



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



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

VALIDACIÓN EXPERIMENTAL Y ANÁLISIS DE
SENSIBILIDAD DE UN MODELO DE REGENERACIÓN
UNI-DIMENSIONAL PARA FILTROS DE PARTÍCULAS
DIÉSEL

TRABAJO FIN DE GRADO
INGENIERÍA AEROESPACIAL



AUTOR: NOELIA TARAZONA BENITO
TUTOR: DR. D. PEDRO PIQUERAS CABRERA
DIRECTOR EXPERIMENTAL: ENRIQUE JOSÉ SANCHIS PACHECO

VALENCIA, JULIO 2017

Agradecimientos

En primer lugar me gustaría expresar mi más sincero agradecimiento al tutor del proyecto, Dr. D. Pedro Piqueras Cabrera, y al director experimental, Enrique José Sanchis Pacheco, por haber confiado en mí y por toda la colaboración, dedicación y consejos que me han ayudado a llevar a cabo este trabajo.

En segundo lugar, sobre todo, a mis padres y mi hermano, sin los cuales no estaría donde estoy ahora. Muchísimas gracias por vuestro apoyo incondicional y por creer en mí cuando yo no lo hacía.

No me voy a olvidar de tí, Manuel, que después de mis padres eres el que más me ha sufrido. Muchísimas gracias por ayudarme a mantener la calma y estar ahí cada vez que te necesitaba.

Por último a mis amigas y compañeras de clase, Mara y Almudena, sin vosotras esta etapa de mi vida habría sido muy diferente, me alegra muchísimo tener vuestra amistad y espero conservarla muchos años más.

Resumen

Hoy en día, las exigentes normativas de regulación de las emisiones contaminantes en motores de combustión interna alternativos han llevado al sector automovilístico a centrar gran cantidad de recursos en la investigación en medios para la reducción de dichas emisiones y la mejora de la eficiencia energética.

Dentro de los motores de encendido por compresión, una de las principales restricciones es la impuesta a la emisión de partículas sólidas. Dada la exigencia de las normas vigentes es necesario la introducción de un sistema de post-tratamiento de gases de escape específico para estas emisiones: El filtro de partículas Diesel o DPF.

Este sistema está compuesto por un conjunto de canales cerrados de forma alternativa forzando así a pasar al flujo de gas de escape a través de un medio poroso mediante el cual se retienen las partículas quedando éstas acumuladas dentro del filtro. La retención de estas partículas va a aumentando la pérdida de presión pudiendo llegar a obstruir el filtro. Esto hace necesario etapas periódicas de regeneración donde se eliminan las partículas atrapadas en el filtro por medio de un proceso de oxidación.

La complejidad de las etapas de un proceso de regeneración requiere un estudio exhaustivo de todos los procesos involucrados, tanto físicos como químicos. Todos estos fenómenos deben tenerse en cuenta en el desarrollo de modelos computacionales que permitan predecir el comportamiento del filtro durante los eventos de regeneración.

En este trabajo se ha empleado el modelo de DPF integrado en el software OpenWAM, desarrollado por el instituto universitario de investigación CMT, para realizar un estudio de sensibilidad ante posibles simplificaciones de algunos de los procesos con el fin de poder reducir el coste computacional, así como su mejor comprensión para poder encaminar futuros estudios centrados en la mejora de la eficiencia del proceso de regeneración, directamente relacionado con el consumo de combustible del motor.

Índice

Agradecimientos	III
Resumen	V
Nomenclatura	XVII
I MEMORIA TÉCNICA	1
1. Introducción	3
1.1. Motivación	3
1.2. Antecedentes	4
1.3. Objetivos	5
1.4. Metodología	5
2. Marco teórico	9
2.1. Normativa de emisiones	9
2.2. Sistemas de post-tratamiento	11
2.2.1. Catalizador de oxidación diésel: DOC	12
2.2.2. Sistema de reducción catalítica selectiva: SCR	13
2.2.3. Trampa de NO_x : LNT	14
2.2.4. Filtros de partículas	14
2.3. Filtro de partículas diésel de flujo de pared	18
2.3.1. Parámetros estructurales	19
2.3.2. Parámetros térmicos y mecánicos	21
2.3.3. Mecanismos de filtrado	22
2.3.4. Principales contribuciones a la pérdida de presión	23
2.3.5. Procesos de regeneración	24
3. Herramientas experimentales	27
3.1. Configuración experimental	27
3.2. Instalación e instrumentación	28
4. Herramientas computacionales	31

4.1. Generalidades	31
4.2. Modelo fluidodinámico de DPF	32
4.2.1. Submodelo de pérdida de presión	36
4.2.2. Submodelo de transmisión de calor	39
4.2.3. Submodelo de filtrado	41
4.2.4. Submodelo de regeneración	43
4.3. Reactividad química	44
4.3.1. Definición del volúmen de control	44
4.3.2. Fases de la reacción	46
4.3.3. Ecuación de conservación de las especies químicas	48
4.3.4. Cálculo de la potencia de regeneración	51
4.3.5. Balance de masas por filtrado y regeneración	52
5. Resultados	55
5.1. Validación modelo	55
5.1.1. Análisis temporal	57
5.2. Etapas de reactividad	62
5.2.1. Evaluación con el tiempo	62
5.2.2. Definición de las etapas de reactividad	66
5.3. Análisis de sensibilidad	68
5.3.1. Orden de reacción	69
5.3.2. Difusión interna	89
5.3.3. Difusión externa	95
5.3.4. Mesoestructura	100
6. Conclusiones	107
 II ANEXO	 113
 III PLIEGO DE CONDICIONES	 119
1. Ordenanzas de seguridad e higiene en el trabajo	121
1.1. Disposiciones generales	121
1.2. Condiciones generales de los centros de trabajo y de los meca- nismos y medidas de protección	122
 IV PRESUPUESTO	 129
1. Introducción	131

2. Balance de presupuesto	133
2.1. Partida de reuniones	133
2.1.1. Costes de mano de obra	133
2.1.2. Costes de amortización de equipos	135
2.1.3. Costes de material fungible	136
2.2. Partida de validación y análisis	136
2.2.1. Costes de mano de obra	137
2.2.2. Costes de amortización de equipos	137
2.2.3. Costes de material fungible	138
3. Presupuesto global	139

Índice de figuras

I Memoria	1
1.1. Esquema de la metodología de trabajo.	6
2.1. Normativa europea en emisiones de partículas y NO_x para vehículos ligeros con motor diésel.	11
2.2. Esquema de funcionamiento de un reactor catalítico de oxidación o DOC.	13
2.3. Esquema de funcionamiento de un SCR junto con un DOC aguas arriba e inyección de urea.	14
2.4. Monolito cerámico de flujo de pared de carburo de silicio y corte diametral [1].	16
2.5. Ejemplos de substrato genérico de espuma cerámica.	17
2.6. Geometría de un par de canales de entrada y salida de un DPF	20
2.7. Principales contribuciones a la caída de presión en el DPF. . . .	23
3.1. Esquema de la configuración de instrumentación de medidas de presión y temperatura en el DPF.	29
3.2. Sistema de válvulas by-pass para controlar la acumulación de hollín del DPF durante la estabilización del motor.	30
4.1. Representación esquemática en el modelo de acción de ondas WAM del DPF como combinación de elementos 1D y 0D unidos por condiciones de contorno[1].	32
4.2. Representación esquemática en el modelo de acción de ondas WAM del filtro de partículas Diesel de flujo de pared con discretización radial[1].	34
4.3. Resolución discreta de las ecuaciones de conservación en un canal de entrada y un canal de salida del filtro de partículas [1]. . . .	36
4.4. Sección transversal del canal de entrada del DPF [2].	37
4.5. Llenado progresivo de la unidad celular [3].	39
4.6. Esquema nodal del modelo de transmisión de calor en los canales del DPF [4].	40

4.7. Esquema nodal del modelo de transmisión de calor en los canales del DPF [4].	41
4.8. Esquema de las posibles regiones de acumulación de hollín en el filtro de partículas [4].	45
4.9. Esquema de los procesos limitantes en una reacción en la superficie de una partícula porosa [5].	46
4.10. Distribución de las moléculas sobre la superficie según la teoría de Langmuir (a) y BET (b).	48
5.1. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$).	56
5.2. Rectas de regresión de la caída de presión junto con el coeficiente de correlación R^2 ($A_n = 2$).	57
5.3. Evolución temporal de la temperatura de pared del canal de entrada para distintas posiciones a lo largo del mismo.	58
5.4. Evolución temporal de la masa de hollín en la capa y pared para distintas posiciones a lo largo del canal.	59
5.5. Tasa de consumo(5.5a) y potencia liberada(5.5b) de NO_2 a distintas longitudes a lo largo del tiempo.	60
5.6. Tasa de consumo(5.6a) y potencia liberada(5.6b) de O_2 a distintas longitudes a lo largo del tiempo.	60
5.7. Evolución temporal de la potencia total liberada para distintas posiciones longitudinales a lo largo del monolito.	61
5.8. Distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo.	63
5.9. Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo.	65
5.10. Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo.	67
5.11. Esquema de las etapas de reactividad en un proceso de regeneración de orden intermedio y factor preexponencial $A_n = 2$	68
5.12. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) y cinética química de orden 0.	70
5.13. Distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 0.	71
5.14. Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 0.	72
5.15. Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo suponiendo una cinética química de orden 0.	74
5.16. Esquema de las etapas de reactividad en un proceso de regeneración de orden 0 y factor preexponencial $A_n = 2$	75

5.17. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) y cinética química de orden 1.	76
5.18. Distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 1	77
5.19. Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 1	78
5.20. Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo suponiendo una cinética química de orden 1.	79
5.21. Esquema de las etapas de reactividad en un proceso de regeneración de orden 1 y factor preexponencial $A_n = 2$	81
5.22. Rectas de regresión de la caída de presión junto con el coeficiente de correlación R^2 para el caso de Orden 0.	82
5.23. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 0,3$) y cinética química de orden 0.	83
5.24. Rectas de regresión de la caída de presión junto con el coeficiente de correlación R^2 para el caso de Orden 1.	84
5.25. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 4$) y cinética química de orden 1.	85
5.26. Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo para orden 0 y 1 variando el factor preexponencial.	86
5.27. Comparación de las tasas de regeneración y sus variaciones para los distintos casos ejecutados durante el análisis de sensibilidad de orden de reacción.	87
5.28. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) con y sin difusión interna.	90
5.29. Estudio paramétrico de la influencia de la temperatura sobre la tasa de consumo para casos con y sin difusión interna.	92
5.30. Estudio paramétrico de la influencia de la temperatura sobre el módulo de Thiele para un caso con difusión interna.	93
5.31. Efectividad de la difusividad a distintas temperaturas.	95
5.32. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) con y sin difusión externa.	96
5.33. Estudio paramétrico de la influencia de la temperatura sobre la tasa de consumo para casos con y sin difusión externa.	98
5.34. Establecimiento de la temperatura límite a la cual se debe tener en cuenta la difusión externa.	99
5.35. Comparación de la tasa de consumo de O_2 para un caso con y sin difusión externa a 550°C	99
5.36. Evolución de la relación α_1/α_0 y w_{w1}/w_{w0} con x	102

5.37. Evolución de los parámetros térmicos y mecánicos relacionados con la mesoestructura con x	103
5.38. Comparacion de la evolución temporal de tres parámetros calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) para σ 200, 300 y 150 cpsi. .	105
II Anexo	112
1. Comparación de la evolución temporal de tres parámetros para distintas densidades de celda.	115
2. Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 200 cpsi . .	115
3. Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 300 cpsi . .	116
4. Distribución de las velocidades de filtrado a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 200 cpsi.	116
5. Distribución de las velocidades de filtrado a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 300 cpsi.	117

Índice de Tablas

I Memoria	1
2.1. Estimación de la implantación en el mercado de los diferentes tipos de filstros de partículas Diesel [6].	19
3.1. Características básicas del motor.	27
3.2. Características del DPF	28
3.3. Características de la instrumentación	29
5.1. Etapas de reactividad para el caso de adsorción.	67
5.2. Etapas de reactividad para el caso de Orden 0.	74
5.3. Etapas de reactividad para el caso de Orden 1.	80
5.4. Resumen de los intervalos límites para cada etapa de reactividad.	86
5.5. Parámetros mesoestructurales.	104
IV Presupuesto	128
2.1. Coste de mano de obra asociado a las reuniones de planificación del proyecto	134
2.2. Coste de mano de obra asociado a las reuniones entre doctorando y becario.	134
2.3. Coste de mano de obra asociado a las reuniones entre profesor contratado doctor y becario.	134
2.4. Coste de mano de obra asociado a las reuniones entre profesor contratado doctor, doctorando y becario.	135
2.5. Coste de mano de obra asociado a la partida de reuniones	135
2.6. Coste de los equipos asociados a la partida de reuniones	136
2.7. Equipos y coste de amortización de los equipos en la partida de reuniones.	136
2.8. Coste del material fungible asociado a la partida de reuniones	136
2.9. Coste de mano de obra asociado a la partida de validación y análisis por parte del doctorando y becario.	137

2.10. Equipos en la partida de realización de la validación y análisis. .	137
2.11. Amortización de los equipos en la partida de estudio computacional.	138
2.12. Coste del material fungible asociado a la validación y análisis. .	138
3.1. Coste total del proyecto aplicado el IVA asociado a la mano de obra.	139

Nomenclatura

Siglas

1D unidimensional

CRT *Continuously Regenerating Trap*

DOC *Diesel Oxidation Catalyst*

DPF filtro de partículas diésel (*Diesel Particulate Filter*)

ECU unidad de control de motor (*Engine control Unit*)

EGR recirculación de gases de escape (*Exhaust Gas Recirculation*)

HC hidrocarburos

ISF fracción insoluble

LNT trampa de NO_x (*Lean NO_x Trap*)

LOF *Light-off Factor*

MCIA Motor de Combustión Interna Alternativo

MEC Motor de Encendido por Compresión

MEP Motor de Encendido Provocado

MIF factor de integridad mecánica (*Mechanical Integrity Factor*)

NO_x óxidos de nitrógeno

OFA fracción abierta del área frontal del monolito (*Open Frontal Area*)

PM materia particulada (*Particulate Matter*)

SCR sistema de reducción catalítica selectiva (*Selective Catalytic Reduction*)

SFA superficie específica de filtrado (*Specific Filtration Area*)

SOF fracción orgánica soluble (*Soluble Organic Fraction*)

TIF factor de integridad térmica (*Thermal Integrity Factor*)

WAM modelo de acción de ondas (*Wave Action Model*)

Griegos

α longitud del lado del canal

χ factor de forma

ΔH_f entalpía de formación

Δp pérdida de presión

Δt paso temporal

Δx paso espacial en la discretización de los canales del monolito

η_D eficiencia de filtrado de una unidad colectora debida al mecanismo de difusión Browniana

η_I eficiencia de filtrado de una unidad colectora debida al mecanismo inercial

η_R eficiencia de filtrado de una unidad colectora debida al mecanismo de intercepción

η_{DRI} eficiencia de filtrado de una unidad colectora debida a los tres mecanismos de deposición

μ viscosidad dinámica del fluido

ϕ módulo de Thiele

ρ densidad del fluido

ρ_{pl} densidad de la capa de partículas

σ densidad de celdas del monolito

θ_n término para el equilibrio de adsorción

ε porosidad

Latinos

\dot{m} gasto másico

\dot{w}_n término fuente de la ecuación de conservación de especies

A_f área de filtrado

A_n	factor pre-exponencial o de frecuencia
A_{fr}	área total de la sección transversal del monolito
D	diámetro del monolito
d_{cell}	diámetro de la unidad celular
d_{cu}	diámetro de la unidad colectora
d_{part}	diámetro de partícula
d_{poro}	diámetro medio de poro
e_0	energía interna específica de parada
E_a	energía de activación
F	área de la sección transversal de un canal en el sistema de ecuaciones de conservación
F_w	coeficiente de transferencia de cantidad de movimiento debido al efecto de inyección o succión a través del medio poroso
h_0	entalpía específica de parada
K	factor hidrodinámico de Kuwabara
k	permeabilidad
K_c	constante cinética
$K_{s,n}$	constante de equilibrio de adsorción/desorción de la especie n en la superficie
L	longitud del monolito
L_e	longitud de los canales del monolito o longitud efectiva
L_{plug}	longitud del tapón
m_s	masa de hollín acumulada
m_{pl}	masa de hollín acumulada en la capa de partículas
N_c	número de canales del monolito
N_e	número de canales de entrada
N_R	parámetro de intercepción
N_s	número de canales de salida

p	presión del gas
Pe	número de Peclet
R	constante del gas
S_p	Superficie específica
St	número de Stokes
T	temperatura del gas
t	coordenada temporal en las ecuaciones de conservación de los canales
u	velocidad del flujo en la dirección axial
u_w	velocidad de filtrado o velocidad a través del medio poroso
V	volumen del filtro de partículas diésel definido con la longitud total del monolito
V_e	volumen del filtro de partículas diésel definido con la longitud de los canales del monolito
w_w	espesor de la pared porosa
W_{pl}	espesor de la capa de partículas
x	coordenada espacial en la dirección axial en las ecuaciones de conservación de los canales
X_n	fracción molar de la especie n
Y_n	fracción másica de la especie n
z	coordenada espacial en la dirección transversal a la pared porosa

Subíndices

e	referente a la entrada del canal
i	referente al instante de tiempo i
j	referente al tipo de canal (1 para entrada y 0 para salida)
lim	referente a una condición límite
n	referente a la especie
pl	referente a la capa de partículas
s	referente a la salida del canal

sat referente a condiciones de saturación de la pared porosa

w referente a la pared porosa

w_0 referente a la pared porosa en condiciones limpias

Parte I

MEMORIA TÉCNICA

Capítulo 1

Introducción

RESUMEN: Este capítulo presenta una breve introducción que consta de los principales antecedentes, objetivos del proyecto y motivación para el mismo basada en el contexto actual de la emisiones contaminantes. Por último se describirá brevemente la estructura del trabajo y metodología llevada a cabo.

1.1. Motivación

El funcionamiento de los automóviles, así como otras máquinas, se basa en la obtención de energía mecánica, principalmente, a partir de energía térmica. Esta conversión de energía se lleva a cabo mediante una máquina denominada motor térmico. La energía térmica se obtiene de combustibles orgánicos por medio de un proceso llamado combustión. Existen varios tipos de motores pero dentro del sector automovilístico se trabaja con motores de combustión interna alternativos (MCIAs), que a su vez se clasifican en dos grandes grupos: motores de encendido provocado o MEP y los motores de encendido por compresión, MEC. Éste último tipo de motor fue inventado en 1892 de mano de Rudolf Diesel.

El gran desarrollo del motor diésel le ha permitido a éste la aceptación en numerosas aplicaciones, llegando a ser el sistema propulsivo más eficiente del sector automovilístico [7]. A pesar de las mejoras alcanzadas, el hecho de que se hayan convertido en una necesidad diaria para la mayor parte de la población ha repercutido negativamente en el medio ambiente. Entre las principales acciones del motor sobre el medio ambiente destacan: emisión y contaminación de la atmósfera, emisión de sustancias que contribuyen al efecto invernadero y producción de niveles de ruido elevados.

El mayor rendimiento de los motores diésel implica una mayor economía de combustible y, por lo tanto, un menor impacto en la emisión de dióxido

de carbono [8], monóxido de carbono e hidrocarburos inquemados. En cambio, debido a la combustión no homogénea y a las altas presiones y temperaturas alcanzadas en el cilindro, los motores diésel generan un mayor número de óxidos de nitrógeno y partículas de hollín.

Los altos niveles de contaminación alcanzados actualmente han desencadenado la imposición de nuevas legislaciones que implican una limitación de emisiones contaminantes más restrictiva. A modo de ejemplo cabe destacar las normas EURO 5 y EURO 6 que se explicarán más adelante en el punto 2.1.

Para poder cumplir dichas normativas, los fabricantes de automóviles han desarrollado sistemas que ayudan a reducir las emisiones contaminantes: mejoras en sistemas de inyección, uso de EGR y sistemas de pos-tratamiento de gases. Explicados con más detalle en el punto 2.2. Estos sistemas afectan al funcionamiento del motor, pudiendo llegar a penalizar el consumo del mismo.

En este contexto se puede observar la gran importancia de la comprensión del funcionamiento de estos nuevos sistemas, así como la mejora de su eficiencia, cuyo fin es mitigar su efecto negativo sobre el consumo del motor. Con este motivo surge el presente proyecto, que parte de un modelado del proceso de regeneración de filtros de partículas Diesel o DPF (Sección 1.2).

La principal aportación de este trabajo es el estudio de sensibilidad ante simplificaciones del proceso de regeneración con el fin de poder reducir el coste computacional del modelo 1D, así como un pequeño análisis del mismo ante cambios estructurales. Para poder comprender bien el proceso de regeneración del filtro se estudiarán las diferentes etapas de reactividad y su distribución a lo largo del tiempo en función de distintos órdenes de reacción, pudiendo así definir las distintas etapas del proceso de regeneración. Para cerrar el trabajo se intentará mejorar un proceso de regeneración con inyección de agua [9] diseñando una estrategia basada en la información recopilada tras todos los estudios realizados a lo largo del proyecto.

1.2. Antecedentes

Este trabajo se sitúa dentro de una serie de proyectos llevados a cabo por el Instituto Universitario de Investigación CMT Motores Térmicos de la Universitat Politècnica de València, entre los que se incluyen los de Piqueras P., García-Alfonso O., Angiolini E. y Sanchis E.J. [1, 10, 11, 5].

Como base para este proyecto se parte del modelo uni-dimensional de filtros de partículas de flujo de pared integrado en OpenWAM [1, 2], un modelo de

flujo compresible, no-estacionario y no-homoentrópico que incluye diferentes submodelos: transmisión de calor, pérdida de presión [10] y filtrado [12].

Por su gran importancia para la comprensión del modelo fluidodinámico y la reactividad química cabe destacar la Tesis Doctoral de Piqueras, P. [1] y el Trabajo Fin de Máster de Sanchis, E.J. [5] respectivamente.

En cuanto a la parte estructural, macro y meso-estructura, se encuentran los estudios de carácter paramétrico resumidos en [13] que recopilan variaciones de macro y meso-geometría del filtro bajo distintas hipótesis.

Por último, para la parte final del trabajo, se atienden los trabajos relacionados con la inyección de agua en filtros de partículas recogidos en [9, 14].

1.3. Objetivos

Los objetivos fijados al inicio del trabajo estaban enfocados a un estudio de sensibilidad y validación del modelo. Posteriormente, a medida que se fue avanzando en materia, se añadieron nuevas metas relacionadas con la estructura del filtro y la inyección de agua, quedando los objetivos finales esquematizados de la siguiente manera:

- Validar el modelo de adsorción.
- Definir las etapas de reactividad en un proceso completo de regeneración.
- Demostrar la importancia del orden de reacción elegido para el modelado.
- Establecer la importancia de las diferentes fases del proceso de regeneración: adsorción, difusión interna y difusión externa.
- Estudiar la distribución del hollín y proceso de regeneración para distintos órdenes de reacción.
- Estudiar la distribución del hollín y eficiencia del proceso de regeneración cambiando parámetros estructurales como densidad de celdas.

1.4. Metodología

Con el fin de alcanzar los objetivos planteados de manera eficiente y ordenada, el siguiente esquema muestra la metodología propuesta para llevar a cabo el proyecto :

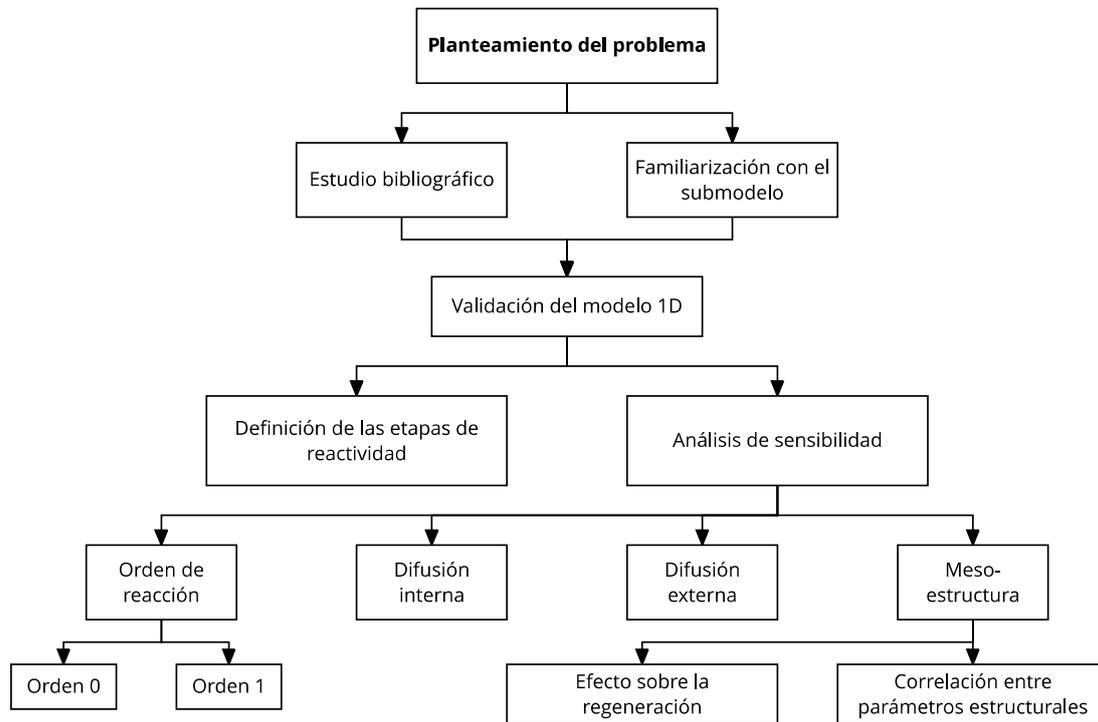


Figura 1.1: Esquema de la metodología de trabajo.

La figura 1.1 muestra el esquema inicial del que parte la organización del trabajo donde, inicialmente y tras el planteamiento del problema, se realiza un estudio bibliográfico sobre filtros de partículas diésel y una familiarización con el submodelo de regeneración desarrollado en [5].

Tras estos pasos previos se procede con la validación del modelo 1D partiendo de unos resultados experimentales obtenidos en el banco de flujo.

Una vez asegurado que el modelo reproduce fielmente los resultados experimentales el proyecto se divide en dos secciones principales: la definición de las etapas de reactividad y la realización de análisis de sensibilidad frente a algunos parámetros considerados importantes.

Para la definición de las etapas de reactividad se realizarán estudios espacio-temporales y de tasas de regeneración con el fin de poder establecer los límites de dichas etapas con criterio.

En cuanto a los análisis de sensibilidad, los estudios realizados son cuatro y sus aportaciones están relacionadas con: el orden de reacción, la difusión interna, la difusión externa y la meso-estructura.

El análisis de sensibilidad de orden de reacción se dividirá en dos partes en las que se observarán los cambios producidos al suponer una cinética química de orden cero y uno. Una vez vistas las principales variaciones que estas modificaciones conllevan, se intentará ajustar lo máximo posible el modelo con ambos órdenes de reacción. Si los resultados no son tan satisfactorios como los obtenidos durante la validación inicial del modelo 1D, quedará inmediatamente demostrada la necesidad de tener en cuenta la etapa de adsorción a la hora de modelar el proceso de regeneración.

El siguiente estudio de sensibilidad se centra en determinar la importancia de la difusión interna. Para ello se realizarán estudios paramétricos en un amplio rango de temperaturas donde se observará la evolución de algunos parámetros, comparándolos con ejecuciones realizadas con y sin difusión interna, con el fin de establecer a qué temperatura este fenómeno cobra mayor importancia.

Otra etapa cuya importancia se desconoce dentro del proceso de regeneración es la difusión externa. Por eso el siguiente estudio de sensibilidad está centrado en ella. El análisis es similar al de la difusión interna: se realizarán estudios paramétricos comparando ejecuciones con y sin difusión externa para esbozar el rango de temperaturas a partir del cual esta etapa afecta a la regeneración y, por lo tanto, debe tenerse en cuenta en el modelado.

Por último, en cuanto a los estudios a realizar relacionados con la mesoestructura, se realizará una demostración analítica para establecer la correlación entre parámetros estructurales y térmicos, centrados en cómo de sensible es el cambio de SFA y los efectos que esto produce sobre la regeneración.

Capítulo 2

Marco teórico

RESUMEN: En este capítulo se introducen y explican los conceptos necesarios para la comprensión de la línea de post-tratamiento, así como los distintos sistemas que la componen y las normativas de emisiones, responsables de la necesidad de desarrollo de estos nuevos sistemas.

2.1. Normativa de emisiones

Todo proceso de combustión de hidrocarburo implica la liberación de dióxido de carbono (CO_2), uno de los principales causantes del calentamiento global. A pesar de ello, el CO_2 no es reconocido como un contaminante en sí por la normativa. La emisión de CO_2 está directamente ligada a la cantidad de combustible consumido, esto implica que un motor más eficiente (con menor consumo) emite menos CO_2 que uno con un rendimiento menor.

En el estado del arte actual, los motores de encendido por compresión (MEC) o diésel son más eficientes que los motores de encendido provocado (MEP). Esta diferencia ha significado un incremento considerable del uso de los primeros con respecto a los MEP.

De esta manera es necesario establecer los compuestos que, según la normativa están considerados como contaminantes, ya sea por tener efectos negativos sobre la salud humana como en el medio ambiente.

Por NOx se designa de forma genérica a los óxidos de nitrógeno, mayoritariamente NO y NO_2 . Estos contaminantes son uno de los principales responsables de la lluvia ácida y potencialmente productores de *smog* fotoquímico, puede irritar los pulmones y participa en la reducción de ozono. Los NOx se forman a muy altas temperaturas en presencia de dosados menores al estequiométrico [15].

El monóxido de carbono o CO es el resultado de una combustión en condiciones de mezcla rica y, por ello, su emisión está íntimamente relacionada con el dosado de operación del motor. Este tipo de contaminante es más común en motores de encendido provocado ya que trabajan con dosados más ricos que los MEC.

Los HC o hidrocarburos son el resultado de combustiones incompletas, su composición puede ser extremadamente heterogénea. Aunque actualmente las normativas que limitan las emisiones en los motores de automoción sólo regulan la cantidad total de hidrocarburos emitidos por un motor, es de esperar que debido a la diferente toxicidad y reactividad atmosférica de estos compuestos, las futuras normativas anticontaminantes regulen también el tipo de hidrocarburo emitido [15].

Se considera partícula (PM) a cualquier materia presente en los gases de salida que se encuentre en estado líquido o sólido en condiciones aproximadamente ambientales. Su tamaño puede variar, siendo peligrosidad y tamaño inversamente proporcionales debido a la facilidad de inhalación de dichas partículas cuanto menores son sus dimensiones [15]. Las partículas pueden separarse en dos fracciones mediante un proceso de extracción química:

- Una fracción insoluble denominada comúnmente ISF que puede tener compuestos orgánicos e inorgánicos entre los que prevalece principalmente el carbono u hollín.
- Una fracción orgánica soluble o SOF, compuesta por hidrocarburos sin quemar procedentes del combustible o aceite lubricante. Durante el recorrido por el sistema de escape, donde se produce un rápido descenso de temperatura, estos compuestos se adhieren al hollín mediante procesos de condensación y adsorción.

Las partículas que realmente son controladas por la normativa son las denominadas partículas secundarias, que se caracterizan por haber sufrido una serie de transformaciones físicas y químicas a lo largo de la línea de escape para acabar siendo diluidas finalmente en la atmósfera.

A pesar de ser más eficientes, como se ha comentado en la sección 1.1, los motores de encendido por compresión emiten mayor cantidad de óxidos de nitrógeno y partículas debido a su combustión heterogénea, elevadas presiones y temperaturas alcanzadas y sus dosados ligeramente pobres.

La reducción de estas emisiones, NOx y PM en diésel, se ha convertido en dos de los puntos más importantes de las normativas de emisiones actuales, dando lugar a un gran desarrollo soluciones tecnológicas que permiten el

cumplimiento de las cada vez más exigentes limitaciones de emisiones.

Las normas Euro standards son las normativas vigentes en los estados miembros de la Unión Europea e imponen restricciones a las emisiones de óxidos de nitrógeno, hidrocarburos inquemados, monóxido de carbono y partículas en suspensión de vehículos Diesel y gasolina [16]. Fueron introducidas en 1992 con la EURO 1 en 1992 y se han ido endureciendo desde entonces, siendo la última la EURO 6 (2014). La evolución de estas normativas a lo largo de los años en cuanto a NO_x y PM puede observarse en la figura 2.1.

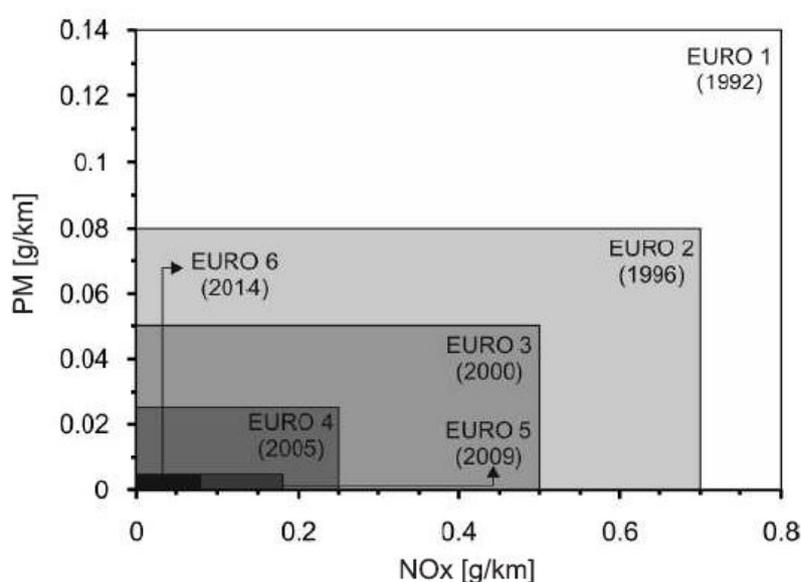


Figura 2.1: Normativa europea en emisiones de partículas y NO_x para vehículos ligeros con motor diésel.

Algunas de las restricciones adicionales introducidas, a parte de los límites de emisiones, implican controles de durabilidad de los sistemas anticontaminantes (introducido en la EURO 3) o el conteo del número de partículas además de su masa (EURO 6), pudiendo diferenciar así distintos tamaños de partículas.

Como se puede observar, las normativas han presionado mucho a los fabricantes de motores para cumplir los límites estipulados, llevándolos a estudiar nuevos sistemas para reducir las emisiones.

2.2. Sistemas de post-tratamiento

Algunas de las mejoras alcanzadas como los avances en los sistemas de inyección, combustión y estrategias de control, han facilitado la reducción del

impacto medioambiental. Otro elemento destacable es el sistema de recirculación de gases de escape (EGR) para mermar las emisiones de NO_x . Estas soluciones se pueden denominar soluciones activas ya que afectan al diseño del motor y estrategias de control.

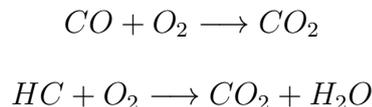
A pesar de los grandes avances y mejoras obtenidas, la reducción de los límites impuestos por las normativas han forzado a los fabricantes a buscar nuevas soluciones: sistemas pasivos o de post-tratamiento. Estos sistemas se basan en la reducción de las emisiones a lo largo de la línea de escape, una vez dichas emisiones ya han sido formadas y se pueden clasificar en cinco grupos según su principio de funcionamiento: reactores térmicos (prácticamente en desuso), reactores catalíticos, reactores químicos, filtros químicos y filtros físicos.

Una línea de post-tratamiento completa actual posee: un catalizador de oxidación diésel (DOC), sistemas de reducción catalítica selectiva (SCR), trampas de NO_x (LNT) y un filtro de partículas diésel (DPF), objeto de estudio de este trabajo. A continuación se va a explicar con mas detalle el funcionamiento de cada uno de estos elementos.

2.2.1. Catalizador de oxidación diésel: DOC

El DOC es un reactor catalítico, también denominado catalizador o convertidor catalítico. Se intercala en el sistema de escape para 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. Para un mayor rendimiento y menores temperaturas de funcionamiento se añade una sustancia catalizadora que suele ser una mezcla de Platino y Paladio en una proporción 2,5 : 1 a 5 : 1.

Este dispositivo se basa en acelerar las siguientes reacciones, donde se puede observar que se tratan de la oxidación por una parte del CO y por otra, del HC :



Estos catalizadores también favorecen la oxidación del NO a NO_2 , esto es beneficioso ya que la presencia de NO_2 en el escape aumenta la eficiencia de los sistemas de post-tratamiento de NO_x [17] así como la capacidad de oxidación del hollín acumulado en el DPF a bajas temperaturas [18].

Son sistemas con un coste moderado, libres de mantenimiento, casi no afectan al consumo y contribuyen a la reducción del ruido [15].

La estructura del DOC se compone de un soporte, recubrimiento y componente catalizador. El soporte puede ser un monolito cerámico o metálico que consiste en estructuras de panel de abeja. El recubrimiento es el que se encarga de la deposición de las sustancias activas sobre las superficies interiores de los conductos del monolito incrementando la superficie de contacto del gas de escape con los sitios activos. Normalmente, el recubrimiento utilizado es la alúmina (Al_2O_3). En cuanto al componente catalizador, hoy en día se utilizan fundamentalmente metales como el platino, paladio o rodio, en función de la aplicación que vaya a tener el DOC.

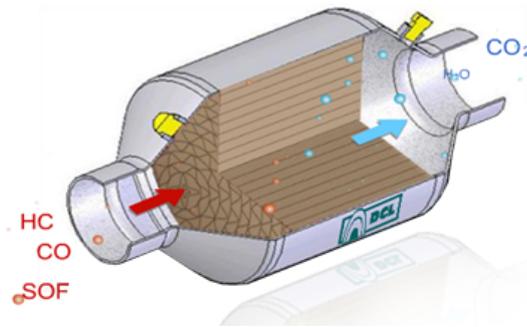


Figura 2.2: Esquema de funcionamiento de un reactor catalítico de oxidación o DOC.

2.2.2. Sistema de reducción catalítica selectiva: SCR

Se entiende como SCR (Selective Catalytic Reduction) un reactor químico cuya función es disminuir la concentración de ciertos productos contaminantes mediante reacciones químicas en los gases de escape, generalmente incluyendo alguna sustancia que se mezcla con los mismos. En concreto, el SCR, se utiliza para disminuir los óxidos de nitrógeno en el escape cuando la reducción catalítica convencional no es viable por la abundancia de oxígeno.

El sistema SCR contiene una mezcla de óxidos de vanadio y titanio, para asegurar la reducción del NO_x se introduce amoníaco y para reducir la toxicidad de éste, se inyecta una solución acuosa de urea antes del SCR.

Actualmente, el SCR se instala junto con un catalizador de oxidación aguas arriba para reducir la concentración de CO y HC , además de la oxidación del NO a NO_2 . Un esquema del funcionamiento de este dispositivo puede visualizarse en la figura 2.3.

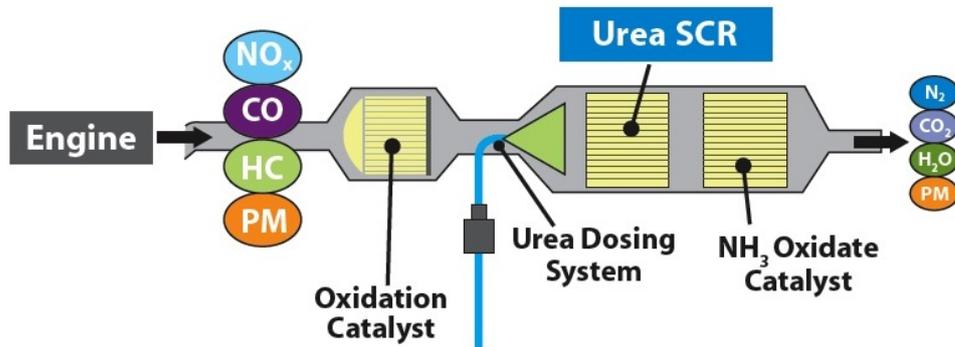


Figura 2.3: Esquema de funcionamiento de un SCR junto con un DOC aguas arriba e inyección de urea.

2.2.3. Trampa de NO_x : LNT

El LNT (Lean NO_x Traps) es una trampa de NO_x , como su propio nombre indica, que se utiliza como solución alternativa al uso del SCR. Es un sistema muy parecido a los catalizadores tradicionales y menos voluminoso que el SCR.

Este dispositivo funciona como un catalizador de oxidación en condiciones de mezcla pobre. A su vez almacena los NO_x en forma de nitratos para ser posteriormente liberados y regenerados haciendo uso de una atmósfera reductora en condiciones de mezcla rica. Dichas condiciones se consiguen de manera puntual inyectando hidrocarburos en el escape o en el cilindro al final de la etapa de expansión.

La principal desventaja del LNT es su pequeño rango de temperaturas de funcionamiento al cual el dispositivo trabaja con buenos rendimientos. Debido a este inconveniente, estas trampas de NO_x son poco útiles para motores con grados de carga muy variables.

Otro gran inconveniente de estos sistemas es la incompatibilidad de los mismos con combustibles que presenten azufre en su composición. El azufre envenena la trampa de NO_x reduciendo su vida útil muy rápidamente.

2.2.4. Filtros de partículas

El filtro de partículas diesel es una trampa de partículas y como tal, su función es capturar físicamente las partículas producidas durante el proceso de combustión en el cilindro y evitar su liberación a la atmósfera. Una vez capturadas, las partículas son retenidas hasta que pueden ser eliminadas por medio de un proceso de regeneración.

Los mecanismos de filtrado presentes en los filtros de partícula Diesel son efectivos para el control de la fracción sólida de las partículas: carbono y cenizas. La fracción orgánica soluble y sulfatos (*PM*) puede ser filtrada dependiendo del tipo de filtro y condiciones de operación.

Existe una amplia variedad de tipos de filtros de partículas Diesel dependiendo de los materiales y estructura geométrica que determinarán las prestaciones y durabilidad.

Para poder realizar un filtrado y regeneración efectivos es necesario que los materiales utilizados en los filtros cumplan algunos requerimientos:

- Alta eficiencia de filtrado, tanto en masa como en número de partículas.
- Reducida pérdida de presión, tanto para condiciones limpias como con el filtro cargado.
- Temperatura máxima de operación elevada y resistencia al choque térmico.
- Capacidad de acumulación de partículas elevada.
- Integridad mecánica y estabilidad química.
- Compatibilidad con los sistemas de regeneración.
- Ausencia de generación de emisiones secundarias y de efectos adversos sobre la seguridad del vehículo, conducción, emisión de ruido, vibraciones, etc.
- Larga vida útil y elevada durabilidad.
- Bajo coste, tanto de fabricación como mantenimiento.

El presente trabajo trata sobre filtros cerámicos de flujo de pared y se profundizará sobre este tipo de filtro en la sección 2.3, pero de momento se va a realizar una breve introducción de las principales características de los distintos tipos de filtros de partículas Diesel.

Monolitos cerámicos de flujo de pared:

Es la tipología más extendida, se trata de una estructura cerámica extruida y generalmente cilíndrica con un gran número de canales paralelos de una reducida sección transversal que atraviesan axialmente el monolito.

Los canales del monolito tienen sus extremos sellados alternativamente, forzando al flujo a pasar a través de la pared porosa que actúa como medio filtrante.

Normalmente están fabricados a partir de materiales cerámicos porosos como la cordierita y el carburo de silicio. El titanio de aluminio aparece como material de filtrado de uso comercial de última generación implantado en vehículos ligeros.

Las principales ventajas de los monolitos de flujo de pared radican en su mayor capacidad de filtrado así como eficiencia del mismo, que llega a alcanzar el 99 %.

Por otra parte, pese a su reducida pérdida de presión, ésta aumenta a medida que se forma la capa de partículas pudiendo llegar a obstruir completamente el paso del flujo. Para evitar dicho taponamiento se diseñan estrategias de regeneración en las que se deberá intentar no alcanzar picos de temperatura para evitar posibles efectos negativos sobre la durabilidad del filtro.

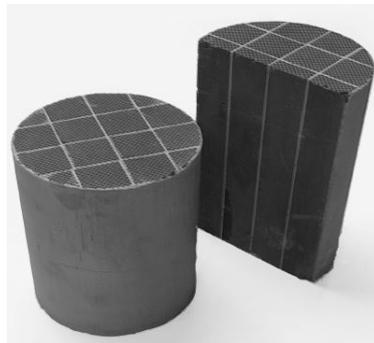


Figura 2.4: Monolito cerámico de flujo de pared de carburo de silicio y corte diametral [1].

Fibras cerámicas:

Esta tipología de filtro es bastante utilizada, aunque menos que la de filtro de flujo de pared. Existen dos disposiciones principales: empaquetado continuo y láminas de fibras cerámicas.

- Empaquetado continuo:

Consiste en una capa de fibras continuas dispuestas alrededor de un conducto metálico perforado. El flujo de gases de escape entra en una vasija sellada en la que tiene como única salida pasar al interior del conducto perforado atravesando la capa de fibra porosa.

Los principales problemas de este diseño son la dificultad en la eliminación de las cenizas y su reducida temperatura máxima de operación.

- Láminas de fibras cerámicas:

Consiste en conformar las fibras cerámicas en láminas delgadas que se fabrican mediante procesos de laminado, obteniendo una especie de tela de fibras cerámicas. En vez de disponer de cartuchos de fibras como se hacía en el caso anterior, se disponen las láminas plegadas (o no) formando un medio continuo poroso.

Las principales desventajas de estas configuraciones son su dificultosa eliminación de las cenizas acumuladas y la imposibilidad de impregnar directamente las fibras cerámicas con catalizadores.

Espumas cerámicas:

Esta tipología de filtro se caracteriza por sus grandes poros. Los materiales de fabricación son los mismos que los utilizados para monolitos de flujo de pared: cordierita y carburo de silicio, ambos con la capacidad de ser catalizados.

La causa de su caída en desuso es su baja eficiencia de filtrado, así como baja capacidad de acumulación de partículas, deficientes características mecánicas y reducida resistencia al choque térmico.



Figura 2.5: Ejemplos de sustrato genérico de espuma cerámica.

Filtros metálicos:

La principal ventaja de los filtros metálicos radica en su gran compatibilidad con una amplia variedad de métodos de regeneración, además de su alta conductividad térmica, reduciendo así la probabilidad de tener puntos calientes a lo largo de la estructura. Su distribución de temperatura es más uniforme, teniendo así un inicio del proceso de regeneración en un área más amplia.

Por otra parte, tienen una alta tendencia a la corrosión y su superficie de filtrado es mucho menor que la de los monolitos cerámicos de flujo de pared. Su porosidad es muy elevada, pudiendo llegar a expulsar al ambiente una parte considerable de las partículas previamente filtradas.

Dentro de este tipo de filtro encontramos dos tendencias de diseño:

- Fibras metálicas:

Filtros basados en el empleo de fibras y fabricados por paquetes de mallas o lanas metálicas.

- Metales sinterizados:

El diseño más común está basado en láminas de malla de acero inoxidable recubierta de polvos metálicos mediante procesos de sinterizado.

Filtros de papel:

Consisten el filtros de cartuchos de papel plegados similares a los filtros de aire utilizados en el sistema de admisión. Se caracterizan por una eficiencia de filtrado cercana al 100 % pero son incapaces de trabajar a temperaturas elevadas.

2.3. Filtro de partículas diésel de flujo de pared

Murtagh [6] ofrece una estimación de la implantación en el mercado del transporte de las diferentes tipologías de filtros de partículas (tabla 2.1). Se puede observar el claro predominio del monolito cerámico de flujo de pared, fortaleciendo así el interés por el estudio de esta tipología. A partir de este momento, a lo largo del resto del trabajo sólo se hablará de monolito cerámico de flujo de pared o DPF.

Tipología	Implantación [%]
Monolito cerámico de flujo de pared	70
Fibras cerámicas	25
Metal sinterizado	4
Otros	1

Tabla 2.1: Estimación de la implantación en el mercado de los diferentes tipos de filstros de partículas Diesel [6].

A continuación se va a explicar más detalladamente algunos aspectos del DPF necesarios para la comprensión de los análisis y estudios llevados a cabo en este proyecto. Por orden, se contemplarán: parámetros estructurales, parámetros térmicos y mecánicos, mecanismos de filtrado, contribuciones a la pérdida de presión y principales procesos de regeneración el DPFs.

2.3.1. Parámetros estructurales

El monolito está formado por canales de sección cuadrada simétrica, dicha sección suele ser igual en los canales de entrada y de salida. A pesar de la existencia de tipologías con distintas secciones e incluso canales asimétricos, la geometría cuadrada simétrica es la más frecuente.

Dentro de los parámetros estructurales se puede diferenciar entre parámetros macroestructurales y mesoestructurales dependiendo del tamaño del parámetro al que se esté haciendo referencia.

2.3.1.1. Parámetros macroestructurales

Los principales parámetros de la macroestructura propia del filtro son: la longitud del mismo (L), el diámetro (D) y el volumen del monolito (V).

Se debe tener en cuenta que los tapones que se corresponden con el sellado de los canales no contribuyen al filtrado. Así surge la necesidad de definir la longitud de dicho tapón (L_{plug}). Así la longitud de los canales (L_e) queda definida como la resta de la longitud del monolito (L) y la longitud del tapón (L_{plug}).

Paralelamente, se puede definir el diámetro del monolito que establece el área total de la sección transversal del monolito o área frontal (A_{fr}) que se calcula con la fórmula 2.1.

$$A_{fr} = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \quad (2.1)$$

A partir de estas definiciones se puede definir el volumen del filtro, tanto a efectos de espacio ocupado (V) como a volumen que computa a efectos de filtrado (V_e). El cálculo de estos volúmenes es exactamente igual, variando sólo

el valor de la longitud por la que se multiplica el área de frontal (ecuaciones 2.2 y 2.3).

$$V = A_{fr} \cdot L = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot L \quad (2.2)$$

$$V_e = A_{fr} \cdot L = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot L_e \quad (2.3)$$

En cuanto al volumen, es obvio que interesa que los filtros sean lo mas compactos posibles, pero se debe encontrar un compromiso entre el volumen del filtro y la pérdida de presión que genera. Actualmente, este volumen suele estar entre 1.5 y 2.5 veces el desplazamiento del motor [19].

2.3.1.2. Parámetros mesoestructurales

Mesoestructura comprende los parámetros relacionados con la geometría de los canales: lado del canal (α) y espesor de la pared porosa (w_w).

A partir de α y w_w se define la densidad de celdas (σ) como el número de canales por unidad de área de sección transversal. Para canales cuadrados, la densidad de celdas se calcula aplicando la ecuación 2.4 cuyas unidades finales son celdas por pulgada cuadrada o *cpssi*.

$$\sigma = \frac{1}{(\alpha + w_w)^2} \quad (2.4)$$

En la figura 2.6 se puede observar un esquema de un par de canales del monolito con indicaciones de los principales parámetros que componen la estructura del filtro.

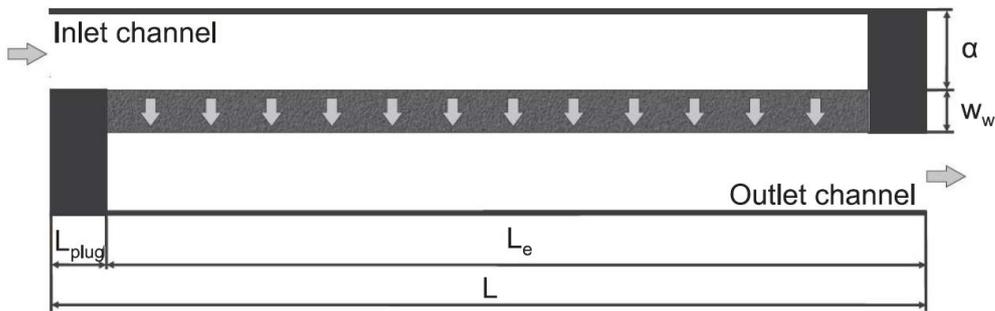


Figura 2.6: Geometría de un par de canales de entrada y salida de un DPF

2.3.1.3. Parámetros relacionados con la macro y mesoestructura

Existen una serie de parámetros cuya función es relacionar los conceptos explicados en las secciones anteriores relacionados con la estructura del monolito.

El número de canales de entrada (N_e) y salida (N_s) del monolito se reparten a partes iguales a partir del total (N_c), quedando cada uno relacionado con la densidad de celdas y el área frontal tan y como muestra la ecuación 2.5.

$$N_{e,s} = \frac{N_c}{2} = \frac{A_{fr} \cdot \sigma}{2} \quad (2.5)$$

El área frontal del monolito (OFA) depende de la fracción de área frontal abierta, que en última instancia podría definirse como aparece en la ecuación 2.6.

$$OFA = \frac{A_{abierta}}{A_{fr}} = \frac{\alpha^2 \cdot N_e}{A_{fr}} = \frac{\alpha^2 \cdot \sigma}{2} = \frac{\alpha^2}{2 \cdot (\alpha + w_w^2)} \quad (2.6)$$

Otro parámetro importante es la superficie específica de filtrado (SFA), que permite analizar las prestaciones del dispositivo. La definición propia de SFA es “área por unidad de volumen del monolito a través de la cual el flujo se mueve de los canales de entrada a los de salida”, cuyo cálculo es posible con la ecuación 2.7).

$$SFA = 2 \cdot \alpha \cdot \sigma = \frac{2 \cdot \alpha}{(\alpha + w_w)^2} \quad (2.7)$$

Por último, es imprescindible definir el área de filtrado (A_f), que se define como la superficie teniendo en cuenta las paredes de los canales de entrada exceptuando la que corresponde al sellado. Este parámetro se define a partir del SFA como se puede observar en la ecuación 2.8.

$$A_f = SFA \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot L_e = 2 \cdot \alpha \cdot \sigma \cdot A_{fr} \cdot L_e = 4 \cdot \alpha \cdot L_e \cdot N_e \quad (2.8)$$

2.3.2. Parámetros térmicos y mecánicos

También existen unos parámetros para poder analizar las características térmicas y mecánicas del DPF. A continuación se explicarán brevemente los utilizados para el presente proyecto en el apartado de estudio de la mesoestructura.

El parámetro que define la capacidad de transmisión de calor del monolito durante el transitorio es el conocido como LOF. Se puede calcular a partir de la ecuación 2.9 e implica una menor inercia térmica del monolito cuanto mayor es dicho parámetro, es decir, LOF es inversamente proporcional a la inercia térmica del dispositivo. A menor inercia térmica, el monolito necesitará menos

tiempo para alcanzar la temperatura de activación de ciertas reacciones presentes en el proceso de regeneración.

$$LOF = \frac{1}{4} \left(\frac{SFA}{OFA} - 2 \cdot SFA \right) \quad (2.9)$$

Otro parámetro, proporcional al gradiente máximo de temperatura que puede soportar el monolito cuando este está sujeto a ciclos térmicos es el TIF (ecuación 2.10). Cuando este parámetro se ve incrementado significa que la resistencia al choque térmico es mayor.

$$TIF = \frac{\alpha + w_w}{w_w} \quad (2.10)$$

Por último se define el MIF como un parámetro que representa el límite de carga máxima que la estructura celular puede soportar. Es directamente proporcional a dicha carga significando esto que cuanto mayor es el MIF, la capacidad de carga soportable por el monolito aumentará. MIF y TIF son inversamente proporcionales, como puede comprobarse en la ecuación que definida en 2.11.

$$MIF = \frac{w_w^2}{(\alpha + w_w) \cdot \alpha} = \frac{w_w}{\alpha \cdot TIF} \quad (2.11)$$

En el artículo [13] se puede encontrar una descripción más detallada de estos parámetros junto con la definición de los que se ha decidido omitir en este trabajo.

2.3.3. Mecanismos de filtrado

Se entiende como filtrado al proceso de retención de partículas contenidas en los gases de escape a su paso por el DPF.

Este dispositivo posee dos regímenes de filtrado: filtrado en lecho profundo y filtrado superficial.

El filtrado en lecho profundo se caracteriza por la deposición de las partículas en el interior del medio poroso y es característico de fases de filtrado en las que el DPF se encuentra limpio, es decir, las fases iniciales.

Una vez el interior del medio poroso se llena, los poros se obstruyen y empieza a cobrar más importancia el filtrado superficial. Este filtrado consiste en la formación de una capa de partículas sobre la superficie de los canales. Cuando

los poros queden totalmente taponados, el filtrado superficial prevalecerá sobre el filtrado en lecho profundo y se definirá el estado del filtro como saturado.

2.3.4. Principales contribuciones a la pérdida de presión

El DPF, como cualquier sistema de post-tratamiento, es un elemento que restringe el paso del fluido, generando así una pérdida de presión que aumenta la contrapresión a la salida de los cilindros del motor. Esto implica un aumento del trabajo de bombeo, incrementando así el consumo específico del motor.

En este apartado se va a hacer un breve resumen de las principales contribuciones a lo largo del sistema del DPF a la pérdida de presión, pudiendo así estudiar e investigar para reducir la misma. En la figura 2.7 se puede observar un esquema de dichas contribuciones numeradas de la 1 a la 5, siendo cada una de ellas:

1. Contribución debida a la contracción local que sufre el flujo al adaptarse a los canales de entrada del monolito.
2. Contribución debida a la fricción entre el fluido y las paredes de los canales de entrada y salida.
3. Contribución debida al paso del fluido a través de la capa de partículas, en caso de que exista.
4. Contribución debida al paso del fluido a través de la pared porosa, contabilizando la posible acumulación de partículas que haya tenido lugar en el interior de dicha pared.
5. Contribución debida a la expansión local que sufre el flujo en los canales de salida del monolito.

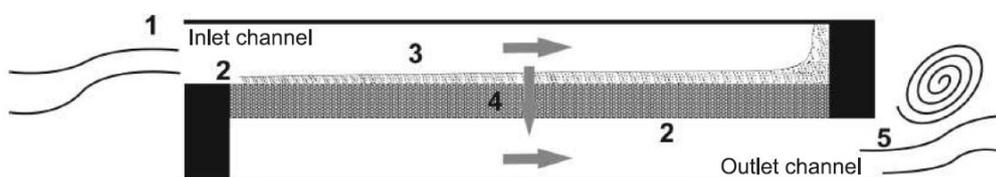


Figura 2.7: Principales contribuciones a la caída de presión en el DPF.

A estas contribuciones propias del monolito debería añadirse la que correspondería a los elementos instalados para adaptar la envoltura del monolito a los conductos de escape: contribución debida a la expansión del gas a su paso

por el como de entrada y a la contracción en el cono de salida, en el caso de su existencia.

El conjunto general de las contribuciones quedaría definido como una suma de términos no inerciales e inerciales.

A los términos no inerciales les corresponden las contribuciones de la ley de Darcy y fricción en los canales, proporcionales al caudal de flujo. La primera tiene en cuenta la acumulación de partículas en la pared porosa a través de una permeabilidad efectiva, así como la existencia de una capa de partículas a través de la permeabilidad de la misma. La segunda se cuantifica a través de un coeficiente que representa la transferencia de cantidad de movimiento debida a la inyección o succión del flujo a través del medio poroso. La contribución por fricción también tiene en cuenta el cambio de la geometría que sufre la sección transversal de los canales al formarse la capa de partículas.

Los términos inerciales dependen cuadráticamente del caudal y se corresponden con las contribuciones de contracción y expansión del flujo.

2.3.5. Procesos de regeneración

El proceso de regeneración es un proceso de oxidación del hollín acumulado en el DPF a lo largo del filtrado. Este proceso puede ser periódico o continuo y es estrictamente necesario para evitar la completa obstrucción de los canales del filtro.

La tasa de reacción de este proceso de oxidación está controlada en su mayor parte por la temperatura de pared del monolito. El proceso de regeneración sería espontáneo a una temperatura situada entre los 500 y 600°C, temperaturas algo más altas que las habituales alcanzadas por los gases de escape en motores Diesel. Esto, junto con el hecho de que las temperaturas serán todavía menores debido a las pérdidas por transmisión de calor a lo largo de la línea de escape, hace necesario el diseño de técnicas que permitan aumentar la temperatura para poder iniciar el proceso de regeneración. Estas técnicas pueden clasificarse en pasivas, activas o activo-pasivas.

2.3.5.1. Regeneración pasiva

La principal premisa de esta técnica reside en que las condiciones para que se inicie el proceso de regeneración surgen sin necesidad de sistemas auxiliares. Como ya se ha dicho antes, las temperaturas alcanzadas en la línea de escape son insuficientes, por lo que se intenta reducir la temperatura de activación de la reacción del hollín, consiguiendo así que el proceso de regeneración tenga

lugar a temperaturas más bajas.

A continuación se van a explicar varios métodos para conseguir lo que se acaba de explicar:

- Impregnar las paredes del monolito con catalizadores, principalmente metales nobles. La principal desventaja de este método es la posibilidad de que el catalizador se desactive al entrar en contacto con SO_3 y que sólo se oxidarán las partículas que estén en contacto con el mismo.
- El uso de aditivos en el combustible, esto reduce la temperatura de oxidación del hollín pero no lo suficiente. Esta técnica se suele utilizar en combinación con otras pero tiene la desventaja de que los aditivos aumentan la acumulación de cenizas en el sustrato poroso.
- Añadir NO_2 en los gases de escape para favorecer la oxidación del hollín. El NO_2 se puede obtener de una oxidación catalítica del NO procedente del DOC. De esta manera queda definido un nuevo sistema, CRT, que combina el uso de DPF y DOC situado aguas arriba del primer dispositivo. El NO_2 actúa como portador de oxígeno, permitiendo reducir la temperatura de inicio de la reacción de oxidación a aproximadamente unos 250-300°C.

2.3.5.2. Regeneración activa

La regeneración activa es una regeneración térmica basada en conseguir, mediante un aporte energético adicional puntual, la mínima temperatura de oxidación del hollín. Este incremento puntual puede conseguirse por medio de varios procedimientos, entre los que destacan:

- Modificar las estrategias de inyección mediante una post-inyección en la cámara de combustión al final del proceso de expansión o directamente en la línea de escape. En ambos casos el combustible inyectado se quema en el escape, produciendo el aumento de temperatura deseado.
- Incorporar sistemas eléctricos de calentamiento antes del filtro de partículas, o en su interior. Este método es muy complejo, lo que lo hace menos atractivo frente a otras soluciones.
- Usar microondas o sistemas duales de regeneración. Este sistema queda restringido a aplicaciones muy concretas en las cuales el motor se encuentra parado parado tras la jornada de trabajo.

2.3.5.3. Regeneración activo-pasiva

Este método mixto permite la regeneración de manera continua, pero no puede asegurar la completa regeneración a baja carga del motor. La principal ventaja es la reducción del estrés térmico del monolito y consumo al evitar el uso único de estrategias activas periódicas. Un ejemplo de este tipo de estrategia mixta sería el sistema CRT, apoyado en las post-inyecciones cuando el motor opera a baja carga.

Capítulo 3

Herramientas experimentales

RESUMEN: En este capítulo se recopilan todas las herramientas y procedimientos que han sido necesarios para la parte experimental de este proyecto que, a pesar de no estar incluidos en el trabajo, son necesarios para ciertas acciones de validación y comprobación.

3.1. Configuración experimental

La realización de ensayos experimentales es necesaria para poder evaluar la fiabilidad y robustez del modelo 1D de regeneración del DPF. En la literatura [14] se han encontrado varios ensayos experimentales en los que se muestran, entre otros parámetros, la temperatura, presión y masa de hollín.

Las pruebas realizadas en el marco de este estudio se han llevado a cabo en un motor Diesel turbo-sobrealimentado para el uso de automóviles de pasajeros. Las características principales del motor se recogen en la tabla 3.1:

Motor	HSDI Diesel passenger car
Normativa de emisiones	EURO 4
Cilindrada	1997 cm^3
Diámetro	85 mm
Carrera	88 mm
Número de cilindros	4 en línea
Número de válvulas	4 por cilindro
Relación de compresión	18:1
Máxima potencia @ rpm	100 kW @ 4000 rpm
Máximo par @ rpm	320 Nm @ 1750 rpm

Tabla 3.1: Características básicas del motor.

El sistema de post-tratamiento está compuesto por un DOC, que se encuentra justo en la salida de la turbina, y un segundo DOC, seguido por el DPF. El DPF ensayado es un filtro sin recubrimiento de flujo de pared con canales de sección cuadrada. Las principales características geométricas del DPF se muestran en la tabla 3.2:

Diámetro	<i>mm</i>	132
Longitud	<i>mm</i>	200
Longitud del tapón	<i>mm</i>	3,2
Volumen	<i>l</i>	2,73
Permeabilidad específica	<i>m²</i>	$2,49 \cdot 10^{-13}$
Densidad de celdas	<i>cpsi</i>	200
Tamaño de celda	<i>mm</i>	1,486
Espesor de pared	<i>mm</i>	0,31
Número de canales	–	4246
Área de filtrado	<i>m²</i>	2,5
Porosidad	–	0,41
Diámetro medio de poro	<i>μm</i>	12,1
Volumen del cono de entrada	<i>l</i>	0,5
Volumen del cono de salida	<i>l</i>	0,45

Tabla 3.2: Características del DPF

3.2. Instalación e instrumentación

El motor se instaló en un banco de pruebas equipado con un dinamómetro asíncrono capaz de controlar la velocidad y el par motor en condiciones de funcionamiento estacionarias y transitorias. La instrumentación cuenta con sensores para medir las magnitudes principales que definen los rendimientos del motor y del pos-tratamiento: temperatura y presión media a lo largo de la trayectoria del aire, flujo de masa de aire y combustible, velocidad del motor, par del motor y velocidad del turbocompresor. Los sensores están conectados a un sistema de adquisición de datos que controla y sincroniza toda esta información con la ECU y los parámetros de la celda de prueba. La Tabla 3.3 resume las principales características de la instrumentación:

Magnitud	Sensor/Instrumento	Rango
Temperatura	Termopar tipo K	$[-200]$ to $[200]$ °C
Presión media	Piersonsistivo PMA P40	$[0 - 6 \text{ bar}]$
Flujo másico de combustible	Balance Gravimétrico	$[0 - 27 \text{ kg/h}]$
Flujo másico de aire	Flujo sensorial	$[0 - 720 \text{ kg/h}]$
Par	Torquímetro	$[-650 \text{ to } 650 \text{ Nm}]$

Tabla 3.3: Características de la instrumentación

Como se muestra esquemáticamente en la figura 3.1, la caída de presión de DPF se mide colocando dos transductores piezorresistivos en los conos de entrada y salida del DPF. Dado que el objetivo es la obtención de la presión media, estos sensores no se refrigeran, se conectan al flujo de gases de escape a través de un conducto largo, en el que se mantiene el flujo en reposo. La temperatura de entrada DPF se mide con dos termopares de tipo K colocados en la parte superior e inferior del cono de entrada, y la temperatura de salida, con un termopar de tipo K colocado junto a la unión del conducto de salida.

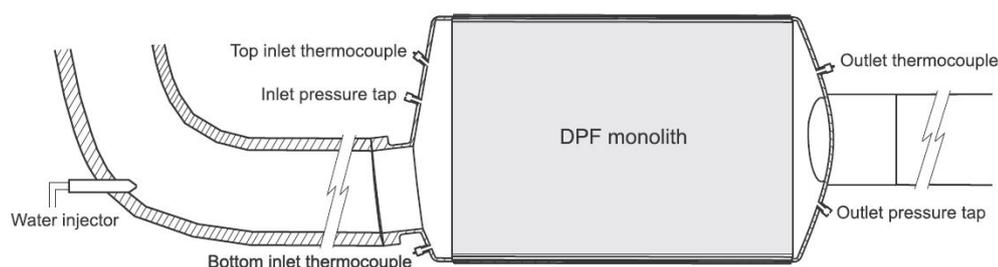


Figura 3.1: Esquema de la configuración de instrumentación de medidas de presión y temperatura en el DPF.

Con respecto a la medida de las emisiones de gases de escape, se utilizó un analizador Mexa 6000 para proporcionar una figura de las emisiones de contaminantes aguas abajo del sistema de pos-tratamiento. La emisión de partículas se midió con un TSI EEPS (Engine Exhaust Particle Sizer). Este espectrómetro es capaz de medir la concentración del número de partículas con una frecuencia de hasta 1 Hz, representando la distribución del tamaño de partícula en un intervalo entre 5,6 y 560 nm. El espectrómetro está conectado a un sistema de válvula que permite la medición alternativa aguas arriba y aguas abajo del DPF para evaluar la eficiencia de filtrado del DPF.

Finalmente, se colocó un sistema de by-pass con dos electroválvulas aguas arriba del sistema de pos-tratamiento. Este sistema, que se muestra en la figura

3.2, se consideró debido a la necesidad de conocer la carga de masa de hollín en el DPF y el comienzo de cada prueba. Durante la estabilización del motor, la válvula en la línea de pos-tratamiento está completamente cerrada y la válvula de by-pass controla la presión de escape del tubo de escape. Se fija en el mismo orden de magnitud que el valor impuesto por el pos-tratamiento. Cuando el motor está funcionando en condiciones de estado estacionario, la válvula de pos-tratamiento está completamente abierta y la válvula de by-pass se cierra. Este procedimiento no evita el transitorio térmico de DPF de un punto de funcionamiento a otro, sino que elimina la influencia del aumento de la carga de hollín de DPF debido a la filtración durante la fase de estabilización térmica.

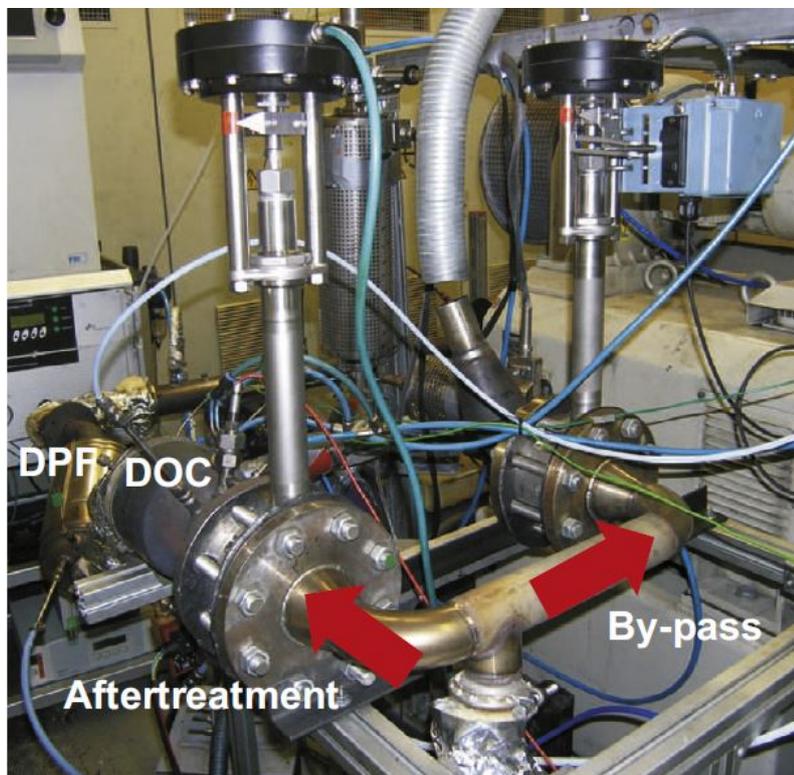


Figura 3.2: Sistema de válvulas by-pass para controlar la acumulación de hollín del DPF durante la estabilización del motor.

Capítulo 4

Herramientas computacionales

RESUMEN: Este capítulo describe el modelo unidimensional desarrollado por CMT, hipótesis y simplificaciones, así como cada uno de sus submodelos. Se hace especial hincapié en el submodelo de regeneración, donde se explican las distintas fases y órdenes de reacción, incluyendo su influencia sobre la resolución de las ecuaciones de conservación de especies, base de este submodelo.

4.1. Generalidades

Para los estudios computacionales llevados a cabo se ha utilizado un software libre de modelado: OpenWAM (*Wave Action Model*). Este software es un código abierto, libre y desarrollado por CMT-Motores Térmicos en la Universitat Politècnica de València. OpenWAM se ofrece bajo la GNU General Public License y siempre será un código abierto y gratuito [20].

OpenWAM está diseñado para predecir el movimiento del flujo a través de los elementos de motores de combustión interna alternativos u otras instalaciones que impliquen flujo compresible. Este software es capaz de resolver diferentes elementos cero-dimensionales y uni-dimensionales.

Los esquemas de resolución de este código trabajan con órdenes de precisión cuadráticos y soluciones corregidas o suavizadas en puntos de discontinuidad. Esto permite que OpenWAM sea una herramienta de cálculo potente cuyos tiempos de resolución son relativamente cortos.

El modelo de DPF implementado en OpenWAM puede predecir la pérdida de presión [7], transmisión de calor [4], eficiencia de filtrado [13] del filtro de partículas y la evolución de dichas partículas durante el proceso de acumulación de hollín. De esta manera es una herramienta de gran utilidad para

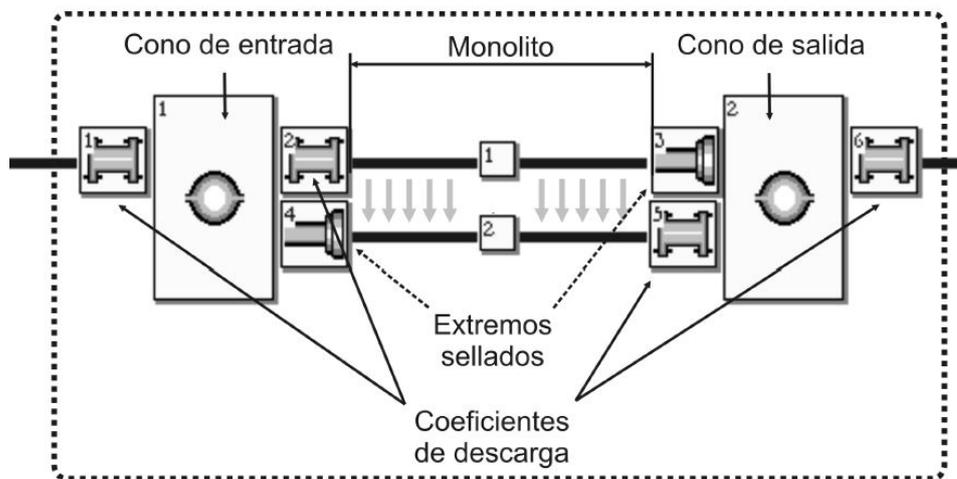


Figura 4.1: Representación esquemática en el modelo de acción de ondas WAM del DPF como combinación de elementos 1D y 0D unidos por condiciones de contorno[1].

evaluar los posibles efectos sobre el consumo específico del motor que pudiesen tener pequeños cambios en el DPF [5].

4.2. Modelo fluidodinámico de DPF

El modelo del DPF está basado en la propuesta de Bisset [21], que implica una resolución de las ecuaciones de masa, momento y energía en una pareja de canales de entrada y salida. Para dicha resolución es necesario establecer algunas hipótesis: flujo unidimensional, compresible, no estacionario y no homentrópico.

Dichas hipótesis son válidas mientras el filtro de partículas se encuentre aguas abajo de la turbina.

El modelo de DPF calcula la pérdida de presión global, incluyendo así la pérdida de presión impuesta por el monolito y la producida en los conos de entrada y salida del monolito. Debido a la alta conicidad, tanto en la entrada como en la salida del filtro, es imposible el modelado de los conos como elementos unidimensionales [22]. Así, la manera más adecuada para simplificar este problema y poder representar los conos en WAM es tratar a éstos como elementos cero-dimensionales, como se puede observar en la figura 4.1, donde se muestra el esquema del filtro de partículas en WAM.

El modelo esquematizado considera los canales de entrada y salida del DPF como conductos unidimensionales y los conos de entrada y salida, como volúmenes cero-dimensionales. La unión entre dichos elementos se modela mediante cuatro condiciones de contorno también señaladas en la figura 4.1, cuya resolución se lleva a cabo mediante el método de las características. Manteniendo la nomenclatura del esquema de la figura de OpenWAM, se tiene que:

- La condición de contorno 1 representa la pérdida de presión que tiene lugar debido a la expansión que se produce en el cono de entrada al monolito.
- La condición de contorno 2 representa la pérdida de presión que se produce debido a la contracción local del flujo al penetrar en los canales de entrada al monolito.
- La condición de contorno 5 representa la pérdida de presión localizada en la salida del monolito por la expansión local del flujo procedente de los canales de salida.
- La condición de contorno 6 representa la pérdida de presión debido a la contracción que sufre el flujo en el cono de salida del filtro de partículas.

La representación del monolito se basa en una representación radial, donde las propiedades del flujo a la entrada son constantes en toda la sección transversal y el monolito se encuentra perfectamente aislado en su periferia en la dirección radial. Estas hipótesis implican la igualdad de todos los pares de canales, quedando así el comportamiento del filtro representado por la resolución de un único par de canales entrada-salida.

En cambio, en algunos procesos el cálculo de la temperatura y partículas acumuladas a lo largo de la pared adquiere dependencia espacial en la dirección radial. Por ello, el modelo puede considerar que las condiciones de entrada y salida del monolito no son constantes en la sección transversal y/o que éste no se encuentra perfectamente aislado en su periferia, lo que implica un flujo de calor en la dirección radial.

De esta manera se propone una nueva discretización del monolito en la que los conjuntos de pares de canales entrada-salida idénticos se encontrarán a una misma distancia del centro del monolito, es decir, adquirirán forma de corona circular respecto a un haz central. Un esquema de esta nueva arquitectura radial puede observarse en la figura 4.2.

Todos los pares de canales entrada-salida de una misma corona o haz poseen el mismo comportamiento, de esta manera el monolito queda caracterizado con la resolución de un par de canales entrada-salida en cada haz.

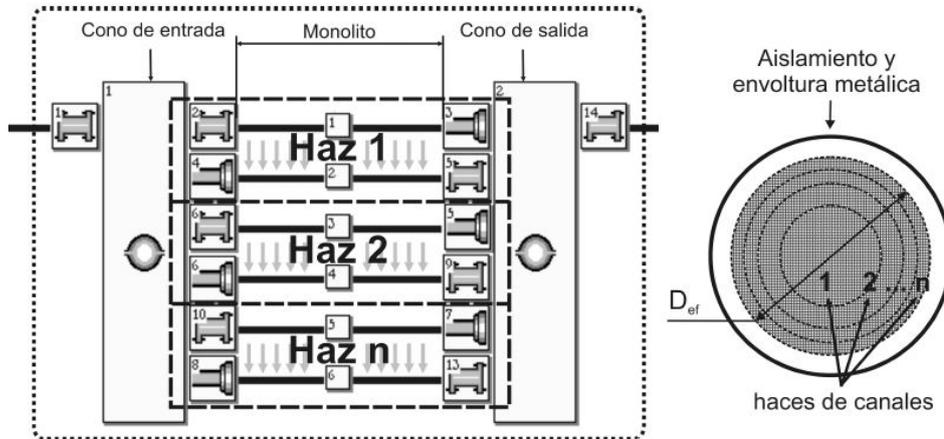


Figura 4.2: Representación esquemática en el modelo de acción de ondas WAM del filtro de partículas Diesel de flujo de pared con discretización radial[1].

La resolución de un par de canales entrada salida parte del planteamiento de las ecuaciones de conservación. Se definen dichas ecuaciones para flujo no estacionario, unidimensional, compresible y no-homoentrópico. Como ya se ha indicado antes, el sistema de ecuaciones de conservación planteado parte de las consideraciones de Bisset [3] pero se introducen una serie de nuevas hipótesis para mejorar los resultados [1]:

1. El sistema de ecuaciones de conservación se resuelve en condiciones no estacionarias.
2. Se tiene en cuenta la modificación de la sección efectiva del canal de entrada a medida que crece/decrece la capa de partículas.
3. Se introduce la influencia de la velocidad del flujo en los canales planteando en términos de condiciones de parada la ecuación de conservación de la energía.
4. Se asume que el gas entrante a los canales de salida y el gas del canal de entrada se encuentra a la misma temperatura.

Como consecuencia de estas nuevas hipótesis, las ecuaciones de conservación quedan definidas en 4.1-4.8, donde u_w representa la velocidad de pared y los subíndices 1 y 2 se corresponden con las secciones de entrada y salida de la pared porosa respectivamente. En las ecuaciones 4.7 y 4.8 el subíndice j representa la especie química cuya conservación se está resolviendo, y la variable Y_{wj} , la fracción másica de la especie j a la salida de la pared porosa.

Conservación de la masa:

- Canal de entrada:

$$\frac{\partial(\rho_e F_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e u_e F_e)}{\partial x} = -4(\alpha - 2w_p)\rho_e u_{w1} \quad (4.1)$$

- Canal de salida:

$$\frac{\partial(\rho_s F_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_s u_s F_s)}{\partial x} = 4\alpha\rho_s u_{w2} \quad (4.2)$$

Conservación de la cantidad de movimiento:

- Canal de entrada:

$$\frac{\partial(\rho_e u_e F_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e u_e^2 F_e + p_e F_e)}{\partial x} - p_e \frac{dF_e}{dx} + F_w \mu_e u_e = 0 \quad (4.3)$$

- Canal de salida:

$$\frac{\partial(\rho_s u_s F_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_s u_s^2 F_s + p_s F_s)}{\partial x} - p_s \frac{dF_s}{dx} + F_w \mu_s u_s = 0 \quad (4.4)$$

Conservación de la energía:

- Canal de entrada:

$$\frac{\partial(e_{0e}\rho_e F_e)}{\partial t} + \frac{\partial(h_{0e}\rho_e u_e F_e)}{\partial x} - q_e \rho_e F_e + 4(\alpha - 2w_p)h_{0w}\rho_e u_{w1} = 0 \quad (4.5)$$

- Canal de salida:

$$\frac{\partial(e_{0s}\rho_s F_s)}{\partial t} + \frac{\partial(h_{0s}\rho_s u_s F_s)}{\partial x} - q_s \rho_s F_s - 4\alpha h_{0w}\rho_s u_{w2} = 0 \quad (4.6)$$

Conservación de las especies químicas:

- Canal de entrada:

$$\frac{\partial(\rho_e Y_{ej} F_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e Y_{ej} u_e F_e)}{\partial x} = -4(\alpha - 2w_p)\rho_e u_{w1} Y_{ej} \quad (4.7)$$

- Canal de salida:

$$\frac{\partial(\rho_s Y_{sj} F_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_s Y_{sj} u_s F_s)}{\partial x} = 4\alpha\rho_s u_{w2} Y_{wj} \quad (4.8)$$

La estructura del mallado espacial de los canales se representa en la figura 4.3, donde se pueden observar todos los nodos en los que se resolverán las ecuaciones de conservación.

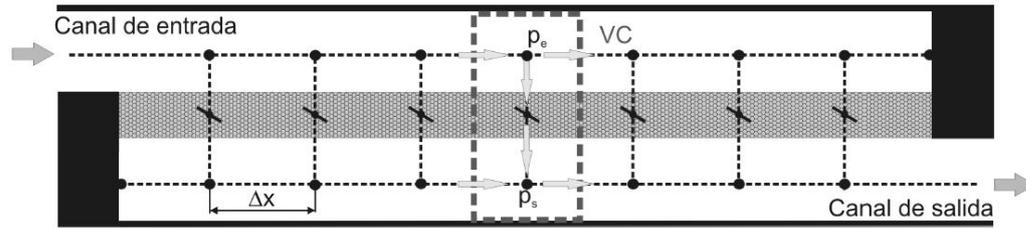


Figura 4.3: Resolución discreta de las ecuaciones de conservación en un canal de entrada y un canal de salida del filtro de partículas [1].

4.2.1. Submodelo de pérdida de presión

Como ya se ha visto en la sección 2.3.4, la pérdida de presión causada por el DPF puede descomponerse en diferentes contribuciones que a modo de breve recordatorio son:

- Contribución inercial causada por la expansión/contracción del flujo en los conos de entrada y salida del DPF.
- Contribución inercial causada por la contracción/expansión del flujo en la entrada y salida del monolito.
- Contribución de Darcy causada por el flujo cuando pasa a través del medio poroso, ya sea la capa de partículas o la pared porosa.
- Fricción con las paredes en los canales del monolito.

Las distintas contribuciones cobran mayor o menor importancia dependiendo de las condiciones del flujo: para números de Reynolds pequeños las pérdidas de presión en los canales (Darcy y fricción) son las más importantes, mientras que cuando el número de Reynolds aumenta, las pérdidas de presión inerciales tienen mayor trascendencia.

A continuación se va a tratar cada una de las contribuciones indicadas para el cálculo total de la pérdida de presión en el filtro de partículas.

La pérdida de presión causada por el flujo a través de los medios porosos se calcula empleando la ley de Darcy. La ley fija que la pérdida de presión de esta contribución es directamente proporcional a la velocidad de filtrado y al espesor del medio poroso, y es inversamente proporcional a su permeabilidad. Así, la diferencia de presión entre el canal de entrada y salida para cada posición axial se calcula con la fórmula 4.9, donde la velocidad del flujo se integra a través del espesor de la capa de partículas para poder tener en cuenta las variaciones de velocidad debidas a los cambios en el área de filtrado. En la

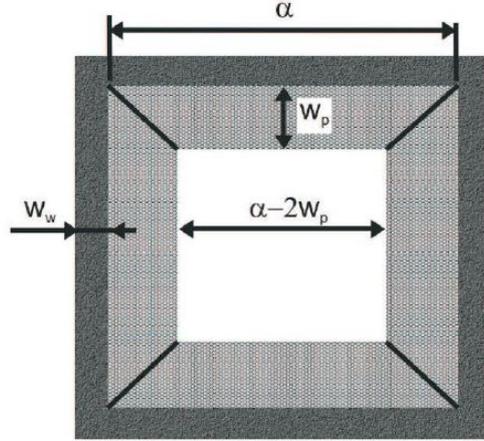


Figura 4.4: Sección transversal del canal de entrada del DPF [2].

figura 4.4 puede observarse cómo variaría el espesor de la capa de partículas en una celda ejemplo.

$$p_i - p_0 = \frac{\mu u_w 2w_w}{k_w} + \frac{\mu}{k_p} \int_0^{w_p} u_w(z) dz \quad (4.9)$$

Como puede observarse en la ecuación 4.9, es necesario obtener la velocidad de filtrado, permeabilidad de la pared porosa y de la capa de partículas para poder calcular la pérdida de presión correspondiente a las contribuciones de los medios porosos.

Se asume flujo cuasi-estacionario dentro del medio poroso, densidad del aire constante y variación lineal del área de la capa de partículas [5] para obtener la velocidad de filtrado con la ecuación 4.10.

$$|u_{w1}| \rho_e (\alpha - 2w_p) = |u_{w2}| \rho_s \alpha \quad (4.10)$$

El valor de la permeabilidad de la pared porosa y de la capa de partículas se calcula asumiendo que ambas estructuras se comportan como lechos de partículas esféricas [23]. Se define la estructura porosa como un conjunto de micro esferas cuya porosidad es la misma que la del medio poroso. El diámetro exterior de estas esferas se conoce como diámetro de la unidad celular, y en su interior se encuentra la unidad colectora, que representa el medio sólido [5].

Permeabilidad de la pared porosa:

La estructura de una pared porosa limpia está caracterizada por una porosidad (ε_0) y el diámetro medio de poro ($d_{pore,0}$). A partir de estos

parámetros es posible calcular los diámetros equivalentes de la unidad colectora ($d_{cu,0}$) y de la unidad celular ($d_{cell,0}$) utilizando las ecuaciones 4.11 y 4.12, los cuales son necesarios para calcular la permeabilidad de la pared porosa limpia según la ecuación 4.13.

$$d_{cu,0} = 1,5 \cdot \frac{(1 - \varepsilon_0)}{\varepsilon_0} \cdot d_{pore_0} \quad (4.11)$$

$$d_{cell,0} = \left(\frac{d_{cu,0}^3}{1 - \varepsilon_0} \right)^{1/3} \quad (4.12)$$

$$k_{w,0} = f(\varepsilon_{w,0}) d_{cu,0}^2 SFC \quad (4.13)$$

En la ecuación 4.13 el término $k_{w,0}$ representa la función de Kuwabara para la porosidad, y el término SCF, el factor corrector de Stokes-Cunningham [5]. Este factor corrector es introducido para tener en cuenta que la resistencia del medio poroso al paso del flujo es menor, ya las moléculas del gas en contacto con la pared tienen una velocidad distinta de cero.

Con el tiempo, el filtro se carga de hollín, modificando así su microestructura en función de la masa de hollín atrapada en cada unidad celular. El tamaño de la unidad colectora crece con el hollín acumulado en la pared porosa, su diámetro se puede calcular a partir del tamaño de la unidad colectora limpia y la masa de hollín por unidad celular, como se muestra en la ecuación 4.14. En dicha ecuación, el término ρ_{sw} representa la densidad de los agregados de hollín dentro del sustrato poroso y χ , el factor de forma, introducido para tener en cuenta el crecimiento no homogéneo de la unidad colectora.

$$d_{cu} = 2 \left(\frac{d_{cu,0}^3}{8} + \frac{3m_{scell}}{4\pi\chi\rho_{sw}} \right)^{1/3} \quad (4.14)$$

En la figura 4.5 se puede observar como a medida que el diámetro de la unidad colectora se incrementa en el interior de la unidad celular, la porosidad y el diámetro medio de poro decrecen. Esto implica una reducción de la permeabilidad de la pared porosa tanto mayor cuanto más saturado se encuentre de hollín.

Permeabilidad de la capa de partículas:

La porosidad de la capa de partículas es constante y se introduce como parámetro de entrada al modelo. Esto implica que la permeabilidad específica de la capa de partículas es, por tanto, también constante. De esta manera, la permeabilidad de esta región sólo depende de los efectos del campo fluido-dinámico, es decir, de la corrección por el SCF [5]. Finalmente se tiene como resultado que la pérdida de presión debida a la capa de partículas crece linealmente con el espesor de la misma.

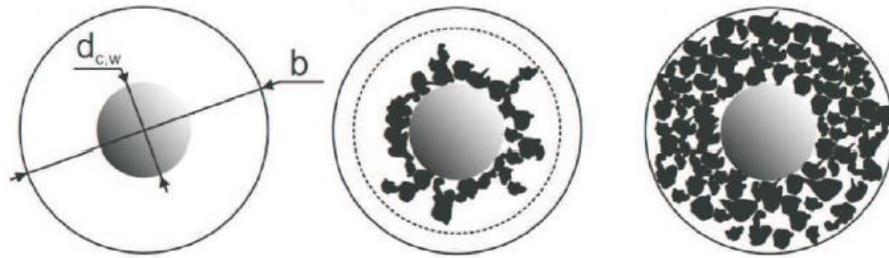


Figura 4.5: Llenado progresivo de la unidad celular [3].

Por último, para representar la pérdida de presión total generada por el DPF, se debe considerar las pérdidas de presión inerciales y por fricción.

La primera se debe a contracciones y expansiones de vena a la entrada y salida del monolito respectivamente. Se consideran modelando los volúmenes de los conos de entrada y salida como elementos 0D unidos al resto de elementos 1D con las condiciones de contorno definidas al principio de esta sección.

La segunda, pérdidas por fricción, depende del coeficiente de transferencia de momento F_w , cuyo valor es constante e igual a 28.454 [3].

El submodelo puede consultarse con mayor detalle y desarrollo de ecuaciones en [1] y [10].

4.2.2. Submodelo de transmisión de calor

El modelo de transmisión de calor está basado en la discretización bidimensional del medio poroso entre los canales de entrada y salida del monolito [4], cuyo esquema está representado en la figura 4.6.

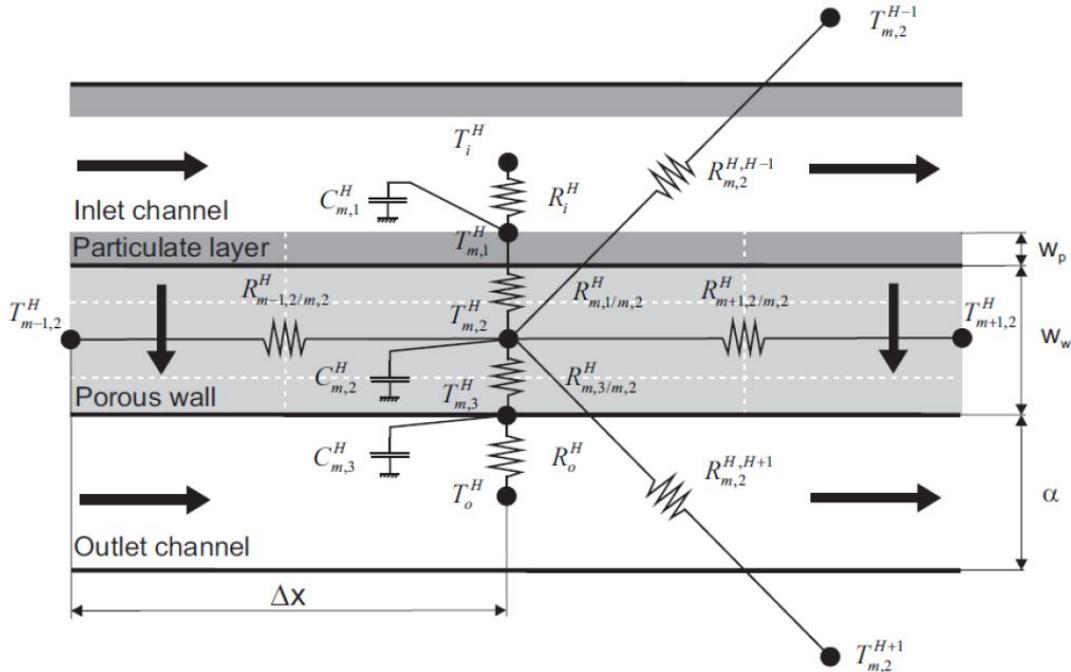


Figura 4.6: Esquema nodal del modelo de transmisión de calor en los canales del DPF [4].

Como puede observarse en la figura 4.6, cada sección axial contiene tres nodos que rigen la transmisión de calor:

- En la interfase entre el medio poroso y la fase gas del canal de entrada.
- En medio de la pared porosa.
- En la interfase entre la pared porosa y la fase gas en el canal de salida.

La capa de partículas también se tiene en cuenta, ya que tiene un efecto sobre la conductividad radial efectiva.

Por último, el mallado radial del monolito está acoplado con el submodelo de transmisión de calor con el exterior, donde el modelo emplea una discretización bidimensional específica (figura 4.7) [5]. Se asume un comportamiento axisimétrico para el monolito y la carcasa exterior, pudiendo así calcular el campo de temperaturas de la pared y del gas en el DPF.

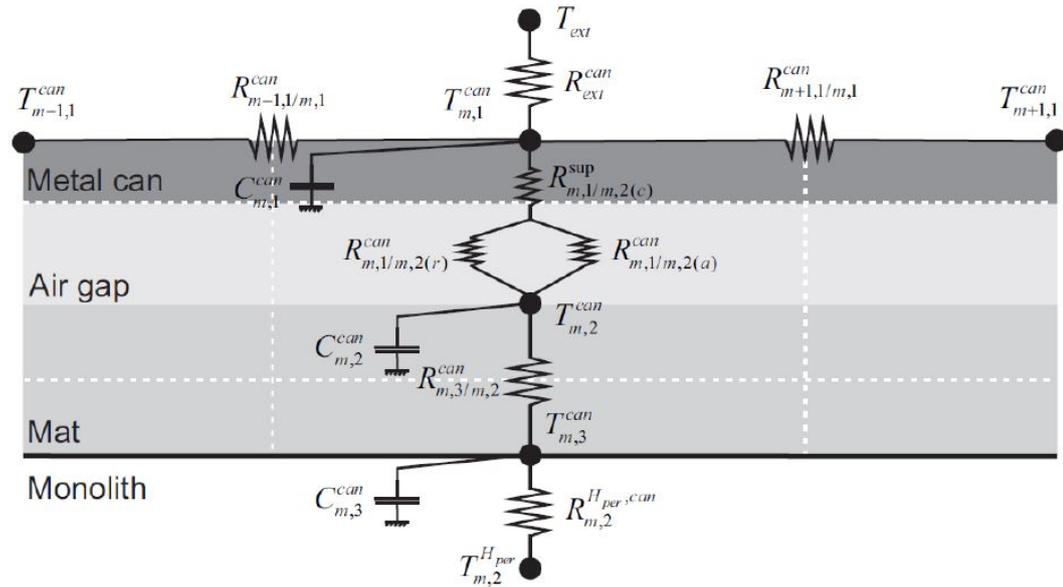


Figura 4.7: Esquema nodal del modelo de transmisión de calor en los canales del DPF [4].

4.2.3. Submodelo de filtrado

El cálculo de la eficiencia de filtrado es necesario para poder saber la masa de hollín depositada a lo largo del canal. Para ello se dispone del submodelo de filtrado que tiene en cuenta cada uno de los fenómenos de deposición que tienen lugar en el DPF.

Según este submodelo, la eficiencia de filtrado que impone la pared porosa depende de cada uno de los mecanismos de deposición sobre la superficie de las unidades colectoras explicadas en la sección 2.3.3: deposición por difusión Browniana, deposición por intercepción y deposición inercial. A su vez, la eficiencia de filtrado de la capa de partículas depende y se determina en función de la eficiencia de filtrado de la pared porosa.

Para que el modelo pueda calcular las eficiencias atendiendo también a las variaciones de tamaño de partículas, el cálculo de dichas eficiencias está referido a partículas de un determinado diámetro (d_{part}).

A continuación se va a hacer un desglose de las principales eficiencias correspondientes a los distintos mecanismos de filtrado. Cabe destacar que todas las eficiencias de filtrado calculadas vienen dadas en términos másicos.

Eficiencia de filtrado por difusión Browniana:

La eficiencia de filtrado de una única esfera debida al mecanismo Browniano está definida por la ecuación 4.15.

$$\eta_D = 3,5 \cdot \frac{\varepsilon_w}{K} Pe_w^{-2/3} \quad (4.15)$$

En la ecuación 4.15 Pe_w es el número de Peclet medio que relaciona el transporte difusivo y convectivo de las partículas en el interior de la pared porosa de acuerdo a la ecuación 4.16, donde u_w es la velocidad intersticial en la pared y D_p , función de la temperatura, viscosidad del gas, efecto de deslizamiento y diámetro de partícula (definido en la ecuación 4.17).

$$Pe_w = \frac{u_w d_c}{D_p} \quad (4.16)$$

$$D_p = \frac{Tk_b SCF_w}{3\pi\mu d_{part}} \quad (4.17)$$

De nuevo en la ecuación 4.15, la porosidad de la pared porosa viene definida como ε_w y K es el factor hidrodinámico de Kuwabara, definido en la ecuación 4.18.

$$K = 2 - \varepsilon_w - \frac{9}{5}(1 - \varepsilon_w)^{1/3} - \frac{1}{5}(1 - \varepsilon_w)^2 \quad (4.18)$$

Eficiencia de filtrado por intercepción:

El parámetro de intercepción N_R se calcula a partir de la ecuación 4.19 y es el parámetro del que depende la eficiencia de filtrado debida a la intercepción, cuya fórmula para una unidad colectora aislada queda definida en 4.20.

$$N_R = \frac{d_{part}}{d_{c,w}} \quad (4.19)$$

$$\eta_R = 1,5 \frac{N_R^2}{1 + N_R^{\frac{3-2\varepsilon_w}{3\varepsilon_w}}} \frac{\varepsilon_w}{K} \quad (4.20)$$

Eficiencia de filtrado inercial:

Esta contribución resulta despreciable en el rango de tamaño de las partículas emitidas por los motores de combustión interna alternativos

[5]. La eficiencia de filtrado de una única esfera debida al mecanismo inercial es función del número de Stokes (St), definido por la ecuación 4.21:

$$St = \frac{SCF_w \rho_{s,w} u_w d_{part}^2}{9\mu d_{c,w}} \quad (4.21)$$

Una vez conocida la definición del número de Stokes, la ecuación 4.22 determina la eficiencia de filtrado de una única esfera debida al mecanismo inercial.

$$\eta_I = \frac{St^2}{(St + 0,25)^2} \quad (4.22)$$

Eficiencia global:

Una vez determinadas las diferentes contribuciones de cada uno de los mecanismos de filtrado se obtiene la eficiencia global como una combinación de todas ellas de acuerdo a la regla de la independencia:

$$\eta_{DRI} = (\eta_D + \eta_R + \eta_I) - (\eta_D \eta_R + \eta_R \eta_I + \eta_D \eta_I) + \eta_D \eta_R \eta_I \quad (4.23)$$

La ecuación 4.23 muestra la eficiencia de filtrado combinada de una esfera colectora. En base a esta eficiencia puede determinarse la eficiencia de filtrado de la pared porosa (ecuación 4.24):

$$E_{f,w} = 1 - e^{-\frac{3\eta_{DRI}(1-\varepsilon_w)w_w f_{wset} Sc}{2\varepsilon_w d_{c,w}}} \quad (4.24)$$

4.2.4. Submodelo de regeneración

El submodelo de regeneración se basa en la aplicación de la ecuación de conservación de especies químicas sobre un volumen de control definido por la pared porosa y la capa de partículas para cada nodo axial discretizado en los canales de entrada y salida del DPF [5]. El término de reactividad química marcará la variación de concentración de especies reactivas presentes en fase gas. Para su cálculo han de considerarse todas las etapas que se dan en reacciones en interfases sólido-gas, así como la posible interacción con otros submodelos presentes en el modelo: pérdida de presión, filtrado y transmisión de calor.

A lo largo de este trabajo se va a realizar un estudio sobre las fases y etapas de reactividad. Dada la importancia de este submodelo para el proyecto, se va a dedicar un punto aparte sólo para explicar en qué consiste, así como los

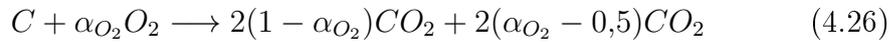
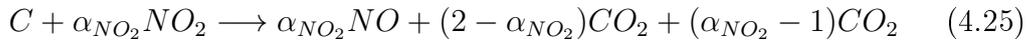
términos y conceptos necesarios para la correcta comprensión de los siguientes apartados y resultados obtenidos.

4.3. Reactividad química

La reactividad química de una especie es su capacidad para reaccionar en presencia de otras sustancias químicas o reactivos [24].

Se va a partir de las ecuaciones químicas (4.25 y 4.26) que expresan la reactividad de las dos especies consideradas las más relevantes en la oxidación del hollín en un filtro de partículas Diesel: el NO_2 y el O_2 [25].

El óxido de nitrógeno (NO_2) es el principal oxidante cuando las temperaturas son bajas, destacando así en procesos de regeneración pasiva. En cambio, el oxígeno (O_2) es el oxidante principal a altas temperaturas, regeneraciones activas.



En las ecuaciones 4.25 y 4.26, el término α representa el índice de completitud de la reacción de oxidación del hollín. El valor de α_{NO_2} toma valores entre 2 y 1, indicando 2 una oxidación completa. En el caso de α_{O_2} , los valores se encuentran entre 1 y 0.5, significando de nuevo el valor más elevado una oxidación completa.

Como se ha indicado en la sección 4.2.4, el modelo 1D cuenta con un submodelo de regeneración que consiste en la aplicación de la ecuación de conservación de especies químicas sobre un volumen de control definido. A continuación se va a explicar en qué consiste este volumen de control y la ecuación de conservación de especies en detalle.

4.3.1. Definición del volumen de control

El volumen de control al cual se aplican las ecuaciones de conservación de especies químicas consiste en un volumen de longitud Δx , con tres secciones principales en la dirección tangencial diferenciadas por la reactividad del hollín

en cada una de ellas: la capa de partículas, la pared porosa cargada e impregnada con catalizador y la pared porosa cargada no catalizada. En la figura 4.3 puede observarse un esquema de dicho volumen.

Para reducir el coste computacional del modelo es necesario fijar algunas hipótesis. En este caso, se considera que la composición del gas sólo depende de la coordenada tangencial de la pared, quedando las variables fluidodinámicas constantes para cada región.

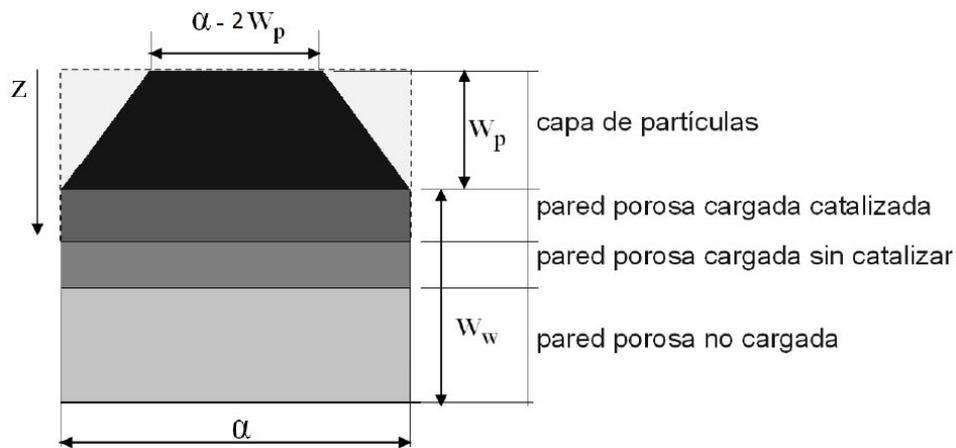


Figura 4.8: Esquema de las posibles regiones de acumulación de hollín en el filtro de partículas [4].

La figura 4.8 muestra las posibles regiones de acumulación y reactividad de hollín en un filtro de partículas. No todas las regiones tienen por qué existir, depende del tipo de filtro y su nivel de acumulación de hollín. Las principales características de cada una de las secciones son:

Capa de partículas:

El espesor de esta región varía según la acumulación de hollín y sólo existe en el caso de que la pared porosa se encuentre saturada, o durante las fases de la regeneración en las que la regeneración de las otras capas se haya completado. Para simplificar los cálculos se considera la velocidad de filtrado con la dirección tangencial constante.

Pared porosa catalizada:

Algunos filtros de partículas tienen la superficie de la pared porosa impregnada con catalizador en los canales de entrada. La función del catalizador es disminuir la energía de activación de las reacciones de

combustión del hollín, lo que implica una mayor reactividad química. Este incremento de reactividad implica una mayor variación de la masa de hollín en la región catalizada.

Pared porosa sin catalizar:

La reactividad de esta región es menor que la de la sección catalizada. La concentración de los principales oxidantes también es menor, lo que implica la necesidad de modelar esta sección de forma independiente.

4.3.2. Fases de la reacción

La reacción de oxidación del hollín se da entre especies presentes en fase gas (oxidantes) y en fase sólida (hollín)[5]. Toda la reactividad ocurre en la interfase sólido-gas de una partícula porosa, implicando los mecanismos que se esquematizan en la figura 4.9.

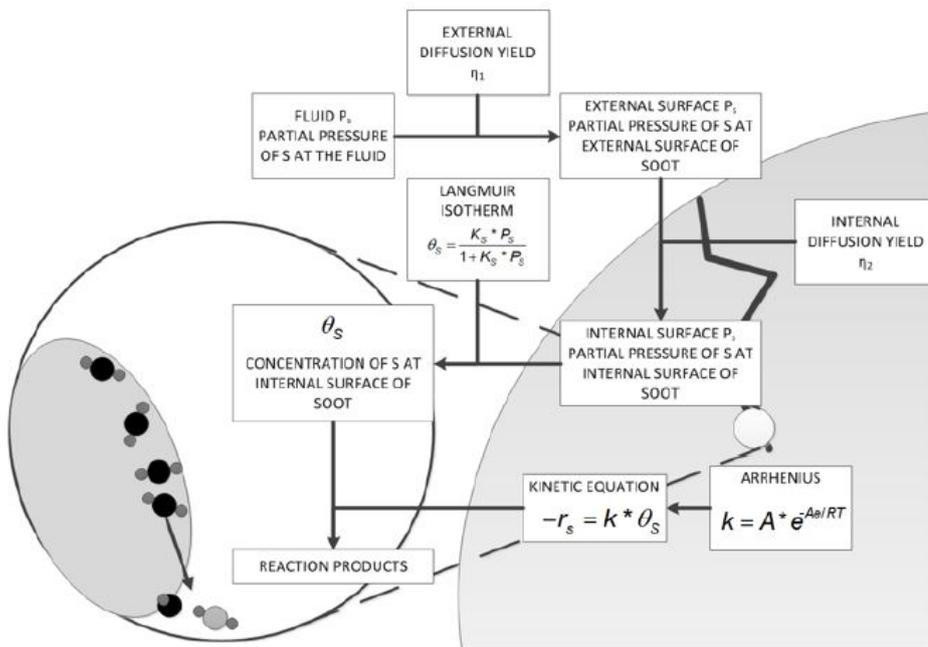


Figura 4.9: Esquema de los procesos limitantes en una reacción en la superficie de una partícula porosa [5].

El correcto modelado de una reacción de este tipo debe tener en cuenta las siguientes fases:

1. La **difusión externa** se establece como el proceso que controla el gradiente de concentración de una especie entre la entrada y la salida de la pared.
2. La **difusión interna** de los reactivos desde la superficie externa de la partícula a la superficie interior de los microporos. Esta fase está caracterizada por el rendimiento de la difusión interna η , que debe introducirse en la definición de la función 4.28, y que representa las limitaciones que se deben al gradiente de concentración de las especies reactivas dentro de los microporos de la partícula.

Existen diferentes mecanismos de difusión de una especie en un medio poroso:

- Difusión molecular: El tamaño de poro es mucho mayor que el camino libre medio de la molécula.
 - Difusión de Knudsen: El tamaño de poro es del orden de magnitud del camino libre medio de la molécula.
 - Difusión configuracional: El tamaño del poro es de un orden de magnitud similar al tamaño de la molécula.
 - Difusión por superficie: Las moléculas son absorbidas en la pared.
3. La **adsorción** tiene en cuenta la relación entre la concentración de las especies en el gas con la concentración superficial. Esta relación viene dada en forma de isotermas de adsorción y su empleo lleva implícito el hecho de que se ha alcanzado el equilibrio entre la concentración en la superficie y fase gas, es decir, la velocidad de adsorción/desorción es despreciable frente a la velocidad de la reacción química [5].

Pueden encontrarse numerosas isotermas en la bibliografía para describir el proceso de adsorción de una molécula sobre una superficie [26]:

- Isoterma Langmuir:

Isoterma monomolecular cuya adsorción está localizada en sitios definidos (activos) de la superficie. La superficie es homogénea, donde se forma una capa de espesor monomolecular (figura 4.10 a) cuyas moléculas adsorbidas no interactúan entre sí.

- Isoterma BET:

Isoterma polimolecular, la teoría de BET amplía el modelo monocapa de Langmuir mediante la introducción de ciertas suposiciones, que incluyen adsorción en multicapa (figura 4.10 b) y condensación

capilar. Las moléculas adsorbidas en la primera capa actúan como sitios de adsorción de la segunda, y así sucesivamente.

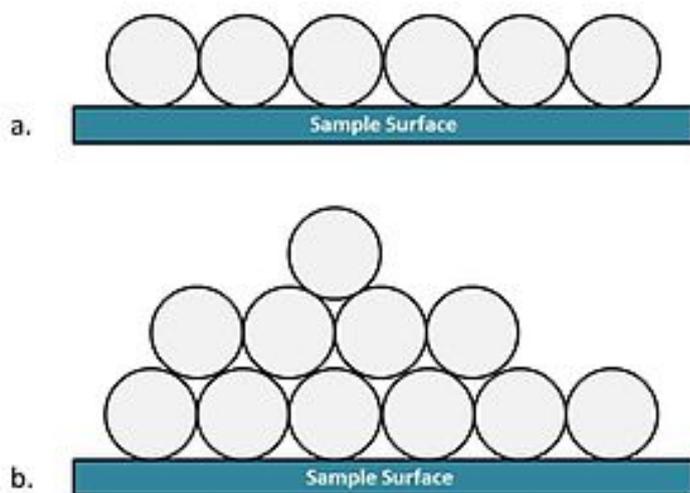


Figura 4.10: Distribución de las moléculas sobre la superficie según la teoría de Langmuir (a) y BET (b).

Para el caso de la adsorción de las principales especies oxidantes del DPF, NO_2 y O_2 , se necesita una isoterma en la que se considere que la partícula es homogénea, la presencia de otras moléculas adsorbidas no influya en la reactividad de la misma y cuya reactividad se liite únicamente a las moléculas adsorbidas en la primera capa sobre la superficie. De esta manera, la isoterma de Langmuir se considera como la más adecuada para modelar la adsorción sobre los reactivos sobre el hollín.

4. La **reacción química en la superficie**, caracterizada por la ecuación cinética.

Cada fase cambia su importancia relativa con la temperatura, ya que la reactividad térmica es altamente dependiente de la misma, como se demostrará más adelante.

4.3.3. Ecuación de conservación de las especies químicas

La ecuación de conservación de las especies químicas empleada en el modelo se basa en los trabajos presentados en [3, 27, 28, 29], en los que se define la

influencia de la reactividad de las partículas de hollín sobre la concentración de las especies presentes en el gas por medio de la ecuación de transporte de especies químicas unidimensional aplicada sobre cada región del medio poroso [5].

$$\dot{w}_n = \frac{\partial(\rho Y_n)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_w Y_n)}{\partial z} - D_n \frac{\partial^2(\rho Y_n)}{\partial z^2} \quad (4.27)$$

La ecuación 4.27 representa la generación/consumo de la especie debido a la reactividad química mediante el término fuente \dot{w}_n . El término Y_n es la fracción másica de la especie n , ρ la densidad, u_w la velocidad de filtrado y D_n el coeficiente de difusividad de la especie n .

Para simplificar cálculos, se considera que la velocidad de las reacciones químicas es muy elevada, pudiendo asumir así que se trata de un proceso instantáneo. De esta manera se propone un modelo cuasi-estacionario para el cálculo de la variación de la fracción másica e las especies químicas en el interior de la pared porosa, controlada por el proceso de oxidación y filtrado. El término difusivo se supone despreciable para el rango de temperaturas de trabajo actual quedando la ecuación de la siguiente manera:

$$\dot{w}_n = \rho \alpha S_p f(X_n, T) = \frac{\partial(\rho u Y_n)}{\partial z} \quad (4.28)$$

La ecuación 4.28 representa la generación/consumo de especie mediante el término fuente tras la hipótesis de un modelo cuasi-estacionario y el desarrollo de dicho término. En esta expresión α representa el índice de completitud o coeficiente estequiométrico, S_p la superficie específica del hollín y $f(X_n, T)$ una función mediante la cual puede definirse el orden de la cinética química y queda definida en la ecuación 4.29.

$$f(X_n, T) = K_c \cdot X_n^r \quad (4.29)$$

donde K_c es una constante cinética, definida siguiendo una cinética química de tipo Arrhenius (ecuación 4.30).

$$K_c = A_n e^{-\frac{E_{a_n}}{RT}} \quad (4.30)$$

Cabe destacar el cambio de la expresión inicial, función de la fracción másica, a la final: función de la fracción molar. Este cambio se ha realizado con la expresión 4.31, donde \overline{PM} es el peso molecular promedio del gas y PM_n el peso molecular del reactivo.

$$X_n = \frac{\overline{PM}}{PM_n} Y_n \quad (4.31)$$

Combinando las ecuaciones 4.28 y 4.31 y teniendo en cuenta que tanto densidad como velocidad la velocidad de filtrado no varían tangencialmente, se obtiene la expresión 4.32.

$$\dot{w}_n dz = \rho u dX_n \quad (4.32)$$

Reordenando términos e introduciendo la definición del desarrollo del término fuente, la expresión final, de la que se partirá a partir de ahora para realizar todos los cálculos, queda definida en 4.33.

$$\frac{dX_n}{dz} = \frac{S_p \alpha f(X_n, T)}{u} = \frac{\dot{w}_n(X_n)}{u \rho} \quad (4.33)$$

Gracias a la función definida en 4.29, se puede resolver la ecuación de conservación de especies propuesta para el modelo para distintos órdenes de reacción, definidos con la potencia r .

El modelo 1D establece una cinética química de orden variable modelada mediante un proceso de adsorción. En este caso, la función equivalente de 4.29 queda:

$$f(X_n, T) = K_c \cdot X_n^r = K_c \theta_n \quad (4.34)$$

Donde el parámetro (θ_n) representa el término para el equilibrio de adsorción y se calcula con la Isoterma de Langmuir, considerada la más adecuada para modelar la adsorción por los siguiente motivos:

- Todas las posiciones de adsorción son equivalente.
- Las moléculas absorbidas no interaccionan entre sí.
- Se forma una capa de espesor monomolecular.

Esta isoterma define θ_n como la fracción de posiciones superficiales ocupadas por la especie n , siendo $K_{s,n}$ la constante de equilibrio de adsorción/desorción de la especie n en la superficie (diferente según se trate de NO_2 o O_2) y X_n la fracción molar de la especie n en la fase gas (ecuación 4.35):

$$\theta_n = \frac{K_{s,n} X_n}{1 + K_{s,n} X_n} \quad (4.35)$$

Sustituyendo la ecuación 4.34 en 4.33 la expresión a integrar es:

$$\frac{dX}{dz} = \frac{S_p \alpha K_c \theta_n}{u} \longrightarrow \int_{X_{in}}^{X_{out}} \frac{dX}{\theta_n(X)} = \int \frac{S_p \alpha K_c}{u} dz \quad (4.36)$$

La solución de 4.36 se lleva a cabo numéricamente, mediante el método Runge-Kutta de orden 4 (RK4), explicando con más detalle en [5] y [30].

El método RK4 sirve tanto para la variación de O_2 como a la de NO_2 en las diferentes regiones, obteniendo así la fracción másica molar que ha reaccionado de cada una de estas dos especies [5].

4.3.4. Cálculo de la potencia de regeneración

La cantidad de hollín consumida en cada una de las regiones por unidad de tiempo se calcula por estequiometría a partir del balance de cada una de las especies reactivas entre la entrada y salida de cada capa.

La variación en valor absoluto de la fracción molar de las especies reactivas (NO_2 y O_2) en el medio poroso viene dada por las ecuaciones 4.37 y 4.38 respectivamente.

$$\Delta X_{NO_2} = |X_{NO_2,out} - X_{NO_2,in}| \quad (4.37)$$

$$\Delta X_{O_2} = |X_{O_2,out} - X_{O_2,in}| \quad (4.38)$$

La variación de fracción molar de los productos de la reacción puede hallarse a partir de la variación que sufren los reactivos según la ecuación 4.39:

$$\Delta X_n = a_{n,NO_2} \Delta X_{NO_2} + a_{n,O_2} \Delta X_{O_2} \quad (4.39)$$

En la ecuación 4.39 a_{n,NO_2} y a_{n,O_2} son el cociente de los coeficientes estequiométricos de la especie n , expresado como $b_n(\alpha)$, y del coeficiente estequiométrico de la especie oxidante en cada caso. Las ecuaciones 4.40 y 4.41 muestran las expresiones que se emplean para calcular a_{n,NO_2} y a_{n,O_2} , relativas a los productos de la reacción de oxidación con NO_2 y O_2 respectivamente.

$$a_{n,NO_2} = \frac{b_n(\alpha_{NO_2})}{\alpha_{NO_2}} \quad (4.40)$$

$$a_{n,O_2} = \frac{b_n(\alpha_{O_2})}{\alpha_{O_2}} \quad (4.41)$$

El caudal molar consumido de NO_2 y O_2 puede obtenerse a partir de la velocidad de filtrado, del área de filtrado del volumen de control, de la concentración molar del gas y de la diferencia de fracciones molares entre entrada y salida (ecuaciones 4.42 y 4.43).

$$\frac{\partial n_{NO_2}}{\partial t} = \Delta X_{NO_2} u_w A_f C_{gas} \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial n_{O_2}}{\partial t} = \Delta X_{O_2} u_w A_f C_{gas} \quad (4.43)$$

Conocida la estequiometría de cada reacción y el paso de tiempo se puede calcular la masa de hollín consumida según la ecuación 4.44.

$$m_{C,Reg} = PM_C \Delta t \left(\frac{1}{\alpha_{NO_2}} \frac{\partial n_{NO_2}}{\partial t} + \frac{1}{\alpha_{O_2}} \frac{\partial n_{O_2}}{\partial t} \right) \quad (4.44)$$

Por último, con ayuda de las ecuaciones 4.45 y 4.46 se obtiene el calor liberado por unidad de tiempo generado por la combustión el hollín en cada capa para el caso de la regeneración con O_2 y NO_2 respectivamente. El calor total por unidad de tiempo en cada capa se obtiene como la suma de ambas contribuciones (ecuación 4.47):

$$\dot{q}_{Reg,O_2} = \frac{2(\alpha_{O_2} - 0,5)\Delta H_{f,CO_2} + 2(1 - \alpha_{O_2})\Delta H_{f,CO}}{\alpha_{O_2}} \frac{\partial n_{O_2}}{\partial t} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} \dot{q}_{Reg,NO_2} &= \\ &= \frac{(\alpha_{NO_2} - 1)\Delta H_{f,CO_2} + (2 - \alpha_{NO_2})\Delta H_{f,CO} + \alpha_{NO_2}\Delta H_{f,NO} - \alpha_{NO_2}\Delta H_{f,NO_2}}{\alpha_{NO_2}} \\ &\quad \frac{\partial n_{NO_2}}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\dot{q}_{Reg} = \dot{q}_{Reg,O_2} + \dot{q}_{Reg,NO_2} \quad (4.47)$$

El cálculo de las entalpías de formación ΔH_f que aparecen en las ecuaciones 4.46 y 4.45 puede encontrarse detalladamente en [30].

4.3.5. Balance de masas por filtrado y regeneración

La variación de la cantidad de hollín en cada instante de tiempo en las distintas regiones de acumulación de hollín depende de los resultados obtenidos por los submodelos de filtrado y regeneración.

La masa de hollín en cada región de un volumen de control queda definida con la ecuación 4.48, donde i puede ser la pared porosa (catalizada o no) y/o la capa de partículas. Si se trata de la capa de partículas se debe tener en cuenta que el espesor de la misma va variando con la masa de hollín depositada de acuerdo a la geometría antes definida (figura 4.8).

$$m_{C,i}(t+1) = m_{C,i}(t) + m_{C,filt,i}(t) - m_{C,Re,i}(t) \quad (4.48)$$

El área transversal de la capa de partículas queda definida en la ec.4.49. Teniendo en cuenta que el volumen de control tiene una longitud Δx y que la capa de partículas posee una densidad ρ_{pl} , la masa acumulada en la capa de partículas se obtiene según la ecuación 4.50.

$$A_{tr} = 4 \frac{\alpha + (\alpha - 2w_{pl})}{2} w_{pl} \quad (4.49)$$

$$m_{C,pl} = A_{tr} \Delta x \rho_{pl} \quad (4.50)$$

El espesor de la capa de partículas se puede calcular combinando estas dos ecuaciones y despejando, quedando como resultado la expresión 4.51.

$$w_{pl} = \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \frac{m_{C,pl}}{\Delta x \rho_{pl}}}}{2} \quad (4.51)$$

Para el caso de las regiones situadas en la pared porosa, ya sea zona catalizada o no, se calcula la masa de hollín depositada en cada unidad colectora (ecuación 4.52) para poder determinar el diámetro de dicha unidad y la porosidad, pudiendo obtener de ahí la permeabilidad y eficiencia de filtrado.

$$m_{C,uc}(t+1) = m_{C,uc}(t) + \frac{m_{C,filtr,w} - m_{C,Reg,w}}{m_{uc}} \quad (4.52)$$

La fracción másica de cada una de las especies químicas a la salida del medio poroso depende del filtrado y la regeneración. El flujo másico de gas se ve reducido entre la entrada y salida del medio poroso debido al proceso de filtrado. Esta reducción es debida a la retención de partículas en el medio poroso y viene definida por la ecuación 4.53, donde E_f es la eficiencia de filtrado del medio poroso, $Y_{C,e}$ la fracción másica de hollín en la corriente de gas a la entrada del medio poroso, $\dot{m}_{gas,e}$ el flujo másico a la entrada del medio poroso y $\dot{m}_{gas,s1}$ es el flujo másico una vez descontado el hollín retenido en el medio poroso.

$$\dot{m}_{gas,s1} = \dot{m}_{gas,e} (1 - E_f Y_{C,e}) \quad (4.53)$$

De igual modo, con la ecuación 4.54, se puede calcular el cambio en la masa total de gas debido a la reactividad química mediante el balance entre la masa de los reactivos consumidos y la masa de los productos generados a partir de la fracción másica de cada especie generada o consumida en el medio poroso. En dicha ecuación, los subíndices i hacen referencia a los productos de reacción y los subíndices j , a los reactivos. La variable $m_{gas,s}$ es el flujo másico incluyendo el balance de especies generadas/consumidas en el medio poroso y ΔY es la variación de fracción másica de cada especie, en valor absoluto, debida a su generación/consumo en el medio poroso definida en 4.55. En esta expresión, PM es el peso molecular de la especie y \overline{PM} , el peso molecular promedio de la mezcla.

$$\dot{m}_{gas,s} = \dot{m}_{gas,s1} + \dot{m}_{gas,e} \sum_i \Delta Y_i - \dot{m}_{gas,e} \sum_j \Delta Y_j \quad (4.54)$$

$$\Delta Y_n = \frac{PM_n}{PM} \Delta X_n \quad (4.55)$$

El flujo másico en la sección de salida del medio poroso se obtiene sustituyendo la ecuación 4.53 en 4.54, quedando la expresión resultante descrita en 4.56.

$$\dot{m}_{gas,s} = \dot{m}_{gas,e}(1 - E_f Y_{C,e}) + \dot{m}_{gas,e} \sum_i \Delta Y_i - \dot{m}_{gas,e} \sum_j \Delta Y_j \quad (4.56)$$

Para el cálculo de la fracción másica de cada especie es necesario conocer el flujo másico de la especie a la salida, dada por el flujo másico de la especie a la entrada y la reactividad de dicha especie en el medio poroso. La ecuación que permite dicho cálculo queda definida en 4.57, donde se entiende como $Y_{n,s}$ la fracción másica de la especie n en el gas a la entrada del medio poroso y se calcula según la ecuación 4.58.

$$\dot{m}_{n,s} = \dot{m}_{gas,e} Y_{n,e} \pm \dot{m}_{gas,e} \Delta Y_n \quad (4.57)$$

$$Y_{n,s} = \frac{\dot{m}_{n,s}}{\dot{m}_{gas,s}} \quad (4.58)$$

Combinando las ecuaciones 4.56, 4.57 y 4.58 se puede expresar la fracción másica de salida de la especie n en función de su fracción másica entrante al medio poroso y de la variación de flujo másico por los procesos de filtrado y regeneración (ecuación 4.59).

$$Y_{n,s} = \frac{Y_{n,e} \pm \Delta Y_n}{1 - E_f Y_{C,e} + \sum_i \Delta Y_i - \sum_j \Delta Y_j} \quad (4.59)$$

Finalmente, la fracción másica de mayor interés: hollín, se calcula teniendo en cuenta que no su variación en el medio poroso no depende de las reacciones de regeneración. Ésta viene dada exclusivamente por la eficiencia del proceso de filtrado, quedando el flujo másico de hollín a la salida de la pared porosa definido en 4.60.

$$\dot{m}_{C,s} = Y_{C,e} \dot{m}_{gas,e} (1 - E_f) \quad (4.60)$$

Siguiendo el mismo procedimiento que para la ecuación 4.59, se puede obtener la fracción másica de hollín en la sección de salida del medio poroso con la expresión 4.61:

$$Y_{n,s} = \frac{Y_{C,e}(1 - E_f)}{(1 - E_f Y_{C,e}) + \sum_i \Delta Y_i - \sum_j \Delta Y_j} \quad (4.61)$$

Capítulo 5

Resultados

RESUMEN: En este capítulo se recopilan los resultados obtenidos a lo largo del proyecto: validación del modelo, etapas de reactividad y análisis de sensibilidad de varios parámetros. Por último se muestra un caso de inyección de agua al que se le aplican las conclusiones obtenidas de los anteriores resultados con el fin de mejorar la estrategia de regeneración.

5.1. Validación modelo

La primera parte de este proyecto busca demostrar que es posible reproducir el comportamiento del filtro durante una regeneración activa teniendo en cuenta la fase de adsorción.

Esta comprobación se aborda como una validación del modelo, basada en la ejecución de varios casos de regeneración en los que se varía principalmente una constante cinética de la principal especie oxidante en la regeneración activa: O_2 . Esta constante cinética es conocida como factor preexponencial o de frecuencia (A_n), y se encuentra en la ecuación de Arrhenius 4.30.

A lo largo de todo el proyecto se trabaja imponiendo el gasto másico y temperatura de entrada al filtro. El parámetro a controlar es la pérdida de presión, definida por los dos parámetros impuestos y la evolución de la permeabilidad, dependiente a su vez de la masa de hollín.

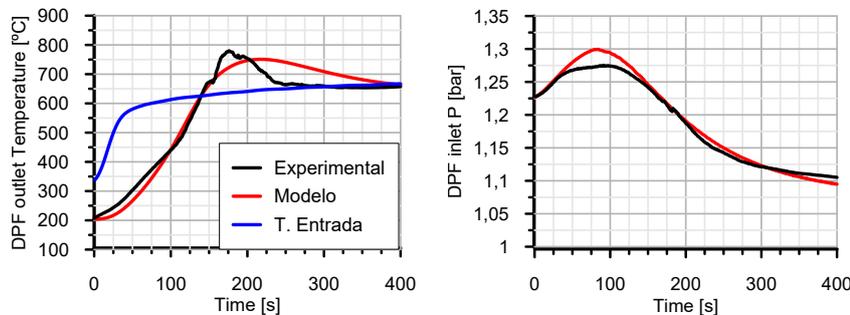
La tarea de validación consiste en intentar hacer coincidir lo máximo posible los datos obtenidos con el modelo y los experimentales recogidos en el banco motor. Se establecen tres gráficas básicas para juzgar a simple vista si el caso ejecutado es o no un buen ajuste, donde se muestra la evolución temporal de tres parámetros: la temperatura a la salida del filtro, la presión a la entrada del mismo y la masa de hollín total. Este último no se compara con datos

experimentales, puesto que no se tienen, pero se representa para proporcionar una idea de la rapidez del proceso de regeneración y la distribución de hollín a lo largo del tiempo.

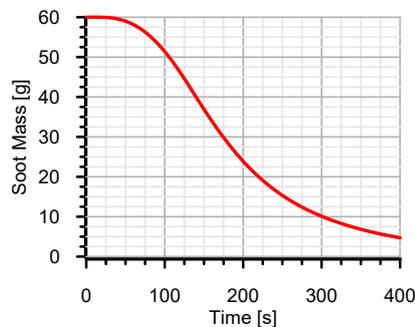
La siguiente fase de la validación consta del cálculo de las rectas de regresión referidas a la pérdida de presión. Este paso incluye el cálculo del coeficiente de correlación correspondiente a cada recta con la análoga de los datos experimentales (R^2), un parámetro que indica la relación lineal entre dos variables aleatorias cuantitativas. Este coeficiente varía en el intervalo $[0, 1]$. Un valor de $R^2 = 1$ indica una correlación positiva perfecta y $R^2 = 0$ implicaría que no existe relación lineal. Esto conlleva que el ajuste que proporcione un valor de R^2 más próximo a 1 será, probablemente, el caso que mejor se acople a la realidad.

Una vez definida la estrategia de validación se procede con la exposición de los resultados obtenidos siguiendo la metodología planteada. Tras varias ejecuciones de distintos casos, el mejor ajuste obtenido se corresponde con un factor preexponencial de 2.

La figura 5.1 muestra las tres gráficas básicas antes mencionadas con las que se ha llevado a cabo la primera fase de la validación:



(a) Temperatura a la salida del DPF (b) Presión a la entrada del DPF



(c) Masa de hollín total

Figura 5.1: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$).

La figura 5.1 demuestra que el ajuste reproduce los resultados experimentales con bastante precisión, sobre todo la presión a la entrada del DPF. El transitorio de temperatura difiere un poco de la realidad pero se estabiliza alcanzando los mismos valores que en el caso experimental. La gráfica 5.1c muestra la evolución temporal de la masa de hollín en el filtro en la que se puede observar como la tasa de consumo de dicha masa varía mucho dependiendo del intervalo de tiempo que se considere: en los 100 primeros segundos se oxidan apenas 100 g, mientras que en el intervalo comprendido entre 100 y 200 segundos se oxida tres veces dicha cantidad. En la gráfica 5.1a se ha añadido la temperatura a la entrada del DPF para poder ver como las temperaturas alcanzadas durante la regeneración son más elevadas debido al proceso exotérmico de oxidación del hollín.

Una vez finalizada la primera fase de la validación se procede con la realización de la correspondiente regresión numérica y su coeficiente de correlación:

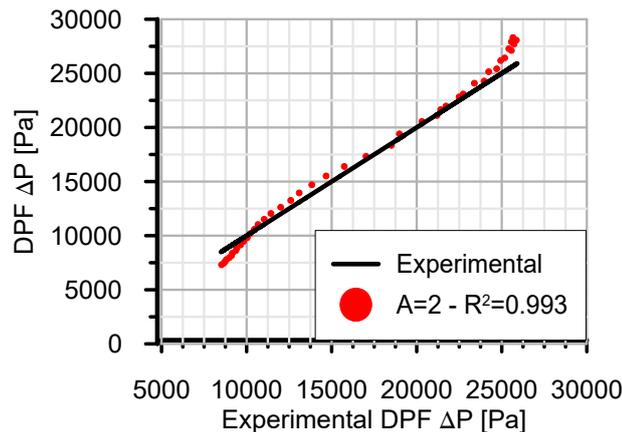


Figura 5.2: Rectas de regresión de la caída de presión junto con el coeficiente de correlación R^2 ($A_n = 2$).

Como se puede observar en la figura 5.2 la relación lineal entre los datos experimentales y los correspondientes al modelado con $A_n = 2$ es muy buena, y el valor del coeficiente de correlación obtenido es muy próximo a la unidad: 0.993. Con esta gráfica y el valor de R^2 se puede confirmar que el ajuste realizado reproduce el comportamiento del DPF con una precisión elevada.

5.1.1. Análisis temporal

Con el fin de comprender mejor el comportamiento del filtro y el proceso de regeneración en sí, se realiza un estudio de la evolución temporal de distintos parámetros.

El modelo es capaz de calcular varias temperaturas: temperatura de pared en el canal de entrada/salida, temperatura superficial, temperatura de salida, etc. La mayoría de los perfiles de dichas temperaturas son muy similares o prácticamente iguales, por eso se elige una de ellas como ejemplo que, en este caso, es la temperatura de pared en el canal de entrada:

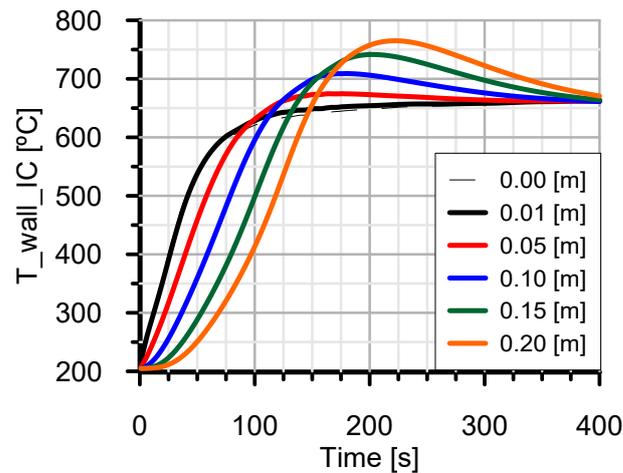


Figura 5.3: Evolución temporal de la temperatura de pared del canal de entrada para distintas posiciones a lo largo del mismo.

La figura 5.3 muestra el considerable aumento de temperatura en los primeros segundos del proceso de regeneración, alcanzando un valor máximo para después estabilizarse. Este máximo o pico de temperatura se desplaza en el tiempo con la longitud, es decir, cuanto más alejado está el punto de medida del inicio del canal, mayor es el valor y el tiempo en el que se observa el máximo. Este comportamiento es algo lógico si se piensa en el proceso de regeneración como un frente de temperatura que avanza a lo largo del canal, oxidando el hollín a su paso. El pico de temperatura aumenta su valor debido a la liberación de calor que se produce en el proceso de oxidación.

Otro parámetro importante, cuya evolución temporal es interesante analizar, es la masa de hollín para distintas posiciones longitudinales. Como se ha comentado en la gráfica 5.1c, la masa de hollín no se quema de manera gradual y continua, existen intervalos de tiempo en los que se oxida mucha más masa que en otros. Con la siguiente gráfica se pretende visualizar la evolución o cambios de dichos intervalos de tiempo:

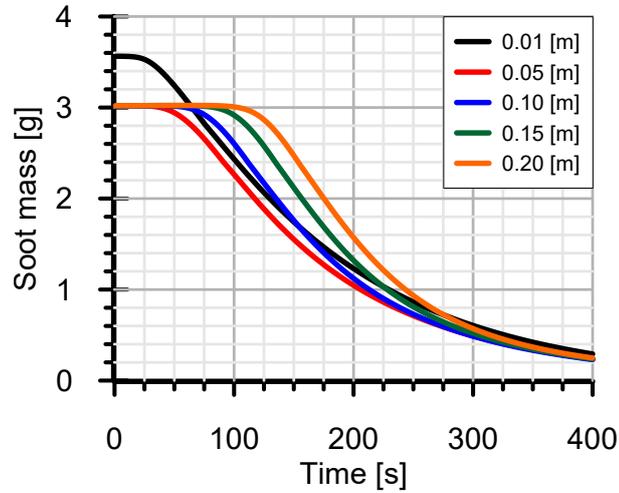


Figura 5.4: Evolución temporal de la masa de hollín en la capa y pared para distintas posiciones a lo largo del canal.

Analizando la figura 5.4 se observa como al inicio existe una etapa en la que no se detecta ninguna variación de masa de hollín, es decir, no se oxida nada. Esta etapa es más larga cuanto más avanzada sea la posición longitudinal dentro del canal. Si se observa esta figura de manera conjunta con 5.3, se deduce que la explicación de la prolongación de esta etapa con la longitud está íntimamente relacionada con la evolución de los máximos de temperatura: Cuanto más alejada es la posición del inicio del canal, más tarde empieza a oxidar el hollín porque aún no se ha alcanzado la temperatura necesaria para tal fenómeno en dicho punto. Se observa como el descenso de masa de hollín empieza a tener lugar cuando el perfil de temperaturas correspondiente alcanza los 450-500 °C, quedando así definida la temperatura a la que el hollín se oxida en una regeneración activa.

Cabe destacar que el hecho de que el primer nodo (0.01 m) posea más masa sólo se debe a una característica del mallado de los canales en el modelo. El nodo inicial se supone vacío, sin masa. Esta suposición no es del todo cierta, una parte de la celda correspondiente al nodo 0 sí acumula hollín, aunque muy poco. Para solucionar este desajuste se suma la masa correspondiente acumulada en el nodo 0 (0.00 m) a la del nodo contiguo (0.01 m). De esta manera, el nodo 1 (0.01 m) siempre tiene más masa de la que en realidad le correspondería.

En el caso de una regeneración activa, la principal especie oxidante es el O_2 , pero el NO_2 también puede tener una aportación que se puede tener en cuenta. A continuación se va a analizar la evolución temporal de las tasas de consumo de ambas especies para distintas posiciones longitudinales. De manera paralela se observará si los órdenes de magnitud de ambas tasas son similares o, como se espera, una predomina sobre el otro. La potencia liberada por el proceso de

oxidación de hollín debido a cada una de las especies va directamente ligada a su tasa de consumo, por eso, ambas variables se estudiarán conjuntamente. La potencia proporcionada por el modelo está referida sólo a un par de canales entrada/salida, de este modo, para obtener la potencia liberada total por cada especie se debe multiplicar el resultado obtenido con el modelo por el número de canales del monolito.

Tras esta breve introducción se muestran las gráficas correspondientes a la tasa de consumo y potencia liberada por ambas especies oxidantes, NO_2 y O_2 :

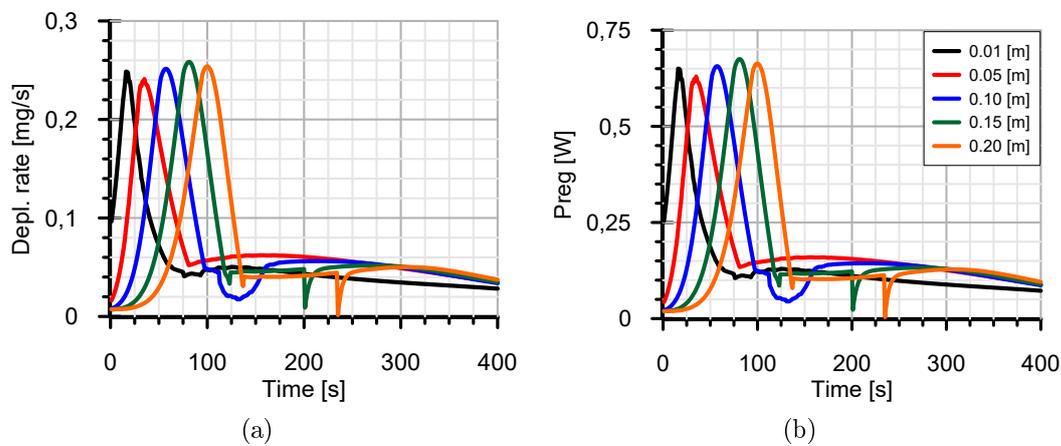


Figura 5.5: Tasa de consumo(5.5a) y potencia liberada(5.5b) de NO_2 a distintas longitudes a lo largo del tiempo.

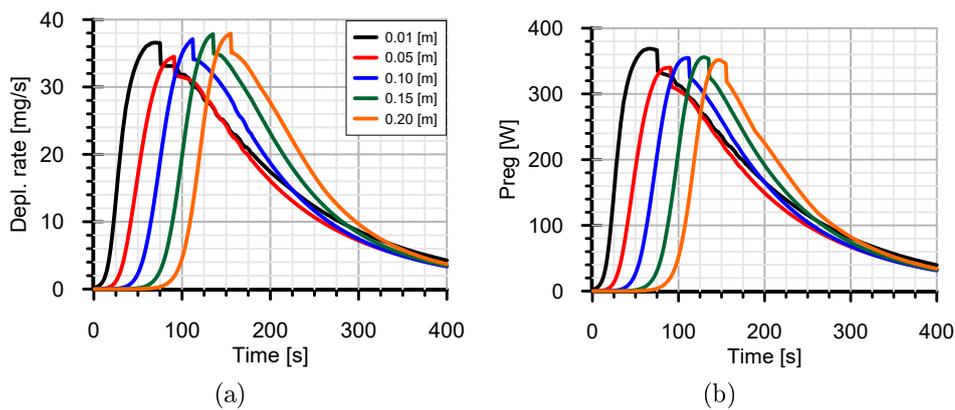


Figura 5.6: Tasa de consumo(5.6a) y potencia liberada(5.6b) de O_2 a distintas longitudes a lo largo del tiempo.

La tasa de consumo de NO_2 , junto con su potencia liberada, se estudian en la figura 5.5. En dicha imagen se observa como ambas variables tienen el mismo perfil y tendencias: un gran pico de consumo al inicio y rápido agotamiento o

descenso para alcanzar posteriormente valores prácticamente constantes. Este perfil se retrasa en el tiempo conforme se avanza a lo largo del canal, pero apenas mengua su valor máximo. De nuevo, esta tendencia coincide con el avance del frente de temperaturas.

La tasa de consumo de O_2 se comporta de manera similar a la del NO_2 , pero carece de la bajada tan abrupta, una vez alcanzado el máximo desciende de forma gradual. La principal diferencia entre la tasa de consumo y potencia liberada del O_2 y NO_2 es el orden de magnitud (el doble para la tasa de consumo y tres veces mayor para la potencia). Como puede observarse en las gráficas 5.6, tanto tasa como potencia liberada son muchísimo más elevadas que las correspondientes al NO_2 . Esto es lógico y coincide con lo esperado, ya que se trata de una regeneración activa, donde la principal especie oxidante es el oxígeno.

Comparando ambas imágenes conjuntamente se observa como el pico de tasa de consumo y potencia liberada del NO_2 tiene lugar antes que los simétricos del O_2 . En apartados anteriores se ha comentado que el NO_2 es el principal oxidante en procesos de regeneración pasiva, donde las temperaturas alcanzadas son menores que en procesos de regeneración activa. Esto se debe a que el NO_2 necesita temperaturas menores para poder reaccionar y oxidar el hollín. Teniendo esto en cuenta es sencillo explicar por qué el NO_2 empieza a consumirse antes que el O_2 , ya que la temperatura necesaria para que la primera especie reaccione se alcanza antes.

Por último, es interesante calcular la potencia total liberada. Tal y como se ha indicado antes, se calcula como la suma de las aportaciones del NO_2 y O_2 :

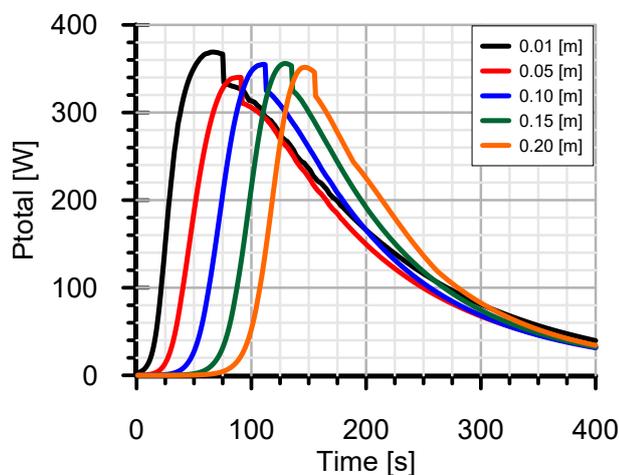


Figura 5.7: Evolución temporal de la potencia total liberada para distintas posiciones longitudinales a lo largo del monolito.

En la figura 5.7 se muestra la potencia total liberada. Como la potencia aportada por la oxidación del NO_2 es prácticamente despreciable frente a la del O_2 , el perfil de la evolución temporal de la potencia total liberada, así como el orden de magnitud, es similar al de O_2 .

5.2. Etapas de reactividad

Observando las gráficas del apartado anterior puede vislumbrarse como el proceso de regeneración sigue siempre una misma estructura, que se corresponde con una serie de etapas. Estas etapas pueden determinarse como etapas de reactividad, ya que dependen de dicho parámetro. Son principalmente tres:

- **Iniciación:** Esta etapa es equivalente al intervalo de tiempo necesario para que el sistema acumule la energía suficiente para comenzar la reacción. Se caracteriza por un gran aumento de la tasa de reactividad y, por lo tanto, de la tasa de variación de hollín.
- **Máxima reactividad:** En esta etapa se puede observar un pico de temperatura. Es la zona que, como el propio nombre indica, se caracteriza por ser la de mayor reactividad, mayor tasa de consumo de las especies oxidantes y mayor reducción de masa de hollín. La longitud de esta etapa en el tiempo proporciona una idea acerca de la rapidez del proceso de regeneración.
- **Cola:** En esta etapa se reduce la tasa de regeneración, tanto la temperatura como la presión comienzan a estabilizarse. La masa de hollín que queda va reduciéndose muy lentamente llegando incluso a no consumirse.

5.2.1. Evaluación con el tiempo

Estas etapas no tienen unos límites estrictamente definidos, por eso se realiza un estudio espacio-temporal, cuyo fin es poder establecer el inicio y fin de cada etapa. Este estudio se basa en la evaluación de la temperatura de pared y masa de hollín a lo largo del canal para distintos tiempos.

Los estudios espacio-temporales de cada una de las variables se han realizado con ayuda del programa MATLAB. El *script* desarrollado para esta función tiene fundamentalmente tres partes:

- Primero se cargan los datos proporcionados por el modelo que se encuentran en un fichero .DAT.
- Mediante un bucle de lectura y comparación se buscan las columnas con los datos correspondientes de la variable a analizar. A medida que se

encuentran los datos, éstos se almacenan en una matriz. Las variables elegidas pasan a estar en función de la posición longitudinal a lo largo del canal.

- Por último se graba la matriz de datos en una hoja excel para su posterior representación gráfica.

Para la representación gráfica se eligen los valores correspondientes a los tiempos múltiplos de 5, evitando así tener que representar 400 perfiles de distribución (uno por cada tiempo). A su vez, cada gráfica agrupa intervalos temporales de 100 segundos cada una, para facilitar la lectura e interpretación de dichas representaciones.

Tanto los intervalos de tiempo como la discretización espacial se mantienen para ambos estudios, temperatura y masa de hollín, con el fin de poder comparar y definir las etapas de reactividad utilizando ambos análisis conjuntamente.

A continuación se van a mostrar las figuras correspondientes a los resultados del espacio-temporal de la Temperatura de pared:

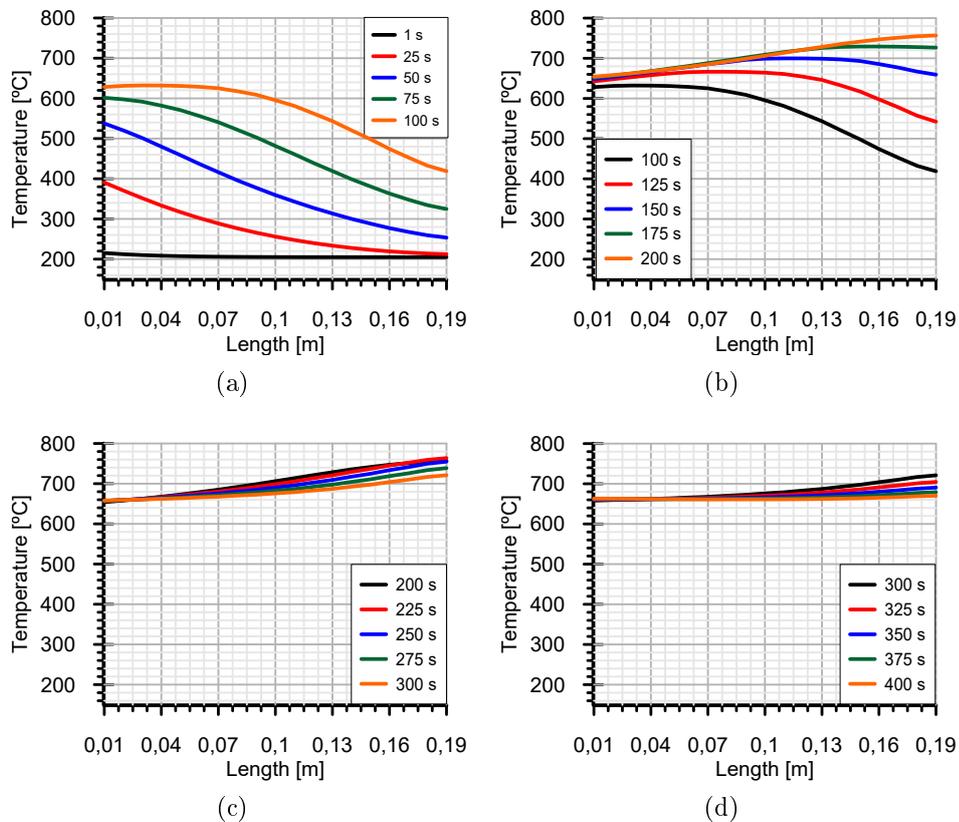


Figura 5.8: Distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo.

Observando la figura 5.8 se aprecia la evolución temporal de la distribución de temperaturas a lo largo del canal. Esta distribución es relativamente homogénea, sin picos ni cambios bruscos de temperatura.

Al inicio del proceso de regeneración, la temperatura a la entrada del canal es mayor que a la salida del mismo. La diferencia de temperaturas entrada-salida va incrementando hasta los 75 segundos, donde el mayor gradiente de temperaturas registrado es de unos 300°C aproximadamente. A partir de este momento, la temperatura al final del canal va alcanzando valores similares a los de la entrada, llegando incluso a ser hasta 100°C superior.

En las figuras 5.8c y 5.8d la distribución de temperatura se mantiene prácticamente constante, descendiendo ligeramente para, posteriormente, estabilizarse.

El salto inicial de temperatura viene impuesto por la post-inyección realizada para iniciar el proceso de regeneración activa. El hecho de que la temperatura vaya aumentando progresivamente se debe a la aportación de calor de la reacción exotérmica de oxidación de hollín. A partir del segundo 200-225 la temperatura se mantiene constante, lo que puede significar que no queda masa de hollín por oxidar y al no existir reacción, la liberación de calor es prácticamente nula. Esto conlleva que la temperatura se mantenga o descienda ligeramente.

En base a estas gráficas ya es posible hacer un pequeño esquema de cuales serán los límites de las etapas de reactividad, sobre todo la etapa de cola que, probablemente, empiece alrededor de los 200 segundos.

Para poder llevar a cabo un establecimiento de los límites de dichas etapas con mayor seguridad se repite este estudio con la masa de hollín. Ver la distribución de este parámetro a lo largo del canal va a permitir conocer cómo es la regeneración el canal: si hay presencia de tapones, la regeneración es homogénea e igual a lo largo de dicho canal o, por el contrario, existen zonas que se regeneran mucho antes.

A continuación se van a mostrar las gráficas correspondientes a los resultados del espacio-temporal de la masa de hollín:

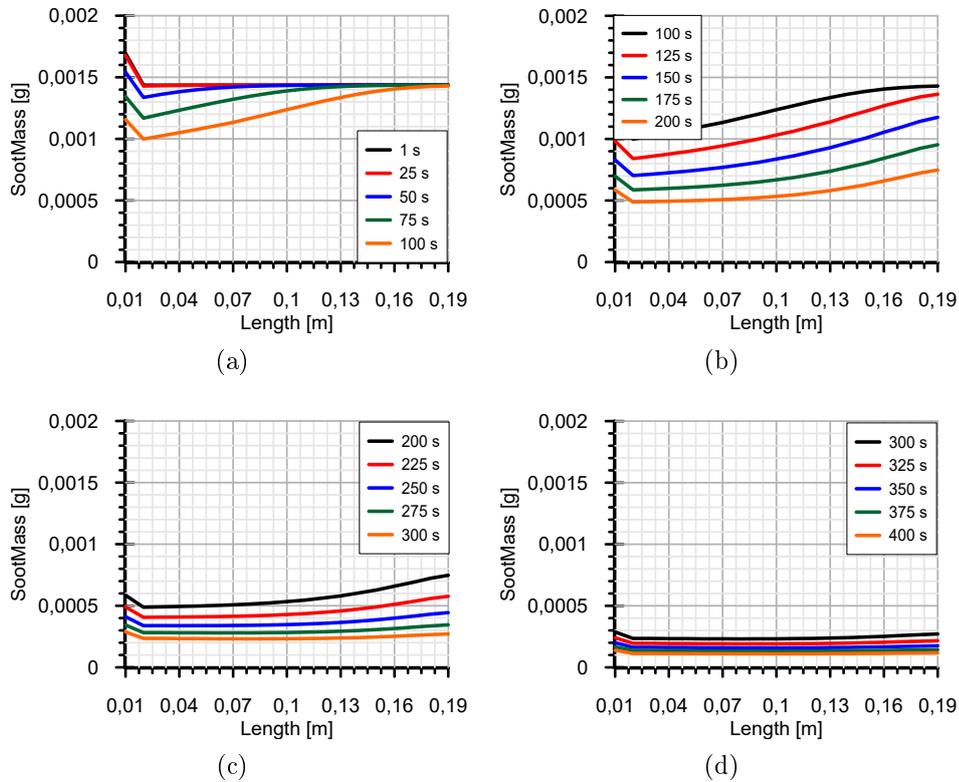


Figura 5.9: Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo.

Una vez representados los resultados en la figura 5.9, puede apreciarse visualmente la evolución de la capa masa de hollín a lo largo del canal para los 400 segundos que dura el proceso de regeneración.

De principio a fin de las gráficas, la masa de hollín siempre desciende, manteniendo el mismo perfil, pero suavizándose hacia el final del proceso de regeneración: la masa al inicio del canal siempre es menor que al final.

La causa del pico de masa al inicio del canal es la expuesta en el comentario de la figura 5.4.

En la figura 5.9a es perceptible como al final del canal la masa permanece constante hasta prácticamente el segundo 100 del proceso de regeneración. Esto se debe a la evolución del frente de temperaturas, conforme avanza dicho frente los nodos finales alcanzan también la temperatura necesaria para que tenga lugar la oxidación, como se puede ver en la figura 5.9b, donde ningún punto permanece con la misma masa que el del tiempo anterior. Si se analiza la gráfica 5.9a con su análoga de temperatura 5.8a, se puede observar como las zonas en las que el hollín ha comenzado a descender coinciden con las regiones

en las que la temperatura es superior a los 450-500°C, temperatura establecida con anterioridad como la necesaria para que tenga lugar la oxidación del hollín en presencia de oxígeno.

En esta figura, 5.9b, se puede apreciar como a partir del segundo 100 la diferencia entre la masa al inicio del canal y al final es más elevada. Esta diferencia, causada por los 100 primeros segundos en los que sólo se quema hollín en entrada del canal, se mantiene hasta el segundo 275, donde el hollín está prácticamente agotado a lo largo de todo el canal.

Las dos últimas gráficas, 5.9c y 5.9d, muestran una distribución de la masa de hollín mucho más homogénea, con variaciones entre los intervalos de tiempo menores, llegando a ser casi nulos, lo que indica el final del proceso de regeneración y prácticamente agotamiento de la masa de hollín.

Con el análisis de ambas distribuciones se puede dar paso a la siguiente sección, la definición de las etapas de reactividad en sí, es decir, sus límites.

5.2.2. Definición de las etapas de reactividad

Para ser coherente y seguir el orden del esquema de las etapas definidas se empieza buscando el límite que indica el final de la etapa de iniciación y comienzo de máxima reactividad.

Se sabe, por definición, que la etapa de iniciación se caracteriza por un gran aumento de la tasa de reactividad, como el propio nombre indica, es el intervalo de tiempo en el que comienza el proceso de regeneración. Teniendo en cuenta que la etapa de máxima reactividad debe incluir picos de temperatura y las mayores variaciones de masa, observando las figuras 5.9a y 5.8a, parece lógico establecer el límite que separa estas dos etapas entre los 0 y 25 segundos.

Una vez establecida la región de búsqueda de la etapa de iniciación y, por consiguiente, el inicio de la etapa de máxima reactividad sólo falta encontrar el fin de dicha fase o inicio de cola.

La etapa de cola se caracteriza por el agotamiento de masa de hollín y estabilización de la temperatura. Observando las figuras 5.9d y 5.8d es obvio que en los últimos 100 segundos del proceso de regeneración apenas varía la masa de hollín y temperatura. En base a las figuras 5.9c y 5.8c se establece que el fin de la etapa de máxima reactividad, a lo largo del momento en el que las variaciones de masa y temperatura dejan de ser relevantes, está aproximadamente en los 150-200 segundos.

Para encontrar los límites exactos de estas etapas se calcula la tasa de regeneración de hollín y la variación de la misma:

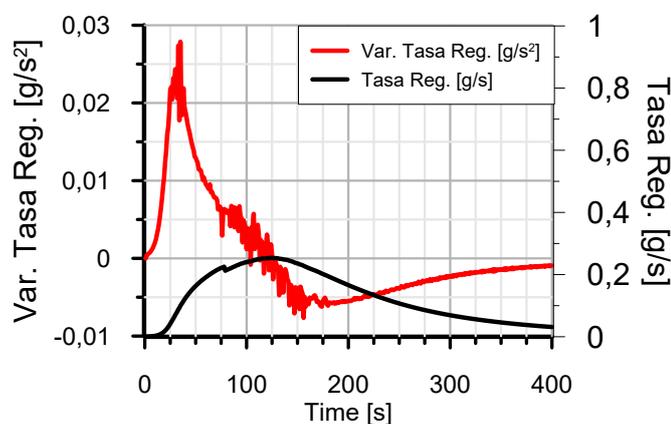


Figura 5.10: Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo.

En la figura 5.10 se aprecia una variación de la tasa de oxidación inicialmente creciente hasta alcanzar un pico máximo, donde empieza a disminuir hasta llegar a un mínimo tras el cual asciende de nuevo pero con mucha menor pendiente. El primer gran cambio de pendiente de la variación de la tasa indica el inicio de la etapa de iniciación. El mínimo absoluto alcanzado implica el fin de la etapa de máxima reactividad y, por consiguiente, el inicio de la cola.

Como era de esperar, tanto el primer cambio de pendiente como el mínimo de la variación de la tasa de regeneración se encuentran dentro de los intervalos establecidos para los límites en el estudio espacio-temporal. De esta manera quedan las tres etapas de reactividad para el caso de inicial de adsorción y factor preexponencial $A_n = 2$ resumidas en la tabla 5.1.

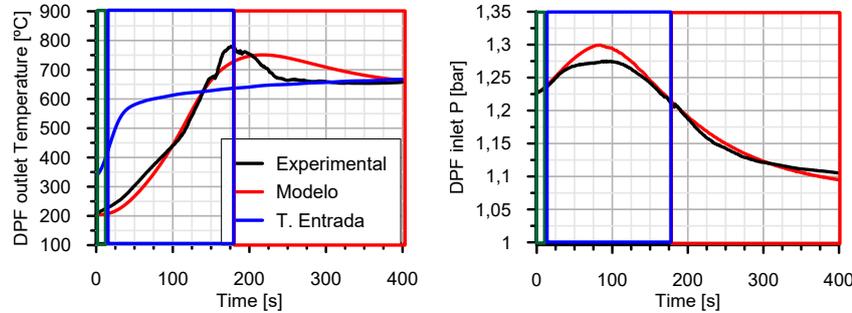
Etapas	Intervalo de tiempo (s)
Iniciación (verde)	0 – 10
Máxima reactividad (azul)	10 – 175
Cola (rojo)	175–

Tabla 5.1: Etapas de reactividad para el caso de adsorción.

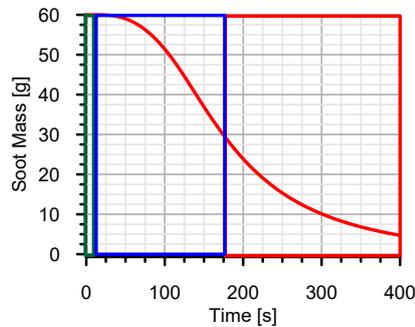
Cabe destacar que no se ha incluido el límite que impone el fin de la etapa de cola en la tabla 5.1 ya que, a pesar de haber alcanzado los 400 segundos, aún queda masa de hollín por oxidar.

En síntesis, se representan las etapas de reactividad superpuestas en las tres gráficas “base” que presentan la evolución temporal de la temperatura a la

salida del DPF, presión a la entrada del mismo y masa de hollín total, acordes a los colores e intervalos definidos en la tabla 5.1:



(a) Temperatura a la salida del DPF (b) Presión a la entrada del DPF



(c) Masa de hollín total

Figura 5.11: Esquema de las etapas de reactividad en un proceso de regeneración de orden intermedio y factor preexponencial $A_n = 2$.

A modo de conclusión, la figura 5.11 demuestra que los límites de las etapas establecidos son coherentes por las siguientes razones:

- El inicio de variaciones apreciables de temperatura y presión se encuentran dentro de la etapa de iniciación.
- Las pendientes más elevadas de la gráfica 5.1c están incluidas en la etapa de máxima reactividad, así como el máximo de presión y el gran aumento de temperatura.
- La etapa de cola abarca la estabilización de temperatura y presión.

5.3. Análisis de sensibilidad

El tercer objetivo de este proyecto es realizar análisis de sensibilidad con el fin de poder introducir simplificaciones en el modelo para reducir el coste computacional, o bien juzgar si algunas de las simplificaciones realizadas son

o no relevantes a la hora de reproducir el comportamiento del DPF.

En esta sección se van a estudiar los tres análisis realizados: influencia del orden de reacción, difusión interna y difusión externa.

5.3.1. Orden de reacción

Como se explicó en la sección 4.3.3, la ecuación de conservación de las especies químicas, base del submodelo de regeneración, puede resolverse de varias maneras: teniendo en cuenta una cinética química de orden 0, orden 1 o adsorción.

En el modelo 1D se fija una cinética química de orden variable, representada mediante un proceso de adsorción modelado por la isoterma de Langmuir, resuelta mediante el uso del método numérico Runge Kutta 4. A continuación se va a realizar un análisis para determinar si se podría haber supuesto una cinética química de orden 0 o 1 para simplificar cálculos, y de haberlo hecho, la repercusión que esto hubiera tenido en los resultados. Para ello se ejecutan primero dos casos con las mismas constantes cinéticas fijadas durante la validación inicial del modelo con el fin de observar las principales consecuencias del cambio de orden correspondientes a orden cero y uno. Después se intentará ajustar lo máximo posible ambos casos variando el factor preexponencial o factor de frecuencia A_n para juzgar si se pueden alcanzar resultados aceptables con estas suposiciones o es estrictamente necesario tener en cuenta la etapa de adsorción.

5.3.1.1. Orden 0

Una cinética química de orden 0 implica una independencia de la generación/consumo de una especie con su concentración molar. Esto puede verse en 5.1, donde se define la función 4.29 para orden 0 queda de la siguiente manera:

$$f(X_n, T) = K_c \cdot X_n^0 = K_c \quad (5.1)$$

Sustituyendo la ecuación 5.1 en 4.33 la expresión a integrar para conocer el gradiente de fracción molar de una especie con cinética química de orden cero es:

$$\frac{dX}{dz} = \frac{S_p \alpha K_c}{u} \longrightarrow \int_{X_{in}}^{X_{out}} dX = \int \frac{S_p \alpha K_c}{u} dz \quad (5.2)$$

cuya solución se muestra en 5.3, donde queda definida la expresión para calcular la variación de la fracción molar en función del espesor de cada región de oxidación de hollín (z):

$$X_{out} = X_{in} - \frac{S_p \alpha k_n}{u} \cdot z \quad (5.3)$$

Para dar comienzo al análisis del proceso de regeneración de cinética química de orden 0, se parte de las tres gráficas básicas con las que se realizaba la primera fase de validación del modelo: evolución temporal de la temperatura de entrada, presión de salida y masa total de hollín. Se ejecuta un nuevo caso con los datos iniciales del modelo de adsorción, imponiendo la misma temperatura de entrada y gasto másico, así como el factor preexponencial correspondiente al ajuste del apartado 5.1 $A_n = 2$. Los resultados obtenidos con esta ejecución se representan a continuación:

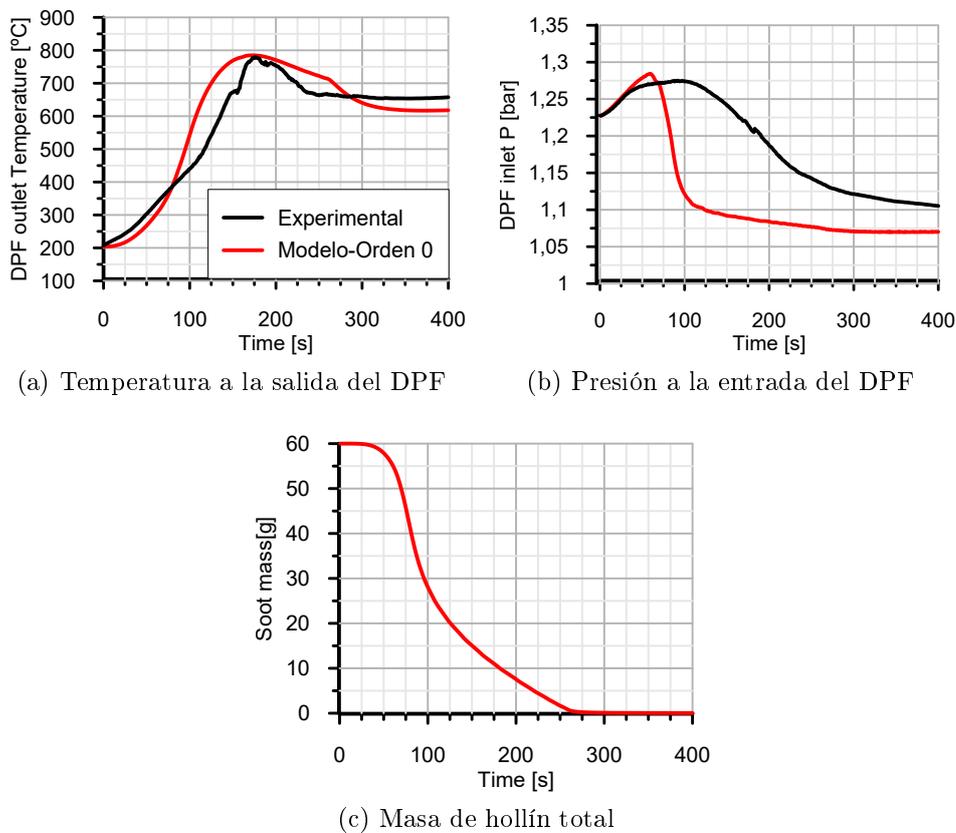


Figura 5.12: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) y cinética química de orden 0.

En la figura 5.12 se demuestra como el hecho de suponer una cinética química de orden 0 conlleva una regeneración mucho más rápida y abrupta. Se afirma así que la imposición de orden 0 acelera la reacción de oxidación.

Con el fin de poder conocer mejor los cambios en el proceso de regeneración se realiza el mismo estudio espacio-temporal que se ha mostrado en el punto 5.2.1 con los resultados correspondientes a orden 0.

El fichero y metodología para realizar los espacio-temporales de cada variable es el mismo, sustituyendo los .DAT correspondientes. Tanto los intervalos de tiempo como el mallado del canal se mantienen, pudiendo así comparar resultados más fácilmente.

Para mantener la estructura del análisis se inicia con la representación gráfica de la distribución de la temperatura de pared:

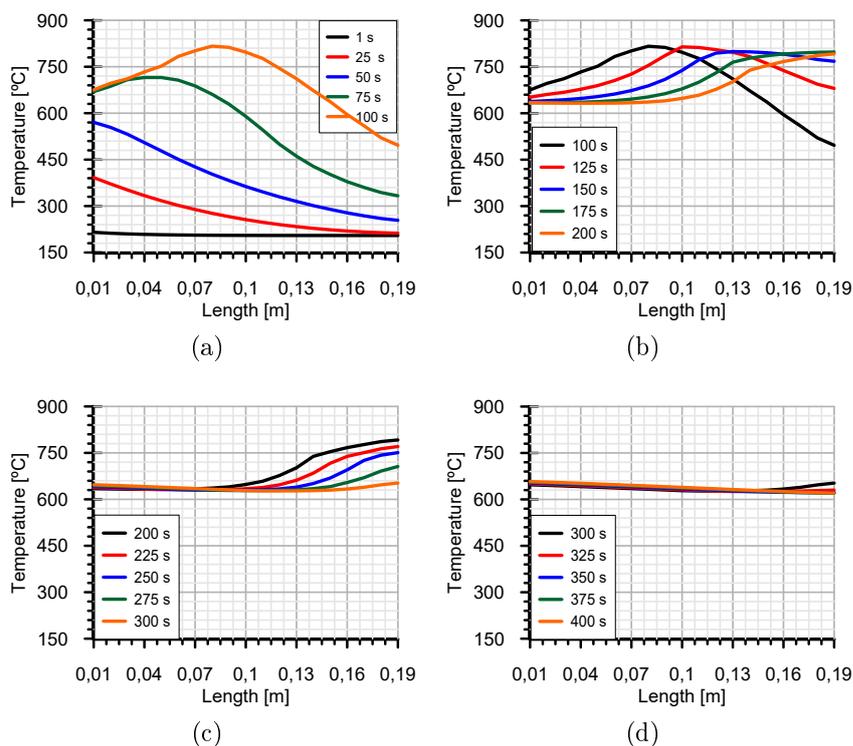


Figura 5.13: Distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 0.

La figura 5.13 muestra la evolución de la distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal. Se observa como las temperaturas alcanzadas son más elevadas que en el caso de orden intermedio, alcanzando casi los 800°C , así como la presencia de máximos o picos de temperatura. Estos picos son perjudiciales para el filtro, pudiendo llegar a deteriorarlo e incluso romperlo.

El comportamiento en cuanto al avance de los perfiles de temperatura es similar: el máximo de temperatura va avanzando longitudinalmente a medida que el proceso de regeneración avanza, pero los gradientes térmicos entre distintos puntos del canal para un mismo tiempo son mucho más marcados. En la figura 5.13c se observa como la temperatura al inicio del canal ya se mantiene constante, lo que puede indicar un agotamiento de la masa de hollín en ese

intervalo de tiempo en esa sección del canal.

En el caso de orden variable se observaba en las gráficas finales como la temperatura apenas variaba, pero no coincidían exactamente dos perfiles para un mismo tiempo. En cambio, para orden 0 a partir de los 300 segundos los perfiles de temperatura son idénticos. La principal causa de esta coincidencia puede ser el completo agotamiento de la masa de hollín, es decir, que el filtro se encuentra completamente limpio.

Para poder verificar las suposiciones a cerca de la relación de los perfiles de temperatura con la masa de hollín se repite el estudio espacio-temporal con dicho parámetro. Las gráficas obtenidas tras el procedimiento son las siguientes:

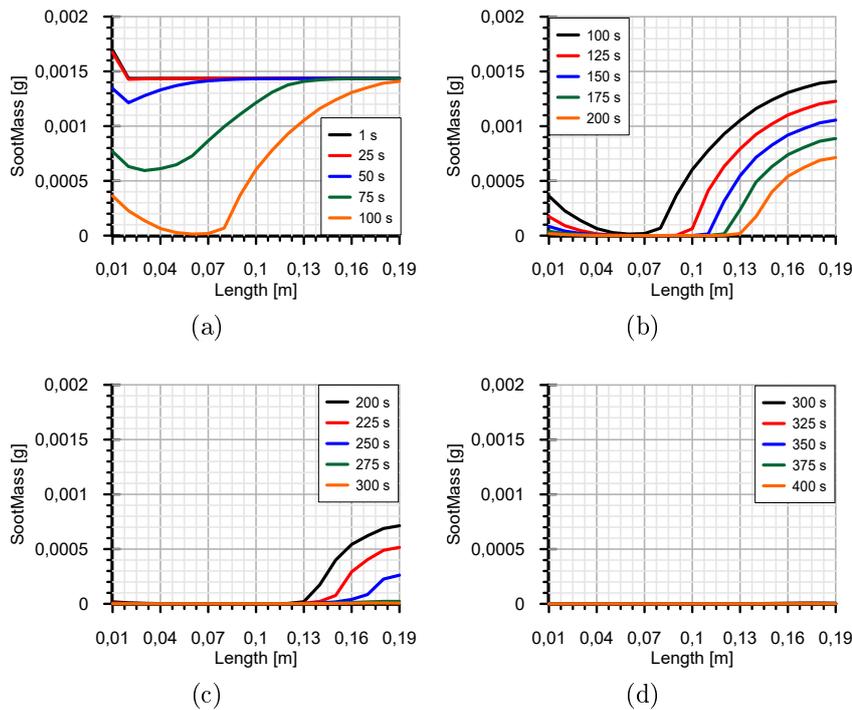


Figura 5.14: Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 0.

La distribución de hollín es muchísimo menos homogénea, éste tiende a acumularse al final del canal, figura 5.14b, ya que la rápida oxidación al inicio del monolito implica la limpieza prácticamente total de esa zona de pared, facilitando el paso del flujo a través de la misma. La zona limpia de pared opone menor resistencia y se convierte en la principal región de paso del flujo, pasando la parte posterior del filtro a un segundo plano y haciendo que dicho sector se “tapone” al verse reducida la llegada de oxígeno. El “tapón” se

va deshaciendo a medida que el frente de temperatura avanza, teniendo a los 275 segundos el canal completamente limpio, la masa de hollín se oxida por completo.

No solo los perfiles de distribución de hollín son mucho más heterogéneos sino que además los gradientes de masa entre los intervalos son mucho más elevados en los primeros segundos. En la figura 5.14a puede observarse como para el segundo 50, la masa del inicio del canal se ha reducido incluso más de la mitad. En el segundo 100 ya existe una región del canal que se encuentra completamente limpia (0.05-0.06 m).

A partir del segundo 150-175 puede se puede considerar el canal prácticamente limpio, a excepción de la sección final del mismo.

Con estas gráficas quedan comprobadas las suposiciones antes realizadas en el análisis de la evolución de la temperatura: los intervalos en los que la temperatura es constante, una vez pasada la fase inicial del proceso de regeneración, coinciden con las zonas en las que el hollín se ha oxidado completamente. Además se descubre que los picos de temperatura coinciden con el inicio del agotamiento de la masa de hollín para un mismo tiempo.

En un principio esta estrategia de regeneración puede parecer ideal ya que el filtro queda prácticamente limpio en muy poco tiempo, pero esta distribución tan dispar de hollín conlleva la posible aparición de puntos calientes que pueden causar la rotura del filtro.

Una vez evaluadas las figuras 5.14 y 5.13 se continúa con la definición de las etapas de reactividad de manera semejante al estudio realizado en el apartado de adsorción.

Las diferentes distribuciones y el aumento de la velocidad de reacción hacen que las etapas, a simple vista, varíen sus límites.

Recopilando las conclusiones de las distribuciones de temperatura y masa se determina el inicio de la etapa de máxima reactividad se encuentra entre los 0-25 segundos. El fin de esta etapa se sitúa en un intervalo comprendido entre 75-100 segundos, siendo esta frontera muy borrosa debido a la desigualdad de la distribución del hollín.

Para encontrar los límites exactos de estas etapas se calcula la tasa de regeneración de hollín y la variación de la misma:

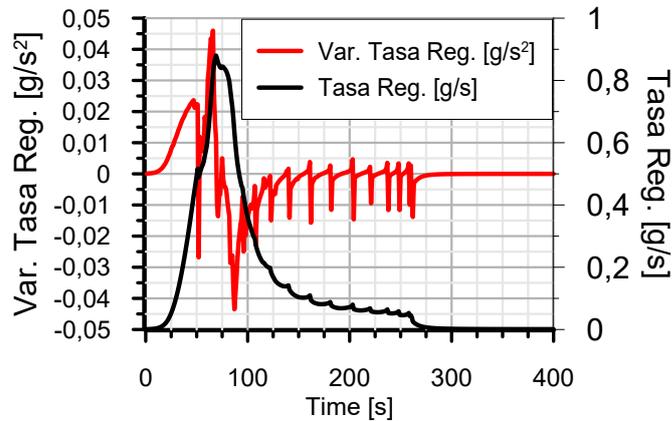


Figura 5.15: Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo suponiendo una cinética química de orden 0.

En la figura 5.15 se aprecia una variación de la tasa de oxidación con una estructura similar a la del caso de adsorción pero con unas pendientes mucho más marcadas. En los primeros 65 segundos la variación de la velocidad de regeneración crece hasta alcanzar un máximo, donde pasa a descender bruscamente hasta un mínimo que indica el inicio de la etapa de cola. El inicio de la etapa de iniciación, definido por el comienzo del crecimiento de la variación de la tasa de regeneración, se encuentra en un tiempo muy similar al del caso de adsorción. Se puede comentar comparando con la gráfica 5.10 como la tasa de regeneración con cinética química de orden cero es muchísimo más elevada, esto implica y coincide con la conclusión antes obtenida: un proceso de regeneración más rápido y abrupto.

Las distintas etapas y sus límites quedan resumidas en la tabla 5.2:

Etapas	Intervalo de tiempo (s)
Iniciación (verde)	0 – 15
Máxima reactividad (azul)	15 – 85
Cola (rojo)	85 – 275

Tabla 5.2: Etapas de reactividad para el caso de Orden 0.

Cabe destacar que en este caso la etapa de cola sí tiene un límite que indica su fin ya que a los 275 tanto la tasa de regeneración es nula, el hollín está totalmente agotado y las temperaturas se mantienen constantes.

Por tanto, las etapas esquematizadas en las tres gráficas básicas, acorde a los colores e intervalos descritos en la tabla 5.2, quedan de la siguiente manera:

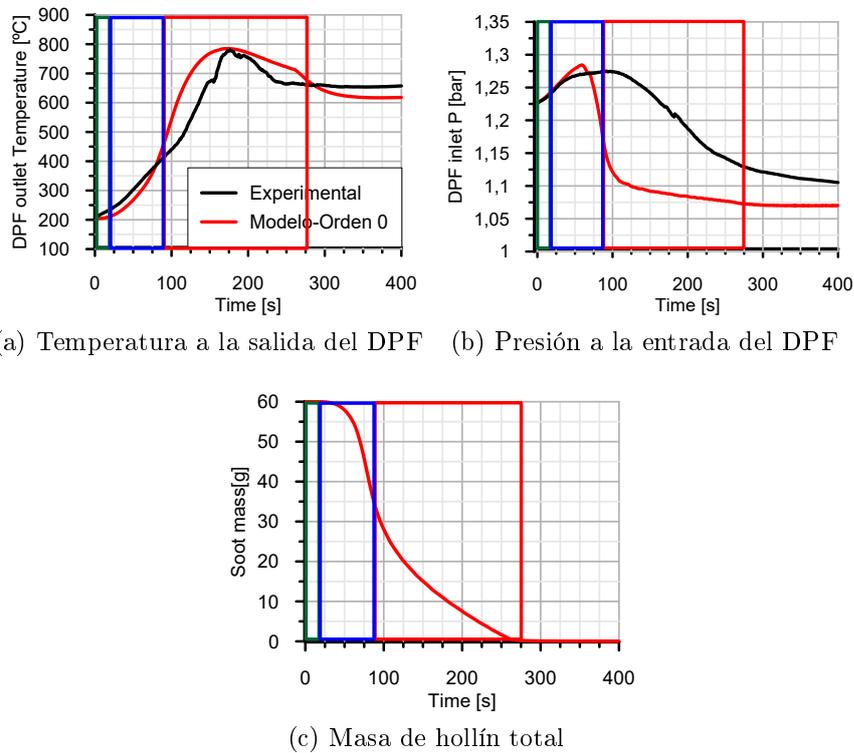


Figura 5.16: Esquema de las etapas de reactividad en un proceso de regeneración de orden 0 y factor preexponencial $A_n = 2$.

A modo de resumen la figura 5.11 demuestra que los límites de las etapas establecidos son coherentes por las siguientes razones:

- La Etapa de iniciación abarca el inicio de los incrementos de presión y temperatura.
- El pico de presión y las mayores pendientes en la gráfica del decrecimiento de masa de hollín están incluidos en la etapa de máxima reactividad.
- La estabilización de la presión se encuentran dentro de los límites de la etapa de cola.

5.3.1.2. Orden 1

Definir una cinética química de orden 1 sin etapa de adsorción conlleva suponer que la tasa de generación/consumo de una especie es directamente proporcional a su concentración molar.

Mediante un proceso análogo al de Orden 0, se define la función equivalente para orden 1 de 4.29:

$$f(X_n, T) = K_c \cdot X_n^1 = K_c X_n \quad (5.4)$$

Sustituyendo la ecuación 5.4 en 4.33 la expresión a integrar es:

$$\frac{dX}{dz} = \frac{S_p \alpha K_c X}{u} \longrightarrow \int_{X_{in}}^{X_{out}} \frac{dX}{X} = \int \frac{S_p \alpha K_c}{u} dz \quad (5.5)$$

cuya solución se muestra en 5.6, donde queda definida la expresión para calcular la variación de la fracción molar en función del espesor de cada región de oxidación de hollín (z):

$$X_{out} = X_{in} \cdot e^{-\frac{S_p \alpha K_c}{u} \cdot z} \quad (5.6)$$

Una vez expuestas las ecuaciones en las que se basa este estudio, el inicio del análisis del proceso de regeneración de cinética química de orden 0 parte de las tres gráficas básicas con las que se realiza la primera fase de validación del modelo: evolución temporal de la temperatura de entrada, presión de salida y masa total de hollín. En nuevo caso a ejecutar parte de los datos iniciales del modelo de adsorción. La temperatura de entrada y gasto másico son datos impuestos por el usuario, así como el factor preexponencial correspondiente al ajuste del apartado 5.1 $A_n = 2$. El producto de esta ejecución se representa a continuación:

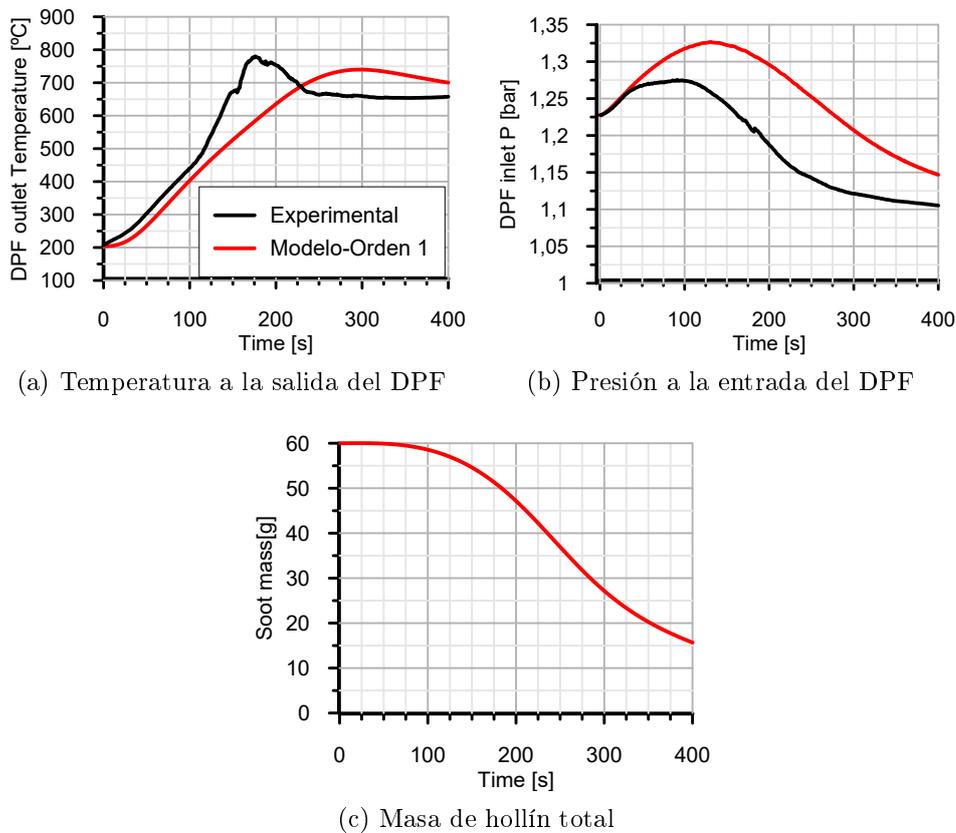


Figura 5.17: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) y cinética química de orden 1.

En la figura 5.17 se revela como el hecho de suponer una cinética química de orden 1 implica una regeneración mucho más lenta y continua, incluso incompleta: en la figura 5.17c se observa como la masa de hollín a los 400 segundos es aún de 15 g. De esta manera se puede afirmar que la imposición de orden 1 frena la reacción de oxidación.

Con objeto de poder conocer mejor los cambios en el proceso de regeneración se desarrolla el mismo estudio espacio-temporal mostrado en los puntos anteriores con los resultados correspondientes a orden 1.

Tanto fichero como metodología e intervalos de tiempo y mallado del canal se mantienen.

Para mantener la organización inicial de estos análisis se parte de la representación gráfica de la distribución de la temperatura de pared:

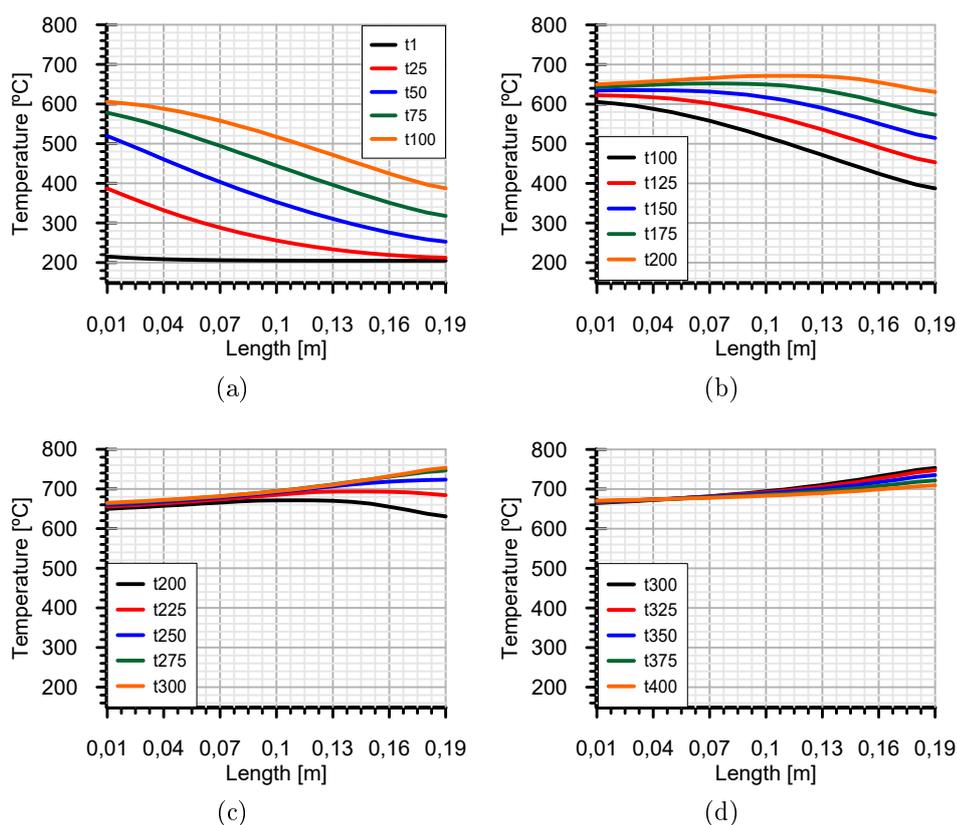


Figura 5.18: Distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 1

La figura 5.18 muestra la evolución de la distribución de la temperatura de pared a lo largo del canal. Las temperaturas alcanzadas son menores que las

análogas de orden intermedio y no se observan máximos o picos de temperatura.

El avance de los perfiles de temperatura es similar al de orden intermedio pero mucho más homogéneo y continuo, los gradientes de temperatura para un tiempo dado a lo largo de un canal no son tan elevados.

Los cambios entre intervalos de tiempo son muy continuos, sin ningún cambio brusco o inesperado.

Para completar el análisis se grafican las correspondientes figuras del espacio-temporal de la masa de hollín:

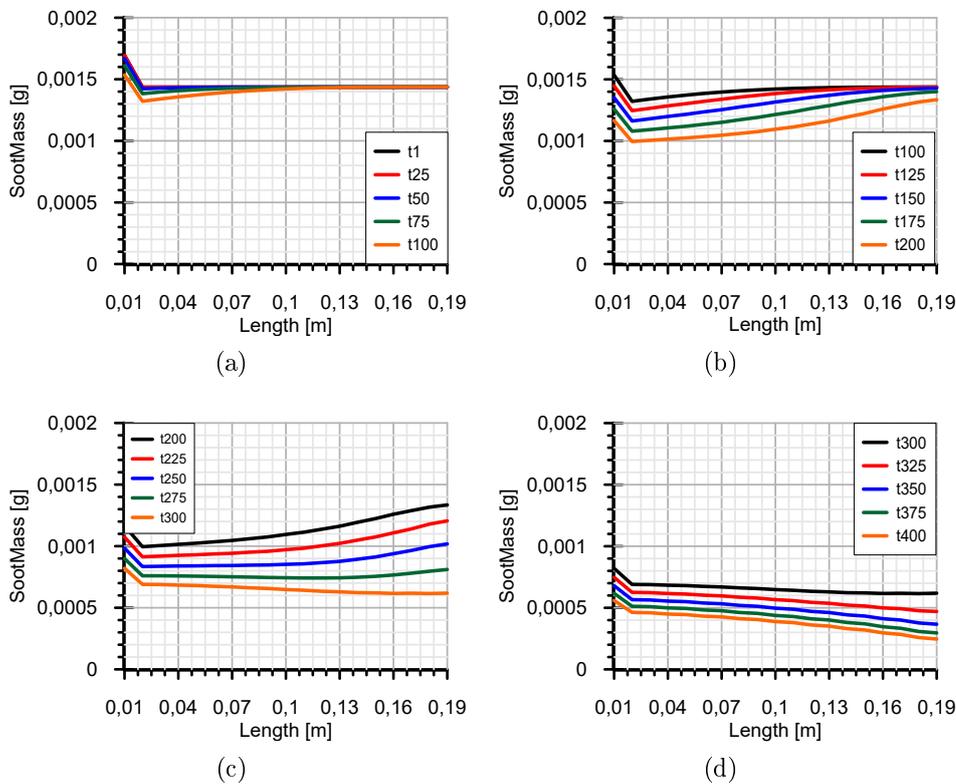


Figura 5.19: Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo, orden 1

La distribución de hollín es mucho más homogénea que en los dos casos anteriores. Se observa como hace falta alcanzar tiempos más elevados para poder apreciar una variación de masa considerable, lo que podría indicar una prolongación de la zona de iniciación.

Otro aspecto a destacar es que, así como en orden 0 el hollín tendía a acumularse al final del canal, en orden 1 a partir del segundo 300 la masa de hollín

es ligeramente superior al inicio del canal que al final.

Como conclusión general se podría decir que el proceso de regeneración con una cinética química de orden uno es mucho más lento, ya que se observa que en la figura 5.19d sigue quedando hollín oxidándose.

Una vez evaluadas las figuras 5.19 y 5.18 se pasa a definir las etapas de reactividad de manera análoga a los anteriores apartados de adsorción y orden 0.

La distribución de las diferentes etapas difieren bastante de la asignación anterior. Según las gráficas de distribución del hollín el inicio de la etapa de iniciación se podría encontrar entre lo 25-50 segundos. La etapa de máxima reactividad llega prácticamente hasta el final del proceso de regeneración ya que, como se ha dicho antes, a los 400 segundos el hollín aún no se ha oxidado completamente. Se establecen los 275-300 segundos como límite para dicha etapa por la estabilización de temperatura, pero podría situarse más atrás.

Para encontrar los límites exactos de estas etapas se calcula la tasa de regeneración de hollín y la variación de la misma:

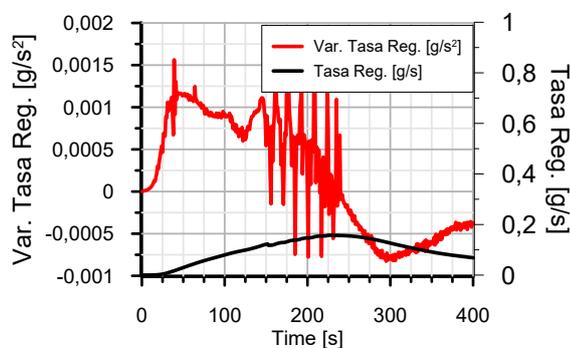


Figura 5.20: Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo suponiendo una cinética química de orden 1.

En la figura 5.20 se aprecia una variación de la tasa de oxidación con una estructura similar a la de los casos de adsorción y orden 0 pero con unas pendientes mucho menos marcadas. En los primeros 40 segundos la variación de la velocidad de regeneración crece hasta alcanzar un máximo, donde pasa a descender muy lentamente hasta un mínimo que indicaría el inicio de la etapa de cola. En cambio, a pesar de las previsiones realizadas en base al espacio temporal de masa de hollín, el inicio de la etapa de máxima reactividad y fin de iniciación se encuentra exactamente en el mismo instante que para el caso de orden cero.

Se puede comentar comparando con las gráficas 5.10 y 5.15 como la tasa de regeneración con cinética química de orden uno es muchísimo menor, esto implica y coincide con la conclusión antes obtenida: un proceso de regeneración más lento y continuo.

La tabla 5.3 recoge las tres etapas de reactividad con sus correspondientes intervalos de tiempo:

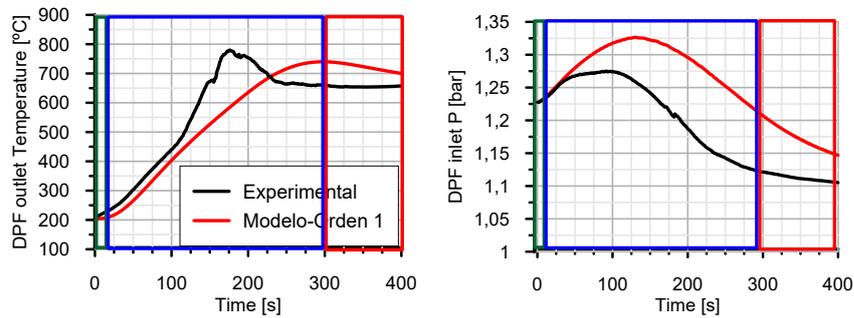
Etapas	Intervalo de tiempo (s)
Iniciación (verde)	0 – 15
Máxima reactividad (azul)	15 – 300
Cola (rojo)	300–

Tabla 5.3: Etapas de reactividad para el caso de Orden 1.

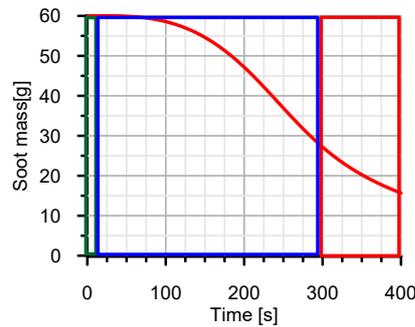
En este caso, como en adsorción, no se indica el fin de la etapa de cola porque aún no se ha completado el proceso de regeneración, en el segundo 400 aún quedan unos 15 gramos aproximadamente de hollín por oxidar.

En base a lo observado es muy probable que esta etapa de cola se alargue mucho, incluso infinitamente. El hecho de tener una regeneración tan lenta proporciona tasas de reactividad muy bajas, la energía necesaria para conseguir quemar la parte final de hollín es muy difícil de obtener tras haber pasado la etapa de máxima reactividad. De esta manera, este proceso de regeneración con una tasa de oxidación del hollín tan baja puede llegar a no conseguir el consumo total del hollín nunca, el filtro siempre quedará cargado con una fracción de hollín.

En consecuencia, las etapas esquematizadas en las tres gráficas básicas según los colores e intervalos definidos en la tabla 5.3 se establecen de la siguiente manera:



(a) Temperatura a la salida del DPF (b) Presión a la entrada del DPF



(c) Masa de hollín total

Figura 5.21: Esquema de las etapas de reactividad en un proceso de regeneración de orden 1 y factor preexponencial $A_n = 2$.

Como conclusión, la figura 5.21 ayuda a comprobar que los límites de las etapas establecidos son coherentes por las siguientes razones:

- El inicio del incremento de temperatura y presión se encuentra dentro de la etapa de iniciación.
- El pico de presión y las pendientes más elevadas en la gráfica de decrecimiento de masa de hollín están incluidos en la etapa de máxima reactividad.
- La etapa de cola abarca la estabilización de temperatura y presión.

5.3.1.3. Análisis del efecto del orden de reacción

En los puntos anteriores se han visto las principales consecuencias de establecer cinéticas químicas de orden 0 y 1, pero en la bibliografía se pueden encontrar estudios que establecen dicho orden de reacción obteniendo resultados aceptables. Con el fin de comprender este hecho se va a realizar un último análisis en cuanto al ajuste máximo posible de ambos casos variando el factor preexponencial o factor de frecuencia.

Orden 0:

Se ha visto que el modelo suponiendo orden 0 con las constantes cinéticas fijadas en el ajuste de adsorción no reproduce el comportamiento del filtro, en consecuencia se va a intentar ajustar lo mejor posible el nuevo caso variando el factor preexponencial de la ecuación de Arrhenius A_n para procurar decidir si suponiendo una cinética de orden 0 se puede reproducir con precisión el comportamiento del DPF.

El procedimiento a seguir es el mismo que el llevado a cabo en la validación inicial del modelo (apartado 5.1), pero no se incluyen las gráficas correspondientes a la primera etapa de dicha validación porque no aportan ninguna conclusión necesaria. Se muestra directamente la gráfica correspondiente a la segunda etapa de validación, las rectas de regresión de los tres mejores ajustes conseguidos y sus coeficientes de correlación correspondientes:

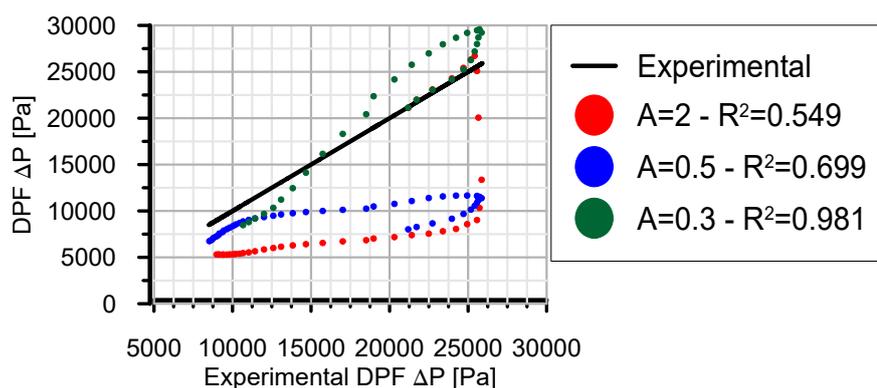
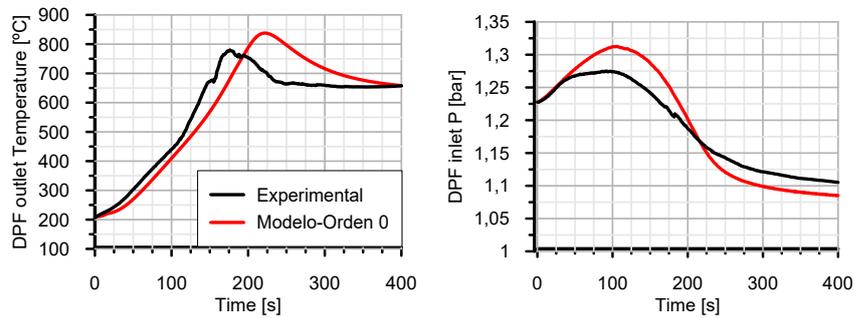


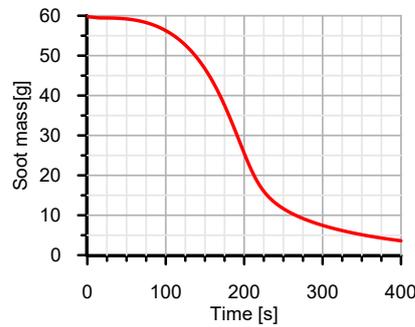
Figura 5.22: Rectas de regresión de la caída de presión junto con el coeficiente de correlación R^2 para el caso de Orden 0.

Según la figura 5.22, el mejor ajuste conseguido para una cinética química de orden 0 es el del caso con un factor preexponencial de 0.3. El coeficiente de correlación calculado es de 0.981. Este coeficiente, como se ha comentado anteriormente, se utiliza como indicador de precisión del modelo, siendo más preciso cuanto más se acerque su valor a la unidad. El coeficiente de correlación obtenido para el caso de adsorción es 0.993, mayor que el relativo a orden 0. Esto apunta a la necesidad de considerar la adsorción para conseguir un ajuste más realista.

Las gráficas “básicas” correspondientes a este nuevo ajuste quedan de la siguiente forma:



(a) Temperatura a la entrada del DPF (b) Presión a la salida del DPF



(c) Masa de hollín total

Figura 5.23: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 0,3$) y cinética química de orden 0.

La figura 5.23 expone las tres principales gráficas con las que se ha estado trabajando hasta ahora para realizar los primeros ajustes visualmente pertinentes al nuevo caso de orden 0 ajustado. A pesar de haber ralentizado el proceso de regeneración disminuyendo el factor exponencial, la temperatura alcanzada es mayor y puede observarse en 5.23c como la oxidación del hollín es ligeramente más abrupta.

Orden 1:

De manera análoga, se intenta ajustar lo máximo posible el modelo de orden 0 a los datos experimentales con el fin de descartar esta simplificación como una variante válida a la hora de reproducir el comportamiento del DPF.

Este proceso se lleva a cabo, de nuevo, de manera simétrica al proceso de validación del modelo. Omitiendo la primera etapa de dicho proceso y mostrando directamente la gráfica de resultados de la segunda, los distintos ajustes tras variar el factor exponencial de la ecuación de Arrhenius quedan:

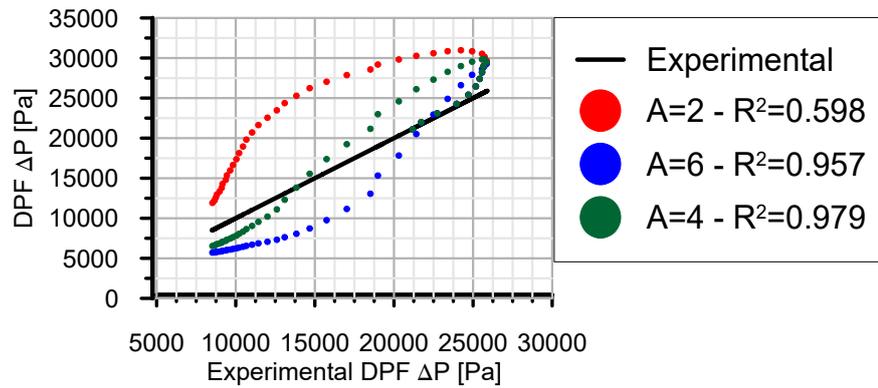
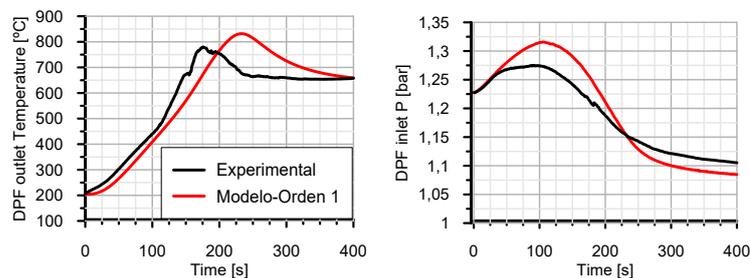


Figura 5.24: Rectas de regresión de la caída de presión junto con el coeficiente de correlación R^2 para el caso de Orden 1.

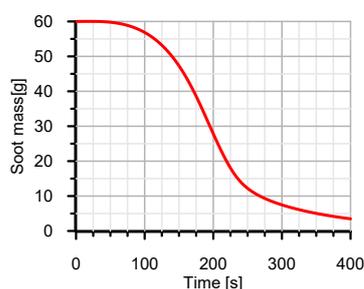
Los resultados de los tres mejores ajustes conseguidos se esquematizan en la figura 5.24. Dicha figura muestra las rectas de regresión de la caída de presión junto con sus correspondientes coeficientes de correlación.

El mejor de los tres casos se corresponde con un factor preexponencial de 4 y un coeficiente de correlación de 0.979. Este coeficiente sigue siendo menor que el conseguido con el ajuste de adsorción, por lo que se puede afirmar que suponer una cinética química de orden 1 tampoco proporciona resultados fiables o, al menos, no tan fiables como los obtenidos suponiendo la etapa de adsorción.

A continuación se muestran las tres gráficas “básicas” pertinentes de este ajuste:



(a) Temperatura a la salida del DPF (b) Presión a la entrada del DPF



(c) Masa de hollín total

Figura 5.25: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros experimentales con los análogos calculados con el modelo 1D ($A_n = 4$) y cinética química de orden 1.

La figura 5.25 muestra los resultados del modelo con cinética de orden 1 pero ajustados con el correspondiente factor exponencial ($A = 4$). El proceso de regeneración se ha acelerado incrementando el factor de frecuencia hasta alcanzar una reproducción del proceso de regeneración por parte del modelo aceptable.

Conclusiones:

Destaca el gran parecido de esta figura con su equivalente de orden 0. Se podría decir que pueden conseguirse los mismos resultados con orden 0 y orden 1 cambiando las constantes cinéticas. Esta suposición explicaría por qué autores eligen orden 0 y 1 indiscriminadamente para reproducir el proceso de regeneración. Esto es posible porque la concentración de oxígeno, término afectado por el orden de reacción y por el que se multiplica la expresión de Arrhenius en la definición del término fuente, es prácticamente constante y no varía a lo largo de la pared. Cambiar el orden de reacción supone, de esta manera, cambios que pueden compensarse variando el valor del factor de frecuencia. Esto no puede aplicarse si se incluye el fenómeno de adsorción, la principal causa radica en que la constante de equilibrio de adsorción varía con la temperatura, siendo en algunos momentos más cercano a orden cero y en otros, conforme aumenta la temperatura, a orden uno, acelerando o ralentizando la reactividad.

La ralentización de la reactividad se produce a altas temperaturas, es decir, al final del proceso de regeneración la cinética química se asemeja a orden 1. Esto hace posible el ajuste de la etapa de cola que, como se observa en las gráficas 5.23 y 5.25, es una etapa que con orden de reacción constante es imposible de reproducir con precisión.

En los apartados anteriores se ha visto como los intervalos de tiempo que limitan las distintas etapas de reactividad varían en función del orden de reacción impuesto. A continuación se va a repetir el proceso de definición de las etapas de reactividad relativos a la tasa de regeneración y su variación para los casos de orden cero y uno ajustados.

Como era de esperar tras observar la gran similitud entre las gráficas 5.23 y 5.25 los resultados obtenidos para el estudio de las etapas de reactividad son prácticamente idénticos para ambos órdenes de reacción:

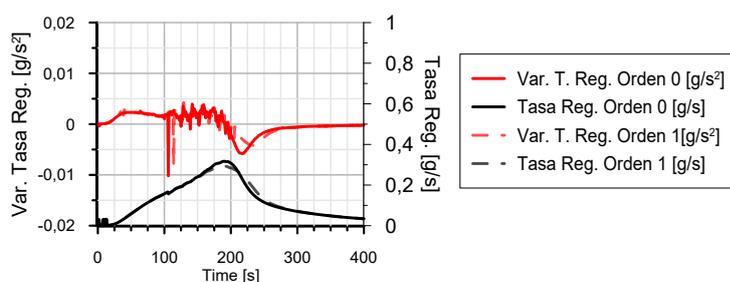


Figura 5.26: Evolución de la tasa de regeneración y su variación con el tiempo para orden 0 y 1 variando el factor preexponencial.

En la figura 5.26 se puede observar como ambos ajustes proporcionan un fin de la etapa de iniciación y comienzo de la etapa de máxima reactividad a los 15 segundos. El final de la etapa de máxima reactividad e inicio de cola cambia ligeramente siendo 220 segundos para orden 0 y 230 para orden 1, una diferencia asequible de tan solo 10 segundos.

A continuación se muestra una tabla resumen con los intervalos de las etapas de reactividad obtenidos para los distintos casos ejecutados:

	Iniciación	Máxima reactividad	Cola
Adsorción	0-10	10-175	175-
Orden 0 - $A_n = 2$	0-15	15-85	85-275
Orden 1 - $A_n = 2$	0-15	15-300	300-
Orden 0 - $A_n = 0,3$	0-15	15-220	220-
Orden 1 - $A_n = 4$	0-15	15-230	230-

Tabla 5.4: Resumen de los intervalos límites para cada etapa de reactividad.

Como era de esperar, la etapa de cola se inicia más tarde en los casos de orden 0 y 1 ajustados que en el de adsorción. Esta es la principal diferencia entre los casos de orden 0 y 1 ajustados y el inicial correspondiente a la validación y es, además, la principal causa de que el ajuste realizado con este último sea mucho mejor que los correspondientes a órdenes fijos.

A modo de conclusión, para ayudar a la comprensión y ampliación de los resultados resumidos en la tabla, se muestran las gráficas correspondientes a la tasa de regeneración y su variación para los distintos órdenes y ajustes:

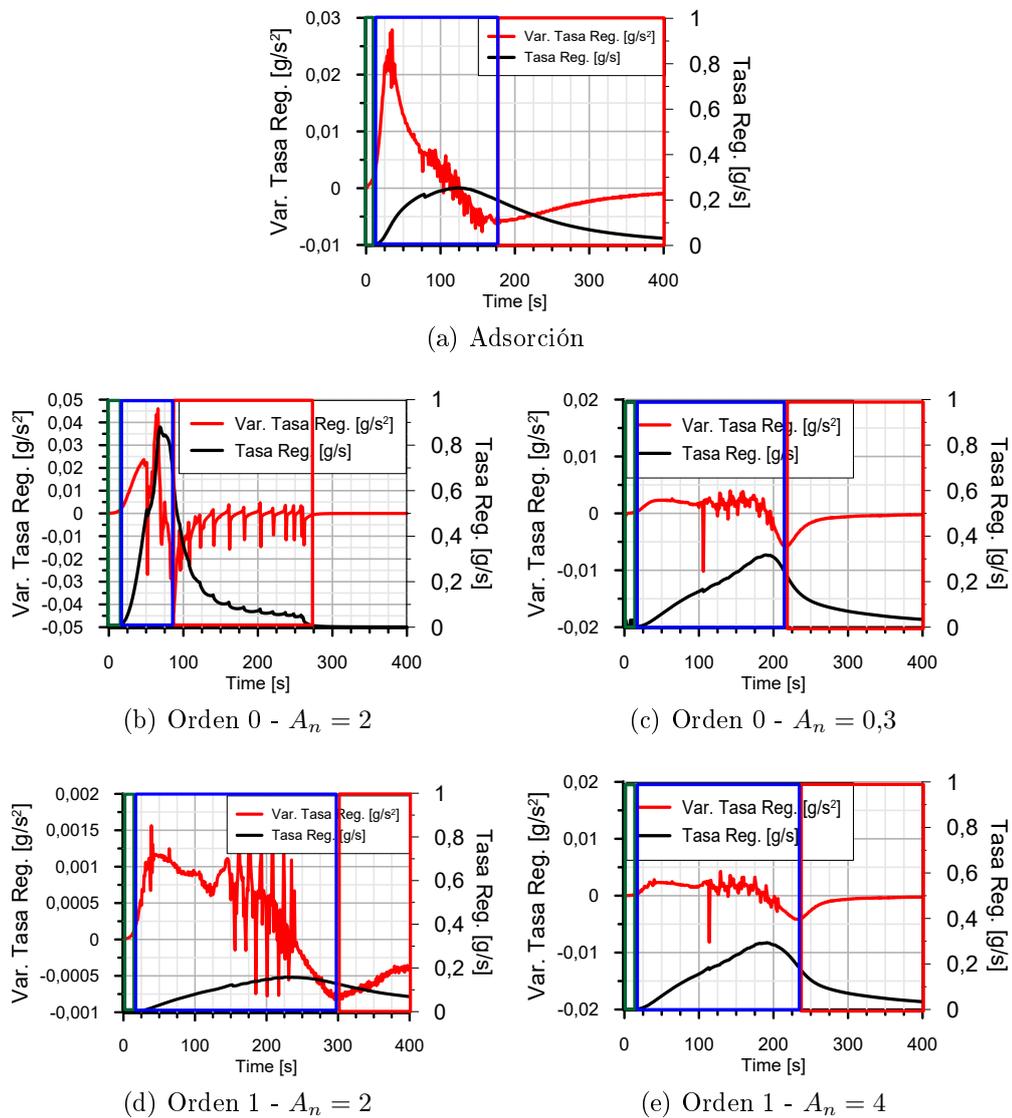


Figura 5.27: Comparación de las tasas de regeneración y sus variaciones para los distintos casos ejecutados durante el análisis de sensibilidad de orden de reacción.

La figura 5.27 resume los resultados obtenidos en cuanto a la definición de

las distintas etapas de reactividad para los distintos casos ejecutados.

En todas las figuras es apreciable como la etapa de iniciación es prácticamente igual, a excepción de la adsorción que se adelanta 5 segundos respecto a las demás. Esto parece indicar que no importa el el orden de reacción impuesto, el tiempo que necesita el sistema para acumular la energía suficiente para iniciar el proceso de oxidación del hollín es el mismo.

En cuanto a las etapas de máxima reactividad se observa como varía su intervalo en los casos sin ajustar: el correspondiente a orden 0 tiene una menor duración mientras que en orden 1 esta etapa ocupa la mayor parte del tramo de regeneración representado. Como se había indicado en la definición de las distintas etapas, la duración de esta fase da una idea de la velocidad de reacción del proceso, análoga a la tasa de regeneración también representada: el caso más rápido posee un intervalo menor y una tasa de regeneración mucho más elevada (orden 0), el más lento, un intervalo mayor y una tasa de regeneración mucho más lenta y continua (orden 1). Entre ambos se encuentra el proceso de regeneración que tiene en cuenta la adsorción, con una velocidad y tasa de regeneración intermedia.

En el caso de los distintos órdenes ajustados la etapa de máxima reactividad es muy similar a la de adsorción pero ligeramente más amplia. En cuanto a sus tasas de regeneración, los casos de orden fijo alcanzan valores ligeramente superiores, con su máximo más atrasado que el del caso de orden variable. Esta principal diferencia es debida a la variación del orden con la temperatura impuesto con la fase de adsorción. Al inicio del proceso, cuando las temperaturas son elevadas, la cinética química tiende a orden 0, acelerando su reactividad y proporcionando un rápido incremento de la tasa de regeneración como se observa en la figura 5.27a. A medida que la temperatura aumenta el orden de reacción tiende a 1, dando lugar a una ralentización de la reactividad y tasa de regeneración. Este fenómeno es el que permite obtener un mejor ajuste respecto a la imposición de un orden fijo.

En cuanto a la etapa de cola la única que llega a terminar se corresponde con el caso sin ajustar de cinética química de orden 0, figura 5.27b, todas las demás ejecuciones no llegan al completo agotamiento de la masa de hollín en el intervalo de tiempo de 400 segundos propuesto para el proceso de regeneración.

5.3.2. Difusión interna

El submodelo actual de regeneración tiene en cuenta las fases de adsorción y difusión interna, explicadas en el apartado 4.3.2. Con el análisis de orden de reacción se ha demostrado la necesidad de considerar la primera de estas fases.

Esta fase está representada en la ecuación de conservación de especies mediante un factor de corrección denominado eficiencia de la fase de difusividad η , que se encuentra multiplicando la definición del término fuente:

$$\dot{w}_n = \frac{\partial(\rho u Y_n)}{\partial z} = \rho \alpha S_p f(X_n, T) \cdot \eta \quad (5.7)$$

quedando, por lo tanto, la ecuación a integrar:

$$\frac{dX_n}{dz} = \frac{S_p \alpha f(X_n, T) \eta}{u} = \frac{\dot{w}_n(X_n)}{u \rho} \quad (5.8)$$

Este rendimiento se calcula mediante la expresión 5.9:

$$\eta_n = f_c \frac{1}{\phi_n} \left[\frac{1}{\tanh(3\phi_n)} - \frac{1}{3\phi_n} \right] \quad (5.9)$$

donde ϕ_n es el módulo de Thiele, un número adimensional que representa el ratio entre la cinética química sin limitaciones por difusión y la velocidad de difusión.

Valores pequeños del módulo de Thiele indican que la influencia del proceso difusivo es muy pequeña, lo que implica una mayor efectividad. En cambio, valores elevados de este número adimensional indican una alta influencia de la difusividad y, por lo tanto, una menor efectividad.

A continuación se va a llevar a cabo un análisis para observar y determinar la influencia de la difusión interna con el fin de especificar si es estrictamente necesario mantenerla en el modelo, o puede suprimirse para reducir el coste computacional.

Se parte de las tres gráficas básicas mostradas en todos los apartados donde se comparan los datos experimentales con los obtenidos mediante el modelo, en este caso con y sin difusión interna, y un factor preexponencial de $A_n = 2$. Como se ha indicado previamente, el orden de cinética química se mantiene modelado con la fase de adsorción.

Imponiendo el mismo gasto másico y temperatura de entrada en el filtro que en los apartados anteriores los resultados son los siguientes:

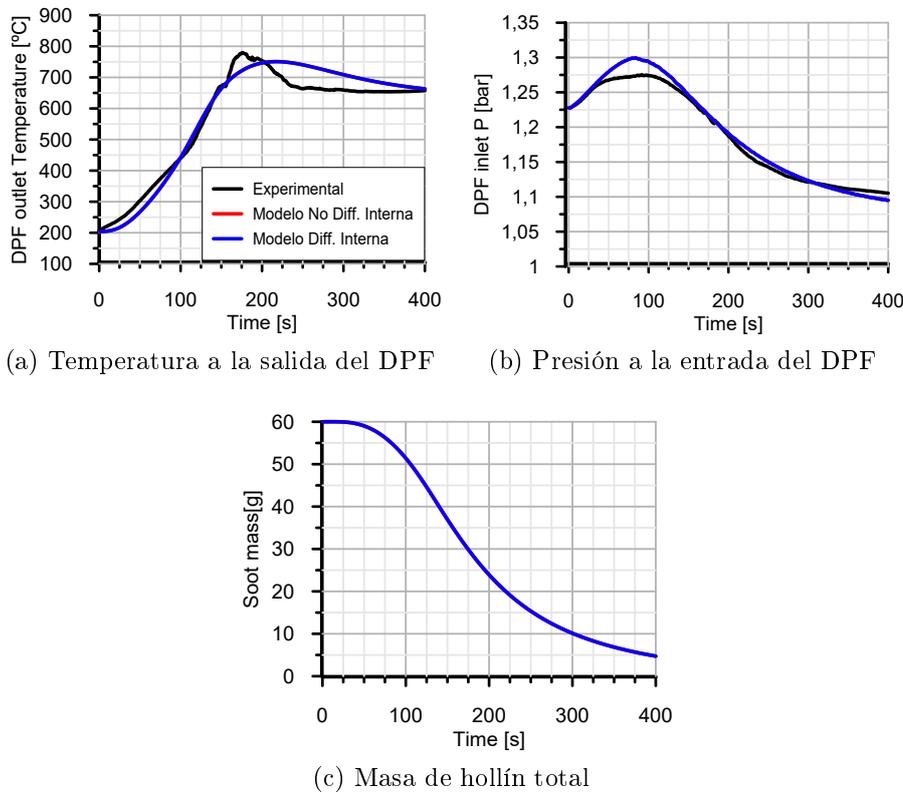


Figura 5.28: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) con y sin difusión interna.

Los resultados, recopilados en la figura 5.28, muestran una coincidencia total en ambos casos de adsorción, con y sin difusión interna. Esto indica una independencia completa de dicha fase.

Para poder afirmar que esta fase puede despreciarse a la hora de modelar el proceso de regeneración para cualquier temperatura se ha de realizar un estudio paramétrico con dicho parámetro ya que, como se comentó en el apartado 4.3.2, las fases de reacción pueden variar su importancia relativa con la misma, pudiendo ser relevante la presencia de la difusión interna a temperaturas más elevadas.

Este estudio paramétrico se basa en la ejecución de varios casos variando solamente la temperatura de entrada impuesta. En los casos anteriores se imponía gasto másico y temperatura de entrada como un transitorio de 400 segundos. En este estudio se impone una temperatura estacionaria y gasto másico. Sólo se calculan los 100 primeros segundos del proceso de regeneración, lo que, junto a la imposición de la temperatura estacionaria, reduce considerablemente el coste computacional y con ello, el tiempo de cálculo.

El estudio se divide principalmente en dos partes. La primera estudia la variación temporal de la tasa de consumo de la principal especie oxidante, el O_2 , para el inicio y final del canal para las distintas temperaturas propuestas. La segunda propone la observación de la evolución temporal del módulo de Thiele, un número adimensional indicador de la influencia del proceso difusivo, para las longitudes correspondientes a los nodos asignados en el mallado. Se diferencia el módulo de Thiele debido a la capa (*Layer*) y a la zona de pared no catalizada (*No cat. wall*).

A continuación se muestran las gráficas resultantes de ambas partes del estudio paramétrico para cada una de las distintas temperaturas elegidas: 650°C, 750°C, 850°C y 950°C. Se omite el estudio análogo de la primera fase a la tasa de consumo del NO_2 por tratarse de una regeneración activa, la aportación de esta especie puede despreciarse para este tipo de estudio. Las representaciones pertinentes de acuerdo a estas descripciones son:

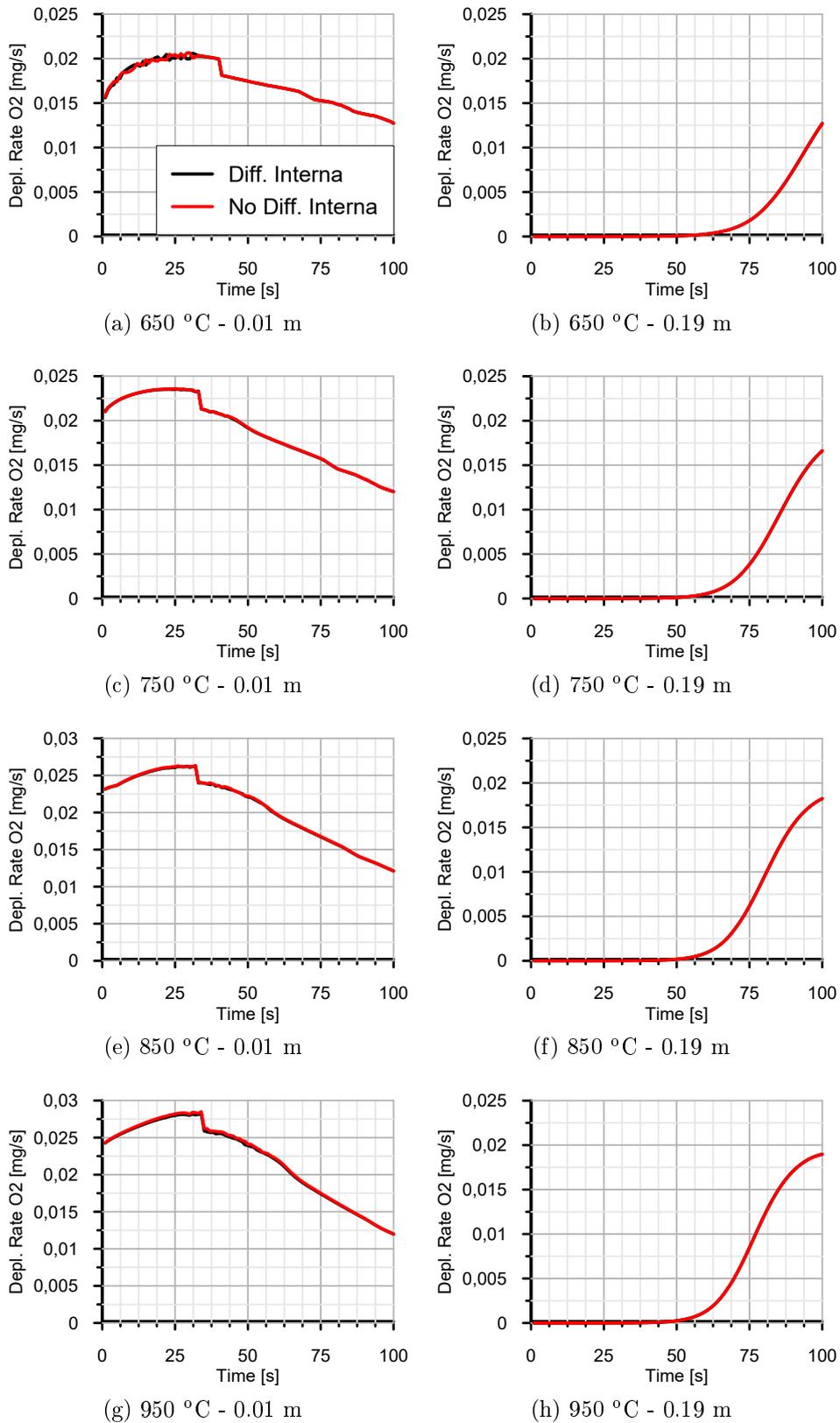


Figura 5.29: Estudio paramétrico de la influencia de la temperatura sobre la tasa de consumo para casos con y sin difusión interna.

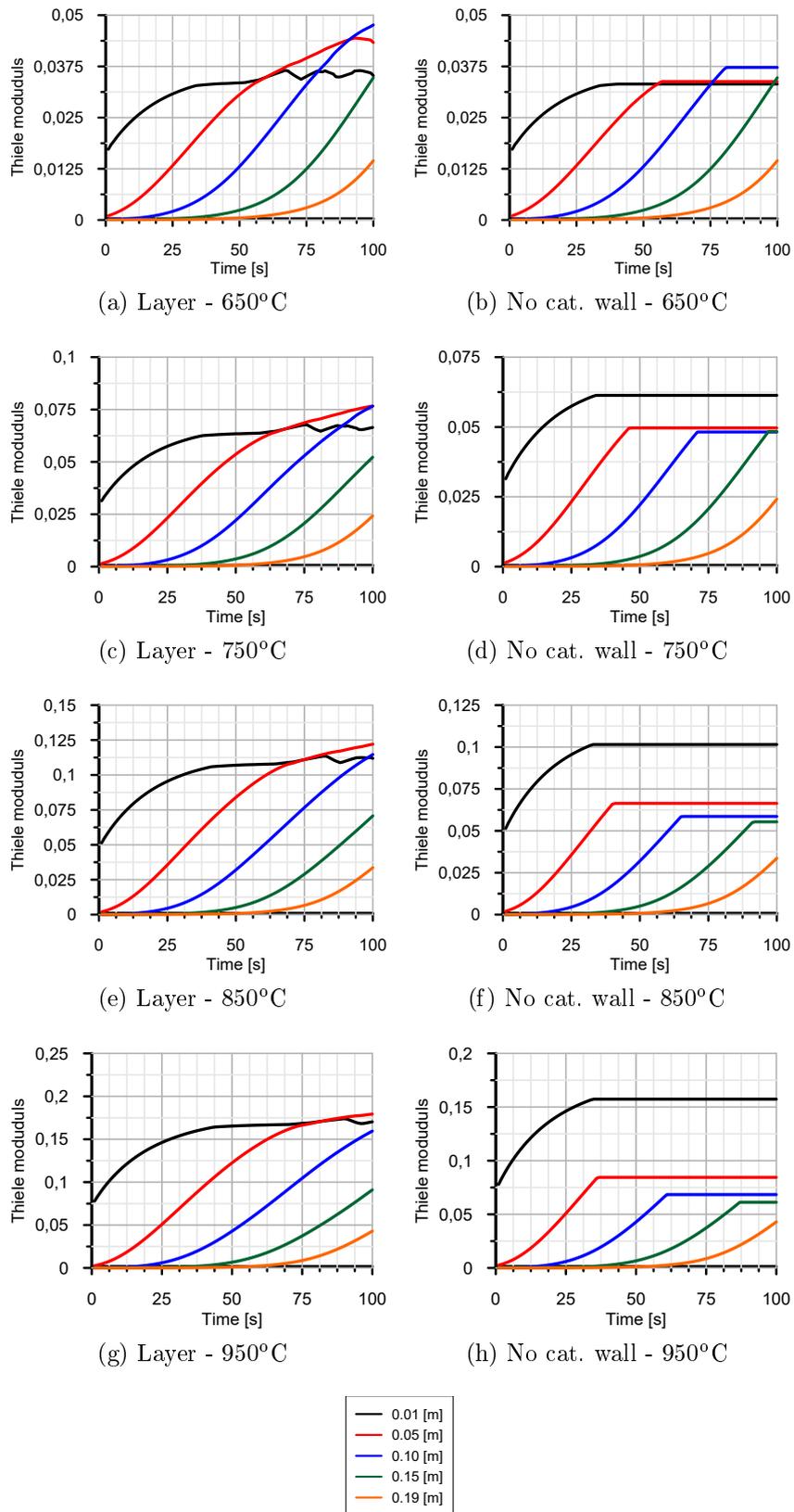


Figura 5.30: Estudio paramétrico de la influencia de la temperatura sobre el módulo de Thiele para un caso con difusión interna.

Como se puede observar en las gráficas de la fig.5.29, los datos coinciden para todas las temperaturas estudiadas tanto al inicio como al final del canal, esto implica una independencia de la tasa de consumo con y sin difusión interna para el rango de temperaturas estudiado.

En cuanto a las gráficas de 5.30 se aprecian pequeñas diferencias, el valor del módulo de Thiele aumenta con la temperatura llegando a ser casi cinco veces mayor el obtenido para 950°C respecto al simétrico de 650°C.

El hecho de que este módulo se mantenga constante en el caso de la pared no catalizada a partir de cierto tiempo indica la total oxidación de masa de hollín en esa región del volumen de control.

En todos los casos se observa como el módulo de Thiele desciende a medida que se avanza a lo largo del canal. Además la tendencia de éste es siempre la misma: inicialmente parte de valores muy bajos para alcanzar los valores máximos para cada longitud en tiempos más avanzados. Estos máximos son más marcados a temperaturas bajas, a pesar de que el valor de los mismos es mucho menor que a temperaturas más elevadas. Esto podría indicar que la fase de difusión interna es más importante al inicio del canal pero cuando ya se ha avanzado un intervalo considerable de tiempo. El perfil coincide con el avance de la distribución de temperaturas. Teniendo en cuenta que la importancia relativa de las fases de un proceso de reacción son dependientes de la temperatura, ésta podría ser su causa.

Tal y como se indicó en el punto 5.2.1, el módulo de Thiele está íntimamente relacionado con la efectividad de la difusividad, siendo este número adimensional un indicador de dicha efectividad. Valores elevados del módulo de Thiele indican que la influencia de la difusividad es elevada y, por tanto, su efectividad se ve reducida.

Con el fin de juzgar si la disminución de efectividad es o no relevante para el rango de temperaturas estudiado, se calculan y grafican las distintas efectividades de la capa y la pared no catalizada para las dos temperaturas extremas del estudio:

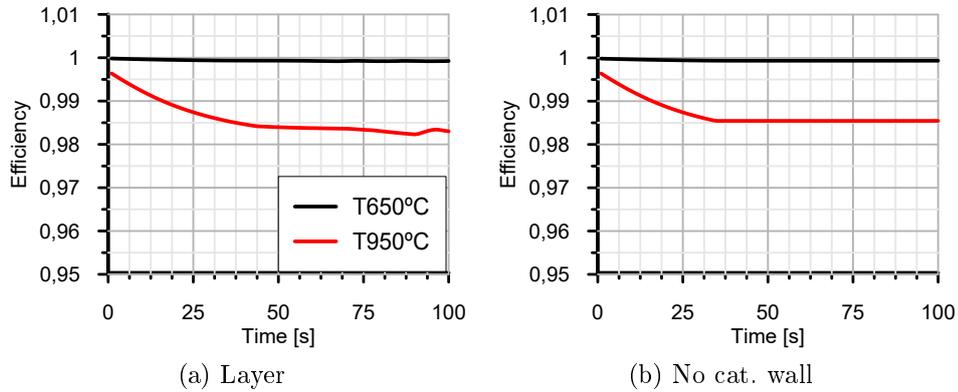


Figura 5.31: Efectividad de la difusividad a distintas temperaturas.

La figura 5.31 ayuda a comprobar que, como era de esperar, la efectividad correspondiente a la temperatura mayor (950°C) es menor que la pertinente a los 650°C. Esto sucede por igual para ambas zonas de estudio: pared no catalizada y capa. Finalmente, se observa como a pesar del descenso de efectividad con la temperatura, dicha bajada es prácticamente despreciable: de 1 a 0.98.

Se podría concluir este apartado afirmando que la influencia de la difusión interna es despreciable, puede suprimirse del modelo, y más aún a las temperaturas de trabajo actuales (600-700°C). El hecho de que esta fase sólo esté introducida en las ecuaciones mediante una corrección de efectividad y que ésta se mantenga prácticamente constante supone que, en caso de que esta fase fuera importante, seguiría pudiéndose ajustar el modelo sin tenerla en cuenta reajustando el factor preexponencial.

5.3.3. Difusión externa

Una vez determinada la importancia de las fases de adsorción y difusión interna sólo queda estudiar la influencia de la difusión externa.

La difusión externa es una fase que no se tiene en cuenta en el modelo 1D inicial del que parte el trabajo. Los efectos de esta fase vienen definidos dentro de la ecuación de conservación de especies mediante el término difusivo:

$$\dot{w}_n = \frac{\partial(\rho Y_n)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_w Y_n)}{\partial z} - \underbrace{D_n \frac{\partial^2(\rho Y_n)}{\partial z^2}}_{\text{diffusion term}} \quad (5.10)$$

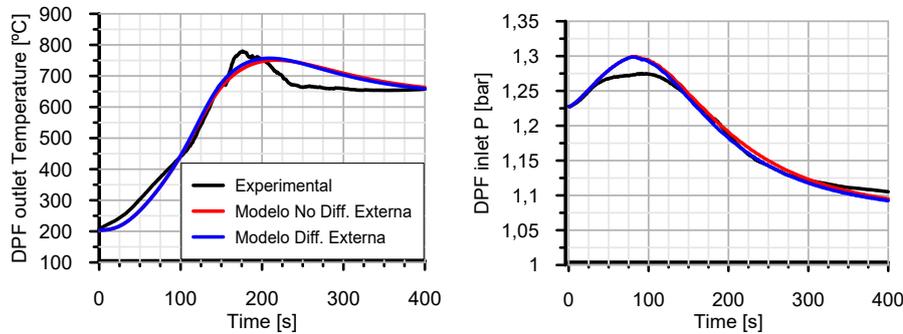
Introducir este término conlleva una mayor complejidad a la hora de hallar variación de la fracción molar de la especie n entre la salida y entrada del filtro. La resolución de la ecuación resultante se lleva a cabo mediante un método

numérico Runge Kutta de segundo orden.

Se repite el estudio realizado con la difusión interna para poder definir el rango de temperaturas en el que, de ser una fase relevante, la difusión externa se debe tener en cuenta.

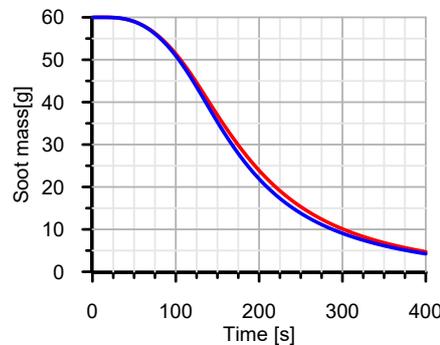
La estructura del estudio es la misma: inicialmente se grafican las tres figuras básicas repetidas a lo largo del trabajo para comparar posibles diferencias a simple vista del caso con y sin difusión externa, y posteriormente se realiza un estudio paramétrico de la tasa de consumo del oxígeno con el fin de observar posibles diferencias de dicho parámetro para distintas temperaturas con la presencia de difusión externa.

Se ejecuta el caso inicial correspondiente a la validación del modelo del punto 5.1 teniendo en cuenta la difusión externa. Se impone la misma temperatura de entrada y gasto másico, así como el mismo factor preexponencial ($A_n = 2$). A continuación se muestran las gráficas correspondientes a esta primera parte del estudio de la difusión externa:



(a) Temperatura a la salida del DPF

(b) Presión a la entrada del DPF



(c) Masa de hollín total

Figura 5.32: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) con y sin difusión externa.

Observando la figura 5.32 se puede indicar que en este caso, a diferencia de la difusión interna, las variables no coinciden exactamente, se pueden observar pequeñas diferencias. En base a la figura 5.32c se podría decir que el hecho de introducir la fase de difusión externa puede acelerar el proceso de regeneración. Aunque la diferencia en este caso es despreciable, dicha disparidad puede verse incrementada a valores más elevados de temperatura. Por esto último se procede con la segunda parte del estudio de difusión externa: el estudio paramétrico de temperatura.

El estudio paramétrico se realiza imponiendo una temperatura de entrada al filtro estacionaria y el gasto másico. Las constantes cinéticas son las correspondientes al apartado de validación del modelo: factor de frecuencia $A_n = 2$.

La variable a estudiar es la tasa de consumo de oxígeno y las temperaturas elegidas son las mismas que en el caso de difusión interna: 650°C, 750°C, 850°C y 950°C. A continuación se muestran las figuras correspondientes a este estudio paramétrico, donde se diferencia también la tasa de consumo de O_2 entre el inicio (0.01m) y final del canal (0.19m):

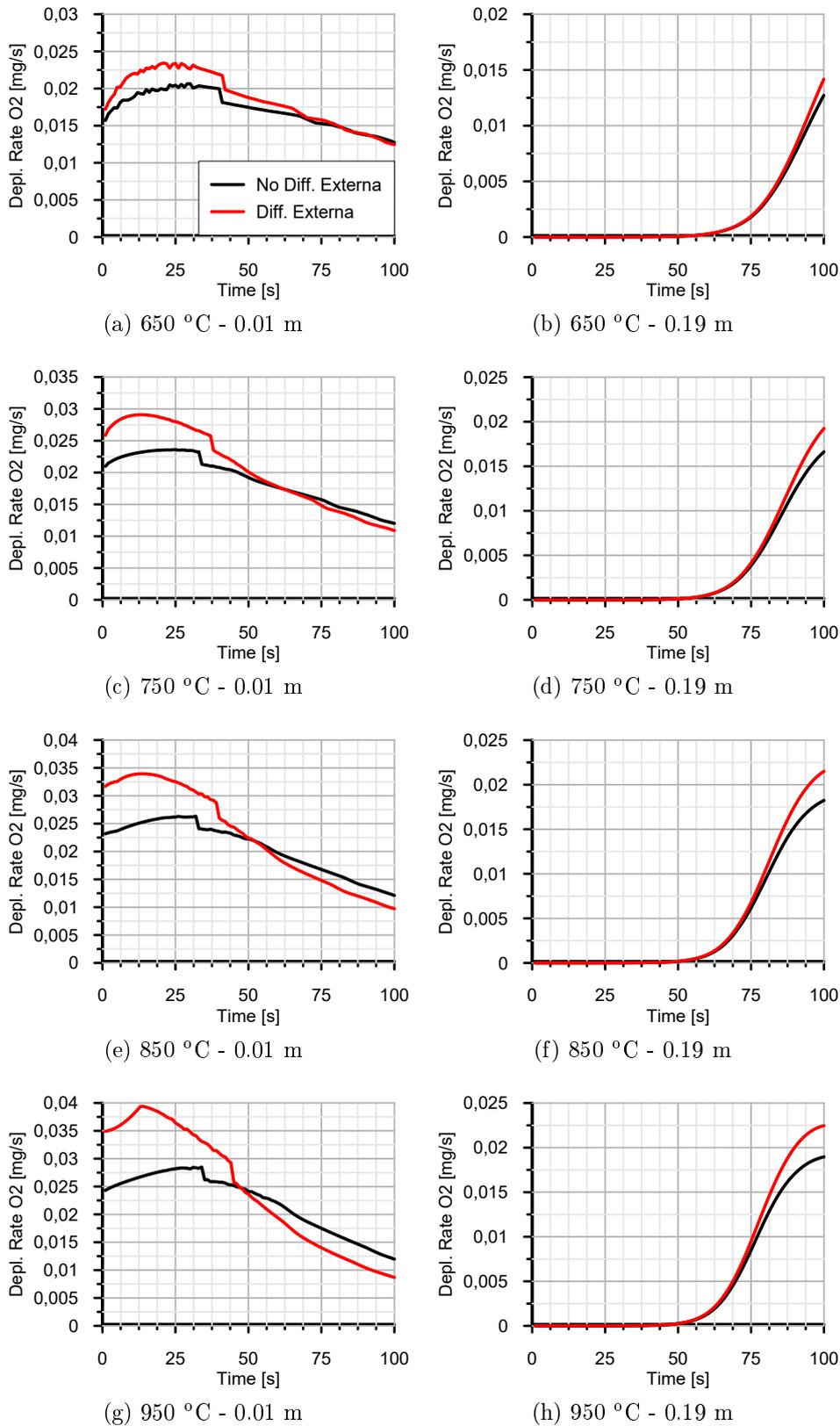


Figura 5.33: Estudio paramétrico de la influencia de la temperatura sobre la tasa de consumo para casos con y sin difusión externa.

La figura 5.33 muestra como para el caso de 650°C ya existe una diferencia notable entre las ejecuciones con y sin difusión externa. Esta diferencia va incrementando su valor a medida que se aumenta la temperatura.

Para establecer el límite de temperatura al cual la difusión externa empieza a ser importante se grafica una de las figuras que representa la evolución de tasa de consumo de O_2 con la temperatura de pared conjuntamente. Se elige la zona final del canal porque se aprecia mucho mejor el momento en el que los dos casos se separan. A continuación se muestran dichas gráficas, para las temperaturas 650°C y 950°C :

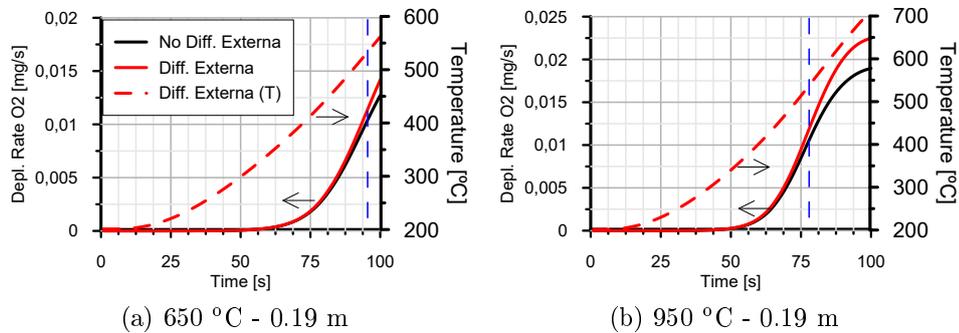


Figura 5.34: Establecimiento de la temperatura límite a la cual se debe tener en cuenta la difusión externa.

La figura 5.34 demuestra que el inicio de la separación de los casos con y sin difusión externa tiene lugar en el momento en el que se alcanza una temperatura aproximada de 550°C . Para comprobar que a esta temperatura la tasa de consumo de oxígeno es igual independientemente de si se considera o no la difusión externa se ejecuta un nuevo caso de estudio paramétrico imponiendo una temperatura de entrada de 550°C :

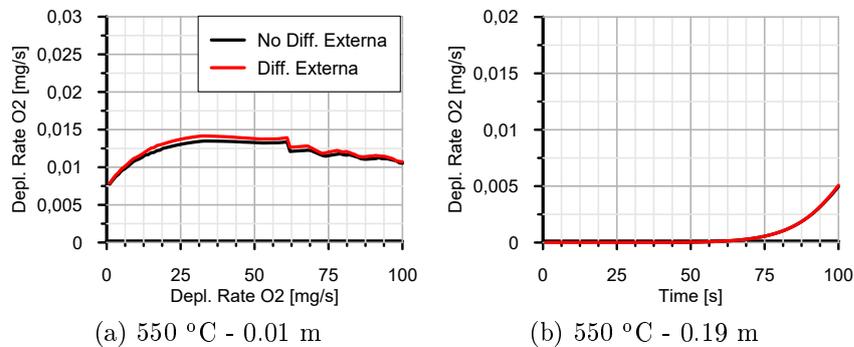


Figura 5.35: Comparación de la tasa de consumo de O_2 para un caso con y sin difusión externa a 550°C .

La figura 5.35 verifica las suposiciones antes expuestas: la difusión externa comienza a ser implicar diferencias a partir de los 550-600°C aproximadamente, en el caso de los 650°C aún podría despreciarse la diferencia, este proceso es relevante a mayores temperaturas. Esto implica que para regeneraciones que alcancen temperaturas elevadas deberían tener en cuenta este fenómeno/fase para reproducir fielmente el comportamiento del filtro durante un proceso de regeneración.

5.3.4. Mesoestructura

Se propone como estudio paralelo un breve análisis de la influencia de algunos parámetros mesoestructurales, térmicos y mecánicos sobre el proceso de regeneración definidos en los apartados 2.3.1.2 y 2.3.1.3.

El estudio se basa en establecer cómo de sensible es el proceso de regeneración ante cambios de SFA y para ello se parte de las siguientes hipótesis: se debe mantener el MIF constante, es decir, mantener invariable el límite de carga máxima que la estructura celular puede soportar y suponer cambios los cambios de SFA proporcionales a una constante x . En forma de ecuación estas hipótesis quedan:

$$SFA_0 \cdot x = SFA_1$$

$$MIF_1 = MIF_0$$

Se desarrollan estas igualdades para establecer la relación entre los espesores de capa y ancho de pared con el fin de introducir dichas relaciones en los parámetros térmicos y estructurales para observar sus tendencias.

Partiendo de las propias definiciones de SFA y MIF :

$$SFA_1 = x \cdot SFA_0 \longrightarrow \frac{x2\alpha_0}{(\alpha_0 + w_{w_0})^2} = \frac{2\alpha_1}{(\alpha_1 + w_{w_1})^2} \quad (5.11)$$

$$MIF_1 = MIF_0 \longrightarrow \frac{w_{w_1}^2}{(\alpha_1 + w_{w_1})\alpha_1} = \frac{w_{w_0}^0}{(\alpha_0 + w_{w_0})\alpha_0} \quad (5.12)$$

se puede establecer que:

$$(\alpha_1 + w_{w_1}) = \frac{w_{w_1}^2}{\alpha_1 MIF_1} \quad (5.13)$$

$$(\alpha_0 + w_{w_0}) = \frac{w_{w_0}^2}{\alpha_0 MIF_0} \quad (5.14)$$

Combinando las ecuaciones 5.11 5.12 5.13 5.14 se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{x2\alpha_0}{\left(\frac{w_{w_0}^2}{\alpha_0 MIF_0}\right)^2} &= \frac{2\alpha_1}{\left(\frac{w_{w_1}^2}{\alpha_1 MIF_1}\right)^2} \longrightarrow \\ \longrightarrow \frac{x\alpha_0}{w_{w_0}^4} &= \frac{\alpha_1}{w_{w_1}^4} \longrightarrow \frac{x}{w_{w_0}} \frac{\alpha_0}{w_{w_0}^3} = \frac{x}{w_{w_1}} \frac{\alpha_1}{w_{w_1}^3} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Esta relación podría simplificarse mucho si la relación w_w/α se mantuviese constante, algo que realmente sucede y que se va a demostrar a continuación:

Se define el MIF con la variable A para que el seguimiento de la demostración sea más visual:

$$\frac{w_w^2}{(\alpha + w_w)\alpha} = MIF \longrightarrow A$$

Desarrollando la expresión y reagrupando términos se llega a:

$$\frac{w_w}{\alpha} \frac{w_w}{\alpha + w_w} = A \longrightarrow \frac{w_w}{\alpha} \frac{1}{\alpha/w_w + 1} = A$$

De nuevo, con el fin de hacer la explicación más sencilla se denomina con la letra b a la relación $\frac{w_w}{\alpha}$:

$$\frac{w_w}{\alpha} = A \frac{\alpha}{w_w} + A \longrightarrow \underbrace{\frac{w_w}{\alpha}}_b - A = \underbrace{\frac{\alpha}{w_w}}_{1/b} A$$

Reordenando los términos se tiene una ecuación de segundo orden:

$$\begin{aligned} b^2 - Ab - A &= 0 \longrightarrow \frac{A \pm \sqrt{A^2 + 4A}}{2} = b \longrightarrow \\ \longrightarrow \frac{\sqrt{2A^2 + 4A}}{2} &= b = \frac{w_w}{\alpha} \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que A es realmente el MIF:

$$\frac{\sqrt{2MIF^2 + 4MIF}}{2} = \frac{w_w}{\alpha} \quad (5.16)$$

y que éste se ha definido como un parámetro constante:

$$MIF = cte \longrightarrow \frac{w_w}{\alpha} = cte \quad (5.17)$$

Una vez demostrado que la relación $\frac{w_w}{\alpha}$ es constante se continúa el desarrollo de la relación de parámetros a partir de la ecuación 5.15:

$$\begin{aligned} x \frac{1}{w_{w_0}} \left(\frac{\alpha_0}{w_{w_0}} \right)^3 &= \frac{1}{w_{w_1}} \left(\frac{\alpha_1}{w_{w_1}} \right)^3 \longrightarrow \\ \longrightarrow \frac{x}{w_{w_0}} &= \frac{1}{w_{w_1}} \end{aligned}$$

Obteniendo finalmente que la relación entre los espesores de pared y ancho de canal la misma para ambos:

$$w_{w_0} = w_{w_1} \cdot x \quad (5.18)$$

$$\alpha_0 = \alpha_1 \cdot x \quad (5.19)$$

cuya representación gráfica permite respaldar que la relación es inversamente proporcional a x :

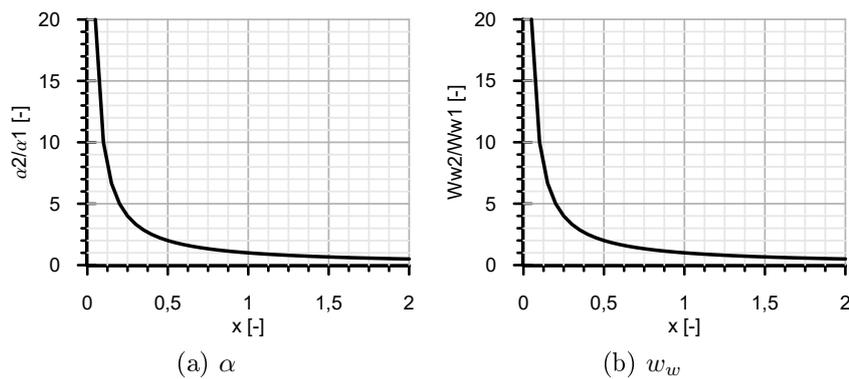


Figura 5.36: Evolución de la relación α_1/α_0 y w_{w_1}/w_{w_0} con x .

Introduciendo las relaciones 5.18 y 5.19 en las definiciones de los parámetros térmicos y mecánicos se obtiene la evolución de éstos en función de x . La figura siguiente muestra las tendencias obtenidas:

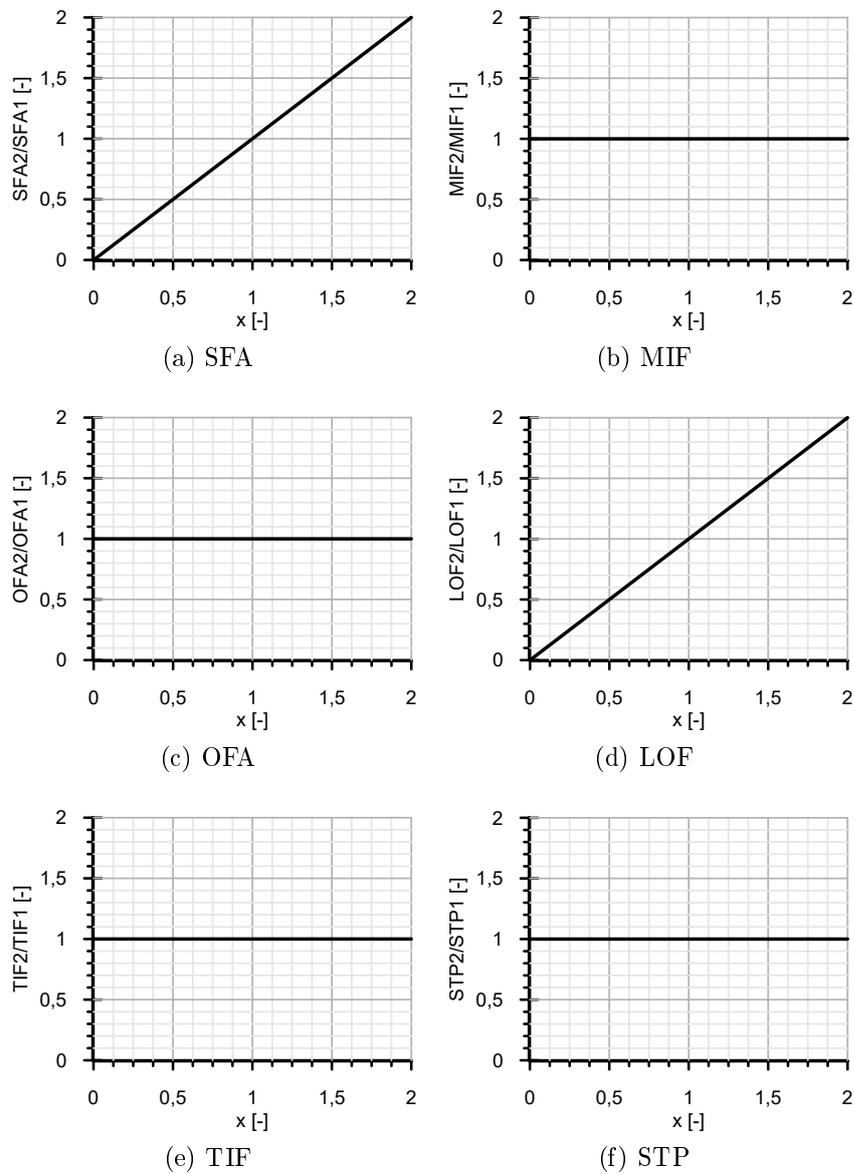


Figura 5.37: Evolución de los parámetros térmicos y mecánicos relacionados con la mesoestructura con x .

En la fig.5.37 se observa como prácticamente la relación entre todos los parámetros se mantienen constantes a excepción del SFA , cuya tendencia está impuesta al inicio del estudio, y LOF , que presenta un crecimiento exactamente igual al de SFA .

El hecho de que OFA se mantenga constante implica que las dimensiones del monolito no varían, y la igualdad de TIF conlleva que el gradiente máximo de temperatura que puede soportar el monolito no varía.

El *LOF* define la capacidad de transmisión de calor del monolito durante el transitorio. Si el *LOF* crece, la inercia térmica del monolito aumenta. El aumento de inercia térmica provoca un mayor tiempo necesario para la iniciación del proceso de regeneración, algo que implicaría un retraso del proceso de regeneración o regeneración más lenta.

Para comprobar esta tendencia se realizan dos ejecuciones variando parámetros relevantes.

El parámetro elegido como variable en este estudio es la densidad de celdas (σ o DC). La densidad de celdas es el número de canales por unidad de área de sección transversal, se mide en cpsi y se elige como parámetro central porque en él se recopila el valor de la longitud del lado del canal y el espesor de la pared porosa (ecuación 4.12).

En el caso inicial del que se parte para la validación del punto 5.1 la densidad de celdas definida es de 200 cpsi. Es un dato impuesto por la longitud del lado del canal (α) y espesor de la pared porosa (w_w). De esta manera, si se quiere variar el valor de σ , se debe realizar un cálculo iterativo con los valores de α y w_w hasta obtener la densidad de celdas deseada.

Para llevar a cabo dicho cálculo iterativo se plantea un sistema de ecuaciones con las definiciones de *SFA* y *MIF*, que es el mismo del que parte la demostración inicial de este apartado. Se impone igualdad de *MIF* y una relación entre *SFA* constante y de valor x . El cálculo iterativo parte de la imposición de un valor para x y a partir de ahí se calcula mediante el sistema de ecuaciones los valores de α y w_w . Una vez conocidos estos parámetros se calcula la densidad de celdas correspondiente. El valor de x se va variando hasta que se obtiene la σ deseada.

La tabla 5.5 recoge los datos obtenidos tras las iteraciones para las densidades de celda deseadas y los datos de partida iniciales, con sus correspondientes valores de x :

x [-]	α [m]	w_w [m]	σ [cpsi]
1	0,001486	$0,31 \cdot 10^{-3}$	200
0,866	0,001716	$0,36 \cdot 10^{-3}$	150
1,225	0,001213	$0,25 \cdot 10^{-3}$	300

Tabla 5.5: Parámetros mesoestructurales.

Los valores correspondientes de α y w_w para las densidades de celdas deseadas se introducen en nuevos ficheros .WAM. Estos ficheros se ejecutan bajo las

mismas condiciones que las de los estudios anteriores: imponiendo temperatura y gasto másico, así como un factor preexponencial $A_n = 2$.

A continuación se van a mostrar los resultados obtenidos tras estas ejecuciones, con sus correspondientes análisis.

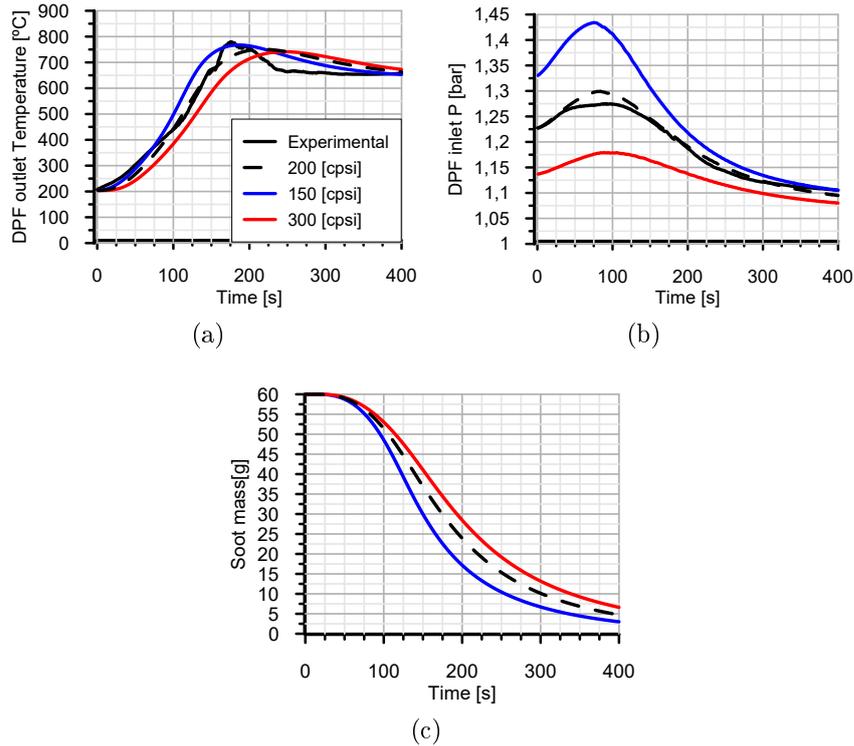


Figura 5.38: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros calculados con el modelo 1D ($A_n = 2$) para σ 200, 300 y 150 cpsi.

La figura 5.38 muestra como el proceso de regeneración con una densidad de celdas de 150 es ligeramente más rápido y la presión a la entrada del filtro es mucho más elevada. Viendo estas gráficas se puede decir que reducir la densidad de celdas implica una regeneración más rápida pero con una presión a la entrada del DPF muchísimo más elevada.

En cuanto a la ejecución de 300 cpsi, la figura 5.38 muestra un proceso de regeneración ligeramente más lento, en el cual cabe destacar la gran disminución de la presión a la entrada del filtro. Este decrecimiento se debe a la mayor superficie de filtrado.

Ambos comportamientos son coherentes con las tendencias obtenidas en el previo estudio de la correlación entre parámetros. Un incremento de superficie específica implica aumentar la densidad de celdas y, como se ha observado

en las gráficas 5.37, un crecimiento del LOF . Si este parámetro aumenta, la inercia térmica del monolito crece, tardando así mas tiempo en alcanzar la temperatura necesaria para iniciar la regeneración, es decir, proporciona una regeneración más lenta. Si, por el contrario, se reduce la superficie específica, las consecuencias son justo las opuestas: se obtiene un menor LOF , menor inercia térmica y menor tiempo de activación necesario, en otras palabras, una regeneración más rápida.

Este estudio deja la puerta abierta a futuros proyectos con el fin de proponer nuevas estrategias de regeneración o dimensionado que mejoren el comportamiento y vida útil del filtro.

Capítulo 6

Conclusiones

- En vista de los resultados obtenidos se ha demostrado que considerar los fenómenos de adsorción y desorción durante los eventos de regeneración es conveniente para reproducir de forma adecuada el comportamiento del filtro durante todas las etapas que componen este evento. Simplificaciones tales como considerar que la cinética del proceso es de orden cero o orden uno no reproducen el comportamiento del filtro en todas sus etapas o fases de reactividad.
- Tras el modelado de varios procesos de regeneración se ha visto que todas siguen una estructura común pudiendo distinguir tres etapas principales: iniciación, máxima reactividad y cola. En función del orden de reacción utilizado estas etapas se redistribuyen, cambiando la importancia relativa de cada una de ellas. Este es el motivo por el cual las simplificaciones de orden cero y uno no permiten el ajuste del proceso de regeneración completo.
- Se ha demostrado que se pueden obtener los mismos resultados independientemente del orden de reacción establecido, reajustando mediante cambios en las constantes cinéticas tales como el factor preexponencial, o factor de frecuencia, la velocidad de reacción o reactividad.
- Los estudios realizados sobre la fase de difusión interna han llevado a que, en el rango de temperaturas estudiado, esta etapa no resulta relevante para el correcto modelado del fenómeno. El estudio de sensibilidad de difusión interna en función de la temperatura ha demostrado que este fenómeno cobra mayor importancia a temperaturas más elevadas. Esto implicaría que en un estudio de puntos calientes, donde se pueden observar picos de temperaturas más elevadas, se debería tener en cuenta la difusión interna. A pesar de esto, el análisis alcanzado temperaturas de estudio de hasta 950°C , donde aún no se observaban grandes cambios.
- Se ha demostrado que la difusión externa cobra mayor importancia con la temperatura, llegando a ser bastante relevante a temperaturas elevadas.

El límite de temperatura establecido para el cual esta etapa incrementa su repercusión son los 650-750°C, ya que a 550°C aún no se observan diferencias significantes y a los 650°C la diferencia aún podría despreciarse.

- Se ha hecho un análisis de mesoestructura para establecer cómo de sensible es el proceso de regeneración ante cambios de *SFA*, demostrando científicamente las correlaciones entre algunos parámetros térmicos y estructurales. Los resultados obtenidos muestran que un aumento de *SFA* manteniendo *MIF* constante conlleva que el resto de parámetros definidos se mantenga constante, a excepción del *LOF* que aumenta igual que el *SFA*.
- El principal y único cambio que implica la variación de *SFA* queda entonces reducido al estudio del *LOF*: el aumento de *SFA* conlleva un incremento del *LOF*, o lo que es lo mismo, un aumento de la inercia térmica. Este aumento produce un aumento del tiempo necesario para el inicio del proceso de regeneración, tiempo de activación, retrasando la regeneración y proporcionando un proceso mas homogéneo.
- Estos avances referidos a la metodología podrían abrir una nueva línea de investigación para dimensionado de filtros con el fin de optimizar su funcionamiento. Se ha realizado un breve estudio inicial para intentar mejorar la estrategia de regeneración para distribuciones de hollín heterogéneas como es el caso de la inyección de agua, cuyas gráficas y resultados están incluidos en el anexo. Como conclusión general a este breve análisis puede decirse que no se ha observado ninguna mejora en el comportamiento de regeneración en cuanto a la masa de hollín consumida, aunque sí una menor caída de presión cuanto mayor es la densidad de celdas fijada.

Bibliografía

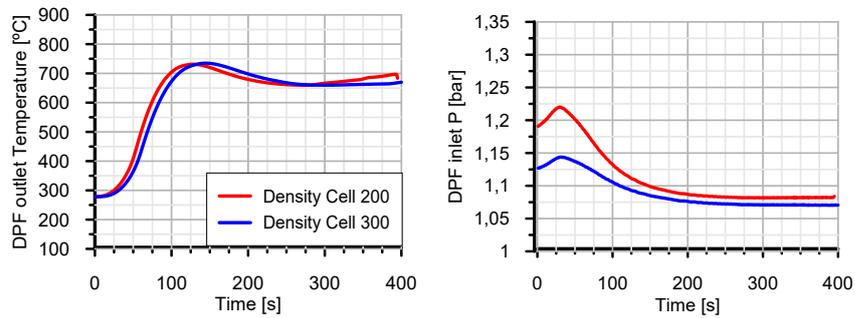
- [1] P. Piqueras Cabrera. Contribución al modelado termofluidodinámico de filtros de partículas diésel de flujo de pared., 2010.
- [2] A.J. Torregrosa, J.R. Serrano, F.J. Arnau, and P. Piqueras. “A fluid dynamic model for unsteady compressible flow in wall-flow Diesel particulate filters.”. *Appl. Energy*, 2011.
- [3] E.J. Bisset. “Mathematical model of the thermal regeneration of a wall-flow monolith diesel particulate filter.”. *Chemical Engineering Science*, 1984.
- [4] J. Galindo, J.R. Serrano, P. Piqueras, and O. Garcia-Afonso. “Heat transfer modelling in honeycomb wall-flow diesel particulate filters.”. *Energy* 43:201-213, 2012.
- [5] E.J. Sanchis Pacheco. Contribución al modelado del proceso de regeneración de filtros de partículas diésel., 2016.
- [6] M.J. Murtagh. “Diesel particulate filters (DPF): A short course.”. *Diesel particulate and NOx emissions course. University of Leeds.*, 2002.
- [7] J.L Sullivan, R.E. Baker, B.A. Boyer, R.H. Hammerle, T.E. Kenney, L. Muniz, and T.J. Wallington. “CO₂ emission benefit of diesel (versus gasoline) powered vehicles.”. *Environmental Science and Technology*, 2004.
- [8] B.R. Stanmore, J.F. Brilhac, and P. Gilot. “The oxidation of soot: a review of experiments, mechanism and models.”. *Carbon*, 2001.
- [9] V. Bermúdez, J.R. Serrano, P. Piqueras, and E.J. Sanchis. “On the impact of particulate matter distribution on pressure drop of wall-flow particulate filters.”. *Applied Sciences - MDPI*, 2017.
- [10] O. García-Alfonso. Análisis teórico experimental de la arquitectura pre-turbo de sistemas de post-tratamiento en MCIA., 2013.
- [11] E. Angiolini. Contribución al modelado del proceso de regeneración de filtros de partículas diésel., 2016.

-
- [12] J.R. Serrano, H. Climent, P. Piqueras, and E. Angiolini. "Filtration modelling in wall-flow particulate filters of low soot penetration thickness.". *Appl. Energy*, 2016.
- [13] J.R. Serrano, H. Climent, P. Piqueras, and E. Angiolini. "Analysis of fluid-dynamic guidelines in diesel particulate filter sizing for fuel consumption reduction in post-turbo and pre-turbo placement.". *Applied Energy Volume 123, pages 507-523*, 2014.
- [14] V. Bermúdez, J.R. Serrano, P. Piqueras, and O. García-Alfonso. "Pre-DPF water injection technique for pressure drop control in loaded wall-flow diesel particulate filters.". *Applied Energy*, 2014.
- [15] F. Payri and J.M. Desantes. "*Motores de combustión interna alternativos*". Editorial Reverté, Editorial UPV, 2014.
- [16] Regulation (EC) no 715/2007 of the european parliament and of the council of 20 june 2007 on type approval of motor vehicles with respect to emissions from passangers and light commercial vehicles (euro 5 and euro 6) and on access to vehicle repair and maintenance information, June 2007.
- [17] A. Rusell and W.S. Epling. "Diesel oxidation catalyts, catalyst review.". *Engineering, Vol.53*, 2011.
- [18] R. Allansson, P.G. Blakeman, B.J. Cooper, H. Hess, P.J. Silcock, and A.P. Walker. "Optimising the low temperature performance and regeneration efficiency of the continuously regenerating diesel particulate filter system.". *SAE Technical Paper*, 2002.
- [19] F. Posada, A. Bandivadekar, and J. German. "Estimated cost of emission control technologies for light-dity vehicles.". *SAE Technical Paper*, 2003.
- [20] <http://www.openwam.org>, Junio 2017.
- [21] X. Wu, F. Lin, H. Xu, and D. Weng. "Effects of adsorbed and gaseous NOx species on catalytic oxidation of diesel soot with MnOx-CeO2 mixed oxides.". *Applied Catalysis*, 2010.
- [22] F.J. Arnau. Aportaciones al cálculo numérico para el modelado de flujo compresible unidimensional en conductos de MCIA., 2003.
- [23] J.R. Serrano, H. Climent, P. Piqueras, and O. Gracia-Alfonso. "Packed bed of spherical particles approach for pressure drop prediction in wall-flow DPFs (diesel particulate filters) under soot loading conditions.". *Energy*, 2013.
- [24] <https://es.wikipedia.org/wiki/Reactividad>, Junio 2017.

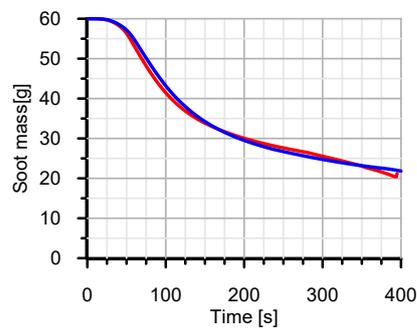
-
- [25] A. Messerer, R. Niessner, and U. Poschl. “Comprehensive kinetic characterization of the oxidation and gasification of model and real diesel soot by nitrogen oxides and oxygen under exhaust conditions: Measurement Langmuir-Hinshelwood, and Arrhenius parameters.”. *Carbon* 44, 2006.
- [26] A.O. Dada, A.P. Olalekan, and A.M. Olantuya. “Langmuir, Freunlich, Temkin and Dubinin-Radushkevich Isotherms Studies of Equilibrium Sorption of Zn²⁺ Unto Phosphoric Acid Modified Rice Husk.”. *IOSR Journal of Applied Chemistry*, 2004.
- [27] M. Schejbal, J. Stepánek, M. Marek, P. Kocí, and M. Kubíček. “Modelling of soot oxidation by NO₂ in various types of diesel particulate filters.”. *Fuel*, 2008.
- [28] A.S. Shende, J.H. Johnson, S.L. Yang, S.T. Bagley, and A.M. Thalagavara. “The filtration and particulate matter oxidation characteristics of a catalyzed wall-flow diesel particulate filter: experimental and 1-D, 2-layer model results.”. *SAE Technical Paper* 1, 2005.
- [29] Y. Yong. “Simulating the soot loading in wall-flow dpf using a three-dimensional macroscopic model.”. *SAE Technical Paper*, 2006.
- [30] B.J. McBride, M.J. Zehe, and S. Gordon. “NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species.”. *NASA/TP*, 2002.

Parte II

ANEXO



(a) Temperatura a la salida del DPF (b) Presión a la entrada del DPF



(c) Masa de hollín

Figura 1: Comparación de la evolución temporal de tres parámetros para distintas densidades de celda.

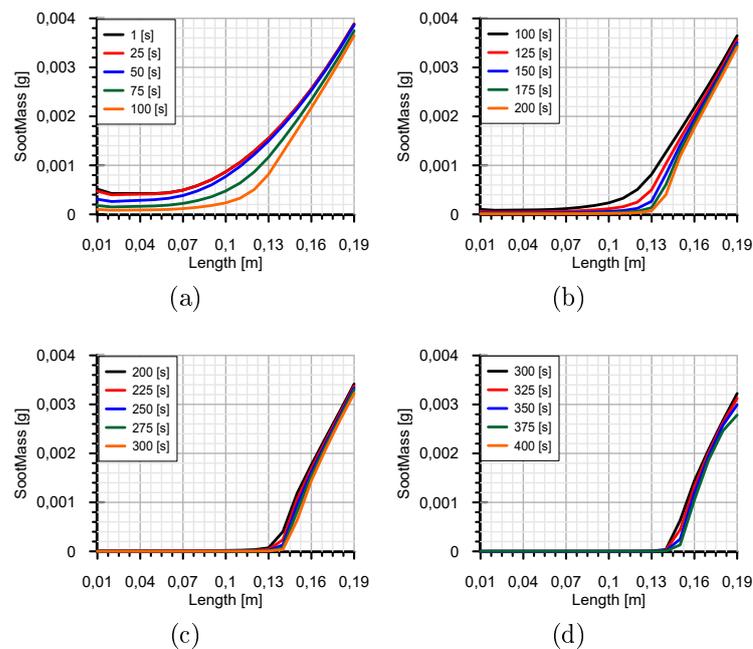


Figura 2: Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 200 cpsi

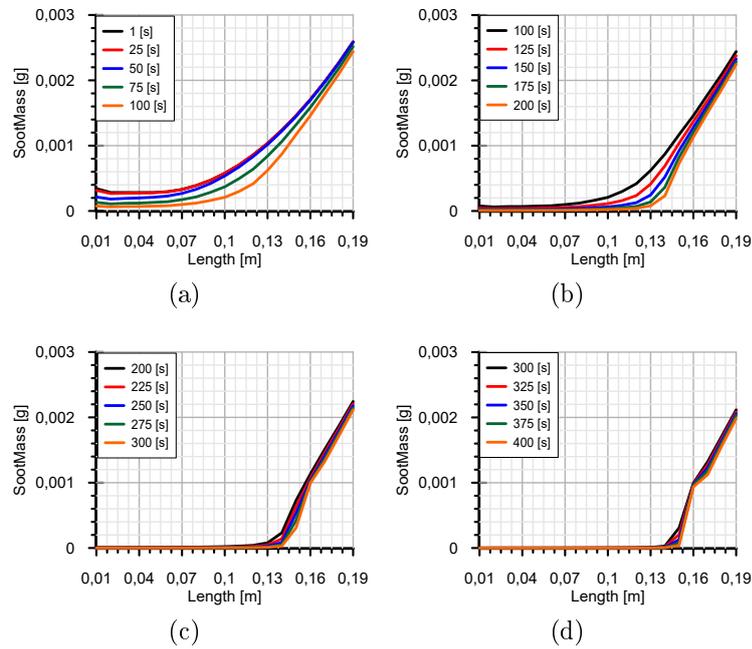


Figura 3: Distribución de la masa de hollín a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 300 cps

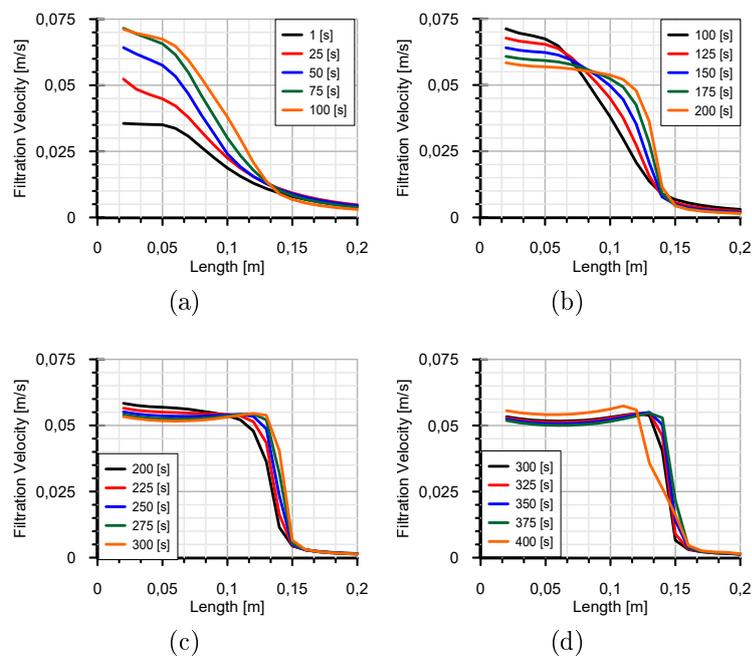


Figura 4: Distribución de las velocidades de filtrado a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 200 cps.

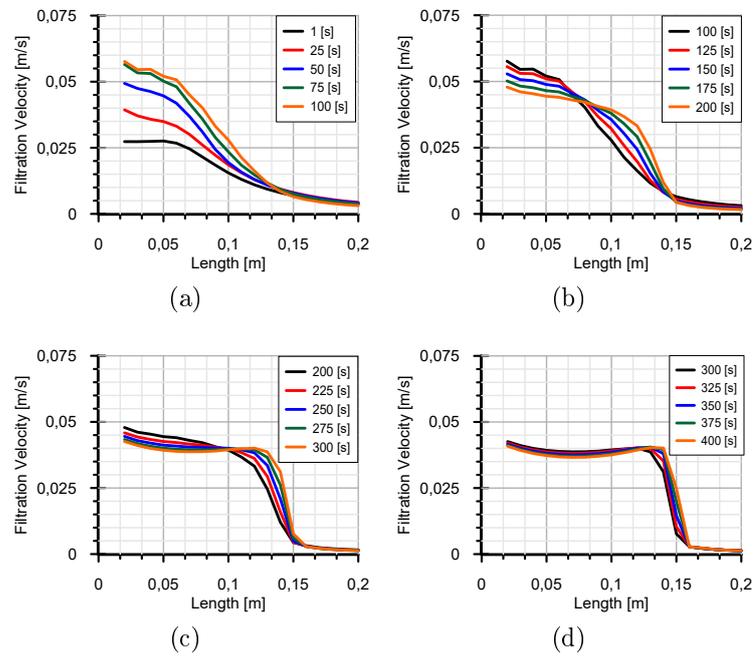


Figura 5: Distribución de las velocidades de filtrado a lo largo del canal para distintos intervalos de tiempo y densidad de celdas de 300 cpsi.

Parte III

PLIEGO DE CONDICIONES

Capítulo 1

Ordenanzas de seguridad e higiene en el trabajo

La ordenanza general de seguridad e higiene en el trabajo se encuentra recogida en el BOE num. 64 del 16 de marzo de 1971. En este capítulo se exponen los diferentes artículos de dicha ordenanza que se han de tener en cuenta con el fin de preservar un ambiente adecuado para la ejecución de los trabajos de forma segura, evitando así riesgos para los operarios.

1.1. Disposiciones generales

ARTÍCULO 1: Ámbito de aplicación

A las disposiciones de esta Ordenanza se ajustará la protección obligatoria mínima de las personas comprendidas en el ámbito del Sistema de la Seguridad Social, a fin de prevenir accidentes y enfermedades profesionales y de lograr las mejores condiciones de higiene y bienestar en los centros y puestos de trabajo en que dichas personas desarrollen sus actividades.

ARTÍCULO 11: Obligaciones y derechos de los trabajadores

Incumbe a los trabajadores la obligación de cooperar en la prevención de riesgos profesionales en la Empresa y el mantenimiento de la máxima higiene en la misma, a cuyos fines deberán cumplir fielmente los preceptos de esta Ordenanza y sus instrucciones complementarias, así como las órdenes e instrucciones que a tales efectos les sean dados por sus superiores.

Los trabajadores, expresamente, están obligados a:

- Recibir las enseñanzas sobre Seguridad e Higiene y sobre salvamento y socorrismo en los centros de trabajo que les sean facilitadas por la Empresa o en las Instituciones del Plan Nacional.

- Usar correctamente los medios de protección personal y cuidar de su perfecto estado y conservación.
- Dar cuenta inmediata a sus superiores de las averías y deficiencias que puedan ocasionar peligros en cualquier centro o puesto de trabajo.
- Cuidar y mantener su higiene personal, en evitación de enfermedades contagiosas o de molestias a sus compañeros de trabajo.
- Someterse a los reconocimientos médicos preceptivos y a las vacunaciones o inmunizaciones ordenadas por las Autoridades Sanitarias competentes o por el Servicio Médico de Empresa.
- No introducir bebidas u otras sustancias no autorizadas en los centros de trabajo, ni presentarse o permanecer en los mismos en estado de embriaguez o de cualquier otro género de intoxicación.
- Cooperar en la extinción de siniestros y en el salvamento de las víctimas de accidentes de trabajo en las condiciones que, en cada caso, fueren racionalmente exigibles.

Todo trabajador, después de solicitar de su inmediato superior los medios de protección personal de carácter preceptivo para la realización de su trabajo, queda facultado para demorar la ejecución de éste, en tanto no le sean facilitados dichos medios, si bien deberá dar cuenta del hecho al Comité de Seguridad e Higiene o a uno de sus componentes, sin perjuicio, además, de ponerlo en conocimiento de la Inspección Provincial de Trabajo.

1.2. Condiciones generales de los centros de trabajo y de los mecanismos y medidas de protección

ARTÍCULO 13: Seguridad estructural

Todos los edificios, permanentes o provisionales, serán de construcción segura y firme para evitar riesgos de desplome y los derivados de los agentes atmosféricos. Para ello, los cimientos, pisos y demás elementos de los edificios ofrecerán resistencia suficiente para sostener y suspender con seguridad las cargas para los que han sido calculados.

Además, para preservar esta seguridad se indicará por medio de rótulos o inscripciones las cargas que los locales puedan soportar o suspender, quedando prohibido sobrecargar los pisos y plantas de los edificios.

ARTÍCULO 14: Superficies y cubicación

Los locales de trabajo reunirán las siguientes condiciones mínimas:

- Tres metros de altura desde el piso al techo.
- Dos metros cuadrados de superficie por cada trabajador.
- Diez metros cúbicos por cada trabajador.

No obstante, en los establecimientos comerciales, de servicios y locales destinados a oficinas y despachos la altura a que se refiere el apartado a) del número anterior podrá quedar reducida hasta 2,5 m, pero respetando la cubicación por trabajador que se establece en el apartado c), y siempre que se renueve el aire suficientemente.

Para el cálculo de la superficie y volumen no se tendrán en cuenta los espacios ocupados por máquinas, aparatos, instalaciones y materiales.

ARTÍCULO 15: Suelos, techos y paredes

El pavimento constituirá un conjunto homogéneo, llano y liso sin soluciones de continuidad; será de material consistente, no resbaladizo o susceptible de serlo con el uso y de fácil limpieza. Además deberá estar al mismo nivel, y de no ser así, se salvarán las diferencias de altura por rampas de pendiente no superior al 10 %.

Los techos y las paredes deberán reunir las condiciones suficientes para resguardar a los trabajadores de las inclemencias del tiempo. Si han de soportar o suspender cargas deberán reunir las condiciones que se establecen en el artículo XIII.

ARTÍCULO 25: Iluminación. Disposiciones generales

Todos los lugares de trabajo o tránsito tendrán iluminación natural, artificial o mixta apropiada a las operaciones que se ejecuten. Empleando iluminación natural siempre que sea posible.

Se intensificará la iluminación de máquinas peligrosas, lugares de tránsito con riesgo de caídas, escaleras y salidas de urgencia.

ARTÍCULO 29: Iluminación de emergencia

En todos los centros de trabajo se dispondrá de medios de iluminación de emergencia adecuados a las dimensiones de los locales y número de trabajadores ocupados simultáneamente, capaces de mantener, al menos durante una

hora, una intensidad de cinco lux mediante una fuente de energía independiente del sistema normal de iluminación.

ARTÍCULO 30: Ventilación, temperatura y humedad

En los locales de trabajo y sus anexos se mantendrán, por medios naturales o artificiales, condiciones atmosféricas adecuadas, evitando el aire viciado, exceso de calor y frío, humedad o sequía y los olores desagradables.

En ningún caso el anhídrido carbónico ambiental podrá sobrepasar la proporción de 50/10.000, y el monóxido de carbono, la de 1/10.000.

En los locales de trabajo cerrados, el suministro de aire fresco y limpio por hora y trabajador será, al menos, de 30 a 50 metros cúbicos, salvo que se efectúe una renovación total del aire varias veces por hora, no inferior a seis veces para trabajos sedentarios ni diez veces para trabajos que exijan esfuerzo físico superior al normal.

La circulación de aire en locales cerrados se acondicionará de modo que los trabajadores no estén expuestos a corrientes molestas y que la velocidad del aire no exceda de 15 metros por minuto con temperatura normal, ni de 45 metros por minuto en ambientes muy calurosos.

En los centros de trabajo expuestos a altas y bajas temperaturas serán evitadas las variaciones bruscas por el medio más eficaz. Cuando la temperatura sea extremadamente distinta entre los lugares de trabajo, deberán existir locales de paso para que los operarios se adapten gradualmente a unas y otras.

Se fijan como límites normales de temperatura y humedad en locales y para los distintos trabajos, siempre que el procedimiento de fabricación lo permita, los siguientes:

- Para trabajos sedentarios: De 17 a 22°C.
- Para trabajos ordinarios: De 15 a 18°C.
- Para trabajos que exijan acusados esfuerzos musculares: De 12 a 15°C.

La humedad relativa de la atmósfera oscilará del 40 % al 60 %, salvo en instalaciones en que haya peligro por generarse electricidad estática, quedando en este caso limitada al 50 %.

Todos los trabajadores estarán debidamente protegidos contra las irradiaciones directas y excesivas de calor. En los trabajos que hayan de realizarse en locales cerrados con extremado frío o calor se limitará la permanencia de los operarios estableciendo, en su caso, los turnos adecuados.

ARTÍCULO 31: Ruidos, vibraciones y trepidaciones

Los ruidos y vibraciones se evitarán o reducirán en lo posible en su foco de origen, tratando de aminorar su propagación en los locales de trabajo.

De esta forma, el anclaje de máquinas y aparatos generadoras de ruidos, vibraciones y trepidaciones se ha de realizar con aplicación de las técnicas más eficaces, a fin de lograr su óptimo equilibrio estático y dinámico, tales como bancadas cuyo peso sea superior entre 1.5 y 2.5 veces el peso de la máquina que soportan, por aislamiento de la estructura general o por otros recursos técnicos.

Además del anclaje, las máquinas que produzcan ruidos o vibraciones molestas deben ser aisladas adecuadamente y en el recinto de aquellas, sólo debe trabajar el personal correspondiente para su mantenimiento durante el tiempo indispensable y con el equipamiento requerido para mantener los niveles de seguridad necesarios.

Se debe extremar el cuidado y mantenimiento de las máquinas u aparatos que produzcan vibraciones molestas o peligrosas a los trabajadores y muy especialmente los órganos móviles y los dispositivos de transmisión de movimiento de las vibraciones que generan estas máquinas.

El control de ruidos agresivos en centros de trabajo no se limita únicamente al aislamiento del foco que los produce, sino que también se han de adoptar las prevenciones técnicas que se requieran para evitar que los fenómenos de reflexión y resonancia alcancen niveles peligrosos para la salud de los trabajadores.

ARTÍCULO 51: Protección contra contactos en las instalaciones y en equipos eléctricos

En las instalaciones y equipos eléctricos, para la protección de las personas contra los contactos con partes habitualmente en tensión se adoptarán algunas de las siguientes prevenciones:

- Se alejarán las partes activas de la instalación a distancia suficiente del lugar donde las personas habitualmente se encuentran o circulen, para evitar un contacto fortuito o por la manipulación de objetos conductores, cuando éstos puedan ser utilizados cerca de la instalación.
- Se recubrirán las partes activas con aislamiento apropiado, que conserven sus propiedades indefinidamente y que limiten la corriente de contacto a un valor inocuo.
- Se interpondrán obstáculos que impidan todo contacto accidental con las

partes activas de la instalación. Los obstáculos de protección deben estar fijados en forma segura y resistir a los esfuerzos mecánicos usuales.

ARTÍCULO 57: Electricidad estática

Para evitar peligros por la electricidad estática, y especialmente que se produzcan chispas en ambientes inflamables, se adoptarán en general las siguientes precauciones:

- La humedad relativa del aire se mantendrá sobre el 50 %.
- Las cargas de electricidad estática que pueden acumularse en los cuerpos metálicos serán neutralizadas por medio de conductores a tierra.

ARTÍCULO 82: Prevención y extinción de incendios

En los centros de trabajo que ofrezcan peligro de incendios, con o sin explosión, se adoptarán las prevenciones que se indican a continuación, combinando su empleo con la protección general más próxima que puedan prestar los servicios públicos contra incendios:

- Donde existan conducciones de agua a presión, se instalarán suficientes tomas o bocas de agua a distancia conveniente entre sí y cercanas a los puestos fijos de trabajo y lugares de paso del personal, colocando junto a tales tomas las correspondientes mangueras, que tendrán la sección y resistencia adecuada.
- Cuando se carezca normalmente de agua a presión o ésta sea insuficiente, se instalarán depósitos con agua suficiente para combatir los posibles incendios.
- En incendios que afecten a instalaciones eléctricas con tensión, se prohibirá el - empleo de extintores de espuma química, soda ácida o agua.
- En proximidad a los puestos de trabajo con mayor riesgo de incendio, colocados en sitio visible y accesible fácilmente, se dispondrán extintores portátiles o móviles sobre ruedas, de espuma física o química, mezcla de ambas o polvos secos, anhídrido carbónico o agua, según convenga a la causa determinante del fuego a extinguir.
- Los extintores serán revisados periódicamente y cargados según las normas de las casas constructoras inmediatamente después de usarlos.
- Para extinguir los fuegos que se produzcan en polvos o virutas de magnesio y aluminio, se dispondrá en lugares próximos a los de trabajo, de cajones o retenes suficientes de arena fina seca, de polvo de piedra u otras materias inertes semejantes. En esos casos nunca se utilizara agua.

- En las dependencias con alto riesgo de incendio, queda terminantemente prohibido fumar o introducir cerillas, mecheros o útiles de ignición. Esta prohibición se indicará con carteles visibles a la entrada y en los espacios libres de las paredes de tales dependencias.
- Se prohíbe igualmente al personal introducir o emplear útiles de trabajo, no autorizados por la Empresa, que puedan ocasionar chispas por contacto o proximidad a sustancias inflamables.
- Es obligatorio el uso de guantes, manoplas, mandiles o trajes ignífugos, y de calzado especial contra incendios que las Empresas faciliten a los trabajadores para uso individual.

Parte IV
PRESUPUESTO

Capítulo 1

Introducción

El presente presupuesto corresponde al proyecto *Validación experimental y análisis de sensibilidad de un modelo de regeneración uni-dimensional para filtros de partículas diésel* realizado en el Instituto Universitario CMT - Motores Térmicos de la Universitat Politècnica de València.

La completa financiación del proyecto, suministro de herramientas informáticas, equipos, materiales y recursos humanos es llevada a cabo por el propio Instituto de Investigación CMT.

Este documento pretende proporcionar una estimación de la cuantía global necesaria para la realización del proyecto. El presupuesto se abroda por separado desde el punto de vista del coste parcial de la mano de obra, la amortización de los equipos necesarios para su desarrollo y el material fungible empleado. Para concluir se realizará una recopilación para poder proporcionar un presupuesto global.

Para poder abordar el presupuesto es necesario definir la duración del proyecto, así como las etapas y la mano de obra del mismo.

En cuanto a la duración del proyecto, el periodo total del mismo ha sido de nueve meses.

En lo que respecta a la mano de obra, el proyecto ha requerido la dirección y tutela de un profesor contratado doctor (tutor del proyecto) y el apoyo de un doctorando (director experimental del proyecto), además de la realización del mismo por parte de un becario (autor del proyecto). A todos ellos se les corresponde una tasa horaria específica.

En relación a las fases del proyecto, en una primera etapa se definieron los objetivos del proyecto y los medios para su consecución. Para ello, se requirió la presencia del tutor y del director experimental del proyecto.

La segunda fase consta del desarrollo del proyecto propuesto en la primera fase: una validación experimental inicial y un posterior análisis de sensibilidad frente a algunos parámetros considerados relevantes. Esta etapa, de duración aproximada de nueve meses, ha sido llevada a cabo por un estudiante de ingeniería aeroespacial. Simultáneamente, se realizaban frecuentes reuniones con el fin de desarrollar análisis exhaustivos referentes a los resultados obtenidos.

Con todo esto ya se puede proceder a abordar una estimación del presupuesto que el proyecto conlleva.

Capítulo 2

Balance de presupuesto

Los costes del proyecto se pueden dividir atendiendo a las fases del mismo según costes asociados a las reuniones y costes asociados a la realización del proyecto en sí. Siguiendo esta división de los costes, se procede a realizar su balance.

2.1. Partida de reuniones

Mano de obra, amortización de unos equipos en particular y algunos de los materiales fungibles empleados en el proyecto conforman los gastos asociados a la partida de reuniones. Atendiendo a esto, se procede a realizar las estimaciones correspondientes.

2.1.1. Costes de mano de obra

La mano de obra asociada a este motivo comprende principalmente el coste de un profesor contratado doctor, de un doctorando y de un becario (autor del trabajo), a los cuales les corresponde unas tasas horarias específicas de 50.00 €/h, 25.00 €/h y 15.00 €/h, respectivamente.

Como se ha mencionado, hubo reuniones a lo largo de casi la totalidad del periodo correspondiente al proyecto, cada una de ellas con diferentes integrantes.

El coste de las reuniones referentes al establecimiento de los objetivos, correspondientes a la primera fase, se realizaron al comienzo del proyecto actuando de manera conjunta el profesor contratado doctor y el doctorando durante un tiempo total de 8 h. Dicho coste queda recogido en la tabla 2.1:

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[h]	[€/h]	[€]
Profesor contratado doctor	8	50.00	400.00
Doctorando	8	25	200.00
Subtotal			600.00

Tabla 2.1: Coste de mano de obra asociado a las reuniones de planificación del proyecto

Las reuniones correspondientes a la realización propia del proyecto forman parte de la segunda fase. Estas reuniones se pueden agrupar en varios tipos según las personas que han participado en las mismas.

En primer lugar, el coste asociado a las reuniones entre doctorando y el autor del proyecto a razón de 1 h/semana se muestran en la tabla 2.2.

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[h]	[€/h]	[€]
Doctorando	36	25.00	900.00
Becario	36	15.00	540.00
Subtotal			1440.00

Tabla 2.2: Coste de mano de obra asociado a las reuniones entre doctorando y becario.

En segundo lugar, las reuniones realizadas entre profesor contratado doctor y becario a razón de 1h/mes se muestran en la Tabla 2.3.

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[h]	[€/h]	[€]
Profesor contratado doctor	9	50.00	450.00
Becario	9	15.00	135.00
Subtotal			585.00

Tabla 2.3: Coste de mano de obra asociado a las reuniones entre profesor contratado doctor y becario.

Por último, las reuniones realizadas entre profesor contratado doctor, doctorando y becario a razón de 1h/mes se muestran en la Tabla 2.4.

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[h]	[€/h]	[€]
Profesor contratado doctor	9	50.00	450.00
Doctorando	9	25.00	225.00
Becario	9	15.00	135.00
Subtotal			810.00

Tabla 2.4: Coste de mano de obra asociado a las reuniones entre profesor contratado doctor, doctorando y becario.

Con todo esto, el coste asociado a la mano de obra de la partida de reuniones se puede resumir como muestra la tabla 2.5.

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[h]	[€/h]	[€]
Profesor contratado doctor	26	50.00	1300.00
Doctorando	53	25.00	1325.00
Becario	54	15.00	810.00
Subtotal			3435.00

Tabla 2.5: Coste de mano de obra asociado a la partida de reuniones

2.1.2. Costes de amortización de equipos

La partida de reuniones también lleva asociados unos costes debidos a la amortización de los equipos empleados. Estos equipos o licencias no han sido adquiridos durante y para la consecución de este trabajo por lo que el coste de compra de los mismos no se encontrará incluido, contabilizando únicamente la amortización de los mismos durante el periodo del proyecto. Además, los equipos empleados con este fin son diferentes a los empleados en otras fases del proyecto, en particular el ordenador con sus licencias correspondientes.

Para simplificar el balance se va a suponer que los equipos tienen un periodo de amortización total de 5 años y que el precio mostrado de las licencias, compradas de manera colectiva para la totalidad del Instituto, incluye 5 años de pago.

Estos costes aparecen reflejados en las tablas 2.6 y 2.7.

Concepto	Coste [€]
Ordenador	700.00
Licencias	230.00

Tabla 2.6: Coste de los equipos asociados a la partida de reuniones

Coste equipos	930.00	[€]
Período de amortización	5	[años]
Período amortizado	9	[meses]
Coste anual de amortización	186.00	[€]
Coste mensual de amortización	15.50	[€]
Coste de amortización de los equipos	139.50	[€]

Tabla 2.7: Equipos y coste de amortización de los equipos en la partida de reuniones.

2.1.3. Costes de material fungible

Finalmente, la partida de reuniones queda definida teniendo en cuenta el material fungible empleado en la misma, el cual queda resumido en la tabla 2.8

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[-]	[€/ud]	[€]
Papel	100	0.01	1.00
Bolígrafo	2	0.25	0.50
Subtotal			1.50

Tabla 2.8: Coste del material fungible asociado a la partida de reuniones

Cabe mencionar que estos costes hacen referencia al material que ha sido consumido en su totalidad durante la realización del proyecto, descartando cualquier coste asociado a material con vida útil activa.

2.2. Partida de validación y análisis

El concepto asociado a la validación y análisis comprende el cálculo y su postprocesado, así como la interpretación de datos. Además, requiere de plasmar en documentos las conclusiones obtenidas a partir de los análisis referentes. Tal concepto conlleva unos gastos debidos a la mano de obra, amortización de equipos y material fungible, al igual que la partida de reuniones.

2.2.1. Costes de mano de obra

La mano de obra se corresponde con el trabajo llevado a cabo por el autor del proyecto durante las horas que se estima que ha realizado junto con el doctorando, cuyas horas se estiman como 1 cada 5 realizadas por el becario.

Teniendo en cuenta esto, el coste asociado a la mano de obra se recoge en la tabla 2.9

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[h]	[€/h]	[€]
Doctorando	100	25.00	2500.00
Becario	500	15.00	7500.00
Subtotal			10000.00

Tabla 2.9: Coste de mano de obra asociado a la partida de validación y análisis por parte del doctorando y becario.

2.2.2. Costes de amortización de equipos

El principal programa utilizado para los cálculos es el software OpenWAM de acceso libre, por lo que los costes referentes a esta parte recaen sobre los programas auxiliares empleados para el postprocesado de los cálculos y los equipos utilizados para ello.

Sabiendo lo anterior, los equipos y costes de amortización de los mismos se resumen en las tablas 2.10 y 2.11.

Concepto	Coste
	[€]
Ordenador	600.00
Impresora	80.00
Licencia Grapher 10	490.00
Licencia Microsoft Office 2013	230.00
Licencia Matlab 2012	500.00

Tabla 2.10: Equipos en la partida de realización de la validación y análisis.

Coste equipos	1900	[€]
Período de amortización	5	[años]
Período amortizado	9	[meses]
Coste anual de amortización	380	[€]
Coste mensual de amortización	31.67	[€]
Coste de amortización de los equipos	285	[€]

Tabla 2.11: Amortización de los equipos en la partida de estudio computacional.

2.2.3. Costes de material fungible

Del mismo modo que se ha realizado hasta ahora, los materiales consumidos en esta fase del proyecto se resumen en la tabla 2.12.

Concepto	Unidades	Coste unitario	Importe
	[-]	[€/ud]	[€]
Papel	150	0.01	1.50
Bolígrafo	2	0.25	0.50
Subrayador	3	0.85	2.55
Subtotal			4.55

Tabla 2.12: Coste del material fungible asociado a la validación y análisis.

Capítulo 3

Presupuesto global

Finalmente, se puede calcular el coste global del trabajo en base a todo lo anterior. Este coste global ha de ser tomado como una estimación de lo que implica cumplir los objetivos del proyecto, y se muestra en la 3.1.

Concepto	Coste [€]
Mano de obra (sin IVA)	13435.00
Mano de obra (con IVA)	16256.35
Amortización de los equipos	424.50
Material fungible	6.05
Total	16686.90

Tabla 3.1: Coste total del proyecto aplicado el IVA asociado a la mano de obra.

Cabe destacar que los costes de la mano de obra no incluyen el IVA (21.00 %), mientras que los costes asociados a otros conceptos sí que lo incluyen.

