

## Resumen

La creciente preocupación sobre el efecto de la emisión de gases nocivos provenientes de motores de combustión interna alternativos (ICE) a la atmósfera ha llevado a los gobiernos a lo ancho del planeta a limitar la cantidad de dichas emisiones, particularmente en Europa a través de las normas EURO. La dificultad en cumplir dichas limitaciones ha llevado a la industria automovilística a cambiar el foco de motores de encendido por compresión (CI) o provocado (SI) hacia la electrificación o los combustibles libres de carbono. Sin embargo, esta transición no se puede llevar a cabo de manera sencilla en el corto y medio plazo, mientras que combustibles libres de carbono como el Hidrógeno ( $H_2$ ) o el Amoniaco ( $NH_3$ ) siguen produciendo algunos contaminantes como los Óxidos de Nitrógeno ( $NO_x$ ), con los cuales hay que lidiar. Estas emisiones pueden ser particularmente dañinas para el ser humano ya que incrementan el riesgo de cáncer de pulmón. La Reducción Catalítica Selectiva (SCR) ha demostrado ser una tecnología eficaz para la reducción de este contaminante en particular. A través de una inyección de una Solución de Urea-Agua, junto con la energía térmica de los gases de escape, se genera una cantidad suficiente de  $NH_3$  capaz de neutralizar los indeseados  $NO_x$  en un catalizador de reducción. Con la inclusión de los SCR en automóviles ligeros además de su presencia tradicional en automóviles pesados, los SCR han sido el foco de la comunidad científica para mejorar el entendimiento de su principio de actuación, y mejorar su eficiencia en un entorno legislativo en el que los límites de emisión se han estrechado enormemente. Esta Tesis intenta ser parte de ese esfuerzo científico en caracterizar el proceso de inyección de UWS en su totalidad a través de un entorno computacional.

El presente estudio tiene como objetivo proveer de un mejor entendimiento del proceso de atomización y degradación sufrido por los chorros de UWS. Las dinámicas no estacionarias que se dan lugar en la zonas cercana del chorro, añadido a la gran influencia de las características internas del inyector sobre el desarrollo del spray hacen que los métodos experimentales sean complicados para poder entender dicho proceso. Por otro lado, la Mecánica de Fluidos Computacional (CFD) supone una alternativa con ciertas ventajas. Para el propósito de esta Tesis, el CFD ha sido utilizado como la principal metodología para caracterizar los sprays de SCR. Mediante dichos métodos, se intenta desarrollar y seleccionar los modelos más apropiados que mejor se adapten a chorros de baja velocidad, y establecer un conocimiento para posteriores estudios desarrollados sobre la misma temática. Una vez adquiridos dichos métodos, los mecanismos principales de rotura del chorro, así como los de degradación de la urea en amoníaco se han analizan. En ese sentido, el

uso de técnicas experimentales podrían ser sustituidos en el futuro para esta aplicación.

Los métodos CFD son aplicados y validados tanto en el campo cercano como en el lejano. Para el campo cercano, el tratamiento multi-fase se lleva a cabo a través de métodos Euleriano-Euleriano, como el Modelo de Mezclas, o el método Volume-Of-Fluid. A través de ellos, la caracterización hidráulica de dos reconstrucciones del inyector de UWS se lleva a cabo, cuyos resultados son comparados con datos experimentales. Subsiguientes análisis se llevan a cabo sobre las dinámicas de rotura de la vena líquida, descubriendo que mecanismos rigen el proceso. El estudio de campo lejano usa un Discrete Droplet Model (DDM) para lidiar con las fases líquidas y gaseosas. En él, la evaporación del agua y el proceso de termólisis de la urea han sido considerados y de nuevo, comparados con resultados experimentales con el fin de obtener una metodología fiel para su caracterización. Todo el conocimiento adquirido se aplica más tarde a un Close-Coupled SCR, en el cual condiciones de trabajo realista han sido consideradas. De los resultados obtenidos de los distintos estudios, una herramienta adicional llamada Maximum Entropy Principle (MEP), capaz de predecir el fenómeno de atomización de los chorros de UWS sin necesidad de realizar simulaciones de campo cercano, es presentada.

Por tanto, esta Tesis aporta una metodología valiosa capaz de predecir tanto el campo cercano como el lejano de una manera precisa por su comparación con los resultados experimentales de la literatura. Dicha metodología puede aplicarse no solo al software CFD usado durante esta Tesis, si no al resto de paquetes disponibles. Adicionalmente, la herramienta MEP puede ser usada de manera independiente para estudios computacionales como experimentales para predecir el rendimiento de inyectores de UWS. En ese sentido, el trabajo realizado presenta un salto adelante significativo en la aplicación de herramientas CFD para la predicción de chorros desafiantes como los de UWS.