 3.11. Condiciones iniciales. | 34 |
| 3.12. Esquemas de discretización y aspectos numéricos. | 37 |
| 3.13. Condiciones de la inyección y del flujo necesarias para la realización del estudio paramétrico. | 38 |
| 1.1. Personal involucrado en la elaboración del trabajo. | 107 |
| 1.2. <i>Hardware</i> informático empleado en la elaboración del trabajo. | 108 |
| 1.3. <i>Software</i> informático empleado en la elaboración del trabajo. | 108 |
| 1.4. Instalaciones necesarias para la elaboración del trabajo. | 108 |

| | |
|--|-----|
| 1.5. Material de oficina empleado en la elaboración del trabajo. | 109 |
| 1.6. Presupuesto de recursos por clase. | 114 |
| 1.7. Presupuesto total. | 115 |

Lista de Símbolos

Griegos

| | |
|---------------|------------------------------|
| δ_{bl} | Espesor de la capa límite |
| ϵ | Tasa de disipación |
| μ | Viscosidad |
| ν_t | Viscosidad turbulenta |
| ρ | Densidad del gas |
| ρ_l | Densidad del líquido |
| σ | Tensión superficial |
| σ_{ij} | Tensor de esfuerzos viscosos |

Latinos

| | |
|--------------|---|
| a | Amortización |
| C_d | Coefficiente de descarga |
| D | Coefficiente de conductividad másica |
| d | Diámetro de la gota |
| e | Energía interna específica |
| F_r | Dosado relativo |
| $F_{d,i}$ | Componente i de la fuerza de arrastre |
| f_{splash} | Fracción másica de la gota, salpicada |
| h | Horas trabajadas en un año |
| h_m | Entalpía de la especie m |

| | |
|---------------|---|
| h_α | Espesor local de la película |
| K | Número K |
| K_{cond} | Coefficiente de conductividad térmica |
| L_{Base} | Tamaño base de la celda |
| $L_{Refined}$ | Tamaño de la celda tras refinamiento |
| La | Número de Laplace |
| n | Periodo de amortización |
| P | Presión |
| p | Número de refinamientos |
| P_{inj} | Presión de inyección |
| R^2 | Coefficiente de determinación |
| S_e | Término fuente de la ecuación de la energía |
| S_{mass} | Término fuente de la ecuación de continuidad |
| S_{mom} | Término fuente de la ecuación de momento |
| S_{spec} | Término fuente de la ecuación de transporte de especies |
| T | Temperatura |
| t | Tiempo |
| t_h | Tasa horaria |
| T_{boil} | Temperatura de ebullición |
| T_{wall} | Temperatura de la pared |
| u | Vector velocidad |
| u_{inj} | Velocidad de inyección |
| v | Velocidad de la gota |
| V_d | Volumen de la gota |
| v_i | Componente i de la velocidad de la gota |
| v_n | Componente de la velocidad normal a la superficie |
| VC | Valor de compra |

| | |
|----------------|--|
| VR | Valor residual al cabo del periodo de amortización |
| We_i | Número de Weber de la gota que impacta |
| $We_{rebound}$ | Número de Weber crítico de rebote |
| We_{splash} | Número de Weber crítico de salpicadura |
| x_i | Coordenadas espaciales |
| Y_m | Fracción másica de la especie m |

Elementos y compuestos químicos

| | |
|------------------|----------------------------|
| $(NH_2)_2CO$ | Urea |
| C | Carbono |
| CH | Enlace carbono-hidrógeno |
| CH ₂ | Metileno |
| CN | Cianuro |
| CO | Monóxido de carbono |
| CO ₂ | Dióxido de carbono |
| H | Hidrógeno |
| H ₂ | Hidrógeno diatómico |
| H ₂ O | Agua |
| HC | Hidrocarburos |
| HCN | Ácido cianídrico |
| HNCO | Ácido isociánico |
| HO ₂ | Hidroperoxilo |
| N | Nitrógeno |
| N ₂ | Nitrógeno diatómico |
| N ₂ O | Óxido nitroso |
| NCO | Cianato |
| NH | Enlace nitrógeno-hidrógeno |
| NH ₂ | Radical amino |

| | |
|-----------------|----------------------|
| NH ₃ | Amoniaco |
| NO | Óxido nítrico |
| NO ₂ | Dióxido de nitrógeno |
| NO _x | Óxidos de nitrógeno |
| O | Oxígeno |
| O ₂ | Oxígeno diatómico |
| OH | Radical hidroxilo |

Siglas

| | |
|-------|---|
| AMR | <i>Adaptative Mesh Refinement</i> |
| CFD | <i>Computational Fluid Dynamics</i> (Mecánica de Fluidos Computacional) |
| FVM | Método de Volúmenes Finitos |
| GHG | <i>Greenhouse Gases</i> (Gases de Efecto Invernadero) |
| GWP | <i>Global Warming Potential</i> |
| KH-RT | Kelvin-Helmholtz-Rayleigh-Taylor |
| NTC | <i>No Time Counter</i> |
| PISO | <i>Pressure Implicit with Splitting of Operator</i> |
| RAM | <i>Random Access Memory</i> |
| RANS | <i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i> |
| SCR | <i>Selective Catalytic Reduction</i> (Reducción Catalítica Selectiva) |
| SMD | <i>Sauter Mean Diameter</i> |
| SOR | <i>Successive Over-Relaxation</i> |
| TKE | <i>Turbulent Kinetic Energy</i> (Energía Cinética Turbulenta) |
| UWS | <i>Urea-Water Solution</i> (Solución Urea-Agua) |

Parte I

Memoria

Capítulo 1

Planteamiento del trabajo

1.1 Introducción

El aumento en el número de vehículos con fines de transporte en las últimas décadas ha incrementado el número de emisiones de productos de la combustión. De hecho, atendiendo a la Figura 1.1 y a la Figura 1.2, se puede contemplar cómo, desde el marco europeo, el sector del transporte contribuye significativamente a las emisiones de gases de efecto invernadero (GHG) y es el principal emisor de óxidos de nitrógeno (NO_x). Son estas últimas emisiones (NO_x) las que tienen un impacto directo y severo sobre la salud humana [1], siendo extremadamente nocivas. Esto convierte a los NO_x en una de las emisiones que más interesa reducir y sobre la que este documento se enfocará.

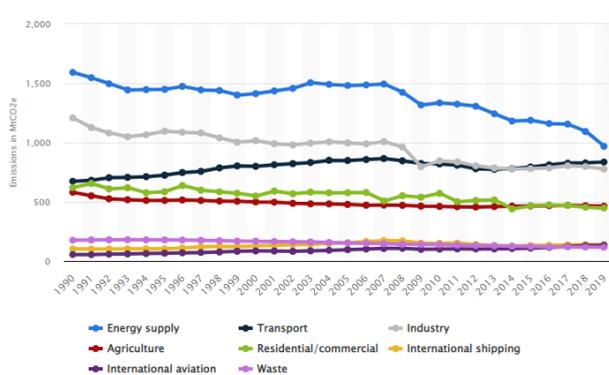


Figura 1.1: Emisiones de GHG en Europa entre 1990 y 2019, por sector [2].

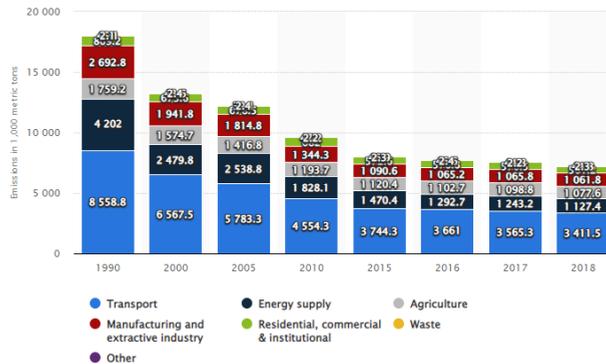


Figura 1.2: Emisiones de NO_x en Europa entre 2000 y 2018, por sector [3].

Para abordar los límites impuestos por los rangos legislativos, la industria automovilística está adoptando múltiples enfoques. Un enfoque líder en muchas hojas de ruta tecnológicas es el vehículo eléctrico. No obstante, dado que los motores de combustión interna poseen una madurez considerable y hasta que la red eléctrica de un salto a fuentes de energía bajas en emisiones de gases de efecto invernadero, abandonar por completo esta tecnología parece carecer de sentido [4]. De hecho, la mayoría de las proyecciones de mercado muestran que los motores de combustión interna seguirán siendo predominantes en los vehículos durante, al menos, otras dos décadas [5]. Es por ello que ha de valorarse el potencial de mejora que los motores de combustión interna poseen con el objetivo de tomar las decisiones futuras más acertadas.

A continuación se citan algunas líneas de investigación potencialmente fructíferas para menguar el problema de las emisiones en el campo de los motores de combustión interna [1]:

- **Eficiencia del motor.** Para lograr un incremento en la eficiencia del motor pueden abordarse múltiples estrategias entre las que destacan actuaciones sobre el sistema de alimentación del combustible, mejoras en la renovación de la carga, hibridación, técnicas de lubricación y gestión térmica y energética.
- **Sistemas de post-tratamiento.** Su diseño e implementación ha sido necesario para cumplir con las últimas regulaciones existentes. No obstante, se continúa investigando en esta tecnología para lograr una operación eficiente en un amplio rango de operación y subsanar ciertos problemas que introduce su inserción en la línea de escape.
- **Combustibles.** Se baraja la posibilidad de sustituir los combustibles tradicionales por bio-combustibles, combustibles duales, hidrógeno, etc.

- **Control en tiempo real del motor.** Esta estrategia pretende adecuar el comportamiento del motor en función de las exigencias de la situación en la que se halle. Sin embargo, requiere de un software y una calibración muy costosos que posiblemente requieran de modelos físicos y estadísticos usando inteligencia artificial.

De entre las múltiples estrategias propuestas, los sistemas de post-tratamiento se imponen como una de las tecnologías más prometedoras a la hora de evitar la introducción de gases contaminantes en la atmósfera. Dentro de esta tecnología se encuentra el *Selective Catalytic Reduction* (SCR), que reduce los NO_x , en nitrógeno y agua introduciendo amoníaco antes del catalizador [6]. No obstante, por razones toxicológicas y de seguridad, se prefiere una solución de urea-agua (UWS) en lugar de amoníaco como agente reductor [7].

Pese a que estos sistemas ya se hallan presentes en el parque automovilístico, el conocimiento de ciertos fenómenos que tienen lugar en su interior es aún muy limitado, lo que acaba repercutiendo en la capacidad para lograr bajas emisiones de NO_x . Fruto de esta situación surge una oportunidad para investigar los sistemas SCR. Particularmente se va a analizar el efecto del choque del chorro de la solución urea-agua con la pared en la formación de películas líquidas que puedan afectar tanto al sistema de post-tratamiento como a la reducción de NO_x .

1.2 Objetivos

Los objetivos principales que se pretenden alcanzar en este trabajo pivotan en torno a la idea de considerar la interacción del chorro de urea-agua con las paredes de la cámara donde se inyecta. Dichos objetivos se pueden sintetizar en dos:

- Evaluación de las diferencias que supone la presencia de paredes en la formación de ciertos compuestos, particularmente el amoníaco, cuyo interés se justificará en el Capítulo 2.
- Estudio de la formación de películas líquidas y depósitos en la línea de escape que pueden acabar suponiendo un severo problema en los sistemas de post-tratamiento, llegando incluso a obstruir por completo la línea de escape.

Adicionalmente, y vinculado con los objetivos anteriores, se pretende dar respuesta a la pregunta de cuál de los modelos de película en la pared presentes en el *software* computacional CONVERGE predice de manera más fidedigna el comportamiento durante y tras el choque del chorro de urea-agua con la pared.

1.3 Contenidos

El trabajo en cuestión consta de tres partes claramente diferenciadas: memoria, pliego de condiciones y presupuesto.

1. **Memoria.** En esta parte del documento se pretenden alcanzar los objetivos planteados en la Sección 1.2 haciendo uso del *software* comercial CONVERGE CFD v3.0. Seguidamente se va a detallar el contenido de los capítulos de los que consta:
 - El Capítulo 1 pretende servir de introducción al proyecto realizado, presentando el contexto que motiva el surgimiento del mismo y los objetivos que pretende cubrir.
 - En el Capítulo 2 se realiza una revisión bibliográfica. Así, este capítulo sirve para describir, por un lado, los fenómenos que rigen la formación de los NO_x; por otro lado, el principio de funcionamiento de los sistemas de post-tratamiento de gases de escape, particularmente de los reactores químicos; y en último lugar, presentar cuáles son y cómo funcionan los modelos de interacción chorro/pared que incluye CONVERGE.
 - En el Capítulo 3 se presenta la geometría y la configuración computacional que han sido empleadas para la elaboración del estudio paramétrico planteado en este trabajo. Este capítulo pretende ser una pseudo-guía para todo aquel usuario de herramientas CFD que quiera replicar este estudio, o lo que resulta más interesante, partir de él con el objetivo de ampliar el conocimiento vinculado a la temática en cuestión.
 - En el Capítulo 4 se exponen y discuten los resultados que han sido obtenidos del estudio paramétrico efectuado. Una parte de dichos resultados son comparados con los de Payri y col. [6] a fin de establecer las diferencias que conlleva el uso de un modelo de película en la pared respecto de un modelo de desvanecimiento de gotas.
 - En el Capítulo 5 se recogen las conclusiones que han sido obtenidas a lo largo del documento, particularmente tras la discusión de los resultados extraídos. Adicionalmente, se incluyen una serie de propuestas para estudios futuros que mejoren, amplíen o continúen esta línea de investigación.
2. **Pliego de condiciones.** En esta parte del documento se exponen las condiciones técnicas y facultativas que se deben seguir a la hora de realizar el trabajo en cuestión. En ella, se hace referencia a la normativa vigente de prevención de riesgos laborales.

3. **Presupuesto.** En esta parte del documento se presentan de manera desglosada y, finalmente conjunta, los diferentes gastos resultantes de la ejecución de este trabajo.

Capítulo 2

Marco teórico

Este documento versa sobre el estudio de un sistema de post-tratamiento de gases, SCR, cuyo fin es la reducción de las emisiones de NO_x . Por consiguiente, antes de comenzar con el propio estudio, conviene introducir aquellos conceptos ligados a los NO_x y al SCR que se consideran necesarios para la comprensión de capítulos posteriores. Adicionalmente, se introducirán los modelos de interacción gota/pared que incluye CONVERGE CFD, describiendo su principio de funcionamiento y aquellos conceptos que, como usuario, han de comprenderse para su adecuado manejo.

2.1 Óxidos de nitrógeno: formación y efectos

Por NO_x se designa de forma genérica a los óxidos de nitrógeno, mayoritariamente óxido nítrico (NO), dióxido de nitrógeno (NO_2) y óxido nitroso (N_2O). En motores principalmente se forma NO, dado que su cinética química es dominante frente a la del NO_2 , aunque, en algunos casos (motores Diesel), aparece una cantidad apreciable de NO_2 debido a la conversión de NO a NO_2 en zonas de baja temperatura y cantidad de oxígeno importante (o dosado relativo (F_r) bajo) [8]. Caso aparte es el N_2O , cuya formación se debe a la existencia de ciertas especies tras el paso por el SCR.

Los principales efectos bioquímicos y fisiológicos de los NO_x son:

- Principales responsables de la lluvia ácida y potencialmente productores de *smog* fotoquímico [9].
- Pueden causar dolores de cabeza, irritación ocular, pérdida de apetito o irritación pulmonar, que aumenta los problemas respiratorios y la tendencia a sufrir enfermedades infecciosas [10].

- El NO participa en la reducción de ozono en la estratosfera facilitando el paso de la radiación solar ultravioleta hasta la superficie terrestre.

A las temperaturas habituales de combustión, el orden de aparición de las especies citadas es el siguiente: $\text{NO} > \text{NO}_2 > \text{N}_2\text{O} > \text{NO}_3 > \text{N}_2\text{O}_3$, aunque generalmente, para modelar la formación de NO_x se suelen considerar los tres primeros [11], que son los descritos en las siguientes subsecciones.

2.1.1 Óxido nítrico (NO)

Existen tres mecanismos principales de formación de NO en la combustión de combustibles convencionales [12], los cuales son:

- Mecanismo térmico.
- Mecanismo súbito, *prompt* o de Fenimore.
- Mecanismo debido al N_2O intermedio.

El mecanismo térmico es el mecanismo más importante a altas temperaturas. Se debe a la oxidación del nitrógeno presente en el aire atmosférico, pues suele ser el oxidante habitual en la mayoría de los sistemas de combustión.



La formación de NO partiendo de nitrógeno ocurre a través de un mecanismo de reacción en cadena propuesto por Zeldovich. En combustiones con dosados pobres, como ocurre en los motores Diesel, las reacciones principales que gobiernan la formación de NO son:



Los átomos de nitrógeno liberados en la reacción mostrada en la Ecuación 2.2b son oxidados a NO principalmente por el radical hidroxilo (OH) a través de la reacción:



El mecanismo súbito, *prompt* o de Fenimore pretende pronosticar las concentraciones de NO en las proximidades de la llama, dado que son mucho mayores que las predichas por el mecanismo térmico. Algunos autores lo atribuyen a la elevada concentración de

radicales oxígeno e hidroxilo que se produce en el seno de la llama. No obstante, Fenimore postuló que el NO formado en llamas con mezclas ricas no puede ser explicado únicamente por la razón anterior puesto que las concentraciones necesarias para alcanzar las velocidades de formación de NO medidas superan significativamente a los valores de equilibrio. Por lo que estableció que en mezclas ricas las reacciones que involucran especies hidrocarbonadas tienen un papel importante en la cinética de formación de NO [8]. Esquemáticamente, el mecanismo se puede describir por las siguientes reacciones:



A diferencia del NO térmico, el NO súbito posee una ligera dependencia con la temperatura. En motores Diesel, la contribución de este mecanismo a la emisión total de NO se estima por debajo del 5% [13].

El mecanismo debido al N_2O intermedio es importante en procesos de formación de NO a bajas temperaturas ($T < 1500$ K) y en la combustión de mezclas pobres ($Fr < 0,8$). Entre los diversos mecanismos propuestos en la bibliografía, uno de los más conocidos es el desarrollado por Lavoie y col. [14], que considera las siguientes reacciones:



2.1.2 Dióxido de nitrógeno (NO_2)

En los motores Diesel, la cantidad emitida de NO_2 puede estar entre un 10 y un 30% [8] de las emisiones totales de NO_x , teniendo además un potencial mayor que el NO para contribuir a la lluvia ácida y al *smog* fotoquímico. Las reacciones principales que desencadenan la formación y destrucción del NO_2 son las siguientes:



La formación de NO₂ ocurre cuando las moléculas de NO, procedentes de zonas de alta temperatura, se difunden o son transportadas hacia regiones más ricas en hidropéroxilo (HO₂). Las reacciones Ecuación 2.6b y Ecuación 2.6c son muy activas a alta temperatura, evitando así la formación de NO₂ en estas condiciones [8]. Así, el balance entre formación y destrucción de NO₂ está básicamente dominando por la temperatura, existiendo una relación inversa entre esta variable y la formación de NO₂.

La proporción de NO₂ en los NO_x emitidos por un motor Diesel se incrementa cuando dicho motor está equipado catalizador de oxidación, cuyo objetivo es oxidar monóxido de carbono e hidrocarburos, provocando la conversión de NO a NO₂.

2.1.3 Óxido nitroso (N₂O)

Como se ha visto en la Subsección 2.1.1, el N₂O contribuye como especie intermedia en la formación de NO. A pesar de que la concentración de este compuesto en los gases de escape es pequeña, el estudio estas emisiones está adquiriendo una gran relevancia en los últimos años debido, por una parte, a su gran efectividad como causante del efecto invernadero (296 veces más efectivo que el dióxido de carbono según su índice *Global Warming Potential* (GWP)) y, por otra, a su capacidad para participar en la química de destrucción del ozono estratosférico [8].

De entre todos los automóviles, los mayores contribuyentes son aquellos que poseen convertidores catalíticos para eliminar los NO_x, donde la concentración de N₂O se ve incrementada en un factor de 3 a 4 dependiendo de la temperatura del catalizador. La razón de ello se encuentra en que la formación de N₂O se debe principalmente a reacciones que involucran a las especies amoníaco (NH₃) y ácido cianhídrico (HCN), donde el amoníaco puede encontrarse tras el paso por el SCR¹.

Las reacciones más importantes de formación de N₂O son las siguientes:



La oxidación del ácido cianhídrico también puede conducir a la formación de amoníaco, que es una especie capaz de formar N₂O a través de la reacción con el radical hidroxilo, generando así la siguiente reacción en cadena:



¹En la Subsección 2.2.2 se profundizará en ello.



Las reacciones Ecuación 2.7d y Ecuación 2.8c son las dos grandes vías de formación de N_2O , siendo la primera de ellas la más importante, reduciéndose la formación de este compuesto a medida que aumenta la temperatura.

2.2 Post-tratamiento de gases de escape

La temperatura de los gases de escape en motores Diesel varía entre 200°C y 600°C . Dichos gases de escape contienen nitrógeno en porcentajes superiores al 75 % en volumen, dióxido de carbono y agua provenientes de la combustión, algo de oxígeno y otros compuestos contaminantes fruto de problemas por combustión incompleta.

Los dispositivos de post-tratamiento de emisiones de escape se instalan en la línea de escape del motor para destruir las sustancias contaminantes previo a su emisión a la atmósfera. Pueden operar con diferentes principios: en ocasiones se pretende activar ciertas reacciones químicas a las relativamente bajas temperaturas existentes en el escape para restablecer el equilibrio químico en los gases de escape. Otros sistemas provocan o aceleran reacciones químicas de oxidación de los hidrocarburos o del hollín y, finalmente, otros sistemas tratan de impedir la salida a la atmósfera de ciertos componentes del escape, acumulándolos y reteniéndolos por vía química y por vía física. Aquí podrían encontrarse algunos sistemas para NO_x y los filtros de partículas.

Los sistemas de post-tratamiento de gases de escape de los motores de combustión interna se pueden clasificar en cinco grupos según su principio de funcionamiento:

- **Reactores térmicos.** Dispositivos encargados de llevar a cabo una combustión a alta temperatura de aquellos productos susceptibles de oxidarse. Actualmente su uso está restringido a la incineración térmica de las partículas atrapadas en los filtros con el fin de evitar su saturación o colmatación, actuando a modo de “regeneradores”.
- **Reactores catalíticos.** El efecto catalítico de ciertos metales y compuestos sobre los gases de escape permite alcanzar el equilibrio químico que no se ha alcanzado previamente por la congelación de las reacciones de oxidación/reducción.
- **Reactores químicos.** Instrumentos que, mediante una reacción química de los gases de escape con algún reactante añadido, permiten la eliminación de alguno de los productos contaminantes presentes. El más conocido es el SCR, que reduce los NO_x en una reacción con amoníaco, en presencia de un catalizador.
- **Filtros químicos.** Sistemas que retienen y acumulan alguno de los productos contaminantes en forma de compuestos químicos.

- **Filtros físicos.** Sistemas que retienen las partículas sólidas y líquidas presentes en el gas de escape.

Dado que el estudio que se realiza en este documento mantiene un vínculo estrecho con el sistema SCR, en las siguientes subsecciones se presenta una descripción de la estructura, funcionamiento y tipos de reactores catalíticos (Subsección 2.2.1) para, a continuación, enfatizar en los reactores químicos (Subsección 2.2.2), donde se ubica el sistema SCR, presentando su principio de funcionamiento, retos que surgen para su correcta operación y avances en la investigación de este dispositivo.

2.2.1 Reactores catalíticos

La inserción de los catalizadores en el sistema de escape busca acelerar las reacciones de oxidación o reducción que no han alcanzado el equilibrio químico a la temperatura de los gases a la salida del cilindro. La presencia de una sustancia catalizadora mejora su rendimiento y les permite funcionar a menores temperaturas que los reactores térmicos [8].

En un catalizador pueden distinguirse tres elementos:

- **Soporte.** Es la estructura del catalizador sobre la que se depositarán las sustancias activas. Los soportes más utilizados actualmente son los de monolito cerámico o metálico. Pese a que existen diferencias entre ellos, ambos monolitos están compuestos de celdillas o paneles donde la relación entre el diámetro medio y la longitud de cada canal debe asegurar una adecuada superficie de contacto gas-catalizador a la vez que el tiempo de residencia de los gases en contacto con el catalizador es suficiente para poder completar la reacción química.
- **Recubrimiento (*washcoat*).** Las sustancias activas se depositan sobre las superficies interiores de los conductos del monolito, ya sea cerámico o metálico, mediante un recubrimiento poroso de óxidos inorgánicos. La función principal del recubrimiento es aumentar la superficie de contacto del gas de escape con los sitios activos.
- **Componente catalizador.** Generalmente suelen usarse metales preciosos como el platino, paladio o rodio, y mezclas entre ellos. La selección de uno u otro vendrá ligada a su uso, pues cada uno de ellos oxida o reduce mejor ciertos compuestos.

Para que las reacciones de oxidación del monóxido de carbono y de los hidrocarburos o de reducción de los NO_x tengan lugar, es necesaria una temperatura suficiente en la superficie interna. En la mayor parte de los catalizadores usados en motores de automoción, sólo por encima de unos 300°C el rendimiento llega a superar el 80 % [8]. En función de la composición del gas de escape un catalizador será de:

- **Oxidación.** Activo frente al monóxido de carbono y los hidrocarburos, es empleado cuando existe suficiente oxígeno en el gas.
- **Reducción.** Activo frente a los NO_x , se utiliza cuando el gas no contiene oxígeno.
- **Tres vías.** Activo frente a los tres tipos de gases, se usa cuando el gas procede de una mezcla estequiométrica.

2.2.2 Reactores químicos

Estos dispositivos tienen por objetivo disminuir la concentración de ciertos productos contaminantes mediante reacciones químicas en los gases de escape, generalmente incluyendo alguna sustancia que se mezcla con dichos gases. Los más usados actualmente son los sistemas de *Selective Catalytic Reduction* para disminuir los NO_x en el escape cuando la reducción catalítica convencional no es viable por abundancia de oxígeno. Los sistemas SCR llevan empleándose desde la década de 1980 en motores estacionarios y marinos con inyección de amoníaco. Recientemente, se han empezado a utilizar en motores de automoción y de otras aplicaciones [8]. Debido a la toxicidad y el riesgo asociado al uso masivo del amoníaco, se utiliza una solución de urea que permite generar el amoníaco necesario en un catalizador [7]. La urea se inyecta normalmente en una solución acuosa al 30-40 % en masa, es un compuesto no tóxico, biodegradable y de bajo coste.

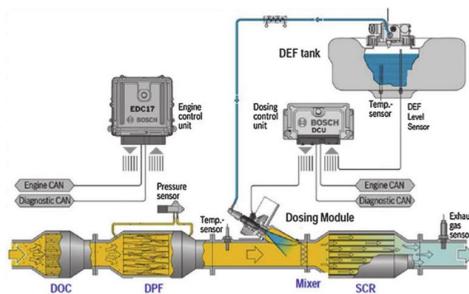
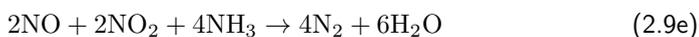
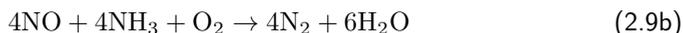


Figura 2.1: Esquema de un catalizador SCR con urea para motores Diesel [15].

En la actualidad, el sistema SCR utilizado es una combinación de diferentes tipos de catalizador, como se esquematiza en la Figura 2.1. La inyección de amoníaco (o de urea) debe controlarse con mucha precisión, pues un exceso produciría emisiones de amoníaco por el escape, por lo que suele instalarse un catalizador de oxidación de seguridad tras el SCR (en la Figura 2.1 no aparece presente) y un sensor de este gas a la salida del escape para prevenir emisiones de amoníaco en los transitorios del motor.

El catalizador SCR contiene una mezcla de óxidos de vanadio y de titanio en un sustrato cerámico. Dependiendo del ratio NO_2/NO_x , pueden tener lugar diferentes reacciones químicas. Todos los caminos posibles están incluidos en la Ecuación 2.9.

La Ecuación 2.9b muestra una reacción SCR estándar [16]. La reacción más lenta está descrita por la Ecuación 2.9c y la Ecuación 2.9d, y ocurre donde se da un exceso de NO₂, resultando N₂O como subproducto. Por otro lado, la Ecuación 2.9e representa una reacción rápida que puede ocurrir si se coloca un catalizador de oxidación aguas arriba del sistema SCR, convirtiendo NO a NO₂.



En el caso de inyectarse una solución de urea-agua, la exposición a altas temperaturas en la línea de escape hace que esta sufra una reacción de termólisis (Ecuación 2.10a) y otra de hidrólisis (Ecuación 2.10b), antes de entrar al SCR con el fin de producir amoníaco:



Lograr la transformación de la solución urea-agua en amoníaco es crítico para alcanzar una eficiencia adecuada y por consiguiente bajas emisiones de NO_x. Para asegurar un adecuado comportamiento del sistema SCR debería asegurarse un suficiente tiempo de residencia y flujo turbulento para obtener una distribución homogénea de amoníaco [17]. Sin embargo, las limitaciones espaciales y temporales pueden resultar parámetros críticos para la consecución de dichos objetivos. Una mala atomización del chorro y un ángulo de inyección inadecuado podría conllevar una mala eficiencia de conversión de amoníaco, lo que podría dar lugar a la formación de una película en la línea de escape aumentando las posibilidades de que se formen depósitos o de que tenga lugar el fenómeno de *ammonia slip*² [18].

Se están llevando a cabo numerosos esfuerzos para lograr una mejor comprensión de la mezcla de la solución de urea-agua con el gas de escape previo a su entrada al SCR. En los próximos párrafos se presentan algunas de las líneas de investigación dentro de este campo.

Desde el punto de vista experimental, Lecompte y col. [19] estudiaron el efecto de diferentes parámetros como la temperatura del gas, la geometría de la línea de escape o la localización de un mezclador y su efecto sobre la homogeneización de la mezcla,

²*Ammonia slip* es un término empleado en la industria para referirse al amoníaco que atraviesa el sistema SCR sin reaccionar.

concluyendo que un mezclador podría reducir la cantidad de partículas presentes a la entrada del sistema SCR. Tang y col. [20], evaluaron la formación de depósitos sólidos a bajas temperaturas de escape visualizando, mediante accesos ópticos, que la descomposición de la urea mantenía una fuerte dependencia con la temperatura de los gases de escape.

Desde el punto de vista computacional, Payri y col. [21] caracterizaron la geometría interna de un inyector de solución urea-agua con el objetivo de poder efectuar una descripción de la atomización, dominada por las bajas presiones de inyección, y de la morfología del chorro, controlada principalmente por la distancia entre las paredes internas del inyector y la relación entre el tamaño de las gotas y el flujo transversal. Drennan y col. [22] llevaron a cabo un estudio para estimar el impacto de dos mezcladores diferentes, concluyendo que el mezclador tiene un efecto positivo para lograr una distribución uniforme de amoníaco a costa de provocar una caída de presión en la línea.

Más próximo a la temática del documento, se puede encontrar el estudio efectuado por Shahariar y Lim [23], que pretende evaluar los fenómenos resultantes de la interacción chorro-pared tales como la generación y el transporte de películas líquidas, la formación de depósitos sólidos y su descomposición térmica, extrayendo las siguientes conclusiones:

- Los depósitos sólidos se generan en la región donde se acumula película líquida.
- A baja temperatura, las gotas poseen una mayor tendencia a adherirse a la pared, lo que puede maximizar la formación de depósitos. En cambio, a elevadas temperaturas de pared, los fenómenos de rebote y rotura térmica ocurrirán, aumentando la tasa de evaporación de gotas.
- La composición química de los depósitos sólidos varía significativamente en función de la temperatura de descomposición. Los principales compuestos encontrados son urea, biuret, ácido cianúrico y melamina.
- La mayoría de los depósitos sólidos se descomponen térmicamente alrededor de los 673K. Pese a que esta temperatura se puede alcanzar en el escape, la descomposición total requiere de elevados periodos de tiempo. Una elevada temperatura de la pared podría reducir significativamente la formación de películas y cristalización de la urea.

En definitiva, el impacto chorro-pared tendrá efectos significativos sobre el comportamiento de un sistema SCR, lo que nuevamente justifica el objetivo perseguido en este documento.

Capítulo 3

Metodología

En el presente capítulo se introducen la geometría y la configuración computacional que han sido empleadas para la elaboración del Trabajo Fin de Grado. Las simulaciones han sido llevadas a cabo a través *software* comercial de Mecánica de Fluidos Computacional CONVERGE CFD v3.0. El estudio que se lleva a cabo en los próximos capítulos, y que inicia en el capítulo presente con la descripción del caso, parte de estudios efectuados previamente por el Instituto CMT-Motores Térmicos. De hecho es una ampliación de la investigación llevada a cabo por Payri y col. [6], cuyo fin es introducir un modelo de película en la pared para contrastar los resultados obtenidos.

3.1 Dominio y geometría

Se comenzará describiendo la geometría simulada, la cual consiste en un recreación de alta fidelidad (3D) de la instalación experimental utilizada por Payri y col. [24]. Dicha instalación puede visualizarse en la Figura 3.1. La cámara de inyección consiste en un hexaedro de 70x70x180 mm, que tiene dos orificios, uno de entrada y otro de salida, una serie de accesos ópticos y una cavidad en el techo donde se sitúa el inyector.

La geometría computacional, Figura 3.2, incluye los dos conductos de entrada y salida presentes en la instalación experimental. Estos conductos, rojo y verde, poseen unos diámetros de 92 mm y 50 mm respectivamente. Para tener en cuenta el posible efecto de las condiciones de contorno se llevó a cabo un estudio de sensibilidad en investigaciones previas [6] determinando que la longitud del conducto de entrada debía ser de 92 mm.

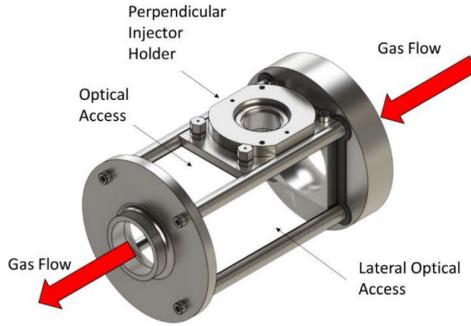


Figura 3.1: Cámara de inyección experimental [24].

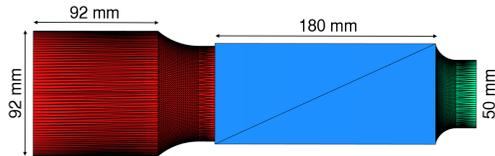


Figura 3.2: Geometría computacional.

3.2 Estrategia de mado

En esta sección se realizará una descripción acerca de la estrategia de mado que se ha seguido. El mado es un aspecto fundamental en cualquier simulación, pues determinará el coste computacional, la precisión y la tasa de convergencia [25].

CONVERGE realiza el mado automáticamente, aunque resulta posible actuar sobre ciertos parámetros en función de lo que sea requerido. En la Tabla 3.1 se presenta la estrategia de mado, que sigue la línea de las simulaciones previamente hechas con esta geometría [6]. De la estrategia abordada, cabe destacar el empleo de las herramientas *Adaptative Mesh Refinement* (AMR) y *Fixed embedding* cuyo fin es refinar la malla en regiones específicas del dominio donde sea necesaria una mayor resolución para alcanzar la precisión suficiente en la solución [26]. El modo en que estas herramientas efectuan el refinamiento viene indicado en la Ecuación 3.1:

$$L_{Refined} = \frac{L_{Base}}{2^p} \quad (3.1)$$

siendo $L_{Refined}$ el tamaño de la celda tras el refinamiento, L_{Base} el tamaño base de la celda y p el número de refinamientos efectuado. AMR permite refinar automáticamente la malla en función de condiciones fluctuantes y en movimiento, en este caso la velocidad y las especies. *Fixed embedding*, por su parte, permite efectuar un refinamiento

en las paredes para incrementar la resolución en el dominio próximo a estas. Otros aspectos vinculados al tratamiento de la pared son indicados en la Subsección 3.3.2.

| Parámetro | Valor |
|---------------------------------|--------------|
| Tipología | Estructurada |
| Tipo de elementos | Hexaedros |
| <i>Adaptive Mesh Refinement</i> | Sí |
| <i>Fixed embedding</i> | Sí |

Tabla 3.1: Estrategia de mallado seguida en las simulaciones.

Para una mejor comprensión de las dos herramientas citadas anteriormente se remite a la Figura 3.3, en la que puede verse un mayor grado de refinamiento en la región próxima a las paredes y en las zonas donde existen fenómenos acusados de transporte, como es el caso de la región donde se encuentra el chorro.

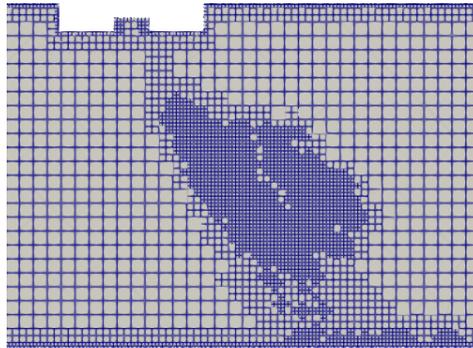


Figura 3.3: Malla de la geometría computacional en la región próxima al inyector.

Adicionalmente se adjunta la Tabla 3.2, en la que se reflejan los valores de los parámetros introducidos en el programa CFD para generar la malla. A excepción del primer parámetro, el resto están vinculados con la herramienta AMR e indican, por orden de aparición, el número máximo de refinamientos a efectuar y la diferencia mínima que ha de darse entre las magnitudes medidas, ya sea velocidad o fracción másica, entre dos celdas consecutivas para que se produzca un refinamiento en dichas celdas.

Resulta oportuno indicar que todos los parámetros insertados en esta sección son heredados de estudios previos. Por lo que, aún siendo consciente de la importancia en la realización de un estudio de sensibilidad de malla, se ha hecho omisión del mismo al aprovecharse el ya realizado con anterioridad [6].

| Parámetro | Valor |
|---|------------------|
| Tamaño base de la celda [m] | 0,003 |
| Número máximo de refinamientos [-] | 2 |
| <i>Sub-grid criterion</i> Velocidad (velocidad) [m/s] | 1 |
| Especies (fracción másica) [-] | 10 ⁻⁷ |

Tabla 3.2: Valores insertados en CONVERGE para generar la malla.

3.3 Modelos y propiedades del fluido

En esta sección se presentarán las propiedades de los fluidos con los que se trabaja y los modelos insertados en las simulaciones efectuadas.

3.3.1 Propiedades del fluido

Cabe destacar la presencia de dos fases en dichas simulaciones: gas y líquido. El enfoque con el que cada una de ellas será tratada se verá en la Sección 3.6.

Un resumen de los principales parámetros que caracterizan la fase gaseosa se incluye la Tabla 3.3. Cabe destacar la consideración de flujo compresible, lo que hace necesario el uso de una ecuación de estado, en este caso la de gas ideal.

| Propiedad del fluido | Valor |
|----------------------------------|---|
| Material | Gas |
| Régimen | Compresible |
| Tipo | Aire ¹ y otras especies ² |
| Ecuación de estado | Gas Ideal |
| Número de Prandtl Turbulento [-] | 0,9 ³ |
| Número de Schmidt Turbulento [-] | 0,71 ⁴ |

Tabla 3.3: Caracterización del fluido gaseoso.

Por otro lado, referente a la fase líquida, se inserta la Tabla 3.4, en la que se presenta un resumen de los principales parámetros que la caracterizan. Especial mención al uso de AdBlue Comercial como fluido, que consiste en una solución urea-agua al 32,5 %.

¹Compuesto por N₂ y O₂ en un 77 % y 23 % (en términos volumétricos) respectivamente.

²En lo que respecta a las especies involucradas en la resolución de la fase gaseosa, los elementos que han sido tenidos en cuenta son los siguientes: C, H, O y N. Estos pueden combinarse y formar, en caso de que las condiciones para ello sean favorables, las especies indicadas a continuación: O₂, N₂, CO₂, H₂O, CO, H₂, (NH₂)₂CO, NH₃, NH₂, H, O, OH, N, NO, NH, HO₂, N₂O, HNCO y NO₂.

³Valor recomendado para flujo confinado en paredes [27].

⁴Valor típico según Tominaga y Stathopoulos [28].

⁵Compuesto por una solución urea-agua, donde las proporciones en términos másicos vienen dadas por 67,5 % de H₂O y 32,5 % (NH₂)₂CO.

| Propiedad del fluido | Valor |
|---------------------------------|-------------------------------|
| Material | Líquido |
| Régimen | Incompresible |
| Tipo | AdBlue Comercial ⁵ |
| Calor de descomposición [kJ/kg] | 3.088 |
| Pre-exponencial [kg/m-s] | 0,42 |
| Energía de activación [kJ/kmol] | 69.000 |

Tabla 3.4: Caracterización del fluido líquido.

3.3.2 Modelo de turbulencia

Se ha recurrido a la formulación RANS $k-\epsilon$ RNG para modelar todas las escalas turbulentas. Esta resuelve las ecuaciones del flujo medio incluyendo el efecto de las fluctuaciones como términos adicionales. Para reproducir la viscosidad turbulenta (ν_t) se emplea el modelo $k-\epsilon$ RNG. Este considera que todas las escalas de la turbulencia contribuyen a la difusión numérica por medio del término de producción, lo cual es introducido por medio de un parámetro adicional en la ecuación de ϵ .

En la Tabla 3.5 se recogen los parámetros introducidos⁶ en la simulación para la modelización de la turbulencia junto con ciertos parámetros referentes al tratamiento de la pared.

| Parámetro | | Valor |
|---|---|-------------------------------|
| | Modelo de turbulencia | RNG $k-\epsilon$ |
| Modelado de la pared | <i>Von Karman's constant</i> [-] | 0,42 |
| | <i>Wall heat transfer model</i> | O'Rourke and Amsden |
| | <i>Near wall treatment</i> | <i>Standard wall function</i> |
| Constantes RANS | y^+ [-] | 5,5 |
| | C_μ [-] | 0,0845 |
| | <i>Reciprocal tke Prandtl</i> [-] | 1,39 |
| | $C_{\epsilon 1}$ [-] | 1,42 |
| | $C_{\epsilon 2}$ [-] | 1,68 |
| | $C_{\epsilon 3}$ [-] | -1 |
| | <i>Reciprocal ϵ Prandtl</i> [-] | 1,39 |
| | β [-] | 0,012 |
| | η_0 [-] | 4,38 |
| | <i>Spray dissipation constant</i> [-] | 0 |
| <i>Drop turbulent dispersion constant</i> [-] | 0,03 | |

Tabla 3.5: Parámetros introducidos para la modelización de la turbulencia.

⁶Valores por defecto [26].

3.3.3 Modelo químico y de combustión

Es necesario implementar un modelo químico para simular la degradación de la urea en amoníaco (Ecuación 2.10a) y la posterior transformación del ácido isociánico en otra molécula de amoníaco (Ecuación 2.10b). El cambio de fase de líquido a vapor se ha simulado con la correlación de Frossling.

La introducción de un modelo de combustión radica en la necesidad de recrear el proceso de hidrólisis por medio del cual el ácido isociánico y el agua, en estado gaseoso, generados se transforman en una molécula adicional de amoníaco y otra de dióxido de carbono. Este proceso se recrea a través del *solver* químico SAGE.

Los parámetros introducidos en estos modelos son heredados del estudio de Payri y col. [6], donde fueron validados con un estudio efectuado por Kim y col. [29].

3.3.4 Modelado del chorro

El proceso de modelar el chorro consta de varios pasos hasta definir completamente el comportamiento del mismo. En las siguientes subsecciones se presentarán los modelos implementados para su reproducción, describiendo su utilidad y haciendo hincapié en aquellos parámetros sobre los que se haya actuado directamente.

3.3.4.1 Modelo de colisiones

Como se verá en la Subsección 3.3.4.3, el inyector posee tres orificios coplanares que provocarán una interacción entre gotas cuando los tres chorros choquen. Para modelar dichas colisiones se hace uso del *No Time Counter* (NTC). De esta forma se consideran tanto la coalescencia como los impactos entre gotas. En la Tabla 3.6 se presentan los parámetros implementados en dicho modelo⁷.

| Parámetro | Valor |
|-------------------------------|--------------------------|
| Modelo de colisión | <i>No Time Counter</i> |
| Modelo de fuerza de arrastre | <i>Dynamic drop drag</i> |
| <i>Dynamic drag var 1</i> [-] | 0,083 |
| <i>Dynamic drag var 2</i> [-] | 10 |
| <i>Dynamic drag var 3</i> [-] | 8 |

Tabla 3.6: Parámetros introducidos para la modelización de las colisiones.

⁷Valores heredados del estudio de Payri y col. [6].

3.3.4.2 Modelo de interacción chorro/pared

Previo a la descripción del modelo de interacción chorro/pared empleado, resulta conveniente introducir todos los modelos y submodelos que incorpora CONVERGE para modelar la interacción chorro/pared. Con tal fin se remite al lector al Apéndice A.

De entre todos los modelos de interacción chorro/pared que presenta CONVERGE se ha optado por un modelo de película en la pared. Concretamente se ha seleccionado el modelo de salpicadura gota/película Kuhnke⁸.

En la Tabla 3.7 se recogen los parámetros introducidos⁹ en la simulación para la modelización de la interacción chorro/pared.

| Parámetro | Valor |
|--|---------------|
| Modelo de salpicadura gota/película | Kuhnke |
| Número de Weber de rebote [-] | 5 |
| Constante de separación [-] | 3 |
| Temperatura crítica de pared ¹⁰ (T^*) [-] | 1,27 |
| Temperatura de ebullición de referencia [-] | Ley de Raoult |

Tabla 3.7: Parámetros introducidos para la modelización de la interacción chorro/pared.

Para validar el modelo de salpicadura gota/película seleccionado, se ha reproducido computacionalmente la instalación experimental de Shahriar y Lim [23] y se ha efectuado una comparación con sus resultados. En dicha instalación, representada en la Figura 3.4, se emplea un inyector comercial de solución urea-agua con tres agujeros montado perpendicularmente a una placa de acero inoxidable, de 150x150 mm y un espesor de 2 mm, a una distancia vertical de 30 mm. Adicionalmente, la placa de acero inoxidable se coloca sobre un plato que permite calentarla.

Por otro lado, en la Figura 3.5 se incluye la recreación computacional de la instalación experimental de Shahriar y Lim [23] que ha sido empleada para llevar a cabo la validación del modelo de salpicadura gota/película.

Las condiciones en las que se efectuó el experimento se presentan en la Tabla 3.8. Pese a la información presente en la Tabla 3.8, existe un elevado nivel de incertidumbre a la hora de seleccionar múltiples parámetros vinculados con la simulación. Ejemplo de ello se encuentra entre la discrepancia que los propios autores tenían entre el gasto másico del inyector y la presión de inyección, que eran incompatibles. Otros problemas se encuentran relacionados con la insuficiente información para caracterizar el inyector¹¹.

⁸Véase la razón de su elección en el Apéndice C.

⁹Valores por defecto [26].

¹⁰Un estudio paramétrico evaluando otro valor de T^* se encuentra en el Apéndice C.

¹¹Con el objetivo de de disipar ciertas dudas con respecto a las características del inyector se recurre a [30], donde se pueden extraer algunos datos adicionales a través de estimaciones o medidas sobre imágenes.

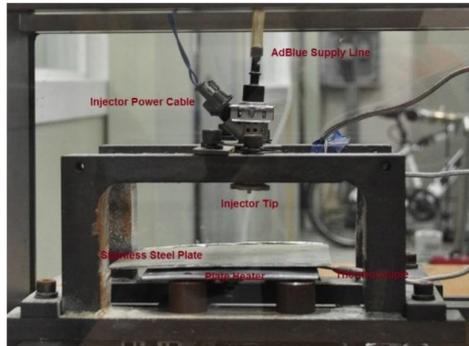


Figura 3.4: Instalación experimental empleada por Shahariar y Lim [23].

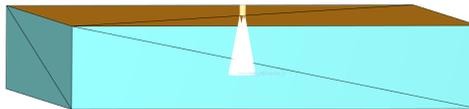


Figura 3.5: Recreación computacional de la instalación experimental empleada por Shahariar y Lim [23].

| Parámetro | Valor |
|---|--------------------------------|
| Fluido de trabajo | AdBlue Comercial ¹² |
| Tiempo de inyección [ms] | 10 |
| Presión de inyección [bar] | 5 |
| Número de orificios del inyector [-] | 3 |
| Diámetro de los orificios [mm] | 0,12 |
| Ángulo de apertura del chorro ¹³ [°] | 21,5 |
| Altura del inyector ¹⁴ [mm] | 30 |
| Temperatura de la placa [K] | 313 |

Tabla 3.8: Condiciones experimentales [23] y características del inyector [30].

La validación del modelo de salpicadura gota/película pasa por replicar los resultados obtenidos por Shahariar y Lim [23] en lo que respecta a la penetración y las distancias radial y axial tras el impacto con la pared inferior. Dado que el objetivo de esta subsección es la validación del modelo de salpicadura gota/película, se deja para el Apéndice B una explicación detallada de qué son las distancias radial y axial, cómo se efectúa la medida de estas distancias en las simulaciones realizadas y qué criterios se han de tomar para su correcta medida. Dado que los criterios son fundamentales tanto para la medida de las distancias como de la penetración, se hace un paréntesis en esta subsección para introducirlos.

Criterios para la definición de la penetración y las distancias radial y axial

Para definir la penetración se suele recurrir al criterio de tanto por ciento. Este consiste en comenzar a capturar gotas del chorro a partir de la zona más alejada del punto donde fue inyectado y calcular el porcentaje de masa que las gotas atrapadas suponen respecto del total inyectado. Así, se van capturando cada vez gotas más cercanas al punto de inyección hasta englobar una masa que sea igual o superior a un tanto por ciento respecto del total. Entre los criterios más extendidos se encuentra el criterio del 99 %, aunque otros que también pueden ser empleados son los del 95 % o 90 %.

Dado que Shahariar y Lim [23] no ofrecen mayor definición de las distancias radial y axial que la que pueda ser interpretada a través de la Figura B.1, para la validación del modelo de salpicadura gota/película se han evaluado dos criterios distintos:

- **Tanto por ciento sobre el total de la masa de las parcelas.** Este criterio es equivalente al empleado para la penetración, solo que en este caso la referencia no se encuentra en el punto de inyección, sino que está en el eje de simetría del inyector o en la pared inferior de la geometría en función de si se mide la distancia radial o axial respectivamente. Una descripción más exhaustiva del principio de medida con este criterio se explica en el Apéndice B.
- **Parcela más alejada.** Se basa en seleccionar la parcela más alejada al elemento de referencia y definir la distancia radial o axial como la distancia que hay de esa parcela al elemento de referencia. El principio de medida del criterio del tanto por ciento puede adaptarse a este caso particular. Nuevamente se referencia al Apéndice B para más información.

Desde el punto de vista del autor de este trabajo, es el criterio del tanto por ciento el que se considera como más consistente y por tanto será el usado en un inicio. Particularmente, se aplicará el criterio del 99 % en las medidas de la penetración y de las distancias.

¹²Compuesto por una solución urea-agua, donde las proporciones en términos másicos vienen dadas por 67,5 % de H₂O y 32,5 % (NH₂)₂CO.

¹³Estimado a partir de medidas efectuadas en [30].

¹⁴Respecto de la placa.

Pasando a los resultados de la validación, en la Figura 3.6 se presentan las curvas de penetración del caso con el que se pretende validar el modelo de salpicadura gota/película y dos simulaciones en las que se inyecta a la presión indicada de 5 bar, pero en un caso en una atmósfera a presión ambiente, y en otro caso en una atmósfera presurizada a 3,5 bar. Como se puede observar en la Figura 3.6, todas las curvas arrancan con una pendiente similar, pero es a partir del primer tercio de la gráfica cuando el caso en el que se inyecta en una atmósfera presurizada a 3,5 bar presenta una curva de penetración con un comportamiento más similar al experimental. Por ende, y ante la carencia de información adicional sobre las condiciones experimentales, no se puede descartar la posibilidad de la existencia de una contrapresión¹⁵.

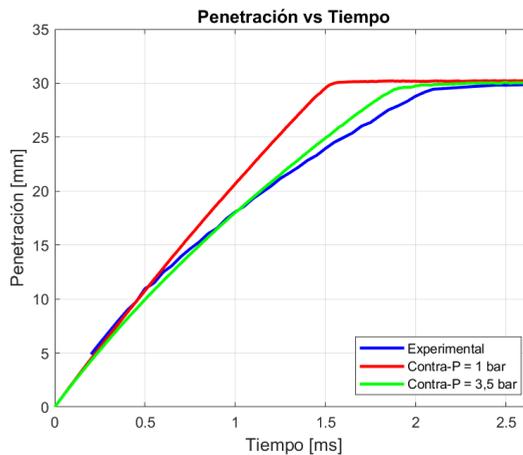


Figura 3.6: Comparación de las curvas de penetración entre los resultados experimentales y computacionales para la validación del modelo de salpicadura gota/película.

Por otro lado se encuentra la Figura 3.7, en la que se representan las distancias radial y axial del caso con el que se pretende validar el modelo de salpicadura gota/película y las dos simulaciones previamente descritas aplicando el criterio del tanto por ciento¹⁶. Como puede observarse en la Figura 3.7, tanto la distancia radial como axial en las dos simulaciones planteadas distan en gran medida de los resultados experimentales. De hecho, la tónica de los resultados computacionales es a subestimar ambas distancias, siendo esta diferencia más significativa cuando se considera una contrapresión de 3,5 bar.

La tendencia apreciable en la Figura 3.7 muestra la existencia de un *trade off* entre intentar replicar la curva de penetración y replicar las distancias radial y axial. Si bien

¹⁵Múltiples intentos se han hecho para intentar replicar la curva de penetración sin la imposición de una contrapresión, todos ellos sin éxito. Cabe destacar, de entre todos, pruebas a diferentes presiones de inyección, modificación del modelo de turbulencia o reorientación del inyector.

¹⁶Para más información véase el Apéndice B.

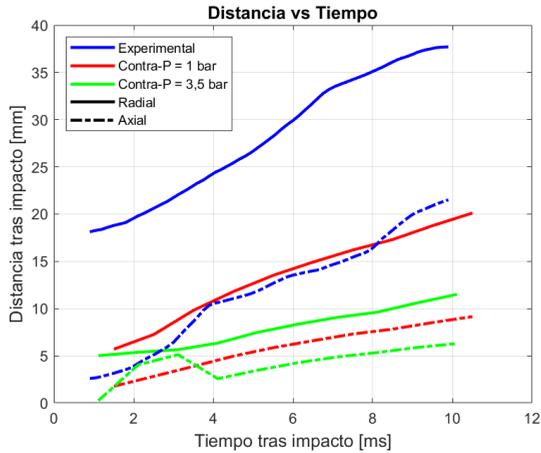


Figura 3.7: Comparación de las curvas de distancia radial y axial entre los resultados experimentales y computacionales para la validación del modelo de salpicadura gota/película aplicando el criterio del tanto por ciento.

un ambiente presurizado permite un buen solape entre la curva de penetración experimental y computacional (véase la Figura 3.6), durante todo el tiempo en que se mide, dicho ambiente presurizado subestima significativamente las distancias representadas en la Figura 3.7. Al contrario ocurre cuando se inyecta a presión ambiente, aunque las distancias en ambos casos están significativamente subestimadas.

Dado que se carece de información sobre cómo se han evaluado las distancias radial y axial en [23], podría intentarse cambiar el criterio con el que se efectúan dichas medidas. Es así como la Figura 3.8 representa la misma información que la Figura 3.7, pero en esta ocasión, aplicando el criterio de la parcela más alejada. Atendiendo a la Figura 3.8 se observa una tendencia que era de esperar: ambas distancias aumentan respecto al criterio del tanto por ciento. Observando la distancia radial, se concluye que esta continúa siendo subestimada durante toda la simulación, volviendo a ser el caso en el que se considera una contrapresión de 3,5 bar el que efectúa una mayor subestimación. No obstante, se observa que es este caso el que presenta una pendiente más similar a la del caso experimental. Por otro lado, si se presta atención a la distancia axial se observa que si bien ambas simulaciones muestran resultados ciertamente análogos, el caso en que se considera una atmósfera presurizada a 3,5 bar presenta una curva que se solapa con la experimental en gran parte de la duración de la medida.

Ante la no completa satisfacción con los resultados obtenidos, se ha recurrido a la realización de una serie de simulaciones adicionales con el objetivo de intentar replicar de forma más fidedigna los resultados experimentales de Shahariar y Lim [23], especialmente las distancias radial y axial. Ejemplos de ello son la utilización del modelo de salpicadura gota/película Bai-Gosman, que mostró un comportamiento muy alejado de

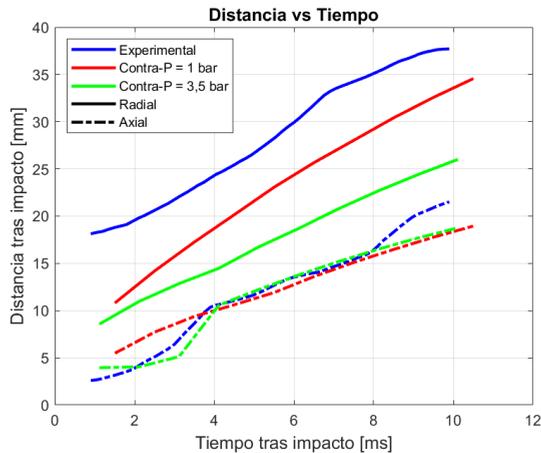


Figura 3.8: Comparación de las curvas de distancia radial y axial entre los resultados experimentales y computacionales para la validación del modelo de salpicadura gota/película aplicando el criterio de la parcela más alejada.

la realidad; o la modificación de la *Turbulent Kinetic Energy*, con un impacto opuesto sobre ambas distancias. Pese a no alcanzar mejores resultados que los ya plasmados, dichos estudios han permitido extraer una serie de conclusiones que pueden resultar de interés. Por ello, un recopilatorio de los resultados más significativos se encuentra en el Apéndice C.

Así, y pesar de no lograr una réplica exacta de los resultados experimentales de Shahariar y Lim [23], se decide dar por validado el modelo de salpicadura gota/película extrayendo las siguientes conclusiones:

- Para lograr una representación fidedigna de la curva de penetración sería necesario conocer más información del inyector, del proceso de atomización y de las condiciones de contorno. Si bien el inicio parece ser igual en todos los casos simulados, la segunda parte de la curva de penetración experimental presenta un efecto que bien podría deberse a fenómenos vinculados con el proceso de atomización o con la existencia de una contrapresión. Por consiguiente, y dado que con los escasos datos disponibles modificar aspectos de la atomización no asegura una mejora en la precisión de la simulación, la opción de una contrapresión no es descartable.
- Los resultados para las distancias radial y axial han sido representados en sintonía con el modo en que Shahariar y Lim [23] lo hicieron. Dicha forma de representación puede derivar a ciertas deducciones erróneas, por lo que a continuación se enumeran una serie de comentarios respecto a dicho modo de graficar:

- Shahariar y Lim [23] comenzaban a medir el tiempo desde el inicio de la inyección, pero las distancias radial y axial empezaban a registrarse pasado un tiempo significativo desde que el chorro hubiera impactado con la pared. No obstante, resulta más adecuado comparar los resultados justo a partir del instante en que se produce el impacto pues, atendiendo a la Figura 3.6, se puede comprobar que el momento en que el chorro impacta con la pared difiere en función de la existencia o no de una atmósfera presurizada, siendo bastante semejante en el caso de una contrapresión de 3,5 bar.
 - El modo de representación de Shahariar y Lim [23] provoca la aparición de un *offset* en el primer punto de la distancia axial que en realidad es inexistente. Justo tras el impacto con la pared, las primeras gotas se encuentran en contacto con ella, por lo que su distancia a esta sería nula. No ocurre así con la distancia radial, pues la propia apertura que sufre el chorro en su recorrido hasta la pared comienza a alejarlo del eje de simetría del inyector desde un inicio.
- A la hora de intentar replicar los resultados experimentales existe una incompatibilidad entre lograr un buen solape con la curva de penetración y con las curvas de distancias radial y axial. Mayores presiones de inyección o menores contrapresiones mejoran los resultados en términos de distancias pero provocan un alejamiento de la curva de penetración con respecto de la experimental y viceversa. Nuevamente, esto puede deberse al proceso de atomización del chorro, pues este podría provocar que las gotas se alejaran más del eje de simetría del inyector y por ello, tras el impacto, la distancia radial medida sea superior a la alcanzada en las simulaciones planteadas. Esto, combinado con el desconocimiento del criterio que Shahariar y Lim [23] han empleado para medir las distancias radial y axial podría ser la causa de la discrepancia de resultados.
- Pese a lo dicho en el punto anterior, la tendencia observada en la medida de las distancias concuerda con la experimental, no así los valores de dichas distancias.

3.3.4.3 Modelado del inyector

Una vez ha sido validado el modelo de salpicadura gota/película, se presentan en la Tabla 3.9 las principales características del inyector empleado en la simulación. Este consiste en tres agujeros coplanares desfasados 120° uno del otro.

Para recrear el carácter transitorio del inyector y del chorro se ha extraído un perfil de inyección, que se encuentra representado en la Figura 3.9, a partir de datos experimentales [31] y se ha implementado en el modelo computacional. Adicionalmente, se introduce una distribución de las gotas inyectadas por medio de la distribución Rosin-Rammler. El parámetro de dicha distribución, y presente en la Tabla 3.9, fue obtenido por Payri y col. [6] por medio de una validación con unos resultados experimentales a

una distancia de 35 mm del inyector para asegurar que la ruptura primaria y secundaria habían tenido lugar. Otro modelo que ha sido empleado para reproducir la atomización primaria de las gotas más grandes y su consiguiente atomización secundaria es el modelo de ruptura Kelvin-Helmholtz-Rayleigh-Taylor (KH-RT) [32]. No obstante, las presiones de inyección empleadas dan lugar a números de Weber inferiores al umbral para que la atomización secundaria tenga lugar ($We_i = 12$ [33]), de modo que esta no debería jugar un papel importante.

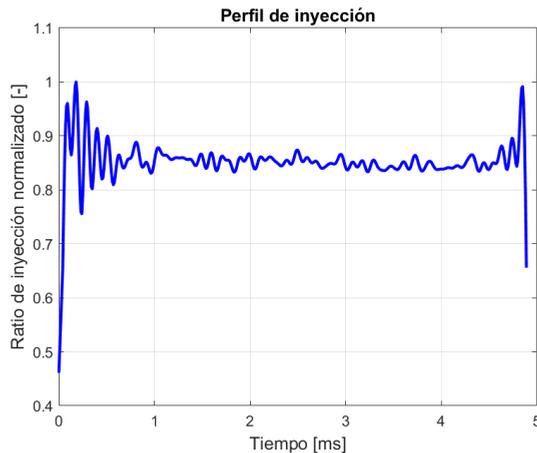


Figura 3.9: Perfil de inyección empleado en la simulación.

| Parámetro | Valor |
|--|------------------|
| Fluido de trabajo | AdBlue Comercial |
| Presión de inyección [bar] | 4/6/8 |
| Perfil de inyección | Experimental |
| Número de orificios del inyector [-] | 3 |
| Diámetro de los orificios [mm] | 0,15 |
| Sauter Mean Diameter (SMD) [μm] | 43,5 |
| Ángulo de apertura del chorro [$^\circ$] | 21,3 |
| Tiempo de inyección [ms] | 5 |
| Temperatura de inyección [K] | 300 |
| Distribución de gotas | Rosin-Ramler |
| Parámetro de la distribución de gotas [-] | 3 |
| Modelo de ruptura de gotas | KH-RT |

Tabla 3.9: Características del inyector empleado en la simulación.

3.4 Condiciones de contorno

Antes de comenzar a definir las condiciones de contorno que han sido impuestas, resulta conveniente introducir una imagen de la geometría computacional, Figura 3.10, en la que se incluyen todos los contornos que componen dicha geometría.

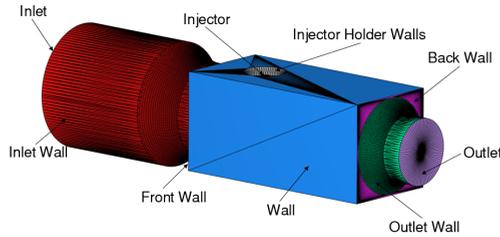


Figura 3.10: Contornos de la geometría computacional.

En la Tabla 3.10 se muestran las condiciones de contorno¹⁷ impuestas en los contornos "Inlet", "Outlet" y "Wall". Este último engloba al resto de contornos dado que están configurados como paredes fijas con las mismas características.

| Contorno | Parámetro | Valor |
|--------------------|---|------------------|
| Inlet | Gasto másico [kg/h] | 40/200 |
| | Temperatura [K] | 623,15 |
| | Especies | Aire |
| | <i>Turbulent Kinetic Energy</i> ¹⁸ [-] | 0,01 |
| | <i>Turbulent Dissipation</i> [m] | 0,018 |
| Outlet | Presión [Pa] | 101.325 |
| | Temperatura [K] | 623 |
| | Especies | Aire |
| | <i>Turbulent Kinetic Energy</i> [-] | 10 ⁻⁶ |
| | <i>Turbulent Dissipation</i> [m] | 10 ⁻⁴ |
| Wall ¹⁹ | Tipo de movimiento | Estacionario |
| | <i>Absolute roughness</i> [m] | 0 |
| | <i>Roughness constant</i> [-] | 0,5 |

Tabla 3.10: Condiciones de contorno.

¹⁷Valores heredados del estudio de Payri y col. [6].

¹⁸Se inserta en términos de tanto por uno.

¹⁹La información relacionada con el modelo de pared fue descrita en la Tabla 3.5.

3.5 Condiciones iniciales

Todos los contornos descritos en la Sección 3.4 se encuentran agrupados dentro de una única región. Para inicializar la región se recurre a la herramienta *Mapping variables*, que permite partir de una solución previamente obtenida. Esta solución consiste en una simulación con las mismas condiciones de contorno que las descritas en la Sección 3.4 con la particularidad de que se omite la inyección. Siguiendo el trabajo de Payri y col. [6], el dominio computacional para esta primera simulación se inicializará con los valores indicados en la Tabla 3.11.

| Parámetro | Valor |
|---|---------|
| Temperatura [K] | 623,15 |
| Presión [Pa] | 101.325 |
| <i>Turbulent Kinetic Energy</i> [m ² /s ²] | 1 |
| <i>Turbulent Dissipation</i> [m ² /s ³] | 100 |
| Especies | Aire |

Tabla 3.11: Condiciones iniciales.

El objetivo que se persigue realizando la simulación inicial es conseguir un estacionario; es decir, obtener condiciones iniciales realistas para el chorro ²⁰. Para asegurar que se alcanza un estacionario se recurre a insertar una línea de monitorización en dirección transversal al flujo compuesta por cinco puntos ubicados en el plano de simetría de la geometría computacional. La posición de dicha línea se muestra en la Figura 3.11.

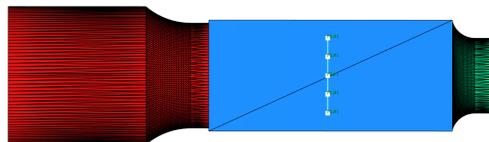


Figura 3.11: Posición de la línea de monitorización dentro de la geometría computacional.

Debido a la propia naturaleza del flujo y a la posición de ciertos puntos, que pueden verse afectados por la proximidad a las paredes o por la presencia de la cavidad del inyector aguas arriba, las variables evaluadas para confirmar que se alcanza un estacionario son la presión estática²¹ y la velocidad en dirección axial.

En la Figura 3.12 se muestra la evolución temporal de las variables monitorizadas para un gasto másico a la entrada de 40 kg/h. Como se puede visualizar, ambas variables

²⁰Dado que existen dos gastos másicos diferentes a la entrada, será necesario obtener dos “estacionarios” diferentes para inicializar las simulaciones correctamente.

²¹Debido a las diferencias despreciables entre puntos monitorizados, se representa únicamente la presión estática en el punto central de la línea de monitorización.

dejan de oscilar una vez transcurridos unos 60 ms del inicio de la simulación, tendiendo hacia valores asintóticos en el final de la simulación.

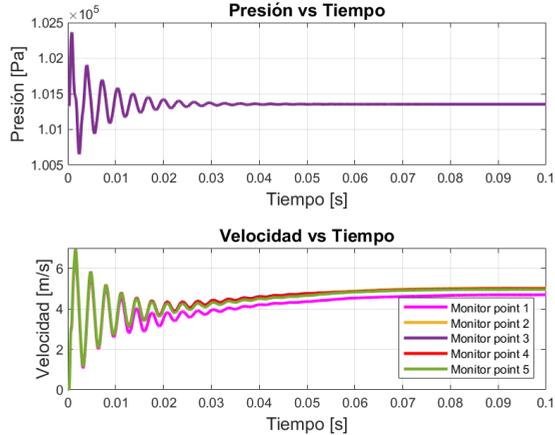


Figura 3.12: Evolución temporal de la presión y la velocidad en los puntos monitorizados para un gasto másico a la entrada de 40 kg/h.

En la Figura 3.13 se muestra la evolución temporal de las variables monitorizadas para un gasto másico a la entrada de 200 kg/h. Su aspecto es análogo al de la Figura 3.12 salvo por dos particularidades. En primer lugar, las oscilaciones parecen estabilizarse antes que para el caso de 40 kg/h, en esta ocasión en torno a los 25 ms, a excepción de la velocidad en el primer punto de monitorización. La segunda particularidad mantiene una estrecha relación con la permanencia de oscilaciones en el primer punto de monitorización. Dicho fenómeno se atribuye a las perturbaciones en el flujo que provoca la presencia de la cavidad del inyector y que son transmitidas aguas abajo del mismo hasta ser captadas por el punto de monitorización. Parece ser, que a diferencia del caso de 40 kg/h, estas oscilaciones no parecen disiparse antes de alcanzar dicho punto resultando en el carácter oscilatorio que la velocidad presenta. Sin embargo, como las oscilaciones son menores al 1% y constantes en el tiempo, se puede asumir estacionario.

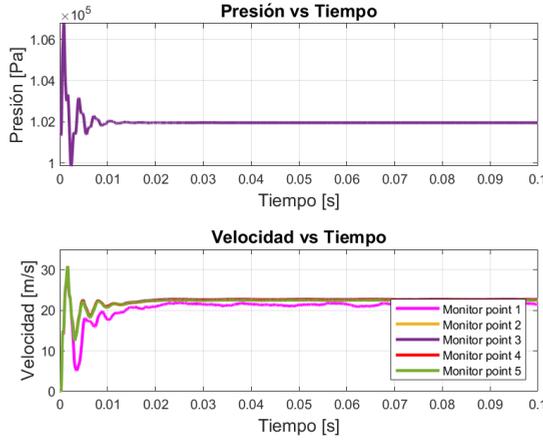


Figura 3.13: Evolución de la presión y la velocidad en los puntos monitorizados para un gasto másico a la entrada de 200 kg/h.

3.6 Esquemas de discretización y aspectos numéricos

Con respecto al modelo computacional, cabe destacar la necesidad de resolver dos fases: gas y líquido. La fase gaseosa será tratada desde un enfoque Euleriano, mientras que la fase líquida será abordada desde un enfoque Lagrangiano.

La fase gaseosa viene gobernada por las ecuaciones de continuidad, momento, energía y las ecuaciones de transporte de las especies implicadas. Dichas expresiones se encuentran recogidas, en el orden en que han sido citadas, en la Ecuación 3.2:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S_{mass} \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_{mom} \quad (3.2b)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j e}{\partial x_j} = -P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_{cond} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_e \quad (3.2c)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_{spec} \quad (3.2d)$$

En la Ecuación 3.2a, ρ hace referencia a la densidad del flujo, t es la variable tiempo, u es el vector velocidad, x_i representa las coordenadas espaciales y S_{mass} se corresponde con el término fuente. Las variables adicionales en la Ecuación 3.2b son la presión, denotada por P , el tensor de esfuerzos viscosos, representado por la variable σ_{ij} y el

término fuente S_{mom} . La Ecuación 3.2c incluye la variable e , que denota la energía interna específica y que desempeña un papel importante en dicha ecuación. El resto de términos son: K_{cond} que se refiere al coeficiente de conductividad térmica, T que se atribuye a la temperatura, D que es el coeficiente de difusión másica, h_m que se corresponde a la entalpía de la especie m e Y_m que representa la fracción másica de la especie m . Además, tanto la Ecuación 3.2c como la Ecuación 3.2d incluyen sus términos fuente correspondientes, S_e y S_{spec} .

Respecto al esquema de discretización empleado, se ha optado por el Método de Volúmenes Finitos (FVM) que consiste en dividir el volumen de control en pequeños volúmenes o celdas con el fin de aplicar las ecuaciones descritas en la Ecuación 3.2 a cada una de ellas obteniendo una aproximación del comportamiento del fluido en el interior de la geometría computacional.

Los parámetros más relevantes referentes a los esquemas de discretización y aspectos numéricos se plasman en la Tabla 3.12. Conviene remarcar que los valores introducidos para configurar el *solver* atienden a las recomendaciones de CONVERGE [26].

| Parámetro | Valor |
|--|-------------------------------------|
| Tipo de <i>solver</i> | Transitorio <i>Density-based</i> |
| Esquema del <i>solver</i> | PISO ²² |
| Esquema de discretización del término convectivo | <i>Flux blending</i> |
| <i>Solver</i> lineal | SOR ²³ |

Tabla 3.12: Esquemas de discretización y aspectos numéricos.

Por otro lado, para la resolución de la fase líquida se ha recurrido al *Discrete Droplet Model* (DDM), en el que las gotas de líquido se representan mediante parcelas²⁴, que son un conjunto de gotas que comparten las mismas propiedades (velocidad, tamaño, densidad, etc.). El movimiento de dichas partículas viene controlado por la Ecuación 3.3:

$$\rho_l V_d \frac{dv_i}{dt} = F_{d,i} \quad (3.3)$$

en la que las fuerzas gravitacionales han sido despreciadas y donde V_d es el volumen de la gota, v_i es la componente i de la velocidad de la gota y $F_{d,i}$ representa la la componente i de la fuerza de arrastre que actúa sobre la gota, que considera la

²²Uso acompañado del algoritmo Rie-Chow dado que CONVERGE coloca las especies transportadas en el centro de las celdas, lo que puede originar un desacoplamiento de la presión y la velocidad [26].

²³Empleado en todas las ecuaciones salvo *Wall dist*, donde se emplea el método BiCGSTAB [26].

²⁴El número de parcelas introducidas atiende a las recomendaciones de CONVERGE [26] en función del tamaño de celda y la masa inyectada.

velocidad relativa entre la gota y el gas. Dicha fuerza es calculada teniendo en cuenta su distorsión con la analogía de Taylor [34] que permite obtener el coeficiente de arrastre de acuerdo con la forma de cada gota²⁵.

3.7 Estudio paramétrico

Una vez descrita la estrategia que ha sido abordada para llevar a cabo la configuración del caso, se plantea el estudio paramétrico efectuado en el trabajo y cuyos resultados se plasman en el Capítulo 4. Dicho estudio se ha basado en generar una matriz de casos donde los parámetros que han sido variados, y que ya han sido introducidos en secciones previas, se recogen en la Tabla 3.13.

Esta matriz de casos fue simulada previamente por Payri y col. [6], pero en dicha ocasión, dentro de los modelos de interacción chorro/pared, el modelo considerado fue el de desvanecimiento.

| Parámetro | Valor | | |
|---------------------------------|----------------------|-------|-------|
| Presión de inyección [bar] | 4 | 6 | 8 |
| Gasto másico de inyección [g/s] | 0,799 | 0,961 | 1,100 |
| Tiempo de inyección [ms] | 5 | | |
| Ángulo de inyección [°] | 30/40/50/60/70/80/90 | | |
| Gasto másico de aire [kg/h] | 40/200 | | |
| Temperatura del aire [K] | 623 | | |

Tabla 3.13: Condiciones de la inyección y del flujo necesarias para la realización del estudio paramétrico.

El ángulo de inyección es el ángulo que forma el eje de simetría del inyector con eje axial de la geometría computacional. Por consiguiente, un ángulo de 0° implicaría que el inyector está orientado en la misma dirección que el flujo entrante, mientras que un ángulo de 90° significa que el chorro se inyecta perpendicularmente a dicho flujo. Para despejar cualquier duda sobre cómo se mide dicho ángulo se inserta la Figura 3.14. En ella se presentan dos de los ángulos de inyección que han sido evaluados durante la realización del estudio paramétrico.

²⁵Los aspectos vinculados al modelado del chorro se han presentado en la Subsección 3.3.4

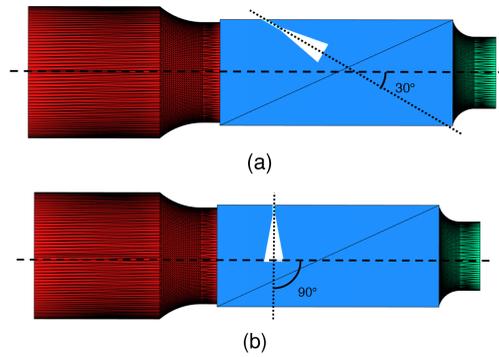


Figura 3.14: Representación gráfica del ángulo de inyección: (a) 30°, (b) 90°.

Capítulo 4

Resultados

En el presente capítulo se presentan los resultados obtenidos tras la realización del estudio paramétrico descrito en la Sección 3.7. Estos son comparados con los de Payri y col. [6] a fin de establecer las consecuencias que conlleva el uso de un modelo de película en la pared, concretamente el modelo de salpicadura gota/película Kuhnke.

Así, este capítulo se estructura en tres secciones. Primero, en la Sección 4.1 se muestra la cantidad de amoníaco generado dentro del dominio computacional. Posteriormente, en la Sección 4.2 se presenta un método para estimar la tasa de generación de amoníaco y los resultados referentes a la misma. En último lugar, en la Sección 4.3 se recogen una serie de resultados vinculados con la formación de películas líquidas en ciertos contornos de la geometría computacional.

4.1 Generación de amoníaco

La cantidad de amoníaco generado dentro del dominio computacional ha sido extraída de las simulaciones efectuadas con el propósito de ver la influencia de las variables que son modifican en el estudio paramétrico previamente introducido y comparar los resultados entre las simulaciones que poseen un modelo de desvanecimiento de gotas y las que introducen un modelo de película en la pared.

4.1.1 Generación de amoniaco en función del ángulo de inyección

Se comenzará evaluando la influencia del ángulo de inyección en la generación de amoniaco. La Figura 4.1 presenta la evolución temporal del amoniaco generado en función del ángulo de inyección para una presión de inyección y gasto másico de aire dados. En primer lugar, se describirá el aspecto que poseen las curvas en las que se emplea el modelo de desvanecimiento de gotas y, posteriormente, se mostrarán las diferencias que conlleva la introducción del modelo de película en la pared.

La evolución temporal que siguen todas las curvas con el modelo de desvanecimiento de gotas es equivalente. En un primer momento, la cantidad de amoniaco dentro del dominio computacional aumenta con el paso del tiempo hasta alcanzar un máximo. A partir de dicho instante, la cantidad de amoniaco comienza a disminuir a medida que este abandona el dominio¹. Respecto a la influencia del ángulo de inyección, a medida que este se reduce, el pico de amoniaco generado es inferior y el instante en que se produce dicho pico disminuye, algo completamente lógico si se tiene en cuenta que una orientación del inyector más coaxial al flujo de aire hará que el fluido inyectado y sus subproductos salgan antes del dominio. Para concluir con la descripción de las curvas del modelo de desvanecimiento de gotas, se observa que las tasas de generación de amoniaco son similares para ángulos de inyección de 60 a 90° y para ángulos de 30 a 50°, lo que indica que una orientación del inyector en la misma dirección que el flujo de aire provocará que la urea necesite de un mayor tiempo para degradarse en sus subproductos.

Pasando a las diferencias que introduce el modelo de película en la pared, conviene comenzar resaltando que la cantidad de amoniaco generado aumenta en un orden de magnitud. Esto podía preverse dado que una cantidad significativa de parcelas impactan con las paredes de la geometría, algo que con el modelo de desvanecimiento provoca su desaparición del dominio y por consiguiente, hace que ya no puedan contribuir a la formación de amoniaco. Por otro lado, se puede contemplar cómo con el modelo de película en la pared el instante en que se produce el pico en la cantidad de amoniaco generado se retrasa con respecto al modelo de desvanecimiento de gotas, asociando dicho pico con la salida de partículas del dominio, siendo visible en este caso solo para los ángulos más coaxiales (30, 40 y 50°). Las diferencias vienen justificadas por el tiempo de permanencia dentro del dominio; dado que, al no producirse una desaparición de las parcelas al tocar con las paredes de la geometría, estas permanecen más tiempo dentro de esta y por consiguiente, se dispone de más tiempo para la conversión de la urea en amoniaco. En último lugar, se observa que, si bien en el modelo de desvanecimiento de gotas la cantidad máxima de amoniaco generado se da cuando el ángulo de inyección es 90°, en el modelo de película en la pared parece intuirse que será el ángulo de 60° el que de lugar a dicha cantidad máxima. No obstante, esto podría no ser así si el instante en el que se produce el pico de amoniaco

¹La forma en que el amoniaco abandona el dominio depende del modelo considerado, pero se discutirá más adelante.

generado para ángulos superiores a 60° es considerablemente superior al instante en el que se produce este pico a 60° . Esto se debe a que en el modelo de película en la pared la tasa de generación de amoníaco aumenta a medida que aumenta el ángulo de inyección hasta un ángulo de 60° , donde si se continúa aumentando este ángulo, la tasa vuelve a decaer. Como se verá en la Sección 4.2, con el modelo de desvanecimiento de gotas también existen diferencias entre el ángulo de inyección y la tasa de generación de amoníaco resultante. En dicho modelo la tasa máxima de generación se da a ángulos superiores que con el modelo de película en la pared. De modo que la combinación de una de las tasas de generación más elevadas junto con el tiempo más tardío en producirse el pico en la cantidad generada de amoníaco resulte en que el pico de amoníaco generado se de cuando el ángulo de inyección es 90° .

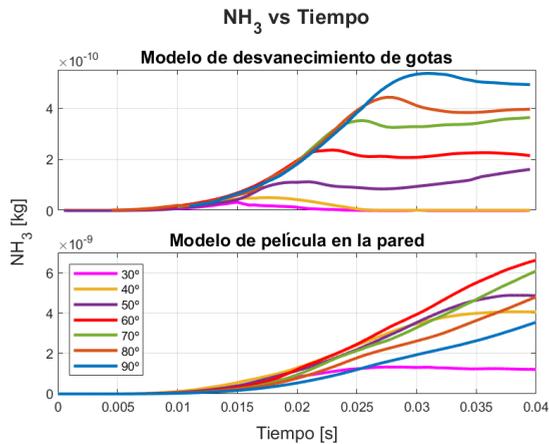


Figura 4.1: Evolución temporal de la masa de amoníaco en el dominio computacional en función del ángulo de inyección, para una presión de inyección de 6 bar y un gasto másico de aire de 40 kg/h.

4.1.2 Generación de amoníaco en función de la presión de inyección

Siguiendo con la misma metodología que en la Subsección 4.1.1, se presenta la Figura 4.2, donde se muestra la evolución temporal del amoníaco generado y presente en el dominio computacional en función de la presión de inyección para dos ángulos de inyección y un gasto másico de aire dados.

Comenzando por el aspecto que poseen las curvas que componen la gráfica en la que se emplea el modelo de desvanecimiento de gotas se puede apreciar cómo independientemente del ángulo de inyección, un aumento en la presión de inyección repercute en

un aumento de la tasa de generación de amoniaco². Cuando se inyecta con un ángulo de 60°, incrementar la presión de inyección conlleva un incremento en la cantidad máxima de amoniaco generado. No obstante, una situación particular ocurre cuando el ángulo de inyección es 90°. En este caso, incrementar la presión de inyección de 6 a 8 bar no repercute en un incremento de la cantidad máxima de amoniaco generado. Por el contrario, reducirla de 6 a 4 bar sí reduce dicho valor máximo, algo que va en sintonía con los resultados contemplados para un ángulo de 60°.

Evaluando las diferencias que introduce el modelo de película en la pared, y dejando de lado aquellas que ya fueron comentadas para la Figura 4.1, la diferencia más significativa es que con este modelo la cantidad máxima de amoniaco generado parece no aumentar si la presión se incrementa de 6 a 8 bar cuando el ángulo es 60°, cosa que ocurría cuando el ángulo de inyección era de 90° en el modelo de desvanecimiento de gotas³.

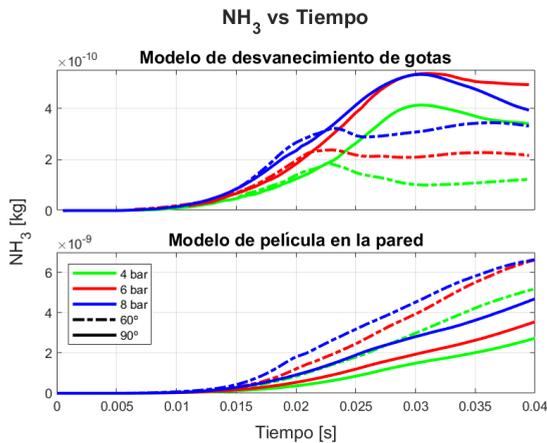


Figura 4.2: Evolución temporal de la masa de amoniaco en el dominio computacional en función de presión de inyección, para dos ángulos de inyección y un gasto másico de aire de 40 kg/h.

Para comprender si la causa de que mayores presiones de inyección den lugar a mayores cantidades de amoniaco generado se encuentra en el incremento en la cantidad de masa que es inyectada⁴ se recurre a la Figura 4.3. En dicha figura se representa la misma información que en la Figura 4.2 pero, en este caso, dividiendo la masa de amoniaco por la masa inyectada, que evidentemente difiere de una presión a otra.

²A simple vista la tendencia parece ser esa, pero ciertas particularidades se comentan en la Sección 4.2.

³Resulta curioso que este fenómeno ocurra para aquellos ángulos que poseen las tasas de generación más elevadas. Una posible justificación se expondrá en la Subsección 4.2.2.

⁴Aumentar la presión de inyección supone un aumento de la masa inyectada dado que el tiempo de inyección permanece constante.

Las tasas de generación en ambos modelos no se ven alteradas, puesto que no dependen de la masa inyectada. Sin embargo, la cantidad de amoníaco generado debe ser proporcional a la cantidad de masa inyectada, algo que es comprobable si se revisa la Figura 4.3, puesto que las curvas presentan diferencias muy pequeñas.

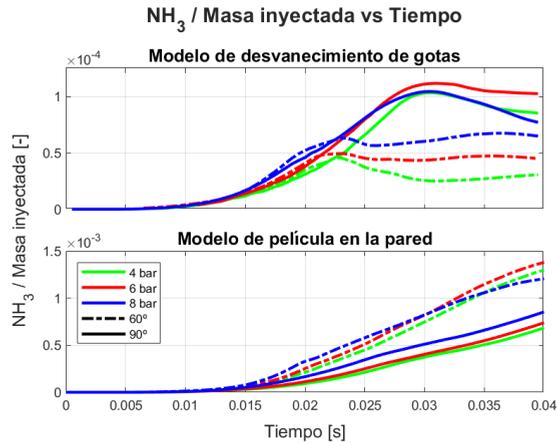


Figura 4.3: Evolución temporal de la masa de amoníaco en el dominio computacional, adimensionalizada con la masa inyectada, en función de la presión de inyección, para dos ángulos de inyección y un gasto másico de aire de 40 kg/h.

4.1.3 Generación de amoníaco en función del gasto másico de aire

Estudiados los efectos que tienen tanto el ángulo como la presión de inyección, falta por evaluar el efecto que tiene el gasto másico de aire sobre la cantidad generada de amoníaco. Para ello se incluye la Figura 4.4, en la que se presenta la evolución temporal del amoníaco generado, y presente en el dominio, en función del gasto másico para un ángulo de inyección y tres presiones de inyección dadas.

Recurriendo a la misma metodología que en la Subsección 4.1.1 y en la Subsección 4.1.2, se inicia describiendo el aspecto de la gráfica en la que se emplea el modelo de desvanecimiento de gotas. Independientemente de la presión de inyección, un aumento en el gasto másico de aire provoca que la degradación de la urea en amoníaco tenga lugar antes, de manera que el pico en la cantidad máxima de amoníaco generado también ocurra antes. Unido a lo anterior, el amoníaco generado desaparece antes del dominio, sin dejar rastro transcurridos 15 ms tras el inicio de la inyección. La razón de que todos los tiempos se reduzcan se vincula a la mayor inercia de los gases calientes, lo que provoca que el intercambio térmico por medio de efectos convectivos entre las gotas de la solución urea-agua y los gases calientes se acentúe. Adicionalmente, los cortos tiempos de residencia de la solución urea-agua en el dominio provocan que la máxima cantidad de amoníaco generado sea significativamente inferior a los casos

con un gasto másico de aire de 40 kg/h. Otra característica que se puede observar es la escasa influencia que la presión de inyección ejerce sobre la cantidad de amoniaco generado cuando el gasto másico es de 200 kg/h, siendo esta influencia despreciable si se compara con la desempeñada por este mismo parámetro cuando el gasto másico es de 40 kg/h.

Si se comparan los resultados obtenidos con el modelo de película en la pared con los anteriores, dos grandes diferencias pueden ser observadas. En primer lugar, el instante en que se produce el pico en la cantidad de amoniaco generada se encuentra desplazado hacia tiempos ligeramente superiores. En segundo lugar, el tiempo que permanece el amoniaco dentro del dominio es el doble que con el modelo de desvanecimiento de gotas. Ambas diferencias se deben al no desvanecimiento de las gotas al impactar con las paredes de la geometría, lo que implica un mayor tiempo de residencia de las gotas en el dominio. De hecho, un gasto másico tan elevado provoca que una parte significativa de las gotas impacten con las caras de la geometría que conectan la cámara experimental con el cilindro de salida⁵, lo que en el modelo de desvanecimiento de gotas supone que gran parte de las gotas de solución urea-agua susceptibles de degradarse en amoniaco desaparezcan, mientras que con el modelo de película en la pared no lo hacen. De esta forma se logran justificar las diferencias entre los tiempos de residencia y las cantidades de amoniaco generadas.

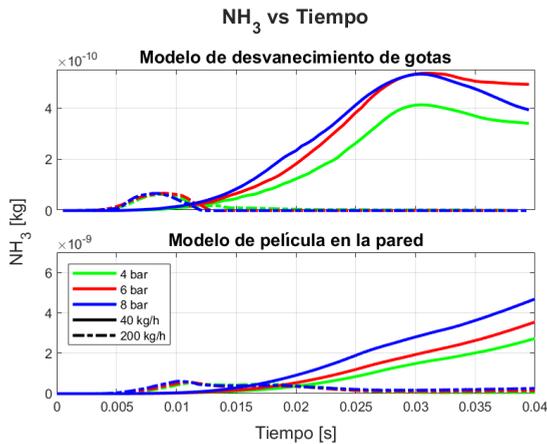


Figura 4.4: Evolución temporal de la masa de amoniaco en el dominio computacional en función del gasto másico de aire, para un ángulo de inyección de 90° y tres presiones de inyección.

⁵En la Sección 4.3 se discute detenidamente sobre ello.

4.2 Tasa de generación de amoniaco

Debido a las restricciones de espacio y al poco tiempo disponible para lograr la degradación de la urea en la geometría computacional, se ha considerado que la tasa de generación de amoniaco puede ser una variable con cierto interés. En consecuencia, dicha tasa ha sido calculada para todas las combinaciones posibles de ángulo de inyección, presión de inyección y gasto másico de aire.

Para el cálculo de la tasa de generación de amoniaco se ha considerado la existencia de un intervalo temporal, previo al punto donde la cantidad generada de amoniaco se hace máxima, en el que la evolución temporal del amoniaco generado puede asumirse como lineal. Para conocer la tasa de generación se ha llevado a cabo una regresión lineal en el intervalo descrito con el fin de extraer la pendiente resultante. Este proceso arranca en un instante temporal próximo al momento en que se produce el pico en la cantidad de amoniaco generado y busca el intervalo temporal más grande que proporcione el mejor ajuste lineal. Para facilitar la comprensión de lo descrito previamente, una representación gráfica de la zona considerada como lineal y del ajuste efectuado para el caso con un ángulo de inyección de 50° , una presión de 6 bar y un gasto másico de 40 kg/h se muestra en la Figura 4.5.

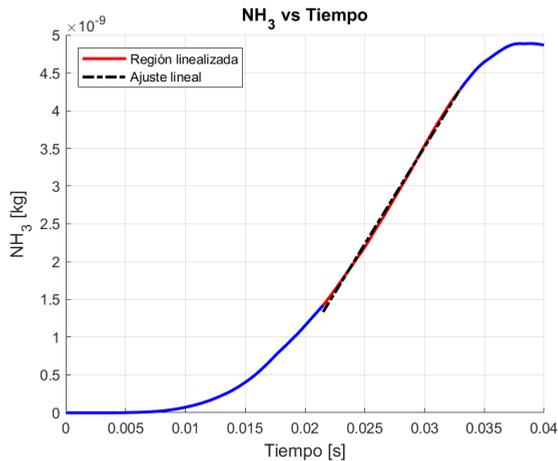


Figura 4.5: Proceso de linealización de la tasa de generación de amoniaco.

Para asegurar el mejor ajuste lineal posible se recurre a evaluar el coeficiente de determinación⁶ (R^2) para todas las combinaciones planteadas, alcanzando en todas ellas un valor de R^2 superior a 0,99⁷.

Descrito el proceso de cálculo de la tasa de generación de amoníaco se da lugar a presentar los resultados obtenidos en esta sección empleando para ello una estrategia que será equivalente a la planteada en la Sección 4.1. Por consiguiente, se describirán por separado los efectos que cada uno de los parámetros evaluados tienen sobre las curvas en las que se emplea el modelo de desvanecimiento de gotas y, al acabar con cada uno de los parámetros, se presentarán las diferencias que introduce el modelo de película en la pared.

No obstante, antes de empezar conviene indicar la que puede ser la diferencia más significativa entre ambos modelos. Al igual que ocurría con la cantidad de amoníaco generada, la tasa de generación de amoníaco cuando se utiliza el modelo de película en la pared es un orden de magnitud superior que con el modelo de desvanecimiento de gotas. El motivo radica en que la cantidad de solución urea-agua que permanece en el interior del dominio es superior y, por consiguiente, hay una mayor cantidad de urea susceptible de degradarse en amoníaco.

4.2.1 Tasa de generación de amoníaco en función del ángulo de inyección

Se comenzará evaluando el efecto del ángulo de inyección sobre la tasa de generación de amoníaco. Para ello se representan las curvas correspondientes a una presión de 6 bar y un gasto másico de 40 kg/h en la Figura 4.6. En primer lugar, se puede comprobar cómo las tasas de generación de amoníaco sufren un grave descenso cuando los ángulos son inferiores a 60°, lo que reafirma la idea, ya introducida en la Subsección 4.1.1, de que existen dos grupos de ángulos que comparten tasas de generación con un orden de magnitud similar. Por otro lado, si se parte del ángulo de inyección con menor tasa de generación, que es el de 30°, un aumento en el ángulo de inyección da lugar a un aumento en la tasa de generación hasta alcanzar un máximo, que se da cuando el ángulo de inyección es 80°. A partir de dicho valor, continuar aumentando el ángulo de inyección provocará un descenso en la tasa de generación. Cabe resaltar que el óptimo aparece en una zona “plana”, aunque se verá en subsecciones posteriores que la presión de inyección y el gasto másico de aire influyen en el aspecto de dicha región. Esta zona

⁶El coeficiente de determinación es la proporción de la varianza total de la variable explicada por la regresión. Este coeficiente refleja la bondad del ajuste de un modelo a la variable que pretender explicar [35].

⁷Salvo para un caso, en el que se inyecta con una presión de 4 bar, con un ángulo de 30° y con un gasto másico de 200 kg/h, donde el valor de R^2 es 0,9883.

permite jugar ligeramente con el ángulo de inyección en busca de mayores tiempos de residencia que favorezcan la formación de una mayor cantidad de amoniaco⁸.

Prosiguiendo con las diferencias que la inserción del modelo de película en la pared muestra frente al modelo de desvanecimiento de gotas se puede observar cómo la tendencia que sigue la curva es análoga a la descrita para el modelo de desvanecimiento de gotas con la salvedad de que, en este caso, el máximo se da cuando el ángulo de inyección es 60°. Debido a la posición del máximo, las tasas de generación mínimas se dan para ángulos extremos (30 y 90°), lo que hace difícil prever qué ángulo generará una mayor cantidad de amoniaco en el dominio, pues existe un *trade off* entre tasa de generación y tiempo de residencia, como ya se adelantó en la Subsección 4.1.1. Al igual que ocurría con el modelo de desvanecimiento de gotas, la presencia de una zona “plana” en la región del ángulo máximo vuelve a ser palpable.

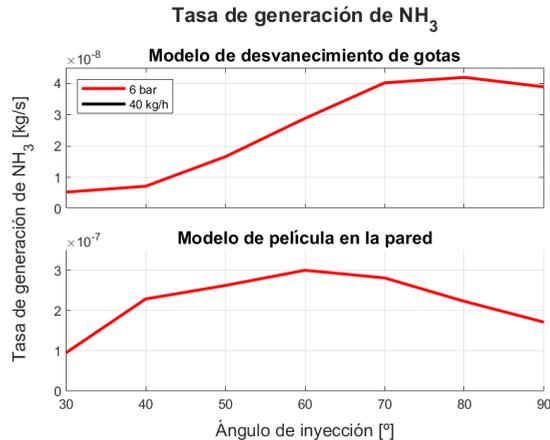


Figura 4.6: Efecto del ángulo de inyección en la tasa de generación de amoniaco.

4.2.2 Tasa de generación de amoniaco en función de la presión de inyección

A continuación, se da paso al estudio del efecto de la presión de inyección sobre la tasa de generación de amoniaco. En la Figura 4.7 se grafican las curvas correspondientes a un gasto másico de 40 kg/h. Atendiendo a las curvas en las que se inserta el modelo de desvanecimiento de gotas, se puede observar que el ángulo de inyección de 80° es también el responsable de producir la tasa de generación de amoniaco máxima cuando la presión de inyección es de 4 u 8 bar. En la Figura 4.2 ya se razonó que,

⁸En la Figura 4.1 ocurre un ejemplo de ello. El ángulo de 90° ofrece una tasa de generación ligeramente inferior, pero debido a su mayor tiempo de residencia, es el ángulo de inyección que genera una mayor cantidad de amoniaco.

independientemente del ángulo de inyección, un aumento en la presión de inyección repercutía en un aumento de la tasa de generación de amoniaco. No obstante, se puede contemplar cómo esto no es completamente cierto cuando el ángulo de inyección es 90° y las presiones de inyección son 6 y 8 bar, pues para dichas condiciones las curvas se cruzan. Esto podría justificar lo ocurrido en la Figura 4.2, donde se vio que incrementar la presión de inyección de 6 a 8 bar no repercutía en un incremento de la cantidad máxima de amoniaco generado. La razón de que para estas condiciones la tasa de generación se comporte de una forma tan particular puede deberse al modelo de desvanecimiento de gotas, pues en la configuración de 90° el chorro está orientado perpendicularmente a la pared inferior y muchas gotas desaparecen al impactar con ella sin tener el tiempo suficiente para degradarse en amoniaco. Además, una mayor presión de inyección implica una mayor velocidad de inyección⁹, de forma que las gotas del chorro se verán deflectadas en menor medida por el flujo transversal y, por tanto, habrá un mayor número de gotas impactarán con la pared y desaparecerán tras dicho evento.

Por otro lado, el uso del modelo de película en la pared presenta un comportamiento análogo con la particularidad, ya discutida, del ángulo de inyección óptimo. A medida que aumenta la presión de inyección, el incremento en la tasa de generación de amoniaco se va reduciendo, lo que deja intuir la existencia de una presión de inyección a partir de la cual no se logren mejoras en dicha tasa. Esto puede deberse al aumento tanto en la densidad de gotas del chorro como en la cantidad de movimiento que estas poseen. Esta combinación resulta en un chorro demasiado denso que no es capaz de alcanzar una interacción suficiente con el flujo gaseoso que permita que las gotas del chorro adquieran las condiciones suficientes para degradarse en amoniaco. También se observa el fenómeno de cruce entre las curvas de 6 y 8 bar, aunque en este caso cuando el ángulo de inyección ronda los 60° . Esto vuelve a ir en sintonía con lo observado en la Figura 4.2, donde parecía que si se dejaba “correr” más tiempo la simulación podría darse el caso de que el amoniaco generado a 6 bar fuera superior que el generado a 8 bar. El comportamiento particular de este caso podría deberse a la insuficiente interacción chorro/gas comentada previamente, de tal forma que la tasa de generación de amoniaco podría alcanzar un valor asintótico que no mejoraría ni modificando el ángulo ni aumentando la presión. De hecho, es la presión de 8 bar en ambos modelos de interacción gota/pared la que da lugar a curvas con máximos en la tasa de generación ubicados en zonas muy poco sensibles a variaciones en el ángulo de inyección.

⁹A razón de $P_{inj} \propto \sqrt{u_{inj}}$.

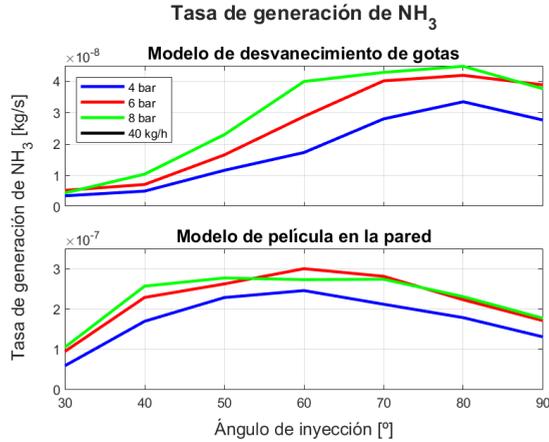


Figura 4.7: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección en la tasa de generación de amoniaco.

4.2.3 Tasa de generación de amoniaco en función del gasto másico de aire

La Sección 4.2 se concluirá describiendo el efecto que ejerce el gasto másico de aire sobre la tasa de generación de amoniaco. En esta ocasión se acude a la Figura 4.8, donde se presentan todas las combinaciones posibles que han sido evaluadas. Con respecto al modelo de desvanecimiento de gotas, se observa que al aumentar el gasto másico de aire se produce una disminución generalizada en las tasas de generación de amoniaco. Esta tendencia se encuentra relacionada con el menor tiempo de residencia de las gotas dentro del dominio a causa de la mayor inercia que el flujo gaseoso posee. Esto provoca que la cantidad de amoniaco generado sea inferior cuando el gasto másico de aire es de 200 kg/h, como se indicó en la Subsección 4.1.3. No obstante, para ángulos bajos, como es el caso de 30 y 40°, las tasas de generación han aumentado respecto del caso de 40 kg/h debido a que la mayor inercia del gas contribuye a acelerar la degradación de la urea. Por otro lado, se observa que las tasas de generación a elevados gastos másicos de aire no son muy dependientes ni del ángulo ni de la presión de inyección, siguiendo las mismas tendencias que para los casos con un gasto de 40 kg/h pero de forma menos acentuada. Esto indica que los factores dominantes en la degradación y evaporación de la solución urea-agua cuando los gastos másicos de aire son muy elevados son el tiempo de residencia de las gotas dentro del dominio y la interacción entre el flujo gaseoso y el chorro. Con gastos tan elevados el efecto del desvanecimiento de gotas a 90° no es tan perceptible puesto que la disminución en la tasa de generación no es tan significativa debido a que la mayor inercia del gas arrastra a las gotas hacia la salida evitando que impacten con las paredes.

Para acabar se harán una serie de comentarios referentes a las diferencias que aparecen con la implementación del modelo de película en la pared, cuyo efecto se puede observar en la Figura 4.8. En primer lugar, a elevados gastos máscicos la dependencia con el ángulo de inyección parece ser mayor que con el modelo de desvanecimiento de gotas repitiéndose de nuevo la particularidad de que el ángulo de inyección óptimo está en torno a los 60°. Respecto a la dependencia con la presión, un gasto máscico de 200 kg/h de lugar a un comportamiento opuesto al esperado en la tasa de generación. En estas condiciones aumentar la presión de inyección disminuye la tasa de generación de amoniaco para todos los ángulos de inyección salvo para el caso de 90°. La razón de este fenómeno podría encontrarse en la incapacidad del chorro para interactuar con el flujo máscico de aire y así lograr la degradación de la urea. Esto no ocurre así con el modelo de desvanecimiento, puesto que tras el impacto con la pared la cantidad de parcelas en el dominio se reduce y por ello las gotas que permanecen poseen una mayor facilidad para interactuar con el flujo gaseoso y alcanzar las condiciones necesarias para su degradación. Cuando el ángulo de inyección es de 90°, el mayor tiempo de residencia¹⁰ permite a las gotas disponer de algo más de tiempo para englobar aire y con ello producirse la conversión de una mayor cantidad de urea en amoniaco. Dicho todo esto, cabe destacar que la dependencia de la tasa de generación de amoniaco con la presión a gastos máscicos de aire elevados es inferior en el modelo de película que en el modelo de desvanecimiento.

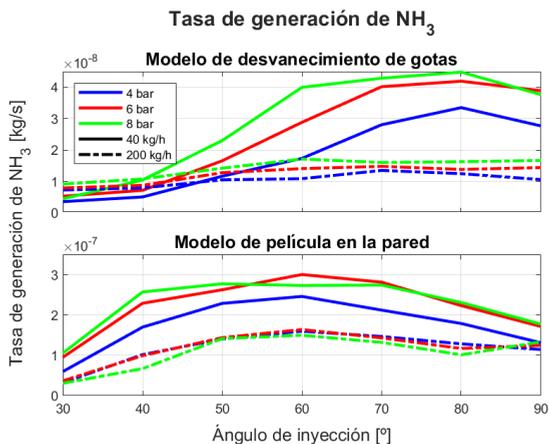


Figura 4.8: Efecto del ángulo de inyección, de la presión de inyección y del gasto máscico de aire en la tasa de generación de amoniaco.

¹⁰Debido a que se inyecta perpendicular al flujo gaseoso.

4.3 Formación de películas

Tras haber descrito los efectos que tiene la introducción del modelo de película en la pared sobre la cantidad generada de amoniaco y la tasa de generación de amoniaco, la Sección 4.3 persigue el fin de comprobar la relación existente entre las tres variables que han sido modificadas en el estudio paramétrico y la formación de películas en las paredes de la geometría computacional.

4.3.1 Evolución temporal de la masa de película líquida acumulada

Para poder acometer este estudio de una forma coherente resulta necesario conocer el aspecto de la evolución temporal de la masa de película líquida acumulada en las paredes de la geometría computacional. Con tal fin se introduce la Figura 4.9, que presenta dicha evolución temporal en función del ángulo de inyección para una presión de inyección y gasto másico de aire dados. Como se puede observar, la película líquida acumulada en las paredes aumenta de forma lineal con el tiempo hasta alcanzar un valor límite a partir del cual la masa acumulada en la película ni aumenta ni disminuye.

Prestando atención al efecto que ejerce el ángulo de inyección sobre esta evolución temporal se pueden observar dos fenómenos muy evidentes. En primer lugar, aumentar el ángulo de inyección provoca una aparición más temprana de la película líquida, cosa que es de esperar puesto que cuanto más perpendicular se encuentre el inyector respecto de la pared inferior, menos distancia tendrá que recorrer el chorro hasta impactar con la pared. En segundo lugar, a ángulos de inyección bajos, un aumento de dicho ángulo provoca que la película acumulada tras el transitorio también se vea incrementada. No obstante, la película es máxima para ángulos de 40 y 50°. A partir de dichos valores continuar incrementando el ángulo de inyección se traduce en una reducción de la película acumulada. Para comprender esta tendencia hay que remontarse a lo ya descrito sobre los modelos de película en la pared en la Sección A.2. A ángulos de inyección bajos, el chorro ha de recorrer una mayor distancia antes de impactar con alguna de las paredes de la geometría computacional de forma que las gotas pierden velocidad y, por consiguiente, el número K ¹¹ será también bajo. Recurriendo a la Figura A.1, una combinación de un bajo número K y una baja T^* da lugar a la deposición de la gota en una película líquida. Podría pensarse que, por esa lógica, debería ser el ángulo de inyección más pequeño el que formara la mayor cantidad película¹², pero también hay que tener en cuenta la presencia de un gasto másico de aire que arrastra a las gotas fuera del dominio computacional, de modo que gran parte de las gotas del chorro cuando el ángulo de inyección es de 30° abandonan el dominio sin impactar con las paredes¹³. A medida que el ángulo de inyección crece, el número de gotas que impactan con las paredes también lo hace hasta alcanzar un

¹¹Proporcional al número de Weber.

¹²Cosa que podría tener cabida en ausencia de flujo gaseoso cruzando el dominio computacional.

¹³Véase la Figura 4.10, que será abordada más adelante.

valor asintótico. Sin embargo, como las gotas del chorro poseen un mayor número K dado que no han perdido tanta cantidad de movimiento, la interacción gota/pared da lugar otro resultado, como puede ser salpicadura o ruptura térmica en caso de que T^* sea elevado.

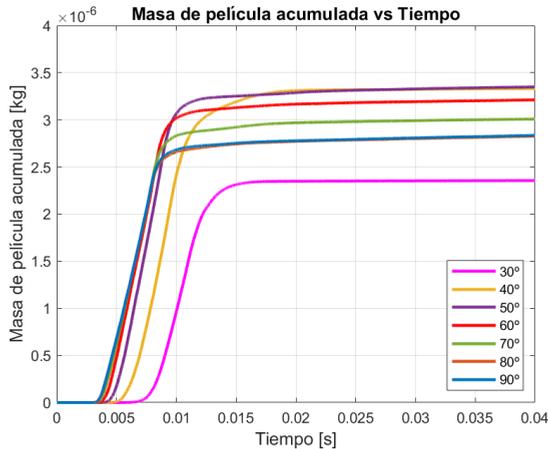


Figura 4.9: Evolución temporal de la masa de película líquida acumulada en las paredes de la geometría computacional en función del ángulo de inyección para una presión de inyección de 6 bar y un gasto másico de aire de 40 kg/h.

El aspecto de la evolución temporal de la masa de película líquida acumulada en las paredes de la geometría computacional es análogo para todos los casos, con las particularidades que caben esperar cuando se modifique la presión de inyección o el gasto másico de aire. Así, presiones de inyección superiores provocarán que el impacto con la pared sea más temprano. Por otro lado, gastos másicos superiores pueden provocar impactos con paredes que antes no ocurrían, que otros impactos no sucedan o que dichos impactos tengan lugar en otro instante.

No obstante, cuándo se produce el impacto con cada una de las paredes de la geometría no es de interés en este estudio. Es por ello, que en las subsecciones posteriores se recurrirá a graficar los valores de la masa, ya sea la total que impacta con la pared o la que se adhiere a esta formando una película, que se alcanzan tras el transitorio.

4.3.2 Masa total que impacta en las paredes

Antes de evaluar cómo cada una de las variables del estudio paramétrico influye en la masa que se queda en las paredes en forma de películas líquidas, resulta interesante detenerse y observar cómo dichas variables influyen en la masa total que impacta con dichas paredes.

En la Figura 4.10 se muestra el efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la masa total del chorro que impacta en las paredes de la geometría computacional para dos gastos máxicos de aire dados. Atendiendo al mapa de contornos correspondiente a un gasto máxico de 40 kg/h se puede observar que para una misma presión de inyección la masa que impacta en las paredes posee un orden de magnitud similar para todos los ángulos de inyección a excepción del ángulo de 30°. Cuando el ángulo es 30° dicha masa es muy inferior al resto de casos debido a que el flujo cruzado arrastra a las gotas al exterior del dominio sin que muchas lleguen a interactuar con las paredes. Por otro lado, incrementar la presión de inyección aumenta la masa total que impacta para todos los ángulos de inyección evaluados. Esto era de esperar puesto que, para un mismo tiempo de inyección, la masa inyectada aumenta con la presión. Sin embargo, este incremento en los impactos podría deberse a que las gotas se ven menos deflectadas por el flujo gaseoso a medida que aumenta la presión de inyección. Para despejar dudas se recurre a la Figura 4.11, que será descrita más adelante. Volviendo a la Figura 4.10 y comparando ambos gastos máxicos de aire, se puede contemplar una diferencia fundamental. Un mayor gasto máxico de aire provoca que la masa que impacta en las paredes sea más dependiente del ángulo de inyección. Esto es lógico, pues un mayor gasto máxico de aire provoca una mayor deflexión del chorro de tal forma que muchas gotas abandonan el dominio sin previo impacto con las paredes incluso a ángulos elevados.

Para disipar las dudas surgidas con el efecto de la presión de inyección se inserta la Figura 4.11, donde se adimensionaliza la Figura 4.10 con la masa inyectada. De esta forma se concluye que para un gasto máxico de aire de 40 kg/h el aumento en la masa total que impacta con las paredes al aumentar la presión de inyección se debe, principalmente, al aumento de la masa inyectada. No obstante, esto no es así cuando el gasto máxico de aire es de 200 kg/h. En dicho caso, el intercambio de cantidad de movimiento entre el chorro y el flujo gaseoso parece tener un mayor peso a la hora de justificar el aumento en la masa total que impacta con las paredes cuando se incrementa la presión de inyección. Esto se traduce en que aumentar la presión de inyección provoca que el chorro sufra una menor deflexión y, por consiguiente, un mayor número de gotas impacten con la pared. Tal es el caso, que a elevados ángulos y presiones de inyección casi el total de la masa inyectada interacciona en algún momento con alguna de las paredes. A pesar de lo todo lo comentando, el efecto de la presión de inyección a gastos máxicos de aire elevados posee una mayor influencia a medida que aumenta el ángulo de inyección, siendo poco relevante a bajos ángulos de inyección.

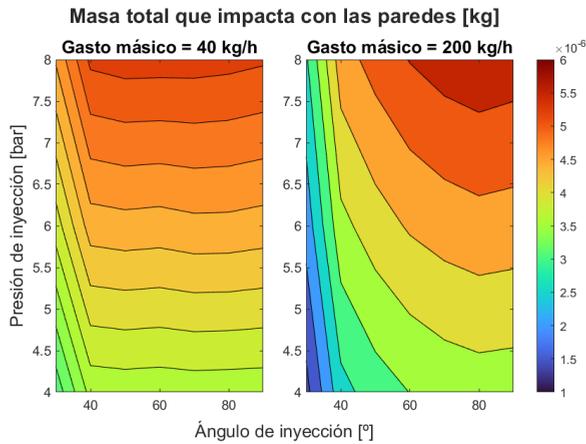


Figura 4.10: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la masa total del chorro que impacta en las paredes de la geometría computacional para dos gastos másicos de aire dados.

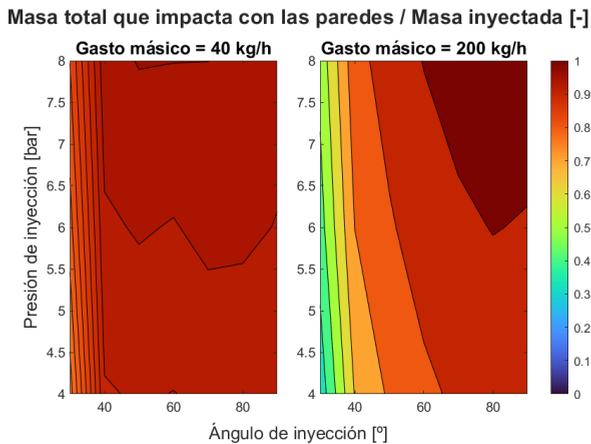


Figura 4.11: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la masa total del chorro que impacta en las paredes de la geometría computacional adimensionalizada con la masa inyectada para dos gastos másicos de aire dados.

4.3.3 Masa de película acumulada

En esta subsección se va a evaluar la influencia que los parámetros modificados a lo largo del estudio ejercen sobre la masa de película líquida acumulada en las paredes, además de ver cuánta masa se acumula en tres diferentes superficies que forma el volumen de control. Para acometer dicho estudio se ha calculado la masa total de película en el cómputo global del dominio y en otras tres regiones¹⁴, que son aquellas donde más película se forma.

La Figura 4.12 muestra el efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional para un gasto másico de 40 kg/h. Comenzando por la masa acumulada en forma de películas en el cómputo total de la geometría, se puede observar cómo, independientemente de la presión de inyección, la masa acumulada aumenta con el ángulo de inyección hasta alcanzar un valor máximo a partir del cual, continuar aumentando el ángulo de inyección conlleva una reducción en la masa acumulada. Salvo para 8 bar, donde la tendencia no es tan evidente, para el resto de presiones se cumple que la mínima cantidad de película se genera a un ángulo de inyección de 30°.

La posición donde se genera la máxima y la mínima cantidad de película para una presión de inyección dada viene determinada por dicha presión. Mayores presiones de inyección provocan un desplazamiento del máximo hacia menores ángulos de inyección, lo que conlleva que en el caso de 8 bar no esté tan claro que el mínimo se produzca a 30°. La razón de estas tendencias se encuentra entre el balance de la cantidad de movimiento del chorro y la cantidad de movimiento del flujo gaseoso. Como se adelantó en la Subsección 4.3.1, menores ángulos de inyección provocan que las gotas alcancen las paredes con una menor velocidad, o con un número de Weber menor, lo cual combinado con una T^* baja da lugar a la formación de películas líquidas. Esto haría pensar que el ángulo de 30° debería ser el ángulo que provoca una mayor acumulación de masa en la película. No obstante es aquí donde interviene el balance entre cantidades de movimiento. A bajas presiones de inyección, el flujo gaseoso arrastra las gotas fuera del dominio antes de que puedan impactar con la pared y quedarse acumuladas en forma de película. A medida que la presión de inyección aumenta, las gotas poseen una mayor cantidad de movimiento y son deflectadas por el flujo en menor medida. De esta forma se puede concluir que si la presión continuara aumentando, el máximo podría llegar a darse a un ángulo de inyección de 30°. Para evaluar la influencia de la presión de inyección sería oportuno adimensionalizar con la masa inyectada para descartar dicha contribución a las mayores masas que se observan a presiones elevadas. Dicho ejercicio se realiza en la Figura 4.13. No obstante, antes se evaluará la formación de películas en contornos concretos del dominio computacional.

Se puede observar cómo es en el contorno "Wall" donde se acumula la mayor cantidad de película. Esto es evidente dado que casi para cualquier ángulo de inyección, esta es

¹⁴Dichas regiones fueron introducidas en la Figura 3.10 y han sido nombradas siguiendo esa misma nomenclatura.

la primera pared con la que impacta el chorro. La masa de película acumulada en este contorno es proporcional a la del cómputo global salvo a ángulos de inyección muy bajos. A dichos ángulos de inyección, las gotas son deflectadas por el flujo gaseoso y acaban impactando en otros contornos. De hecho, es a estos bajos ángulos de inyección donde se produce una mayor cantidad de película en los contornos “Back Wall” y “Outlet Wall”. Aunque como puede verse, la contribución de estos contornos no es significativa para el cómputo global salvo para ángulos de inyección muy bajos.

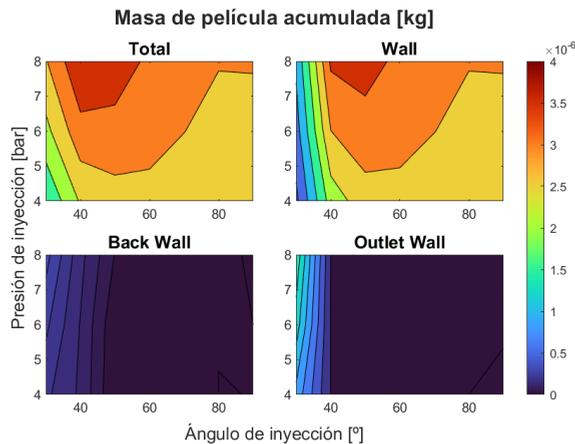


Figura 4.12: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional para un gasto másico de aire de 40 kg/h.

Adicionalmente, se acude a la Figura 4.13 para evaluar la influencia de la presión de inyección en la formación de películas líquidas en las paredes descontando el efecto de la masa inyectada. Se puede observar cómo una mayor presión de inyección tiende a disminuir la formación de películas líquidas, sobre todo a elevados ángulos de inyección debido a que las gotas del chorro alcanzan la pared con un número de Weber superior. Un ligero aumento se observa a unos 40° y 8 bar en el mapa de contorno correspondiente a todo el dominio. Si se acude a los contornos individuales en busca de una respuesta a este fenómeno se deduce que dicho aumento se debe a que las gotas impactan en el contorno “Back Wall”, que se encuentra muy alejado del inyector y donde las gotas llegarán con poca velocidad. De esta forma se concluye que la mayor cantidad de masa acumulada en forma de película al incrementar la presión de inyección, observada en la Figura 4.12, es debida a que mayores presiones de inyección implican introducir mayores cantidades de masa.

A continuación, se comentarán las diferencias que surgen cuando el gasto másico de aire es de 200 kg/h, cuyos resultados se encuentran recogidos en la Figura 4.14. En primer lugar, la masa de película acumulada en el cómputo global parece ser inferior

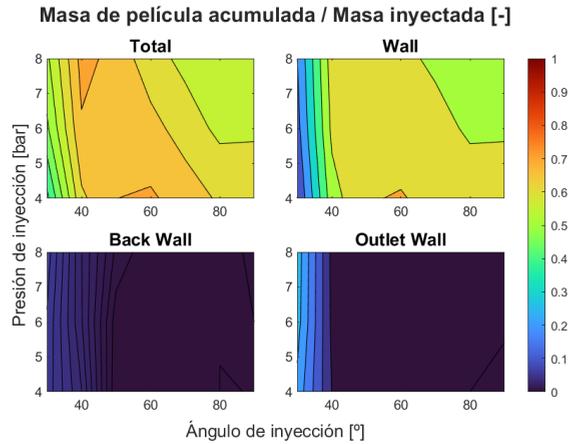


Figura 4.13: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre el cociente entre la masa de película acumulada y la masa inyectada para un gasto másico de aire de 40 kg/h.

para todos los casos planteados. La evolución con los ángulos presenta un aspecto similar, aunque introduce ciertas diferencias. Comparando con la Figura 4.12, la tendencia general de los mapas de contorno es que todos los eventos comentados para la Figura 4.12 se encuentran desplazados hacia ángulos superiores. Una particularidad es que mientras que antes exclusivamente el ángulo de inyección de 30° generaba poca cantidad de película, ahora ángulos ligeramente superiores, como 40 o 50° , también lo hacen. Esto es debido a que el mayor gasto másico de aire provoca que un mayor número de gotas se vean deflectadas por el flujo y no lleguen a impactar con las paredes antes de salir del dominio. Adicionalmente, el mayor gasto puede conferir a las gotas una mayor velocidad, de tal forma que tras el impacto con las paredes, el resultado no sea su adherencia plena a la película de la pared.

Pasando a evaluar las diferencias en los contornos individuales, el contorno “Wall” continúa siendo el que presenta una tendencia más similar a la que muestra el cómputo global. No obstante, los contornos “Back Wall” y “Outlet Wall” poseen una mayor contribución que en el caso de 40 kg/h, aunque continúa siendo poca en comparación con la contribución del contorno “Wall”. Estos dos contornos, que a su vez son los más alejados del inyector, presentan una evolución similar. Para ángulos de inyección intermedios (40 o 50°), un aumento en la presión de inyección desemboca en una mayor acumulación de masa en la película, pues será para estos ángulos cuando algunas gotas llegarán a impactar en dichos contornos antes de abandonar el dominio y algunas se acumularán en forma de película líquida.

Nuevamente, se recurre a la Figura 4.15 para evaluar la influencia de la presión de inyección en la formación de películas líquidas en las paredes descontando el efecto

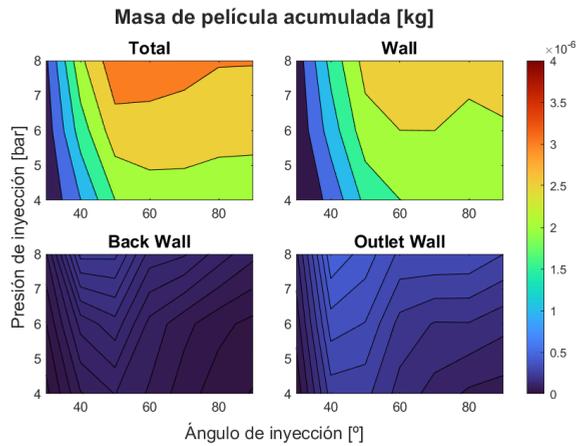


Figura 4.14: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional para un gasto másico de aire de 200 kg/h.

de la masa inyectada. Para un gasto másico de 200 kg/h parece que la presión de inyección (descontando el efecto de la masa inyectada) influye relativamente poco en la formación de películas en el cómputo global. En función del contorno evaluado y el ángulo de inyección puede resultar en una menor o mayor acumulación de masa en la película. Por ejemplo, en el contorno “Wall” se puede observar cómo a bajos ángulos de inyección una mayor presión de inyección tiende a aumentar la formación de películas líquidas (muy ligeramente), ocurriendo a la inversa a ángulos elevados. Por otro lado, en los contornos “Back Wall” y “Outlet Wall” sigue ocurriendo la misma tendencia que fue presentada en la Figura 4.14. En definitiva, si se descuenta el efecto de la masa inyectada, para un gasto másico de 200 kg/h el efecto de la presión de inyección no es muy significativo.

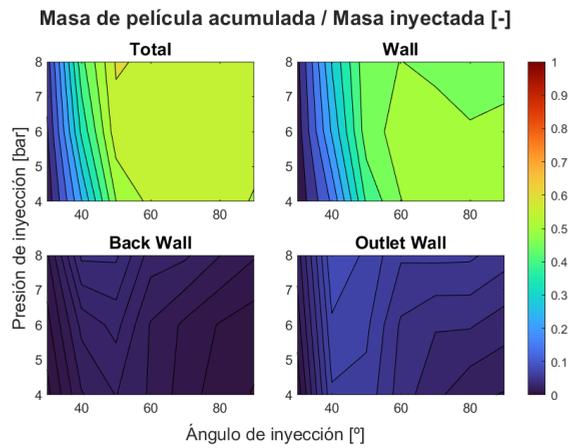


Figura 4.15: Efecto del ángulo de inyección y de la presión de inyección sobre el cociente entre la masa de película acumulada y la masa inyectada para un gasto másico de aire de 200 kg/h.

Capítulo 5

Conclusiones y desarrollos futuros

Este último capítulo tiene por objetivo servir como una recapitulación de los aspectos más relevantes tratados en el Trabajo Fin de Grado. Adicionalmente, se presentan una serie de propuestas para su mejora, ampliación o continuación.

5.1 Conclusiones

En esta sección se van a sintetizar las principales ideas que han ido apareciendo a lo largo del documento, así como los resultados obtenidos más significativos. El objetivo de este trabajo ha sido el estudio de los chorros urea-agua y la formación de películas líquidas y depósitos en la línea de escape.

Los resultados obtenidos en el documento presente se pueden dividir en dos partes claramente diferenciadas: por un lado el impacto que el modelo de película en la pared tiene sobre la formación de amoníaco en el dominio computacional; y por otro lado, el efecto que cada una de las variables del estudio paramétrico realizado ejerce sobre la formación de películas líquidas en las paredes de la geometría computacional. Por tanto, las principales conclusiones se detallan divididas en estas mismas partes.

Impacto del modelo de película en la pared sobre la formación de amoníaco

- El empleo de un modelo de película en la pared provoca que tanto la cantidad de amoníaco generado en el dominio computacional como la tasa de generación de amoníaco aumenten en un orden de magnitud respecto de los valores obtenidos con el modelo de desvanecimiento de gotas. Por lo tanto, es necesario incluirlos en simulaciones que pretendan ser precisas.

- Se comprueba la existencia de un ángulo de inyección óptimo, distinto al del modelo de desvanecimiento de gotas, que maximiza la tasa de generación de amoniaco. Dicho ángulo está caracterizado por:
 - Escasa sensibilidad a la presión de inyección y al gasto másico de aire.
 - La región en la que se encuentra es poco sensible ante variaciones del ángulo de inyección. Esto significa que ángulos ligeramente inferiores o superiores dan lugar a tasas de generación de amoniaco muy cercanas al óptimo. Adicionalmente, esta región es más insensible al ángulo de inyección cuanto mayor es la presión de inyección o el gasto másico de aire.
- Modificar la presión de inyección tiene un impacto diferente sobre la tasa de generación de amoniaco en función del gasto másico de aire:
 - A bajos gastos másicos de aire, incrementar la presión de inyección aumenta la tasa de generación de amoniaco. El aumento en dicha tasa es menos significativo a medida que la presión de inyección es más grande, llegando hasta el punto en que aumentos en la presión de inyección no sólo no mejoran dicha tasa sino que la empeoran para ciertos ángulos de inyección.
 - A elevados gastos másicos de aire, incrementar la presión de inyección disminuye la tasa de generación de amoniaco. No obstante, la tasa de generación a las tres presiones evaluadas es prácticamente idéntica, demostrándose la escasa influencia que la presión de inyección ejerce sobre la tasa de generación en estas condiciones.
- Aumentar el gasto másico de aire provoca una disminución en la tasa de generación de amoniaco y una menor dependencia de esta tanto con el ángulo como con la presión de inyección.
- Existe un ángulo de inyección óptimo que maximiza la cantidad de amoniaco generado. Dicho ángulo no tiene por qué ser el que maximiza la tasa, sino que tiene que presentar un balance entre una tasa de generación de amoniaco elevada en combinación con tiempos de residencia de la solución urea-agua en el interior del dominio computacional altos.
- Incrementar la presión de inyección aumenta la cantidad de amoniaco generado. No obstante, dicho aumento es debido al incremento de la cantidad de masa inyectada, que es mayor cuanto mayor es la presión de inyección dado que el tiempo de inyección permanece constante.
- Un aumento en el gasto másico de aire conlleva una reducción sustancial de la cantidad de amoniaco generado. Adicionalmente, provoca una formación más

temprana del amoniaco en el dominio computacional acompañada de una desaparición del mismo también más temprana fruto de la mayor inercia del gas.

Estudio de la formación de películas líquidas en la línea de escape

- Respecto a los modelos de película en la pared, los modelos de salpicadura gota/película se erigen como unos de los modelos más completos para considerar la interacción chorro/pared:
 - Dentro de los modelos de salpicadura gota/película, el modelo Kuhnke y el modelo Bai-Gosman son los que presentan un modo de proceder más completo. Estos determinan el resultado de la interacción gota/película en función de dos parámetros: el número de Weber de la gota que impacta en la pared (We_i) o algún parámetro proporcional a este y el ratio entre la temperatura de la pared y la temperatura de ebullición de la gota (T^*). Ambos parámetros poseen un valor de corte, de forma que el We_i y la T^* de la gota que impacta en la pared pueden encontrarse por encima o por debajo de su correspondientes valores de corte. Si se comparan los valores de corte con los valores de la gota que impacta en la pared aparecen cuatro combinaciones posibles de We_i y T^* , lo que resulta en cuatro posibles escenarios de interacción gota/película.
 - Pese a que el modelo Bai-Gosman está fuertemente recomendado para su utilización en simulaciones que involucren reducción catalítica selectiva de urea, el proceso de validación ha determinado que es el modelo Kuhnke el que presenta unos resultados más acordes con la realidad.
- El ángulo de inyección es especialmente influyente a la hora de determinar la cantidad de película formada sobre las paredes del dominio computacional. El menor ángulo de inyección evaluado debería dar lugar a la mayor acumulación de masa en la película. No obstante, la influencia de un flujo transversal provoca una deflexión en el chorro haciendo que las gotas abandonen el dominio computacional antes de impactar con alguna de las paredes. Por consiguiente, la cantidad máxima de película se forma a ángulos de inyección que garanticen que el chorro llega a impactar con la pared pese a la influencia del flujo transversal, pero que han de continuar siendo bajos para lograr que el chorro pierda la mayor cantidad de movimiento posible en su recorrido hasta la pared.
- Descontando los efectos debidos a la masa inyectada, un incremento en la presión de inyección tiende a reducir la masa de película acumulada en la pared, siendo este efecto más significativo a elevados ángulos de inyección.

- Un incremento en el gasto másico de aire provoca un descenso en la cantidad de masa acumulada en la película dentro del dominio computacional. Además, desplaza la formación de películas hacia regiones más alejadas del inyector.

5.2 Desarrollos futuros

A continuación se introducen una serie de propuestas para la mejora, ampliación o continuación de este trabajo:

- **Estudio paramétrico de los criterios que definen el modelo de película en la pared.** Como se definió en el Capítulo 2, tanto el modelo de salpicadura gota/película Kuhnke como el Bai-Gosman determinan el resultado de la interacción gota/película en función de dos parámetros: We_i o algún parámetro proporcional a este, como puede ser el número K , y T^* . Para la validación del modelo de salpicadura gota/película los valores impuestos han sido los recomendados por CONVERGE [26]. Pese a que en el Apéndice C se plantea un breve estudio acerca del impacto que tiene T^* , se propone efectuar un estudio más exhaustivo variando ambos parámetros en unas condiciones de operación semejantes a las planteadas en el estudio paramétrico efectuado en este documento.
- **Evaluación de otros modelos de película en la pared.** En este documento se ha recurrido al modelo de salpicadura gota/película Kuhnke, aunque un breve estudio del modelo de salpicadura gota/película Bai-Gosman se ha presentado en el Apéndice C arrojando resultados que distaban en gran medida de la realidad. No obstante, se plantea la posibilidad de volver a emplear ese modelo, junto con el modelo de salpicadura gota/película O'Rourke en un entorno con menor incertidumbre que la que presentaba el caso con el que se validó el modelo de salpicadura gota/película. Otra posibilidad sería recurrir al modelo de rebote gota/película. Además, podría plantearse la implementación de submodelos como son:
 - **Modelo de transferencia de calor chorro/pared Wruck.** Ante la presencia de fuertes gradientes térmicos entre el flujo y la pared, la introducción de este modelo estaría más que justificada.
 - **Modelo de separación de la película.** Tal vez en la geometría empleada el uso de este modelo carecía de sentido. No obstante, y como se verá en la siguiente propuesta, el empleo de geometrías realistas podría forzar el uso de este modelo.
- **Implementación del modelo de película en la pared en una geometría realista.** La geometría empleada en las simulaciones consiste en una recreación de alta fidelidad de la instalación experimental utilizada por Payri y col. [24].

No obstante, dicha geometría no replica el aspecto de una línea de escape que se pudiera encontrar en un vehículo que esté equipado con un sistema SCR. En consecuencia, un estudio híbrido, empleando una geometría realista y su recreación computacional, podría llevarse a cabo empleando el modelo de salpicadura gota/película Kuhnke, que ya ha sido probado en este trabajo y ha demostrado ofrecer resultados que se ajustan a la realidad.

Capítulo 6

Bibliografía

- [1] R.D. Reitz y col. "IJER editorial: The future of the internal combustion engine". En: *International Journal of Engine Research* (2019) (vid. págs. 3, 4).
- [2] Ian Tiseo. *Greenhouse gas emissions in the EU-27 1990-2019, by sector*. 2021. URL: <https://www.statista.com/statistics/1171183/ghg-emissions-sector-european-union-eu/> (visitado 23-05-2022) (vid. pág. 3).
- [3] Ian Tiseo. *Nitrogen oxide emissions in the European Union (EU-28) 2000-2018, by sector*. 2021. URL: <https://www.statista.com/statistics/791190/nitrogen-oxide-emissions-european-union-eu-28/> (visitado 23-05-2022) (vid. pág. 4).
- [4] Timothy Johnson y Timothy Joshi. "Review of Vehicle Engine Efficiency and Emissions". En: *SAE Technical Paper* (2017) (vid. pág. 4).
- [5] Amgad Elgowainy y Jeongwoo Han. *Cradle-to-Grave Lifecycle Analysis of U.S. Light-Duty Vehicle-Fuel Pathways: A Greenhouse Gas Emissions and Economic Assessment of Current (2015) and Future (2025-2030) Technologies*. Inf. téc. Argonne National Laboratory, 2016 (vid. pág. 4).
- [6] Raúl Payri y col. "Numerical Analysis of the Injection Angle of Urea-Water Sprays for the Ammonia Generation in Realistic Test Conditions". En: *SAE Technical Paper* (2022) (vid. págs. 5, 6, 19-21, 24, 31, 33, 34, 38, 41).
- [7] Rafal Sala, Piotr Bielaczyc y Marek Brzezanski. "Concept of Vaporized Urea Dosing in Selective Catalytic Reduction". En: *Catalysts* (2017) (vid. págs. 5, 15).
- [8] José M. Desantes y Francisco Payri. *Motores de combustión interna alternativos*. Editorial Reverté, S.A., 2011 (vid. págs. 9, 11, 12, 14, 15).
- [9] Wikipedia. *Smog fotoquímico*. 2022. URL: https://es.wikipedia.org/wiki/Esmog_fotoqu%C3%ADmico (visitado 25-05-2022) (vid. pág. 9).

- [10] Phys.org. *NO_x gases in diesel car fumes: Why are they so dangerous?* 2015. URL: <https://phys.org/news/2015-09-nox-gases-diesel-car-fumes.html#:~:text=N0x%20has%20direct%20and%20indirect,land%E2%80%94harming%20animals%20and%20plants>. (visitado 25-05-2022) (vid. pág. 9).
- [11] Stephen R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGrawHill, 1996 (vid. pág. 10).
- [12] Peter Eastwood. *Critical topics in exhaust gas aftertreatment*. Research Studies Press, 2000 (vid. pág. 10).
- [13] J. Warnatz, U. Maas y R.W. Dibble. *Combustion: hysical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant emissions*. Springer, 2006 (vid. pág. 11).
- [14] George A. Lavoie, John B. Heywood y James C. Keck. "Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion Engines". En: *Combustion Science and Technology* (1970) (vid. pág. 11).
- [15] Unai De La Torre. "Sistemas SCR y NSR-SCR paraDeNO_x en corrientesde escape diésel: Formulaciones, cinética y modelización". Universidad del País Vasco, 2015 (vid. pág. 15).
- [16] William R. Miller y col. "The Development of Urea-SCR Technology for US Heavy Duty Trucks". En: *SAE Technical Paper* (2000) (vid. pág. 16).
- [17] C. Ates y col. "Morpho440 logical characterization of urea derived deposits in SCR systems". En: *Chemical Engineering Journal* (2021) (vid. pág. 16).
- [18] S. Jeong y col. "Optimization of the Urea Injection Angle and Direction: Maximizing the Uniformity Index of a Selective Catalytic Reduction System". En: *Energies* (2021) (vid. pág. 16).
- [19] M. Lecompte, S. Raux y A. Frobert. "Experimental Characterization of SCR DeNO_x-Systems: Visualization of Urea-Water-Solution and Exhaust Gas Mixture". En: *SAE Technical Paper* (2014) (vid. pág. 16).
- [20] Tao Tang y col. "Urea Decomposition at Low Temperature in SCR Systems for Diesel Engines". En: *SAE Technical Paper* (2014) (vid. pág. 17).
- [21] Raúl Payri y col. "Computational Study of Urea-Water Solution Sprays for the Analysis of the Injection Process in SCR-like Conditions". En: *Industrial & Engineering Chemistry Research* (2020) (vid. pág. 17).
- [22] S. Drennan, G. Kumar y M. Quan S. andWang. "Application of Automatic Meshing to Urea-Water Injection Simulation for Engine Aftertreatment". En: *SAE Technical Paper* (2015) (vid. pág. 17).
- [23] G.M. Shahariar y O.T. Lim. "A Study on Urea-Water Solution Spray-Wall Impingement Process and Solid Deposit Formation in Urea-SCR de-NO_x System". En: *Energies* (2018) (vid. págs. 17, 25-27, 29-31, 79, 82, 85, 86).

-
- [24] Raúl Payri y col. "Spray Characterization of the Urea-Water Solution (UWS) Injected in a Hot Air Stream Analogous to SCR System Operating Conditions". En: *SAE Technical Paper* (2019) (vid. págs. 19, 20, 66).
- [25] Departamento de Máquinas y Motores Térmicos. *Pre-proceso en CFD*. Universidad Politécnica de Valencia, 2020 (vid. pág. 20).
- [26] K.J. Richards, P.K. Senecal y E. Pomraning. *CONVERGE 2.4 Manual*. Convergent Science, 2018 (vid. págs. 20, 23, 25, 37, 66, 74, 76-78).
- [27] Nuclear Power. *Laminar Prandtl Number – Turbulent Prandtl Number*. 2022. URL: <https://www.nuclear-power.com/nuclear-engineering/heat-transfer/introduction-to-heat-transfer/characteristic-numbers/what-is-prandtl-number/laminar-prandtl-number-turbulent-prandtl-number> (visitado 27-05-2022) (vid. pág. 22).
- [28] Yoshihide Tominaga y Ted Stathopoulos. "Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield". En: *Elsevier* (2007) (vid. pág. 22).
- [29] J.Y. Kim, S.H. Ryu y J.S. Ha. "Numerical Prediction on the Characteristics of Spray-Induced Mixing and Thermal Decomposition of Urea Solution in SCR System". En: *ASME 2004 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference* (2004) (vid. pág. 24).
- [30] G.M. Shahariar y O.T. Lim. "Investigation of urea aqueous solution injection, droplet breakup and urea decomposition of selective catalytic reduction systems". En: *Journal of Mechanical Science and Technology* (2018) (vid. págs. 25-27).
- [31] Raúl Payri y col. "A Methodology for the hydraulic characterization of a Urea-Water Solution injector by means of Spray Momentum Measurement". En: *29th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems* (2019) (vid. pág. 31).
- [32] M.A. Patterson y R.D. Reitz. "Modeling the Effects of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission". En: *SAE Technical Paper* (1998) (vid. pág. 32).
- [33] Arthut H. Lefebvre y Vincent G. McDonell. *Atomization and Sprays*. CRC Press, 2017 (vid. pág. 32).
- [34] P.J. O'Rourke y A.A. Amsden. "The Tab Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup". En: *SAE Technical Paper* (1987) (vid. pág. 38).
- [35] José Francisco López. *Coficiente de determinación (R cuadrado)*. 2019. URL: <https://economipedia.com/definiciones/r-cuadrado-coeficiente-determinacion.html> (visitado 02-06-2022) (vid. pág. 48).
- [36] Manuel A. Gonzalez, Gary L. Borman y Rolf D. Reitz. "A Study of Diesel Cold Starting using both Cycle Analysis and Multidimensional Calculations". En: *SAE Technical Paper* (1991) (vid. pág. 73).
- [37] J.D. Naber y Rolf D. Reitz. "Modeling Engine Spray/Wall Impingement". En: *SAE Technical Paper* (1988) (vid. pág. 73).

- [38] P.J. O'Rourke y A.A. Amsden. "A Spray/Wall Interaction Submodel for the KIVA-3 Wall Film Model". En: *SAE Technical Paper* (2000) (vid. págs. 74, 75, 78).
- [39] H. Smith, M. Zöchbauer y T. Lauer. "Advanced Spray Impingement Modelling for an Improved Prediction Accuracy of the Ammonia Homogenisation in SCR Systems". En: *SAE Technical Paper* (2015) (vid. pág. 78).
- [40] C. Bai y A. Gosman. "Development of Methodology for Spray Impingement Simulation". En: *SAE Technical Paper* (1995) (vid. pág. 78).
- [41] N.M. Wruck y U. Renz. "Transient Phase-Change of Droplets Impacting on a Hot Wall". En: *Institute of Heat and Mass Transfer* (2000) (vid. pág. 78).

Apéndice A

Modelos computacionales de interacción chorro/pared

En el presente apéndice se describirán los modelos que incorpora CONVERGE CFD para modelar la interacción chorro/pared. Este *software* ofrece tres opciones para modelar dicha interacción, que serán descritas en las siguientes secciones.

A.1 Modelo de rebote/deslizamiento

En este modelo se incluyen dos regímenes de impacto, los cuales son rebote y deslizamiento. La selección del evento que ocurrirá tras el impacto con la pared está basada en el número de Weber de la gota líquida que impacta (We_i):

$$We_i = \frac{\rho_l v_n^2 d}{\sigma} \quad (\text{A.1})$$

donde ρ_l es la densidad, v_n es la componente de la velocidad normal a la superficie, d es el diámetro y σ es la tensión superficial.

Cuando We_i es menor de 80, la gota rebotará elásticamente con una velocidad normal a la superficie modelada por Gonzalez y col. [36].

Si, por el contrario, We_i es mayor de 80, se utiliza el modelo de Naber y Reitz [37] para actualizar la velocidad de la gota. En este modelo también se incluye una estimación del espesor de la película producida por el impacto del chorro líquido incidente.

A.2 Modelo de película en la pared

CONVERGE ofrece la posibilidad de modelar películas de líquido resultante de la interacción de las gotas líquidas del chorro con superficies sólidas empleando para ello un enfoque híbrido. Este enfoque supone que mientras que algunos cálculos asumen cantidades basadas en partículas individuales, otros cálculos asumen cantidades basadas en el total de la película.

A.2.1 Ecuación de cantidad de movimiento de la película

La ecuación de cantidad de movimiento de O'Rourke y Amsden [38] se utiliza para modelar el transporte de la película líquida.

A.2.2 Rebote gota/película

Las gotas con números de Weber bajos pueden rebotar en una superficie sólida si:

$$We_i < We_{rebound} \quad (\text{A.2})$$

donde $We_{rebound}$ es impuesto por el usuario.

A.2.3 Salpicadura gota/película: Modelo O'Rourke

El modelo O'Rourke considera dos vías para determinar el criterio de salpicadura:

- Basado en el valor de E_{crit}^2 ¹, que viene definido según la Ecuación A.3:

$$E^2 = \frac{We_i}{\min(\frac{h_\alpha}{d}, 1) + \frac{\delta_{bl}}{d}} > E_{crit}^2 \quad (\text{A.3})$$

donde h_α es el espesor local de la película y δ_{bl} es el espesor de la capa límite.

- Basado en el valor crítico del número de Weber según la Ecuación A.4:

$$We_i > We_{splash} \quad (\text{A.4})$$

donde We_{splash} es impuesto por el usuario.

¹Para más información se remite al manual de CONVERGE [26].

En caso de que exista salpicadura, una fracción másica de la gota que impacta (f_{splash}) se usa para crear una parcela nueva que es salpicada. La fracción másica restante, dada por $1-f_{splash}$, es incorporada a la película adherida a la pared.

Las propiedades de la parcela que es salpicada son determinadas a partir de los modelos de O'Rourke y Amsden [38].

A.2.4 Salpicadura gota/película: Modelo Kuhnke

El modelo Kuhnke considera la temperatura y el espesor de la película en la pared para determinar la existencia de salpicadura. Este modelo opera comparando el número K de la parcela líquida, definido en la Ecuación A.5:

$$K = \frac{(\rho d)^{\frac{3}{4}} v^{\frac{5}{4}}}{\sigma^{\frac{1}{2}} \mu^{\frac{1}{4}}} = We_i^{\frac{5}{8}} La^{\frac{1}{8}} \quad (A.5)$$

donde v es la velocidad de la gota, μ es la viscosidad y La es el número de Laplace definido en la Ecuación A.6:

$$La = \frac{\sigma \rho d}{\mu^2} \quad (A.6)$$

El número K tiene en cuenta tanto los efectos de la condición cinemática como del tamaño de las gotas del chorro.

Cuando el número K de la parcela líquida es más alto que el número K crítico para las condiciones particulares de la pared (basado en T^* , que es el ratio entre T_{wall} y T_{boil}) la gota podrá salpicar, romperse térmicamente, o una combinación de las dos. La Figura A.1 ofrece un esquema conceptual de las condiciones bajo las cuales se someterá la parcela a cada tipo de interacción gota/pared.

Los cuatro resultados mostrados conceptualmente en la Figura A.1 son los siguientes:

- Cuando el valor K de la parcela y la temperatura de la pared son ambos bajos, se creará una película en la pared.
- Cuando el valor K es bajo pero la temperatura de la pared es alta, la parcela rebotará.
- Cuando el valor K es alto pero la temperatura de la pared es baja, la parcela salpicará.
- Cuando el valor K y la temperatura de la pared son ambos altos, la parcela se romperá térmicamente.

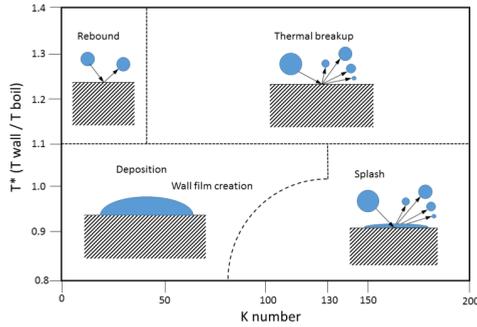


Figura A.1: Representación conceptual de las cuatro interacciones gota/pared para una pared seca disponibles en el modelo Kuhnke [26].

Conviene detenerse y hacer una breve discriminación en el criterio de salpicadura en función de si la pared está seca o mojada.

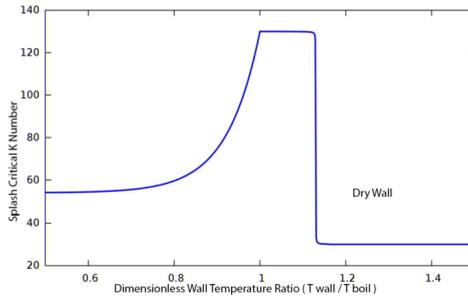


Figura A.2: Valores críticos del número K en el modelo Kuhnke para una pared seca a diferentes (T_{wall}/T_{boil}) ratios de temperatura [26].

Atendiendo a la Figura A.2, las gotas del chorro salpicarán o se romperán térmicamente con facilidad en paredes secas cuando la temperatura de la pared sea significativamente superior a la temperatura de ebullición del líquido.

Según la información mostrada en la Figura A.3, las gotas del chorro se depositarán en la película existente cuando el espesor de la película de la pared sea delgado, y salpicarán cuando dicha película sea gruesa ².

Para calcular las propiedades de las gotas secundarias, este modelo se basa en datos experimentales y leyes de la conservación. Particularmente, el número de gotas secundarias es determinado por CONVERGE basándose en la conservación de la masa una

²El espesor de la película se considerará delgado o grueso en función de cual sea el diámetro de la gota que impacta.

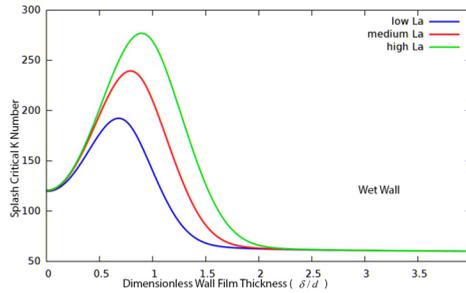


Figura A.3: Datos usados en el modelo Kuhnke: valores del número K para una pared mojada a diferentes espesores adimensionales de película en la pared [26].

vez han sido obtenidos tanto la fracción másica como el diámetro de dichas gotas por medio de modelos adicionales [26].

A.2.5 Salpicadura gota/película: Modelo Bai-Gosman

Al igual que con el modelo Kuhnke, el modelo Bai-Gosman considera la temperatura de la pared, el número de Weber de las gotas que impactan y la condición de la pared (seca o mojada) para determinar la existencia de salpicadura. El modelo Bai-Gosman ha sido personalizado para simulaciones que involucren reducción catalítica selectiva de urea. De hecho, este modelo debe usarse con precaución para aplicaciones que no sean de urea [26].

Este modelo opera comparando el número de Weber de la gota que impacta con un número de Weber crítico, que será distinto en función de si la pared está seca o mojada.

Los posibles resultados para paredes secas son los siguientes:

- Cuando el número de Weber y la temperatura de la pared son ambos bajos, la parcela se depositará en la pared, creando una película en la pared.
- Cuando el número de Weber es bajo pero la temperatura de la pared es alta, la parcela rebotará.
- Cuando el número de Weber es alto pero la temperatura de la pared es baja, la parcela sufrirá rotura térmica.
- Cuando el número de Weber y la temperatura de la pared son ambos altos, la parcela salpicará y, bajo ciertas condiciones, se deslizará sobre la pared.

Los resultados para las paredes mojadas son similares a los de las paredes secas, excepto por el número de Weber crítico y por la existencia de un régimen de rebote adicional

que se observa cuando tanto el número de Weber como la temperatura de la pared son bajos [39].

En el régimen de rebote, el ángulo de rebote de la parcela es igual al ángulo de incidencia y no ocurren otros cambios en sus propiedades físicas. En el régimen de salpicadura, cada parcela incidente se rompe en dos parcelas, y el criterio usado para determinar ratios de masa, radios y velocidades de las gotas secundarias sigue la metodología descrita por Bai y Gosman [40].

A.2.6 Transferencia de calor chorro/pared: Modelo Wruck

El modelo Wruck puede utilizarse junto con los modelos Kuhnke o Bai-Gosman. Este modelo tiene en cuenta la energía térmica transferida desde las paredes calientes a las gotas del chorro que rebotan o salpican [41].

A.2.7 Separación de la película

Puede ocurrir si las partículas de una película fluyen sobre una esquina afilada siguiendo el criterio de O'Rourke y Amsden [38].

En caso de que dicho criterio se satisfaga, las parcelas de la película se convertirán en parcelas del chorro con un diámetro igual al espesor de la película.

A.3 Modelo de desvanecimiento de las gotas

Con este modelo, las gotas del chorro que impactan en la pared se desvanecen. Así, la masa de dichas gotas desaparece de la simulación. Conviene remarcar que este proceso no es lo mismo que la vaporización de las gotas³.

³Para más información se remite al manual de CONVERGE [26].

Apéndice B

Distancias radial y axial

El objetivo que este apéndice persigue es explicar qué son las distancias radial y axial, cómo se efectúa la medida de estas distancias en las simulaciones realizadas y qué criterios se han de considerar para su correcta medida.

B.1 ¿Qué son?

Para describir en qué consisten las distancias radial y axial se recurre a la Figura B.1, empleada por Shahariar y Lim [23] para explicar qué son estas distancias y en la que se basa el documento para su correcta comparativa durante la validación del modelo de salpicadura gota/película.

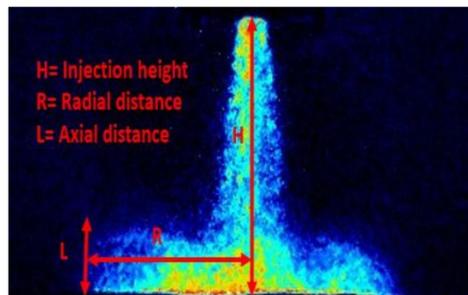


Figura B.1: Definición de las distancias radial y axial efectuada por Shahariar y Lim [23].

Por un lado, la distancia radial se define como la distancia, en dirección perpendicular al eje de simetría del inyector, que hay entre dicho eje y el punto donde la nube de gotas que han chocado previamente con la pared inferior de la instalación experimental se desvanece. Por otro lado, la distancia axial se define como la distancia, en dirección

perpendicular a la pared inferior de la instalación experimental, que hay entre dicha pared y el punto donde la nube de gotas que han chocado previamente con ella se desvanece.

B.2 Medida de las distancias radial y axial

El principio de funcionamiento que permite calcular las distancias radial y axial es análogo. Antes de comenzar, conviene indicar que todos los parámetros vinculados a las parcelas (posición, velocidad, masa, etc.) se encuentran en un único fichero que es generado cada intervalo temporal que indique el usuario.

En primer lugar, ha de efectuarse una discriminación entre las parcelas que aún no han impactado con la pared inferior de aquellas que sí lo han hecho. Esto permite “eliminar” las parcelas asociadas al chorro, puesto que podrían conducir a errores en el cálculo de las distancias. Además, su eliminación supone un ahorro en coste computacional. La manera en que dichas parcelas se eliminan consiste en suponer que, despreciando fuerzas gravitacionales, las parcelas que impacten con la pared adquirirán velocidad vertical positiva, mientras que las parcelas que aún no han impactado con la pared poseen velocidad vertical negativa. Atendiendo a la Figura B.2 y, teniendo en cuenta que las parcelas con velocidad vertical negativa son de color azul oscuro, se puede concluir cómo el criterio de eliminar dichas parcelas para los pasos posteriores permite cumplir los objetivos descritos previamente¹.

Una vez seleccionadas las parcelas con velocidad vertical positiva, se calcula la masa total de dichas parcelas y se crea un tetraedro paralelo a las caras de la recreación computacional. A partir de este momento, se describirá el método para el cálculo de las distancias radial y axial por separado.

Para el cálculo de la distancia radial el tetraedro se orienta verticalmente con una anchura horizontal definida por el usuario. La posición donde se origina la cara del tetraedro más alejada al eje del inyector está ligeramente más lejos de dicho eje que la posición de la parcela que se encuentra más alejada a este elemento. Generado el tetraedro, se obtiene la masa total de las parcelas contenidas en su interior y se efectúa un cociente entre dicha masa y la masa total de las parcelas con velocidad vertical positiva. Si este cociente es igual o superior a un porcentaje definido por el usuario, la distancia radial se calcula como la distancia existente desde la cara del tetraedro más cercana al eje del inyector a dicho eje. En caso de que el cociente sea inferior al porcentaje indicado, se genera un nuevo tetraedro cuya cara más alejada se mantiene en la misma posición pero que posee una anchura horizontal dos veces la inicial y vuelve

¹Podría discutirse si pasado un tiempo, parte de las parcelas que han impactado con la pared poseen velocidad vertical negativa nuevamente. Esto ocurre, pero dado que lo que se busca es la posición donde la nube se dispersa, dichas partículas no intervienen en el cálculo de las distancias.

a efectuarse el mismo procedimiento iterativo² hasta igualar o superar el porcentaje impuesto por el usuario. Una representación gráfica de cómo se calcula la distancia radial se presenta en la Figura B.2, donde el rectángulo rojo delimita las caras del tetraedro.

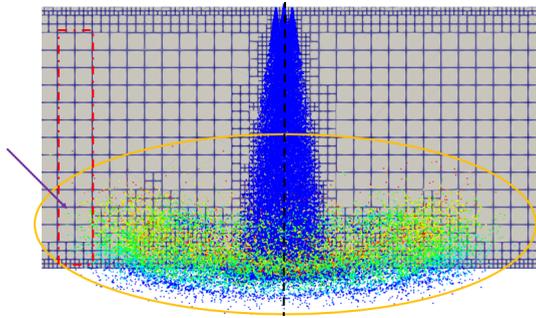


Figura B.2: Medida de la distancia radial de forma computacional.

Para el cálculo de la distancia axial el tetraedro se orienta horizontalmente con una anchura vertical definida por el usuario y que puede diferir de la impuesta para el cálculo de la distancia radial. La posición donde se origina la cara del tetraedro más alejada a la pared inferior está ligeramente más lejos de dicha pared que la posición de la parcela más alejada a este elemento. Generado el tetraedro, el modo de proceder es análogo al caso de la distancia radial, salvo por la particularidad de que, en este caso, si el cociente entre ambas masas es inferior al porcentaje indicado por el usuario, la anchura sobre la que se actúa es la vertical y no la horizontal. Una representación gráfica de cómo se calcula la distancia axial se presenta en la Figura B.3.

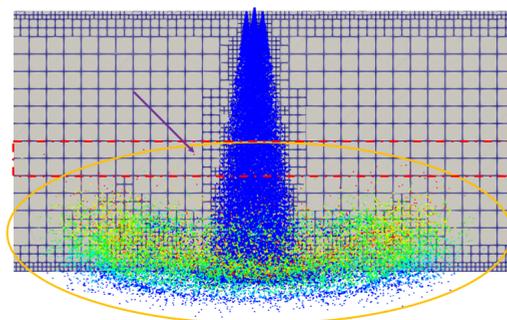


Figura B.3: Medida de la distancia axial de forma computacional.

²En este caso triplicando la anchura inicial del tetraedro si el cociente volviera a ser inferior al porcentaje impuesto.

B.2.1 Criterios para la definición de las distancias radial y axial

Dado que Shahariar y Lim [23] no ofrecen mayor definición de las distancias radial y axial que la que pueda ser interpretada a través de la Figura B.1, para la validación del modelo de salpicadura gota/película se han evaluado dos criterios distintos:

- **Tanto por ciento sobre el total de la masa de las parcelas.** Este criterio se corresponde con el modo de funcionamiento indicado en la Sección B.2. Consiste en calcular la masa total de las parcelas que se encuentran dentro del tetraedro y que previamente han chocado con la pared y dividirla por la masa total de todas las que han chocado con la pared. Así, la distancia radial o axial será la distancia a la que se encuentra la cara del tetraedro más próxima al elemento de referencia siempre y cuando el cociente de masas supere al porcentaje insertado por el usuario.
- **Parcela más alejada.** Se basa en seleccionar la parcela más alejada al elemento de referencia y definir la distancia radial o axial como la distancia que hay de esa parcela al elemento de referencia. Como particularidad, el modo de funcionamiento descrito en la Sección B.2 se puede adaptar a este criterio si se selecciona un porcentaje nulo y la anchura del tetraedro se hace muy pequeña.

Desde el punto de vista del autor de este trabajo, es el primer criterio el que se considera como más consistente y es por ello que el principio de funcionamiento del programa que permite el cálculo de estas distancias basa su principio de funcionamiento en dicho criterio. Particularmente, se aplica el criterio del 99 %, en sintonía con la penetración.

Apéndice C

Simulaciones adicionales para la validación

El objetivo que este apéndice persigue es presentar una serie de resultados adicionales obtenidos durante el proceso de validación y que poseen cierto interés. Así, el apéndice se estructura en tres secciones. En las dos primeras secciones efectúan los dos estudios más relevantes en relación con el impacto de ciertos parámetros sobre las distancias radial y axial. Otros estudios menores se agrupan en la tercera sección. Como última indicación previa, cabe resaltar que las condiciones en las que se efectuaron estas simulaciones corresponden al caso en que se inyecta en una atmósfera sin presurizar¹ y aplicando el criterio del tanto por ciento.

C.1 Modelo de salpicadura gota/película

Como se puede contemplar en la Tabla 3.7, el modelo de salpicadura gota/película seleccionado es el Kuhnke. No obstante, su elección no es arbitraria pues en esta sección se efectúa un estudio paramétrico donde se compara dicho modelo con el Bai-Gosman. Adicionalmente, se cambia el valor de T^* en ambos modelos con respecto al indicado en la Tabla 3.7 para evaluar las posibles diferencias en los resultados que pudiera conllevar el cambio en dicho parámetro.

En la Figura C.1 se presentan los resultados obtenidos con el modelo Kuhnke y variando el parámetro T^* . Todos aquellos comentarios referentes a la comparativa con los resultados experimentales se desarrollan en la Subsección 3.3.4.2. Referente al parámetro T^* , se puede concluir que, en el caso con el que se pretende validar, su variación no supone cambios en los resultados obtenidos.

¹Véase Subsección 3.3.4.2.

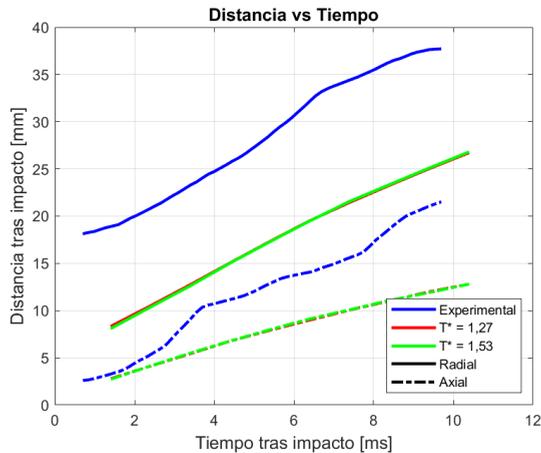


Figura C.1: Comparación de las curvas de distancia radial y axial usando el modelo de salpicadura gota/película Kuhnke y variando el parámetro T^* .

La Figura C.2 muestra los resultados obtenidos con el modelo Bai-Gosman y variando el parámetro T^* . Comparando este modelo con el Kuhnke, se pueden observar diferencias significativas entre ambos. En primer lugar, mientras que el modelo Kuhnke posee un carácter “lineal” (las parcelas se alejan con el tiempo de forma lineal), el modelo Bai-Gosman posee un carácter “logarítmico” (las parcelas se alejan muy rápido inicialmente y posteriormente lo hacen muy lentamente). El carácter “lineal” o “logarítmico” de cada uno de los modelos se da en las dos distancias indistintamente. Por otro lado, la distancia axial en el modelo Bai-Gosman es superior a la distancia radial, algo que ocurre al revés tanto en los resultados experimentales como en el modelo Kuhnke. Referente al parámetro T^* , al igual que ocurría con el modelo Kuhnke, su variación no supone cambios en los resultados obtenidos (para el caso estudiado).

A la vista de los resultados obtenidos se justifica la selección del modelo Kuhnke para la validación del modelo de salpicadura gota/película.

C.2 Turbulent Kinetic Energy

Otro parámetro sobre el que se planteó actuar fue la *Turbulent Kinetic Energy* (TKE) impuesta en las condiciones iniciales. En la Figura C.3 se presenta una comparación de las curvas de distancia radial y axial variando TKE. Atendiendo a la Figura C.3 se puede observar que la modificación del parámetro TKE tiene impacto sobre ambas distancias. En primer lugar, la distancia radial en un inicio es igual para ambos valores de TKE, pero a partir del segundo tercio de la gráfica una mayor TKE conlleva una

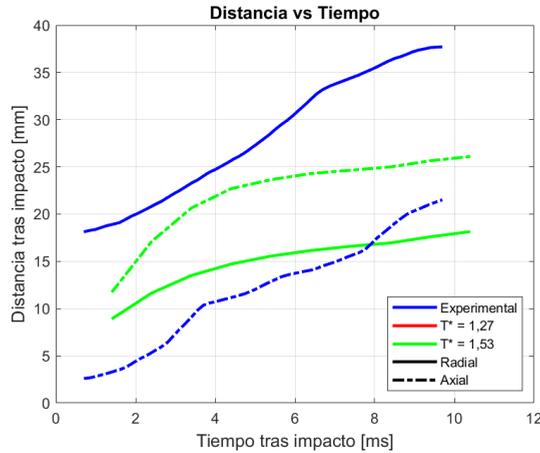


Figura C.2: Comparación de las curvas de distancia radial y axial usando el modelo de salpicadura gota/película Bai-Gosman y variando el parámetro T^* .

menor distancia radial. En segundo lugar, la distancia axial aumenta para mayores valores de TKE, reduciéndose esta diferencia con el paso del tiempo.

A la vista de los resultados, modificar TKE parece tener efectos opuestos para las distancias radial y axial. Una posible justificación podría estar vinculada con la distancia recorrida por cada una de las parcelas y a los efectos disipativos característicos de la turbulencia. Pues, pese a que la distancia axial aumenta con una mayor TKE, el aumento es menor con el paso del tiempo o, lo que es equivalente, con el aumento de la distancia axial, dejando entrever que habrá un punto en que ambas curvas colapsen e incluso cambien su posición.

C.3 Otros estudios

C.3.1 Presión de inyección

En la Subsección 3.3.4.2 ya se indicó la discrepancia existente entre el gasto másico del inyector y la presión de inyección que Shahariar y Lim [23] presentaban en su artículo. Producto de dicha discrepancia se planteó actuar sobre estos parámetros en busca de acercarse a los resultados que obtuvieron en sus experimentos. Así, se planteó un estudio paramétrico en el que se inyectaba a 5 bar, que era la presión indicada en el paper, y a la tasa de inyección que señalaban. No obstante, la tasa de inyección propuesta en combinación con un coeficiente de descarga (C_d) realista (del orden de 0,6) arrojaba una presión de inyección de 20 bar, por lo que también se valoró la

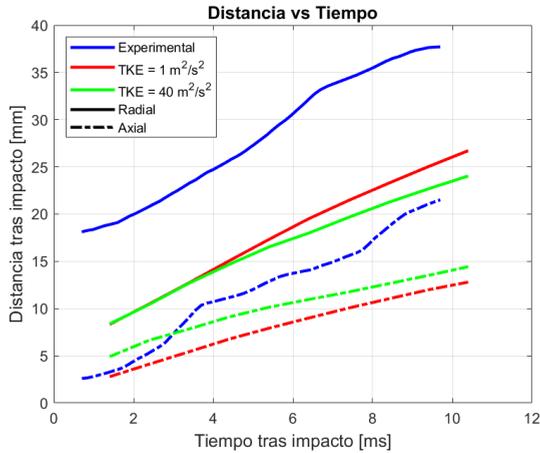


Figura C.3: Comparación de las curvas de distancia radial y axial variando el parámetro TKE.

opción de un C_d igual a la unidad (pese a que no sea realista) resultando en una presión cercana a los 7 bar.

Comenzando por la penetración, representada en la Figura C.4, se puede observar cómo un aumento en la presión de inyección da lugar a una mayor pendiente de la curva de penetración. Esto se traduce en que el chorro alcance la pared inferior antes a medida que la presión de inyección es mayor. Por otro lado, se contempla cómo ninguna de las presiones evaluadas ofrecen una curva de penetración similar a la experimental, con la salvedad de la curva de 5 bar, donde en un inicio presenta una tendencia similar. Esto reafirma la idea de que la presión de 5 bar debe ser la indicada, existiendo algún fenómeno en la segunda mitad de la inyección que no se está considerando.

Continuando con las distancias radial y axial, presentes en la Figura C.5, se observa que un incremento en la presión de inyección provoca un aumento de ambas distancias. Sin embargo, el incremento que sufre la distancia axial es más significativo que el sufrido por la distancia radial. Pese a lo anterior, ni siquiera el caso que contempla una presión de inyección de 20 bar se aproxima a la curva de distancia radial experimental. No obstante, este mismo caso presenta una tendencia similar para la distancia axial, aunque ni al inicio ni al final del tiempo de medida esta se comporta igual a la experimental.

En definitiva, tras este estudio se concluyó que la tasa de inyección indicada por Shahariar y Lim [23] se ignoraría y se comenzaría a trabajar con la presión de 5 bar que ellos mismos también indicaban.

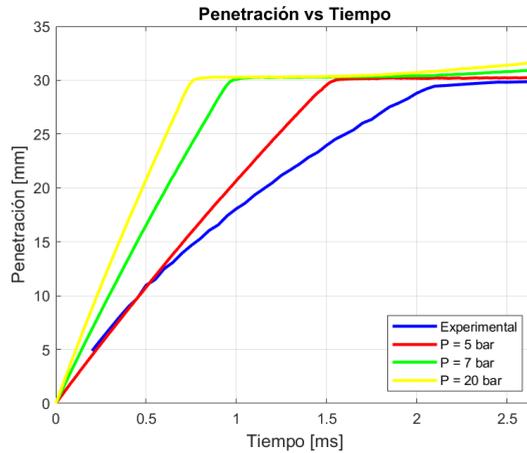


Figura C.4: Comparación de las curvas de penetración variando la presión de inyección.

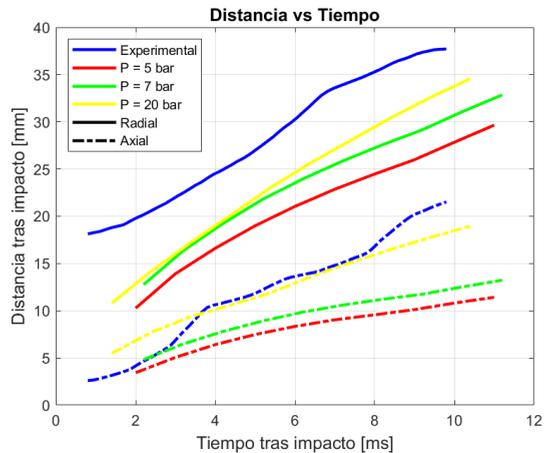


Figura C.5: Comparación de las curvas de distancia radial y axial variando la presión de inyección.

C.3.2 Modelo de fuerza de arrastre

Un intento por buscar una mejor réplica de la curva de penetración pasó por modificar el modelo de fuerza de arrastre. El empleado en el estudio es el *Dynamic drop drag* por lo que un estudio paramétrico comparando este con el *Spherical drop drag* fue llevado a cabo. Los parámetros insertados en ambos modelos fueron los mismos y se encuentran indicados en la Tabla 3.6.

Si se pasa a analizar la Figura C.6, se comprueba cómo el modelo de fuerza de arrastre *Spherical drop drag* apenas presenta diferencias respecto al *Dynamic drop drag*. Ambos presentan una tendencia similar a la experimental en un inicio, para progresivamente ir alejándose de esta con el paso del tiempo.

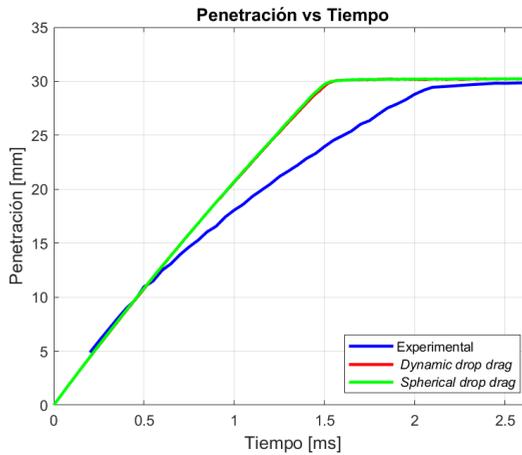


Figura C.6: Comparación de las curvas de penetración variando el modelo de fuerza de arrastre.

De esta forma se concluye que, para el caso planteado en la validación, el modelo de fuerza de arrastre no tiene impacto sobre la curva de penetración.

Parte II

Pliego de condiciones

Capítulo 1

Pliego de condiciones generales

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

Son las normas de desarrollo reglamentario las que deben fijar las medidas mínimas que deben adoptarse para la adecuada protección de los trabajadores. Entre ellas se encuentran las destinadas a garantizar que de la utilización de los equipos que incluyen pantallas de visualización por los trabajadores no se deriven riesgos para la seguridad y salud de los mismos.

Estas ordenanzas son estándares basados en el Real Decreto 488/1997, de 14 de abril, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas de visualización, donde se aplican las disposiciones de la Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales.

También hay que tener en cuenta que en el ámbito de la Unión Europea se han fijado mediante las correspondientes Directivas criterios de carácter general sobre las acciones en materia de seguridad y salud en los centros de trabajo, así como criterios específicos referidos a medidas de protección contra accidentes y situaciones de riesgo. Concretamente, la Directiva 90/270/CEE, de 29 de mayo, establece las disposiciones mínimas de seguridad y de salud relativas al trabajo con equipos que incluyan pantallas de visualización. Es en el Real Decreto 488/1997 donde se transpone al Derecho español el contenido de la Directiva 90/270/CEE.

Real Decreto 488/1997, de 14 de abril

Artículo 1. Objeto

1. El presente Real Decreto establece las disposiciones mínimas de seguridad y de salud para la utilización por los trabajadores de equipos que incluyan pantallas de visualización.
2. Las disposiciones de la Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales, se aplicarán plenamente al conjunto del ámbito contemplado en el apartado anterior.
3. Quedan excluidos del ámbito de aplicación de este Real Decreto:
 - a) Los puestos de conducción de vehículos o máquinas.
 - b) Los sistemas informáticos embarcados en un medio de transporte.
 - c) Los sistemas informáticos destinados prioritariamente a ser utilizados por el público.
 - d) Los sistemas llamados portátiles, siempre y cuando no se utilicen de modo continuado en un puesto de trabajo.
 - e) Las calculadoras, cajas registradoras y todos aquellos equipos que tengan un pequeño dispositivo de visualización de datos o medidas necesario para la utilización directa de dichos equipos.
 - f) Las máquinas de escribir de diseño clásico, conocidas como máquinas de ventanilla.

Artículo 2. Definiciones

A efectos de este Real Decreto se entenderá por:

1. Pantalla de visualización: una pantalla alfanumérica o gráfica, independientemente del método de representación visual utilizado.
2. Puesto de trabajo: el constituido por un equipo con pantalla de visualización provisto, en su caso, de un teclado o dispositivo de adquisición de datos, de un programa para la interconexión persona/máquina, de accesorios ofimáticos y de un asiento y mesa o superficie de trabajo, así como el entorno laboral inmediato.
3. Trabajador: cualquier trabajador que habitualmente y durante una parte relevante de su trabajo normal utilice un equipo con pantalla de visualización.

Artículo 3. Obligaciones generales del empresario

1. El empresario adoptará las medidas necesarias para que la utilización por los trabajadores de equipos con pantallas de visualización no suponga riesgos para su seguridad o salud o, si ello no fuera posible, para que tales riesgos se reduzcan al mínimo. En cualquier caso, los puestos de trabajo a que se refiere el presente Real Decreto deberán cumplir las disposiciones mínimas establecidas en el anexo del mismo.
2. A efectos de lo dispuesto en el primer párrafo del apartado anterior, el empresario deberá evaluar los riesgos para la seguridad y salud de los trabajadores, teniendo en cuenta en particular los posibles riesgos para la vista y los problemas físicos y de carga mental, así como el posible efecto añadido o combinado de los mismos. La evaluación se realizará tomando en consideración las características propias del puesto de trabajo y las exigencias de la tarea y entre éstas, especialmente, las siguientes:
 - a) El tiempo promedio de utilización diaria del equipo.
 - b) El tiempo máximo de atención continua a la pantalla requerido por la tarea habitual.
 - c) El grado de atención que exija dicha tarea.
3. Si la evaluación pone de manifiesto que la utilización por los trabajadores de equipos con pantallas de visualización supone o puede suponer un riesgo para su seguridad o salud, el empresario adoptará las medidas técnicas u organizativas necesarias para eliminar o reducir el riesgo al mínimo posible. En particular, deberá reducir la duración máxima del trabajo continuado en pantalla, organizando la actividad diaria de forma que esta tarea se alterne con otras o estableciendo las pausas necesarias cuando la alternancia de tareas no sea posible o no baste para disminuir el riesgo suficientemente.
4. En los convenios colectivos podrá acordarse la periodicidad, duración y condiciones de organización de los cambios de actividad y pausas a que se refiere el apartado anterior.

Artículo 4. Vigilancia de la salud

1. El empresario garantizará el derecho de los trabajadores a una vigilancia adecuada de su salud, teniendo en cuenta en particular los riesgos para la vista y los problemas físicos y de carga mental, el posible efecto añadido o combinado de los mismos, y la eventual patología acompañante. Tal vigilancia será realizada por personal sanitario competente y según determinen las autoridades sanitarias en las pautas y protocolos que se elaboren, de conformidad con lo dispuesto en

el apartado 3 del artículo 37 del Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los servicios de prevención. Dicha vigilancia deberá ofrecerse a los trabajadores en las siguientes ocasiones:

- a) Antes de comenzar a trabajar con una pantalla de visualización.
 - b) Posteriormente, con una periodicidad ajustada al nivel de riesgo a juicio del médico responsable.
 - c) Cuando aparezcan trastornos que pudieran deberse a este tipo de trabajo.
2. Cuando los resultados de la vigilancia de la salud a que se refiere el apartado 1 lo hiciese necesario, los trabajadores tendrán derecho a un reconocimiento oftalmológico.
 3. El empresario proporcionará gratuitamente a los trabajadores dispositivos correctores especiales para la protección de la vista adecuados al trabajo con el equipo de que se trate, si los resultados de la vigilancia de la salud a que se refieren los apartados anteriores demuestran su necesidad y no pueden utilizarse dispositivos correctores normales.

Artículo 5. Obligaciones en materia de información y formación

1. De conformidad con los artículos 18 y 19 de la Ley de Prevención de Riesgos Laborales, el empresario deberá garantizar que los trabajadores y los representantes de los trabajadores reciban una formación e información adecuadas sobre los riesgos derivados de la utilización de los equipos que incluyan pantallas de visualización, así como sobre las medidas de prevención y protección que hayan de adoptarse en aplicación del presente Real Decreto.
2. El empresario deberá informar a los trabajadores sobre todos los aspectos relacionados con la seguridad y la salud en su puesto de trabajo y sobre las medidas llevadas a cabo de conformidad con lo dispuesto en los artículos 3 y 4 de este Real Decreto.
3. El empresario deberá garantizar que cada trabajador reciba una formación adecuada sobre las modalidades de uso de los equipos con pantallas de visualización, antes de comenzar este tipo de trabajo y cada vez que la organización del puesto de trabajo se modifique de manera apreciable.

Artículo 6. Consulta y participación de los trabajadores

La consulta y participación de los trabajadores o sus representantes sobre las cuestiones a que se refiere este Real Decreto se realizarán de conformidad con lo dispuesto en el apartado 2 del artículo 18 de la Ley de Prevención de Riesgos Laborales.

Anexo. Disposiciones mínimas

1. Equipo

a) Observación general.

La utilización en sí misma del equipo no debe ser una fuente de riesgo para los trabajadores.

b) Pantalla.

Los caracteres de la pantalla deberán estar bien definidos y configurados de forma clara, y tener una dimensión suficiente, disponiendo de un espacio adecuado entre los caracteres y los renglones.

La imagen de la pantalla deberá ser estable, sin fenómenos de destellos, centelleos u otras formas de inestabilidad.

El usuario de terminales con pantalla deberá poder ajustar fácilmente la luminosidad y el contraste entre los caracteres y el fondo de la pantalla, y adaptarlos fácilmente a las condiciones del entorno. La pantalla deberá ser orientable e inclinable a voluntad, con facilidad para adaptarse a las necesidades del usuario.

Podrá utilizarse un pedestal independiente o una mesa regulable para la pantalla.

La pantalla no deberá tener reflejos ni reverberaciones que puedan molestar al usuario.

c) Teclado.

El teclado deberá ser inclinable e independiente de la pantalla para permitir que el trabajador adopte una postura cómoda que no provoque cansancio en los brazos o las manos.

Tendrá que haber espacio suficiente delante del teclado para que el usuario pueda apoyar los brazos y las manos.

La superficie del teclado deberá ser mate para evitar los reflejos.

La disposición del teclado y las características de las teclas deberán tender a facilitar su utilización.

Los símbolos de las teclas deberán resaltar suficientemente y ser legibles desde la posición normal de trabajo.

d) Mesa o superficie de trabajo.

La mesa o superficie de trabajo deberán ser poco reflectantes, tener dimensiones suficientes y permitir una colocación flexible de la pantalla, del teclado, de los documentos y del material accesorio.

El soporte de los documentos deberá ser estable y regulable y estará colocado de tal modo que se reduzcan al mínimo los movimientos incómodos de la cabeza y los ojos.

El espacio deberá ser suficiente para permitir a los trabajadores una posición cómoda.

e) Asiento de trabajo.

El asiento de trabajo deberá ser estable, proporcionando al usuario libertad de movimiento y procurándole una postura confortable. La altura del mismo deberá ser regulable.

El respaldo deberá ser reclinable y su altura ajustable.

Se pondrá un reposapiés a disposición de quienes lo deseen.

2. Entorno

a) Espacio.

El puesto de trabajo deberá tener una dimensión suficiente y estar acondicionado de tal manera que haya espacio suficiente para permitir los cambios de postura y movimientos de trabajo.

b) Iluminación.

La iluminación general y la iluminación especial (lámparas de trabajo), cuando sea necesaria, deberán garantizar unos niveles adecuados de iluminación y unas relaciones adecuadas de luminancias entre la pantalla y su entorno, habida cuenta del carácter del trabajo, de las necesidades visuales del usuario y del tipo de pantalla utilizado.

El acondicionamiento del lugar de trabajo y del puesto de trabajo, así como la situación y las características técnicas de las fuentes de luz artificial,

deberán coordinarse de tal manera que se eviten los deslumbramientos y los reflejos molestos en la pantalla u otras partes del equipo.

c) Reflejos y deslumbramientos.

Los puestos de trabajo deberán instalarse de tal forma que las fuentes de luz, tales como ventanas y otras aberturas, los tabiques transparentes o translúcidos y los equipos o tabiques de color claro no provoquen deslumbramiento directo ni produzcan reflejos molestos en la pantalla.

Las ventanas deberán ir equipadas con un dispositivo de cobertura adecuado y regulable para atenuar la luz del día que ilumine el puesto de trabajo.

d) Ruido.

El ruido producido por los equipos instalados en el puesto de trabajo deberá tenerse en cuenta al diseñar el mismo, en especial para que no se perturbe la atención ni la palabra.

e) Calor.

Los equipos instalados en el puesto de trabajo no deberán producir un calor adicional que pueda ocasionar molestias a los trabajadores.

f) Emisiones.

Toda radiación, excepción hecha de la parte visible del espectro electromagnético, deberá reducirse a niveles insignificantes desde el punto de vista de la protección de la seguridad y de la salud de los trabajadores.

g) Humedad.

Deberá crearse y mantenerse una humedad aceptable.

3. Interconexión ordenador/persona

Para la elaboración, la elección, la compra y la modificación de programas, así como para la definición de las tareas que requieran pantallas de visualización, el empresario tendrá en cuenta los siguientes factores:

a) El programa habrá de estar adaptado a la tarea que deba realizarse.

b) El programa habrá de ser fácil de utilizar y deberá, en su caso, poder adaptarse al nivel de conocimientos y de experiencia del usuario; no deberá utilizarse ningún dispositivo cuantitativo o cualitativo de control sin que los trabajadores hayan sido informados y previa consulta con sus representantes.

- c) Los sistemas deberán proporcionar a los trabajadores indicaciones sobre su desarrollo.
- d) Los sistemas deberán mostrar la información en un formato y a un ritmo adaptados a los operadores.
- e) Los principios de ergonomía deberán aplicarse en particular al tratamiento de la información por parte de la persona.

Capítulo 2

Pliego de condiciones de especificaciones técnicas

2.1 Especificaciones de los recursos

Dado que el trabajo efectuado está basado en la realización de simulaciones y el posterior procesado de la información resultante, ambos de forma computacional, los requerimientos en términos de equipos físicos o dimensiones espaciales se encuentran sometidos al Real Decreto 488/1997. Todo aquello que resulta necesario para el correcto desempeño de este proyecto se encuentra citado en la siguiente enumeración:

- Personal

La necesidad de su presencia es evidente, pues alguien ha de hacerse responsable de la ejecución del trabajo. Para este proyecto en particular, se emplea una persona en la realización propia del trabajo. No obstante, se requiere de personal adicional, un tutor y un cotutor en este caso, que posean conocimientos y experiencia en la materia abordada en el trabajo.

La función de tutor y cotutor es la de definir la temática del trabajo, guiar durante su desarrollo y supervisar las labores desempeñadas por el alumno. Las acciones de guiar y supervisar pueden resultar ciertamente ambiguas. Dentro de dichas competencias pueden englobarse acciones como: indicar qué acciones han de llevarse a cabo, solventar problemas derivados de uso del *software*, resolver dudas respecto a la redacción del trabajo, definir criterios y plazos para la realización de ciertas labores, etc.

■ *Hardware* informático

Se requiere de un *hardware* relativamente sofisticado que sea capaz de resolver los casos propuestos. Estos casos tienen como particularidades que suelen necesitar ser resueltos en paralelo, necesitando por tanto varios núcleos, y con elevadas capacidades de memoria RAM que permitan trabajar a los equipos cómodamente. Pese a todo lo anterior, la resolución de un caso puede llevar desde horas a días, en función de múltiples parámetros como puede ser el número de celdas, el paso temporal o la cantidad de modelos implementados.

Debido a la complejidad del estudio (número de casos a simular, tiempos de simulación, precisión buscada, etc.) se ha utilizado un ordenador portátil y una estación de cálculo para la resolución de los casos planteados. Un disco duro externo ha sido necesario para guardar la información de los casos simulados y poder postprocesarlos posteriormente. Adicionalmente, un ratón y teclado inalámbricos han sido empleados para poder operar más cómodamente.

■ *Software* informático

La mayor parte del *software* utilizado está disponible gracias a los acuerdos que la Universitat Politècnica de València tiene con las empresas distribuidoras de dicho *software*.

Los programas empleados para la elaboración del trabajo son:

- CONVERGE CFD v3.0
- MATLAB R2020b
- Microsoft Office 2021
- Paraview 5.9.1
- MobaXTerm
- FileZilla
- Notepad++
- Adobe Acrobat DC
- Overleaf

Cabe destacar que el principal obstáculo viene de la mano del uso de CONVERGE CFD, cuya licencia tiene un precio muy elevado en comparación con el resto de los programas usados. Tal es la suma, que el proceso de renovación de la licencia se demoró y mantuvo al personal inactivo durante un periodo cercano a un mes.

- Instalaciones

Las instalaciones deben cumplir dos factores fundamentales: crear un entorno de trabajo tranquilo, cómodo y sin distracciones y disponer de todos los medios, o suministros, que sean requeridos por su usuario.

El entorno de trabajo necesario para la elaboración de este proyecto únicamente requiere de un escritorio lo suficientemente grande como para abarcar el *hardware* empleado y una silla de escritorio ergonómica.

En relación con los suministros, electricidad e internet son fundamentales. La electricidad es la fuente de alimentación de todos los equipos empleados e incluso es requerida para mantener la conexión a internet. Con respecto al internet, es indispensable mantener una conexión estable y de alta velocidad que permita la comunicación entre el ordenador portátil y la estación de cálculo, necesaria para poder lanzar simulaciones en la estación remota y transmitir grandes volúmenes de archivos de un equipo a otro. La conexión a internet también es necesaria para la búsqueda bibliográfica, consulta en foros de ayuda, descarga de documentación, comunicación con los tutores e incluso para el uso de cierto *software*, como podría ser el editor de texto Overleaf.

- Material de oficina

El material de oficina debe estar siempre funcional para poder tomar notas, plantear diagramas de trabajo, estructurar capítulos por medio de esquemas o dibujar bocetos que permitan interpretar el modo de funcionamiento de ciertos programas creados en el *software* oportuno.

- Conocimientos previos

Cierta formación previa es necesaria para el correcto desempeño del trabajo.

Dentro de esta formación pueden englobarse conocimientos vinculados con termodinámica, métodos numéricos, herramientas computacionales para resolver problemas de mecánica de fluidos, etc. Todos estos conocimientos son adquiridos a lo largo del grado que finaliza con este trabajo.

Por otro lado, conocimientos informáticos y ofimáticos son recomendables. Estos permitirán solventar problemas de una manera más rápida y eficiente a la par que permitirán elaborar una memoria del trabajo más atractiva y en un tiempo reducido.

2.2 Condiciones de calidad

La empresa encargada de la realización del proyecto ha de poder garantizar la calidad del producto final. Por este motivo, la calidad de los proyectos realizados por dicha empresa en ocasiones anteriores será tenida en consideración. Se valorará la disposición del certificado de calidad ISO-9001 por parte de la empresa.

La empresa deberá realizar pruebas intermedias a lo largo del proceso de desarrollo del proyecto. Durante la programación se evaluarán cada una de las funciones o rutinas con el objeto de depurar errores de codificación. Posteriormente, se efectuarán pruebas para comprobar que cumplen las funciones previstas. Finalmente, se desarrollarán pruebas de aceptación con el sistema completamente integrado.

Tanto el sistema de calidad de la empresa como el proceso de pruebas y sus resultados deberán estar debidamente documentados. Particularmente, se deberá presentar un registro impreso en el que se recojan las pruebas llevadas a cabo, indicando título de la prueba, descripción, entorno y fecha de realización, resultados y valoraciones o comentarios.

2.3 Condiciones de garantía y mantenimiento

La empresa contratada para la ejecución del proyecto garantiza durante el período de dos años el producto final. De esta forma se compromete a responder ante cualquier problema surgido en el uso cotidiano de este, así como de ofrecer un servicio de atención al cliente que tiene por objeto solventar dudas en relación con el manejo del sistema. El plazo de garantía comenzará a ser efectivo desde el momento de su recepción. La garantía quedará invalidada cuando, en posesión de las instrucciones del sistema, se haya hecho caso omiso a estas.

En relación con el mantenimiento al que debe someterse el producto, en este caso no hará falta ningún tipo de mantenimiento particular. Un uso adecuado del mismo siguiendo las pautas indicadas en el tutorial de la garantía y evitando los riesgos ahí expuestos asegura el buen funcionamiento del sistema.

2.4 Reclamaciones

Se atenderán exclusivamente a las reclamaciones formuladas por escrito en un plazo no superior a quince días hábiles a partir del momento de recepción del producto. En caso de que la entrega se realice fuera de España dicho plazo será prorrogado hasta un mes.

Únicamente en el caso de que alguna de las mercancías entregadas resulte defectuosa, el vendedor se compromete a la sustitución de las mismas declinando así cualquier otra responsabilidad. Ante envíos equivocados o la ausencia de estos, el vendedor se compromete exclusivamente al suministro de la mercancía estipulada en las condiciones establecidas por el cliente, siendo ajeno a cualquier otra responsabilidad.

2.5 Condiciones legales y contractuales

En el supuesto de que, durante la ejecución del proyecto, el comprador quisiese ampliar el contrato a otros suministros, estos se encontrarían sometidos a un nuevo presupuesto.

En caso de modificaciones sobre el producto base u otras causas que implicaran la suspensión temporal del suministro o retraso en el periodo de entrega, se podrá solicitar una prórroga a condición de que tal solicitud se adelante antes de que el término haya caducado.

2.6 Revisión de los precios

Los precios que se muestran en la Parte III son fijos e invariables independientemente de cuales sean las variaciones en coste que puedan sufrir los recursos empleados.

2.7 Fianza

El contratista se compromete a obtener aval bancario a favor del comprador, en concepto de fianza por una cuantía del 10% del valor total del contrato, con el fin de responder al cumplimiento de todas y cada una de las obligaciones previstas en dicho contrato. El aval ha de mantenerse desde el inicio del trabajo hasta el momento en que concluya el periodo de garantía. Una vez cumplido el periodo de garantía, la fianza será devuelta al contratista en un plazo no superior a diez días hábiles.

2.8 Aceptación

La aceptación será cumplida a través de los programas establecidos por el vendedor. Cuando la obligación de instalación corresponda al vendedor, la aceptación se producirá en el lugar de la dicha instalación una vez quede demostrado por parte del vendedor que los procedimientos de diagnóstico y de prueba funcionan correctamente y que el producto se encuentra en condiciones normales de operación. Si la instalación fuese prorrogada por parte del comprador más de treinta días tras la fecha de entrega,

el vendedor considerará que los productos han sido aceptados con efectividad del trigésimo primer día, contado a partir de la fecha de entrega.

Parte III

Presupuesto

Capítulo 1

Presupuesto

El presente capítulo recoge los costes derivados de la realización del Trabajo Fin de Grado. En primer lugar, en la Sección 1.1 se presenta un recuento de los recursos empleados para la elaboración del trabajo segregando según su índole: personal, equipos informáticos (*hardware* y *software*), instalaciones y material de oficina. Posteriormente, en la Sección 1.2 se incluyen los costes unitarios de todos los recursos previamente citados en la Sección 1.1. Finalmente, en la Sección 1.3 se presenta el presupuesto definitivo del proyecto.

Los precios que han sido aplicados corresponden a tarifas legales vigentes o, en caso de no existir referencia, a estimaciones tras una evaluación del mercado.

1.1 Desglose de recursos

En esta sección se recogen, agrupados según índole, todos los recursos que han sido necesarios para el correcto desempeño de este trabajo:

- Personal

| Código | Descripción | Factor | Unidades |
|--------|-----------------------------------|--------|----------|
| RP01 | Profesor Titular de Universidad | h | 1 |
| RP02 | Técnico Superior de Investigación | h | 1 |
| RP03 | Alumno Becario | h | 1 |

Tabla 1.1: Personal involucrado en la elaboración del trabajo.

■ *Hardware* informático

| Código | Descripción | Factor | Unidades |
|--------|---------------------------------------|--------|----------|
| RH01 | Ordenador portátil Lenovo ideapad 320 | h | 1 |
| RH02 | Estación de cálculo | h | 1 |
| RH03 | Disco duro externo WD Elements 1 TB | Ud | 1 |
| RH04 | Teclado y ratón inalámbricos TedGem | Ud | 1 |

Tabla 1.2: *Hardware* informático empleado en la elaboración del trabajo.

■ *Software* informático

| Código | Descripción | Factor | Unidades |
|--------|--------------------------------|--------|----------|
| RS01 | Licencia CONVERGE CFD v3.0 | h | 1 |
| RS02 | Licencia MATLAB R2020b | h | 1 |
| RS03 | Licencia Microsoft Office 2021 | h | 1 |
| RS04 | Licencia Paraview 5.9.1 | h | 1 |
| RS05 | Licencia MobaXTerm | h | 1 |
| RS06 | Licencia FileZilla | h | 1 |
| RS07 | Licencia Notepad ++ | h | 1 |
| RS08 | Licencia Adobe Acrobat DC | h | 1 |
| RS09 | Licencia Overleaf | h | 1 |

Tabla 1.3: *Software* informático empleado en la elaboración del trabajo.

■ Instalaciones

| Código | Descripción | Factor | Unidades |
|--------|-------------------|--------|----------|
| RI01 | Alquiler despacho | Ud | 1 |
| RI02 | Suministros | Ud | 1 |

Tabla 1.4: Instalaciones necesarias para la elaboración del trabajo.

- Material de oficina

| Código | Descripción | Factor | Unidades |
|--------|-------------------------------------|--------|----------|
| RM01 | Libreta Oxford & You Europeanbook 5 | Ud | 1 |
| RM02 | Bolígrafo Pilot V-Ball 0.7 | Ud | 3 |
| RM03 | Paquete de folios Copystar A4 | Ud | 1 |

Tabla 1.5: Material de oficina empleado en la elaboración del trabajo.

1.2 Desglose de costes unitarios

En la presente sección se calculan los costes unitarios de cada uno de los recursos indicados en la Sección 1.1. Para ello, se hace uso de las nociones básicas impartidas en el Apéndice A.

1.2.1 Coste de personal unitario

- Profesor Titular de Universidad

$$\text{Salario bruto anual} = 32.540,52 \text{ €} \quad (1.1a)$$

$$\text{Coste horario} = \frac{32.540,52}{1.736} = 18,74 \text{ €/h} \quad (1.1b)$$

- Técnico Superior de Investigación¹

$$\text{Salario bruto anual} = 18.086,38 \text{ €} \quad (1.2a)$$

$$\text{Coste horario} = \frac{18.086,38}{1.736} = 10,42 \text{ €/h} \quad (1.2b)$$

- Alumno Becario

$$\text{Importe de la beca} = 2.000 \text{ €} \quad (1.3a)$$

$$\text{Coste horario} = \frac{2.000}{510} = 3,92 \text{ €/h} \quad (1.3b)$$

¹Para el cálculo de su coste se ha empleado la denominación Ayudante.

1.2.2 Coste de *hardware* informático unitario

- Ordenador portátil Lenovo ideapad 320

Estimando un valor residual del 18 % y un periodo de amortización de 5 años:

$$a = \frac{885 - 159,3}{5} = 145,14 \text{ €/año} \quad (1.4a)$$

$$t_h = \frac{145,14}{1.736} = 0,084 \text{ €/h} \quad (1.4b)$$

- Estación de cálculo

Estimando un valor residual del 20 % y un periodo de amortización de 8 años:

$$a = \frac{3.000 - 600}{8} = 300 \text{ €/año} \quad (1.5a)$$

$$t_h = \frac{300}{1.736} = 0,17 \text{ €/h} \quad (1.5b)$$

- Disco duro externo WD Elements 1 TB

$$\text{Coste de adquisición} = 52,24 \text{ €} \quad (1.6)$$

- Teclado y ratón inalámbricos TedGem

$$\text{Coste de adquisición} = 20,39 \text{ €} \quad (1.7)$$

1.2.3 Coste de *software* informático unitario

- Licencia de CONVERGE CFD v3.0

El valor de una licencia anual para 3 trabajos a la vez y para 21 procesadores es de 20.400 €. Considerando que se han empleado 8 procesadores:

$$\text{Coste asociado al estudio} = \frac{20.400}{21} \cdot 8 = 7.771,43 \text{ €} \quad (1.8)$$

La tasa horaria asociada al uso de CONVERGE CFD v3.0 es:

$$t_h = \frac{7.771,43}{1.736} = 4,48 \text{ €/h} \quad (1.9)$$

- Licencia de MATLAB R2020b

El valor de una licencia educacional anual es de 1.523 €. La tasa horaria asociada al uso de MATLAB R2020b es:

$$t_h = \frac{1.523}{1.736} = 0,88 \text{ €/h} \quad (1.10)$$

- Licencia de Microsoft Office 2021

El valor de una licencia estándar anual es de 99 €. La tasa horaria asociada al uso de Microsoft Office 2021 es:

$$t_h = \frac{99}{1.736} = 0,057 \text{ €/h} \quad (1.11)$$

- Licencia de Paraview 5.9.1

Es *software* libre, por lo que su licencia es gratuita.

- Licencia de MobaXTerm

Se ha usado la versión de uso doméstico, por lo que su licencia es gratuita.

- Licencia de FileZilla

Es *software* libre, por lo que su licencia es gratuita.

- Licencia de Notepad++

Es *software* libre, por lo que su licencia es gratuita.

- Licencia de Adobe Acrobat DC

Se ha usado la versión de prueba, por lo que su licencia es gratuita.

- Licencia de Overleaf

Se ha usado la versión gratuita para estudiantes.

1.2.4 Coste de las instalaciones

La situación de la pandemia ha derivado en un auge del teletrabajo. Es así que este trabajo ha sido llevado a cabo por medio de dicha modalidad.

- Alquiler despacho

El lugar donde el trabajo ha sido desarrollado es un piso alquilado por el alumno en la ciudad de Valencia a razón de 200 €/mes. Teniendo en cuenta que el uso del piso no está restringido al desarrollo del proyecto (considérese dicho uso el de un despacho convencional) sino que también es el lugar de residencia del alumno y su alquiler también atiende a motivos académicos (curso presencial), se puede considerar que un 15% del alquiler ha sido destinado al uso de oficina durante los seis primeros meses del contrato de becario. No obstante, la contribución del piso como despacho es íntegra durante los dos últimos meses del contrato de becario. Así, el coste de alquiler en concepto de despacho resulta:

$$\text{Coste de alquiler de despacho} = 200 \cdot (6 \cdot 0,15 + 2) = 580 \text{ €} \quad (1.12)$$

- Suministros

Adicionalmente al alquiler del despacho, los gastos de luz, agua, aire e internet han de ser considerados. Estos se engloban en el coste de suministros. Aplicando los mismos rendimientos que para el alquiler del despacho a una factura en concepto de suministros que ronda los 60 €/mes, el coste de los suministros resulta:

$$\text{Coste de suministros} = 60 \cdot (6 \cdot 0,15 + 2) = 174 \text{ €} \quad (1.13)$$

1.2.5 Coste de material de oficina unitario

Dentro de estos costes se incluyen los materiales de oficina necesarios para la realización del estudio:

- Libreta Oxford & You Europeanbook 5

$$\text{Coste de adquisición} = 7,41 \text{ €} \quad (1.14)$$

- Bolígrafo Pilot V-Ball 0.7

$$\text{Coste de adquisición} = 1,78 \text{ €} \quad (1.15)$$

- Paquete de folios Copystar A4

$$\text{Coste de adquisición} = 4,29 \text{ €} \quad (1.16)$$

1.3 Presupuesto total

En esta sección se adjuntan dos tablas en las que se define el presupuesto total del trabajo realizado. Dicho presupuesto presenta un aspecto limitado dadas las características del proyecto llevado a cabo. Las tablas que se presentan se corresponden con el presupuesto de recursos por clase y el presupuesto total.

| Código | Cantidad | Descripción del recurso | Precio | Importe |
|-----------------------|----------|---------------------------------------|--------|-------------------|
| RP | | Personal | | |
| RP01 | 30,00 | Profesor Titular de Universidad | 18,74 | 562,20 |
| RP02 | 25,00 | Técnico Superior de Investigación | 10,42 | 260,50 |
| RP03 | 510,00 | Alumno Becario | 3,92 | 2.000,00 |
| | | Total | | 2.822,70 € |
| RH | | Hardware informático | | |
| RH01 | 510,00 | Ordenador portátil Lenovo ideapad 320 | 0,08 | 42,84 |
| RH02 | 400,00 | Estación de cálculo | 0,17 | 68 |
| RH03 | 1,00 | Disco duro externo WD Elements | 52,24 | 52,24 |
| RH04 | 1,00 | Teclado y ratón inalámbricos TedGem | 20,39 | 20,39 |
| | | Total | | 183,47 € |
| RS | | Software informático | | |
| RS01 | 420,00 | Licencia CONVERGE CFD v3.0 | 4,48 | 1.881,60 |
| RS02 | 85,00 | Licencia MATLAB R2020b | 0,88 | 74,80 |
| RS03 | 100,00 | Licencia Microsoft Office 2021 | 0,06 | 5,70 |
| RS04 | 30,00 | Licencia Paraview 5.9.1 | 0,00 | 0,00 |
| RS05 | 40,00 | Licencia MobaXTerm | 0,00 | 0,00 |
| RS06 | 5,00 | Licencia FileZilla | 0,00 | 0,00 |
| RS07 | 10,00 | Licencia Notepad ++ | 0,00 | 0,00 |
| RS08 | 30,00 | Licencia Adobe Acrobat DC | 0,00 | 0,00 |
| RS09 | 150,00 | Licencia Overleaf | 0,00 | 0,00 |
| | | Total | | 1.962,10 € |
| RI | | Instalaciones | | |
| RI01 | 1,00 | Alquiler despacho | 580,00 | 580,00 |
| RI02 | 1,00 | Suministros | 174,00 | 174,00 |
| | | Total | | 754,00 € |
| RM | | Material de oficina | | |
| RM01 | 1,00 | Libreta Oxford & You Europeanbook 5 | 7,41 | 7,41 |
| RM02 | 3,00 | Bolígrafo Pilot V-Ball 0.7 | 1,78 | 5,34 |
| RM03 | 1,00 | Paquete de folios Copystar A4 | 4,29 | 4,29 |
| | | Total | | 17,04 € |
| Total recursos | | | | 5.739,31 € |

Tabla 1.6: Presupuesto de recursos por clase.

| | |
|-------------------------------------|------------|
| TOTAL EJECUCIÓN MATERIAL | 5.739,31 € |
| 6 % Beneficio Industrial | 344,36 |
| TOTAL EJECUCIÓN POR CONTRATA | 6.083,67 € |
| 21 % I.V.A. | 1.277,57 |
| TOTAL PRESUPUESTO C/IVA | 7.361,24 € |

Tabla 1.7: Presupuesto total.

Asciende el presupuesto proyectado, a la expresada cantidad de:

SIETE MIL TRESCIENTOS SESENTA Y UNO CON VEINTICUATRO EUROS

Apéndice A

Nociones básicas para el cálculo del presupuesto

Este apéndice pretende servir al lector como una consulta que le permita comprender el modo en que los costes unitarios descritos en la Sección 1.2 han sido calculados.

A.1 Coste de amortización

El coste de amortización de los bienes utilizados se calcula como:

$$a = \frac{VC - VR}{n} \quad (\text{A.1})$$

donde:

a : amortización (€/año)

VC : valor de compra (€)

VR : valor residual al cabo del periodo de amortización (€)

n : periodo de amortización (años)

A.2 Tasa horaria

La tasa horaria viene definida como:

$$t_h = \frac{a}{h} \quad (\text{A.2})$$

donde:

t_h : tasa horaria (€/h)

a : amortización (€/año)

h : horas trabajadas en un año (h)