



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería Mecánica

**Optimización del proceso de combustión
de hidrógeno para su uso en MCI**

Autor:

Tello Perales, Javier

Tutoras:

Reyes Serrano, Miriam

Sastre Zamora, Rosaura

**Departamento de Ingeniería
Energética y Fluidomecánica**

Valladolid, Abril 2024

Resumen breve

Los MCIAs de hidrógeno se presentan como una de las grandes alternativas para sustituir los MCIAs de derivados del petróleo, cuya fabricación será prohibida a partir de 2035 en la Unión Europea. Los estudios experimentales están aún en fases muy tempranas, ya que la técnica y la tecnología actuales presentan deficiencias en cuanto a aplicaciones reales.

La combustión de hidrógeno no produce CO_2 por su naturaleza, pero sí produce otros tipos de emisiones contaminantes. Para cumplir con las normativas de emisiones, se han considerado las opciones de variar el dosado y de utilizar EGR, aunque no se han explorado a fondo los resultados de estas opciones. El presente trabajo realiza una comparación mediante simulaciones de ambas opciones y arroja algunas conclusiones sobre la conveniencia de una u otra técnica en función de las necesidades de cada aplicación.

Palabras clave: MCIAs, Combustión de Hidrógeno, Cámara, Simulaciones cinéticas, Combustibles alternativos

Abstract

Hydrogen burning ICEs seem to be a suitable option as a substitute for oil fueled engines, as manufacturing these engines is going to be forbidden since 2035 in the European Union. Experimental studies are still in early phases, and the development of technique and technology is still poor to study real uses.

The hydrogen combustion does not produce any CO_2 due to its chemistry. Notwithstanding, other pollutants are emitted. Variations on dosage or the use of exhaust gas recirculation (EGR) have been considered to accomplish emissions normatives. This work compares both techniques using simulations and finds conclusions on which option is optimal basing on the needs of each application.

Keywords: ICE, Hydrogen combustion, Cámara, Kinetic Simulation, Alternative fuels

Agradecimientos

A mi tutora *Miriam Reyes* por ofrecerme la oportunidad de contribuir a la investigación y el desarrollo del hidrógeno como combustible alternativo, y por la confianza y trabajo que ha depositado en mí.

A Rosaura, por la ayuda prestada y el conocimiento que me ha aportado en tan poco tiempo.

A mis padres *Javier* y *María Teresa* y mi novia *Ángela* por acompañarme y apoyarme ahora y siempre.

Contenido

Índice de ecuaciones.....	VIII
Índice de figuras	IX
Índice de acrónimos	XII
1. Introducción	1
1.1. Motivación.....	1
1.2. Antecedentes	2
1.3. Objetivos.....	6
1.4. Estructura del documento	7
2. Estado del arte.....	8
2.1. Hidrógeno.....	8
2.2. Reacciones químicas	14
2.3. Combustión	14
2.4. Combustión en MCI.....	18
2.5. Recirculación	19
2.6. Sensibilidad.....	20
2.7. Efecto Soret.....	21
2.8. Eficiencia de combustión	21
3. Metodología	22
3.1. Paquete Anaconda	22
3.2. Cantera.....	23
3.3. Mecanismos cinéticos.....	23
4. Programación simulaciones cinéticas.....	24
4.1. Cantera.....	24
5. Validación de resultados.....	37
5.1. Comparación con Verhelst.....	37
5.2. Comparación con Bourgrine	42
5.3. Comparación con S. Wang.....	45
5.4. Resultados de validación	52
6. Estudio paramétrico: adición de EGR y disminución de dosado.....	53

6.1.	Efecto de la presión y dosado a temperatura constante	56
6.2.	Efecto de la temperatura y dosado a presión constante	64
6.3.	Análisis de resultados del estudio paramétrico.....	70
7.	Cálculo de parámetros.....	80
7.1.	Capacidad calorífica y conductividad térmica	80
7.2.	Reacción principal y energía de activación	83
7.3.	N.º de Lewis y Prandtl	85
7.4.	Viscosidad.....	89
7.5.	Densidad de reactivos	90
7.6.	Densidad de productos.....	92
8.	Conclusiones	94
	Referencias.....	95

Índice de ecuaciones

Ecuación 2.1: Reacción estequiométrica de combustión de Hidrógeno con Oxígeno.....	14
Ecuación 2.2: Reacción de combustión de hidrógeno con aire.....	16
Ecuación 2.3 : Reacción de combustión de hidrógeno con recirculación.....	19
Ecuación 2.4: Cálculo de la sensibilidad	21
Ecuación 2.5: Poder calorífico de la mezcla.....	21
Ecuación 2.6: Eficiencia de la combustión.....	21
Ecuación 4.1:- Número de Lewis.....	29
Ecuación 4.2:- Número de Prandtl	29
Ecuación 5.1 Relación entre lambda y el dosado.....	38
Ecuación 6.1: Relación entre tasa de recirculación y dosado	73
Ecuación 7.1 N.º de Lewis	85
Ecuación 7.2 N.º de Prandtl.....	85

Índice de figuras

Figura 1.1 Imagen del vehículo de de Rivaz. A = Cilindro, B = Bujía, C = Pistón, D = Depósito de hidrógeno, E = trinquete, F Pistón de carga con admisión de aire y válvulas de escape, G = Manilla para pistón de carga.[2].....	1
Figura 1.2 Comparación de usos de motor eléctrico y fuel cell.....	4
Figura 1.3 Imágenes de vehículos propulsados por MCI de hidrógeno: BMW Hydrogen 7 (a) [5], Mazda RX-8 Hydrogen RE (b) [6]	5
Figura 2.1 Comparación de densidades relativas al aire de hidrógeno, gas natural, propano, y vapor de gasolina, de izquierda a derecha [8].....	8
Figura 2.2 Comparación de límites de inflamabilidad al aire de hidrógeno, gas natural, propano, y vapor de gasolina, de izquierda a derecha [8].....	9
Figura 2.3 Comparación de energías mínimas de combustión al aire de hidrógeno, gas natural, propano, y vapor de gasolina, de izquierda a derecha [8]	9
Figura 2.4 Llama producida por hidrógeno y propano a la luz del día (izquierda) y de noche (derecha) [8].....	10
Figura 2.5 Vistas de alzado (a) y planta (b) de una combustión provocada por jet ignition. [referencia].....	12
Figura 2.6 Triángulo de la combustión (ilustración propia)	15
Figura 2.7: Clasificación de los procesos de combustión [16].....	18
Figura 2.8 Esquema del circuito de recirculación en un motor de combustión interna alternativo, [1]	20
Figura 4.1: Extracto del programa de origen.....	25
Figura 4.2: Entrada de parámetros de composición, dosado, temperatura y presión	26
Figura 4.3 a) y b) Inicialización de variables obtenidas y calculadas.....	28
Figura 4.4 :Obtención de variables en cada caso singular	30
Figura 4.5: Obtención de la reacción crítica y la energía de activación.....	31
Figura 4.6 Estudio de sensibilidad para mezcla a 900K a 40 bar a), b), c), d) y 80 bar d), e), f), g.....	35
Figura 5.1: Velocidad de combustión respecto dosado. Comparación con resultados obtenidos por Verhelst.....	38
Figura 5.2: Velocidad de frente de llama respecto de Temperaturas (a) y de presiones (b).....	40
Figura 5.3: Velocidad de frente de llama frente a dosado. Resultados comparados entre obtenidos por Cantera y según estudio de Bourgrine. T= 300K P=1 bar.....	43
Figura 5.4: Estudio de sensibilidad para dosado 1, 0% recirculación, 300K, 1 bar. Resultados según Cantera (a) y Bourgrine (b).....	44
Figura 5.5 Comparación de resultados de velocidad de combustión en función de la cantidad de dilución	46

Figura 5.6 Comparación de resultados de temperatura de combustión en función de la cantidad de dilución	47
Figura 5.7 Comparación de resultados de emisiones de NO en función de la cantidad de dilución	49
Figura 5.8 (a) Comparación de resultados de emisiones de H ₂ de combustión en función de la cantidad de dilución y (b) zoom en los resultados de S. Wang	50
Figura 6.1: Velocidad de la llama en función de dosado composición. Ensayos a 900K y varias presiones	57
Figura 6.2: Temperatura adiabática de llama para (a) diversas presiones a 900K y (b) diversas temperaturas a 60 bar	58
Figura 6.3 :Emisiones de NO en función de dosados a 900K y diferentes presiones.....	60
Figura 6.4 :Emisiones de NO ₂ para distintos dosados a 900K y distintas presiones.....	60
Figura 6.5 :Emisiones de OH para distintos dosados a 900K y distintas presiones.....	62
Figura 6.6 :Emisiones de H ₂ inquemado para distintos dosados a 900K y distintas presiones	62
Figura 6.7 :Emisiones de H ⁺ inquemado para distintos dosados (a) 900K, distintas presiones y (b) 60 bar y diversas temperaturas	63
Figura 6.8 Velocidad de la llama en función de dosado composición. Ensayos a 60 bar y varias temperaturas	64
Figura 6.9: Temperatura adiabática de llama para diversas temperaturas a 60 bar.....	65
Figura 6.10 :Emisiones de NO para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas	66
Figura 6.11 :Emisiones de NO ₂ para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas	67
Figura 6.12 :Emisiones de OH para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas	68
Figura 6.13 :Emisiones de H ₂ inquemado para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas	68
Figura 6.14: Emisiones de H ⁺ inquemado en función del dosado a 60 bar y diversas temperaturas	69
Figura 6.15 Emisiones de NO y NO ₂ , velocidad de combustión y temperatura de llama en función de dosado y recirculación para combustión a 550K y 60 bar. Valores totales (a) y cociente entre resultados con dosado y con recirculación (b).....	71
Figura 6.16 Emisiones de NO _x a 900K para distintas presiones en comparación con el límite impuesto por la normativa Euro VI.....	73

Figura 6.17: Relación entre recirculación y dosado para velocidades de combustión iguales.....	74
Figura 6.18 Valores de EGR equivalentes a dosado en temperatura adiabática de llama (a), emisiones de NO (b), de NO ₂ (c) y OH (d)	76
. Figura 6.19: Comparación de emisiones y temperaturas de llama adiabáticas para combustiones a 60 bar, 900K para velocidades de combustión iguales	78
Figura 6.21: Comparación de emisiones en combustión de 100% H ₂ o EGR en función de la fracción molar inicial de H ₂ . Ensayos a temperatura 900K y presión 60 bar.....	79
Figura 7.1 Capacidad calorífica (a) y conductividad térmica (b) a 900K en función de dosado, presión y EGR.....	81
Figura 7.2: Capacidad calorífica (a) y conductividad térmica (b) a 60bar en función de dosado, temperatura y EGR.....	82
Figura 7.3 : Reacción principal y su energía de activación en función de dosado y (a) diversas presiones con temperatura 900K, (b) distintas temperaturas a 60 bar	84
Figura 7.4 N.º de Prandtl (a) y de Lewis (b) a 900K en función de dosado y presión	87
Figura 7.5 N.º de Prandtl (a) y de Lewis (b) a 60 bar en función de dosado y temperatura.....	88
Figura 7.6 Viscosidad de la mezcla tras la combustión para 900K (a) y 60 bar (b)	90
Figura 7.7 Densidad de la mezcla antes de la combustión para 900K (a) y 60 bar (b).....	91
Figura 7.8 Densidad de la mezcla tras la combustión para 900K (a) y 60 bar (b)	93

Índice de acrónimos

EGR	<i>Exhaust Gas Recirculation</i> – Recirculación de Gases de Escape
MCIA	Motor de Combustión Interna Alternativo
C _p	Capacidad calorífica a presión constante
k	Conductividad térmica
H ₂	Hidrógeno (gas)
NO _x	Nitróxidos
NO	Monóxido de nitrógeno
NO ₂	Dióxido de nitrógeno
O ₂	Oxígeno (gas)
N ₂	Nitrógeno (gas)
OH	Hidróxido
E _a	Energía de activación
λ	Lambda. Inverso de phi
φ	Dosado. Fracción molar de fuel sobre comburente
MHV	Mixture heating value
η	Eficiencia

1. Introducción

1.1. Motivación

El motor de combustión de interna alternativo de hidrógeno, objeto de estudio del presente trabajo, tiene la apariencia de ser una idea muy nueva y revolucionaria. Sin embargo, estudiando la historia descubrimos que el hidrógeno fue el combustible del primer MCI, desarrollado por François Isaac de Rivaz en 1807 [1]. Este motor fue inventado buscando una alternativa a las turbinas de vapor, las cuales mostraban problemas cuando trataban de integrarse en la idea de un vehículo autónomo. Se observa un boceto de dicho vehículo en la Figura 1.1

Vemos de esta forma que los vehículos, los MCI y el hidrógeno como combustible tuvieron un origen común hace más de 200 años, y ahora parece que sus caminos se unen de nuevo.

En este TFG se tratará de aportar herramientas para el estudio de la combustión del hidrógeno, y se realizará análisis de la combustión de hidrógeno en distintos casos tratando de aportar conclusiones acerca de cómo afectan distintas condiciones a dicha combustión.

De esta forma, la motivación es apoyar a la investigación y el desarrollo del uso del hidrógeno como combustible, el cual parece hoy en día que es una de las grandes alternativas a los combustibles derivados del petróleo.

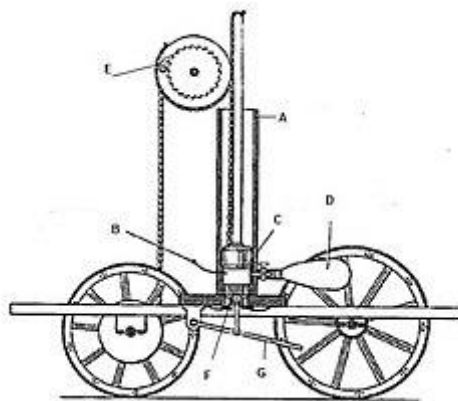


Figura 1.1 Imagen del vehículo de de Rivaz. A = Cilindro, B = Bujía, C = Pistón, D = Depósito de hidrógeno, E = trinquete, F Pistón de carga con admisión de aire y válvulas de escape, G = Manilla para pistón de carga.[2]

1.2. Antecedentes

. Tras numerosos estudios acerca de la situación medioambiental actual y la futura disponibilidad de recursos naturales, se ha demostrado una alta cantidad de compuestos presentes en el aire originados por la actividad humana. Una de las diferentes consecuencias de esto es la contaminación del aire tanto a nivel de suelo como en las capas más superiores de la atmósfera. Esta contaminación afecta profundamente a la salud humana con distintos problemas y enfermedades. También afecta gravemente a toda la biosfera, conformando así un grave problema mundial y un obstáculo para la supervivencia de un gran número de especies, incluyendo en última instancia la de los propios humanos.

Con la Primera Revolución Industrial, la contaminación atmosférica comenzó a crecer exponencialmente tras haberse mantenido en niveles estables y poco tóxicos para la mayoría de las especies. La invención de la máquina de vapor y su rápida popularización conllevó un enorme aumento del uso de combustibles como el carbón, anteriormente utilizados solo con fines lumínicos, como fuentes de calor simples para cocinas y otros usos poco intensivos. La creciente escalada de las nuevas máquinas condujo al crecimiento de emisiones de sustancias como CO, cuyos efectos nocivos no tardaron en hacerse notar en la salud de los trabajadores de las fábricas.

Las medidas para preservar la salud de los trabajadores en los lugares donde se realizaban estas combustiones comenzaron a llegar, pero no se incidió en a donde llegaban estas emisiones cuando salían de las fábricas o los vehículos. A finales del siglo XX, los esfuerzos de investigadores y divulgadores científicos comenzaron a calar en la población, quien empezó a darse cuenta de la causa de algunas enfermedades y la de la destrucción de ecosistemas y de paisajes: Las emisiones contaminantes.

Tras la máquina de vapor, la tecnología fue mejorando en busca de mayores eficiencias energéticas, potencias más grandes y aplicaciones a distintos sectores. Una de las derivadas de la máquina de vapor es el motor de combustión interna alternativo (MCI). Entre sus ventajas destaca su proporción peso-potencia, haciéndolo la opción óptima para vehículos. El MCI transforma energía química contenida en un fluido combustible en trabajo que puede utilizarse para mover ruedas o hélices.

La situación medioambiental ha llevado a las autoridades competentes a buscar métodos para disminuir las emisiones contaminantes. Para ello, distintos organismos como la Unión Europea internacionales han fijado

distintas bases y objetivos a corto plazo tratando de conseguir una huella de carbono neutral en 2050. Una de estas bases es la prohibición desde 2035 de la venta en países de la UE de vehículos nuevos que en su uso produzcan emisiones de carbono. Esto conlleva la prohibición de la fabricación de nuevos motores que utilicen gasolina o diésel a partir de ese año, por lo que es una prioridad el desarrollo de nuevas tecnologías para suplir estos motores.

Como alternativa a los MCIAs de derivados de petróleo, se está trabajando en 3 alternativas. Estas son el motor eléctrico, la pila de combustible y el MCI de hidrógeno. Observamos en la Figura 1.2 el rango de aplicación de motor eléctrico y fuel cell. Mientras que el motor eléctrico es óptimo para desplazamientos cortos y de carga ligera, la fuel cell es indicada para trayectos medios y con cargas ligeramente mayores. Como vemos en la imagen, el motor eléctrico es perfecto para ciclomotores, motocicletas o automóviles pequeños y ligeros para uso urbano. La pila de combustible sería más recomendable en caso de desplazamientos de distancia media o desplazamientos cortos, pero de vehículos algo más pesados.

El rango de aplicación óptimo de MCI de hidrógeno sería para vehículos más pesados tales como aviones y barcos, aunque también incluiría vehículos terrestres pesados como camiones y ferrocarriles [3]. La principal ventaja del MCI de hidrógeno frente a la pila de combustible y el motor eléctrico es su capacidad para dar mayor autonomía y potencia.

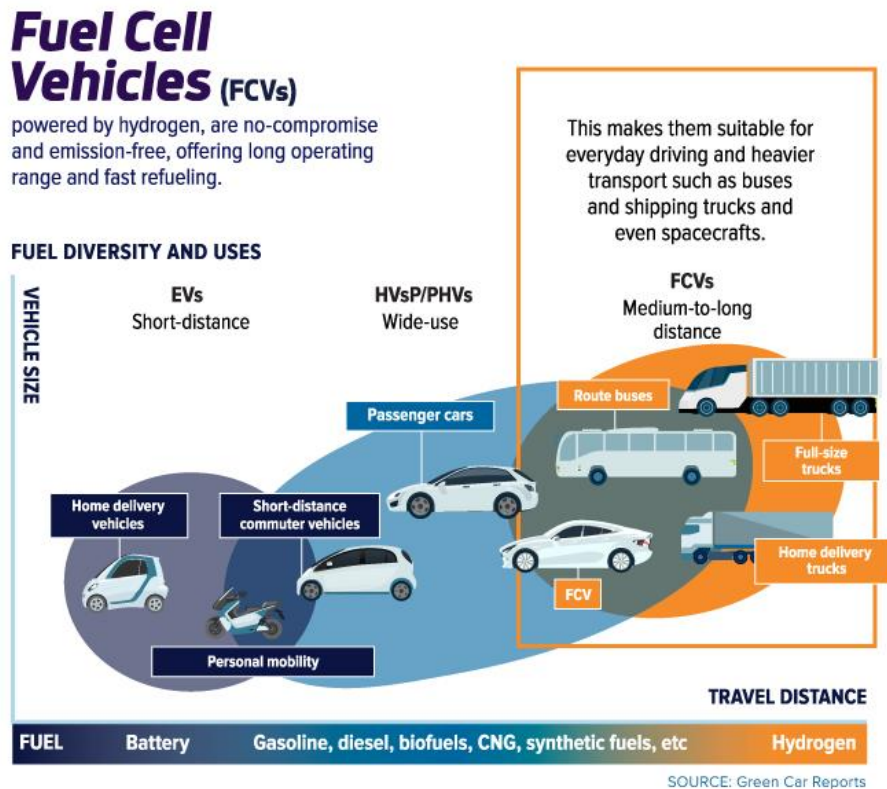
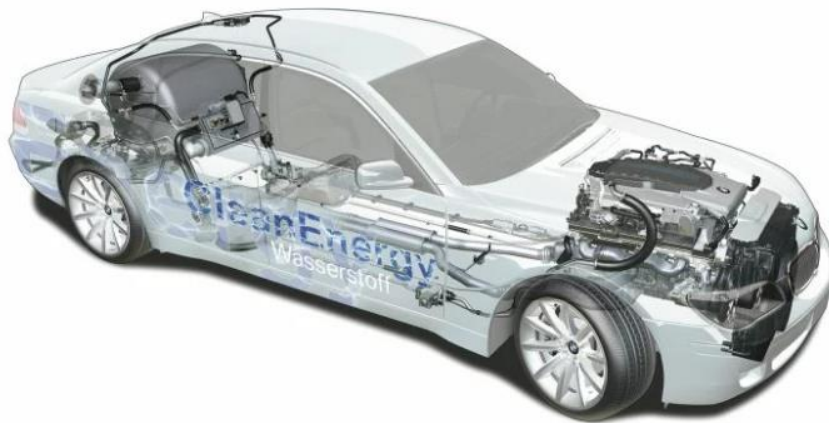


Figura 1.2 Comparación de usos de motor eléctrico y fuel cell [3]

La tecnología que concierne a este trabajo es la de la utilización de hidrógeno (H_2) como combustible alternativo en motores de combustión interna alternativos. Esta tecnología es una gran alternativa para disminuir las emisiones tal como se pretende. Sin embargo, se encuentra aún en fase muy temprana de desarrollo. Las empresas están comenzando a plantear su diseño y fabricación y se encuentran aún ante desafíos acerca de su configuración.

La idea de usar hidrógeno en MCI no es nueva. La historia nos remonta al siglo XIX, donde ya se desarrollaron el primer MCI, que funcionaba a base de hidrógeno, y los primeros motores de gas a base de hidrógeno. Sin embargo, eran menos eficientes que los combustibles fósiles y el hidrógeno es más difícil de almacenar. En la primera mitad del siglo XX también se investigó el hidrógeno como combustible. La motivación vino de la preocupación por perder acceso a combustibles fósiles por culpa de la complicada situación geopolítica. En varias ocasiones durante la segunda mitad del siglo XX se ha vuelto a investigar e incluso desarrollar vehículos a base de hidrógeno. Durante el siglo 21 se han comercializado más de 180 vehículos que utilizan hidrógeno como combustible [4]. Observamos algunos de estos vehículos en la



(a)



(b)

Figura 1.3 Imágenes de vehículos propulsados por MCIA de hidrógeno: BMW Hydrogen 7 (a) [5], Mazda RX-8 Hydrogen RE (b) [6]

El escaso éxito de los MCIA de hidrógeno viene provocado por el desarrollo pobre de la tecnología necesaria.

La experimentación con MCIA de Hidrógeno es aún muy complicada, dado que no existen modelos comerciales o de referencia. Algunas condiciones como las

altas presiones de entrada son aún difíciles de conseguir en entornos experimentales. Pero gracias a las simulaciones cinéticas y a programas como Cantera, se puede estudiar el efecto de presiones, temperaturas y composiciones, entre otros, ahorrando gran cantidad de tiempo y recursos. De esta forma, se pueden diseñar ensayos experimentales específicos ahorrando gran cantidad de iteraciones, como podrían ser composiciones o presiones no adecuadas, no favorecedoras o que ni siquiera pudiesen conseguir la combustión.

1.3. Objetivos

El objetivo principal de este TFG consiste en caracterizar la combustión de hidrógeno en condiciones reales de funcionamiento de un motor de combustión interna haciendo uso de un software de simulación del proceso de combustión, estudiando el efecto de la adicción de EGR con el de la disminución de dosado en condiciones de motor.

Para caracterizar el proceso de combustión se procederá a simular cinéticamente la combustión de hidrógeno mediante el software Cantera y haciendo uso de Python.

Se utilizarán presiones y temperaturas de motor, similares a las teóricas para un MCI de hidrógeno, para obtener resultados extrapolables al motor.

Para conseguir este objetivo se caracterizará la combustión de hidrógeno a través de la velocidad de combustión, temperatura adiabática de llama y emisiones durante dicho proceso, validando con otros resultados. También se analizarán otros parámetros que caracterizan la combustión, aunque son de menor importancia.

Se compararán los resultados con los obtenidos en otros estudios con el objetivo de demostrar si Cantera es una herramienta que arroja resultados válidos, y si puede ahorrar enormes cantidades de tiempo, trabajo y capital.

Además, se tratará de encontrar porcentajes de EGR y dosados de funcionamiento que ayuden a reducir las emisiones de contaminantes como NO_2 , NO y OH tratando de mantener otras propiedades para una correcta combustión.

Se estudiará a qué parámetros favorece y cuales empeora el uso de EGR, y en que proporciones es óptimo el uso de EGR.

1.4. Estructura del documento

Para conseguir los objetivos anteriormente detallados se ha realizado esta memoria de TFG que se estructura en siete capítulos que se describen a continuación:

1. Introducción y objetivos
 - Descripción de la motivación y finalidad del documento
2. Estado del arte
 - Términos y conceptos considerados necesarios para la comprensión del documento
3. Metodología
 - Descripción de los programas y aplicaciones utilizados
4. Programación
 - Descripción exhaustiva del funcionamiento del programa de simulaciones cinéticas
5. Validación
 - Comparación de resultados con otros autores y discusión de la validez de resultados obtenidos mediante el programa de simulaciones cinéticas propuesto
6. Estudio paramétrico
 - Muestra y análisis de resultados obtenidos con simulaciones mediante el programa de simulaciones cinéticas propuesto
7. Conclusiones
 - Análisis resumiendo las conclusiones obtenidas del presente trabajo

2. Estado del arte

2.1. Hidrógeno

El hidrógeno es un elemento químico formado por un protón, un electrón y 0, 1 ó 2 neutrones, aunque el isótopo más común es el que no tiene neutrones, llamado protio. La unión de dos átomos de hidrógeno da lugar a moléculas gaseosas que llevan el mismo nombre, hidrógeno. Aunque en algunos artículos se habla de este gas como dihidrógeno, hidrógeno molecular, o hidrógeno gaseoso, la denominación más común es hidrógeno. Cuando se mencione el hidrógeno en el presente trabajo se referirá a su forma como molécula gaseosa a partir del presente apartado, siempre que no se indique explícitamente lo contrario.

2.1.1. *Propiedades del hidrógeno*

El hidrógeno destaca frente a los combustibles actuales derivados de la gasolina por su alto poder calorífico, siendo aproximadamente de 3 veces mayor que el de la gasolina o el diésel, su alta difusividad másica y baja densidad[7].

Su densidad es de 0.07 veces la del aire. Se ilustra en la Figura 2.1 una comparación de la densidad del hidrógeno frente a otros combustibles, mostrando la muy baja densidad del hidrógeno frente a otros combustibles.

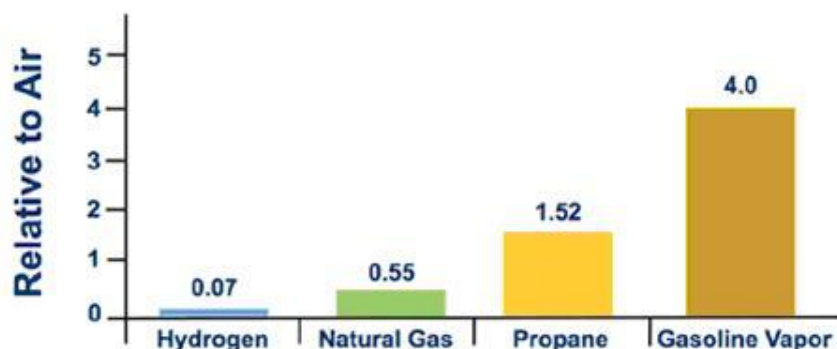


Figura 2.1 Comparación de densidades relativas al aire de hidrógeno, gas natural, propano, y vapor de gasolina, de izquierda a derecha [8]

Los límites de inflamabilidad son las concentraciones más alta y baja entre las cuales una mezcla de gas y aire es inflamable. En el caso del hidrógeno, sus límites de inflamabilidad son 4% y 75% en volumen. Se ilustran en la Figura 2.2 los límites de inflamabilidad del hidrógeno comparados con los de otros combustibles convencionales. Se observa en la figura el amplio rango que tienen estos límites en el hidrógeno frente a los rangos de otros combustibles.

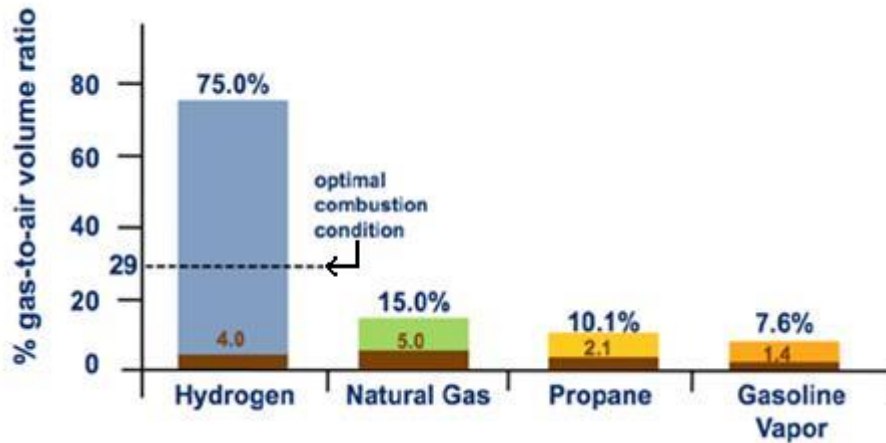


Figura 2.2 Comparación de límites de inflamabilidad al aire de hidrógeno, gas natural, propano, y vapor de gasolina, de izquierda a derecha [8]

La energía mínima de combustión se define como la energía mínima que debe aportarse a una atmósfera para que en esta se produzca ignición. Esta energía puede ser aportada por chispas o en forma de calor. La energía mínima de combustión del hidrógeno es de hasta 1/10 la de otros combustibles, aunque en concentraciones bajas el valor se acerca a 0.25 mJ, valor similar al de otros combustibles comunes. Se observa la baja energía mínima de combustión en la Figura 2.3.

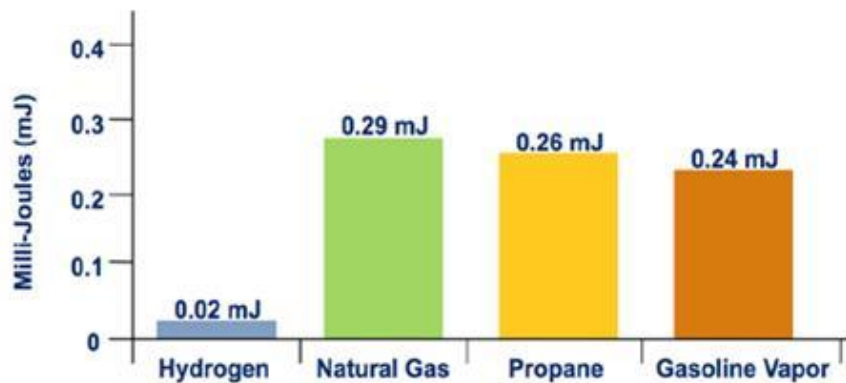


Figura 2.3 Comparación de energías mínimas de combustión al aire de hidrógeno, gas natural, propano, y vapor de gasolina, de izquierda a derecha [8]

La velocidad de combustión en el aire es aproximadamente 6 veces superior a la velocidad de combustión del propano y del metano en condiciones similares. Su llama es prácticamente invisible a la luz del día, presentando un brillo azul pálido tenue en la oscuridad. [7], [8], [9]. Se puede observar el comportamiento de la llama del hidrógeno comparado con la de propano en la Figura 2.4.

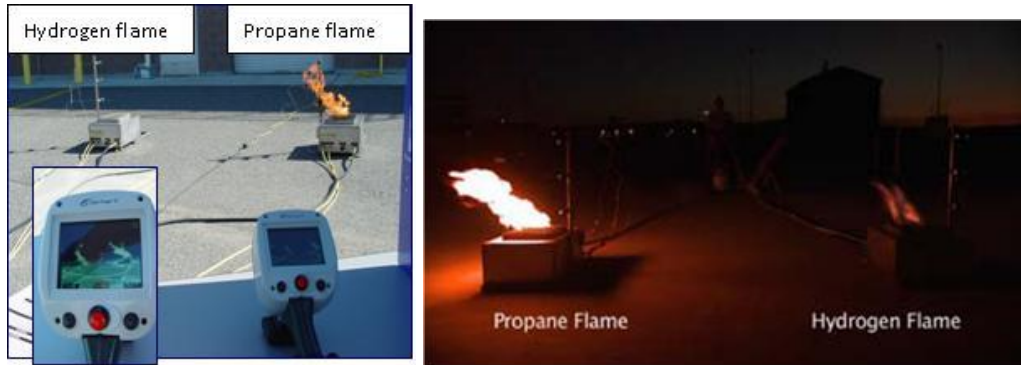


Figura 2.4 Llama producida por hidrógeno y propano a la luz del día (izquierda) y de noche (derecha) [8]

La baja densidad del hidrógeno provoca que para almacenarlo sea necesario comprimirlo. En un depósito de 1000 litros a condiciones atmosféricas lleno de hidrógeno, no encontraríamos más que 44 gramos de este gas. Según las estimaciones actuales, en un escenario verosímil para un MCI de hidrógeno se ha de comprimir el hidrógeno a 350 bar. Esta es una masa de aproximadamente 850 gramos si el depósito es de 60 litros.

La alta difusividad másica del hidrógeno presenta frecuentemente un problema. Los átomos de hidrógeno son en esencia tan solo un protón y un electrón. Dichos átomos son por tanto los más pequeños que pueden existir. En caso de tener hidrógeno almacenado en un tanque, este escapa gradualmente del tanque, debido al mencionado tamaño de los átomos de hidrógeno. Uno de los problemas del hidrógeno tiene que ver con ambas propiedades. El hidrógeno debe ser comprimido por su densidad tan baja, pero esto provoca que su difusividad aumente y que parte del hidrógeno escape del depósito.

2.1.2. Hidrógeno como combustible

En la actualidad la investigación para movilidad terrestre está desarrollando nuevas tecnologías para aportar energía a los vehículos. Estas nuevas tecnologías buscan la descarbonización de la movilidad y una disminución en emisiones nocivas para el ser humano y el medio ambiente. Algunas de las tecnologías con las que más se está trabajando son los motores eléctricos, la pila de combustible y los MCIA de hidrógeno.

Mientras ya existen modelos comerciales de vehículos con motores eléctricos, las otras dos tecnologías mencionadas se encuentran en fases de desarrollo más tempranas. En el caso del MCIA de hidrógeno existen aún algunos problemas a resolver relacionados con la alta presión que necesita este combustible para su almacenamiento o combustión, aumentar la producción de hidrógeno debido a la alta demanda futura, y crear infraestructuras extensivas para el transporte de este combustible.[10], [11], [12].

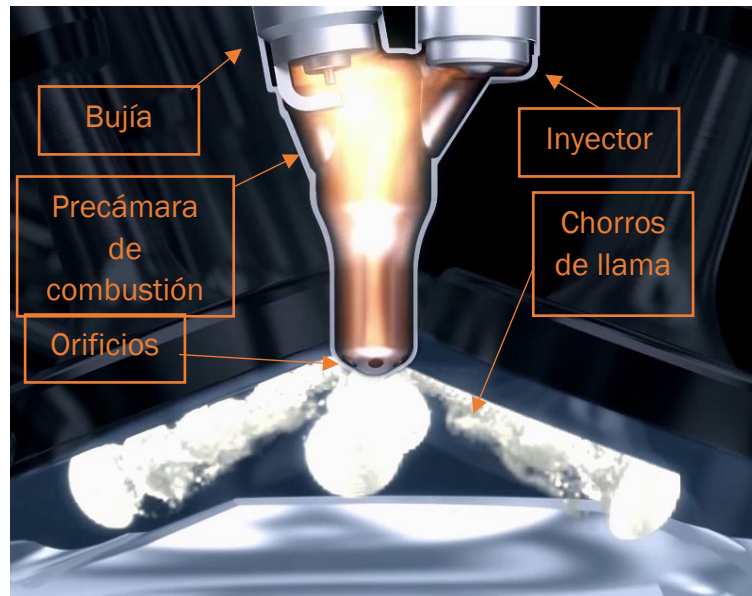
2.1.3. Inyección en MCIA de hidrógeno

La investigación en los últimos años con MCIA de hidrógeno ha llevado a considerar como una mejor alternativa la inyección directa. [13] Los estudios experimentales con MCIA de hidrocarburos adaptados a hidrógeno muestran que con inyección indirecta premezclada la diferencia de densidades entre el aire y el hidrógeno provoca una mezcla mala y estratificada, provocando una combustión ineficiente y una densidad energética del hidrógeno inferior a la de gasolina o diésel. Con inyección directa, sin embargo, se evitan estos problemas en la mezcla, pudiendo obtenerse resultados mucho más favorecedores. La combinación de inyección directa y combustión por compresión ha mostrado también resultados con eficiencias similares a las de los motores de diésel.

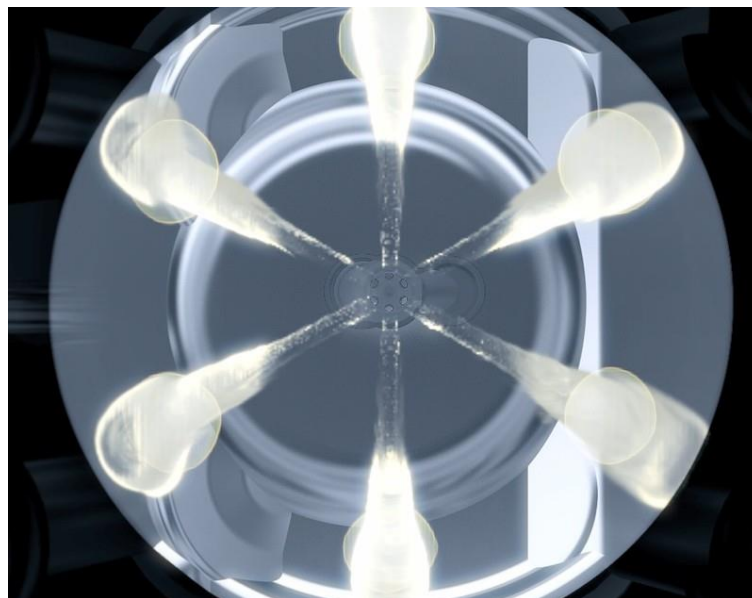
2.1.4. Ignición en MCIA de hidrógeno

La técnica jet ignition ha surgido como una alternativa al encendido tradicional que presentan los motores de gasolina. Se ilustra la jet ignition en la Figura 2.5. Esta técnica incorpora una precámara de combustión insertada en la cámara de combustión del cilindro. Esta precámara consiste en un volumen cerrado, con 4, 5, 6 u 8 pequeños orificios que comunican con la cámara de combustión. La precámara de combustión está conectada con una bujía convencional y con la inyección de combustible. Cuando el combustible es inyectado, se acciona la bujía, por lo que la chispa provoca una primera ignición en el seno de la

precámara de combustión. Dado el rápido aumento de presión, la llama escapa por los orificios, pero a gran velocidad, en forma de jets o chorros. Estos chorros se prolongan diametralmente por la cámara de combustión. Cuando la llama de estos chorros se expande, provoca que la combustión sea más homogénea en la cámara. [14]



(a)



(b)

Figura 2.5 Vistas de alzado (a) y planta (b) de una combustión provocada por jet ignition. [referencia]

Los estudios más recientes muestran que el uso de jet ignition mejora la combustión. Esta también ha sido aplicada a MCI de hidrógeno, permitiendo mejorar los resultados de eficiencia. Distintas tecnologías están siendo desarrolladas y probadas. Entre ellas están la criogenización del combustible, el uso de inyección directa o indirecta, mejoras en el sistema de jet ignition, la optimización de la refrigeración del motor, ignición híbrida por compresión y jet, inyección híbrida indirecta y directa y uso de alta presión en la inyección.

El uso de software de simulaciones cinéticas, entre ellos cantera, puede facilitar estos estudios. Se pueden obtener resultados para prever las configuraciones óptimas para algunas de estas tecnologías, ya que se pueden modificar la presión, el tipo de ignición, la temperatura, la mezcla, y otras variables. De esta forma puede ahorrarse mucho tiempo y capital en investigaciones.

2.1.5. Actualidad de MCI de Hidrógeno y uso de EGR

Investigaciones actuales sobre el MCI de hidrógeno proyectan resultados muy interesantes. Parámetros como la eficiencia se encuentran ya cercanos al 40%, valores muy similares a los actuales motores de combustión de diésel y gasolina. Nos indican por tanto que este nuevo combustible sería ya igual de eficiente que los utilizados actualmente, abriendo la posibilidad de que sea en un futuro un combustible mucho más eficiente si se aplican tantos años de experiencia y desarrollo a este como se han dedicado a los derivados del petróleo [11], [15]. Algunos artículos reflejan estas posibilidades de aumentar la eficiencia, mencionando también ensayos en los que se han conseguido resultados mayores al 42% [12].

Aunque las emisiones de CO₂ desaparecen debido a la química de la combustión del hidrógeno, los NO_x siguen presentes. El alto poder calorífico, del hidrógeno provoca altas temperaturas al ser quemado, las cuales propician la formación de compuestos NO_x. Para evitar las altas temperaturas, se han propuesto actualmente dos alternativas: La introducción de recirculación de gases de escape (EGR, por sus siglas en inglés) o la reducción del dosado. Algunos artículos comparan ambas alternativas [12], mencionando que la disminución del dosado proporciona además una reducción de las pérdidas térmicas. Otros indican que el aumento de EGR también favorece la disminución de pérdidas de calor [11]. Diversos artículos señalan también el efecto favorable de la recirculación para disminuir las emisiones de NO_x [15].

Se observa por tanto que el uso de EGR produce disparidad de opiniones, por lo que se tratarán de clarificar en este trabajo los efectos de su uso.

2.2. Reacciones químicas

Una reacción química es un proceso en el cual ciertos compuestos iniciales llamados “reactivos” se transforman en otros llamados “productos”. Una extensa cantidad de reacciones son reversibles, por lo que una reacción no indica una transformación permanente.

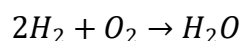
Las reacciones químicas suceden al entrar en contacto moléculas de distintos compuestos. La facilidad para entrar en contacto depende de las condiciones de presión, temperatura y concentración, entre otras. Estas condiciones aportan a las moléculas cierta energía. Las condiciones críticas para que se dé una reacción no dependen de valores concretos de las condiciones en las que se encuentra la mezcla, si no del conjunto de estas condiciones a través de su energía en conjunto. A esta energía crítica la llamamos energía de activación (E_a)

Dado que algunas reacciones son reversibles, la energía de activación de una reacción y la de su reversa son iguales con signo opuesto. La que lleva signo negativo indica que esa reacción sucede de manera espontánea, es decir, sin necesidad de aporte de ningún tipo de energía.

2.3. Combustión

Entre las diferentes clases de reacciones químicas, el presente trabajo fija su principal atención en las de combustión. Las reacciones de combustión se caracterizan por la presencia de un hidrocarburo llamado combustible reacciona con otro compuesto llamado comburente que aporta oxígeno y entre los productos aparecen CO_2 y/o H_2O . Otra característica importante de la combustión es que presente altas velocidades de reacción y es exotérmica, es decir, cede energía calorífica al sistema en el que se encuentra.

En el presente trabajo, la reacción de combustión a estudiar es la que sigue:



Ecuación 2.1: Reacción estequiométrica de combustión de Hidrógeno con Oxígeno

Para que se presente una combustión, son siempre necesarios 3 agentes:

- **Combustible**
 - Elemento que se oxida. Generalmente, caracteriza la combustión en cuanto a cantidad de energía exotérmica, masa de comburente necesario, temperaturas de combustión, productos, etc.
- **Comburente**
 - Elemento que cede átomos de oxígeno. En la mayoría de los casos, aire u oxígeno purificado. También otros compuestos son utilizados ocasionalmente como comburentes: Lejías, agua oxigenada, sales de permanganato, sulfoxidos, etc. La cantidad de comburente en relación con la cantidad necesaria según la relación estequiométrica caracteriza la combustión en relación con temperaturas de combustión, eficiencia y otros factores.
- **Ignición**
 - La combustión necesita ser provista de una energía de activación para suceder. Según las condiciones de contorno, puede ocurrir la autoignición, como en el caso del diésel al comprimirlo a altas temperaturas, o ser necesaria una chispa o llama generada mediante otro componente, caso de los motores de gasolina. Los tipos de ignición se explicarán con detalle a continuación.

Observamos en la Figura 2.6 el esquema de los agentes necesarios para la combustión.

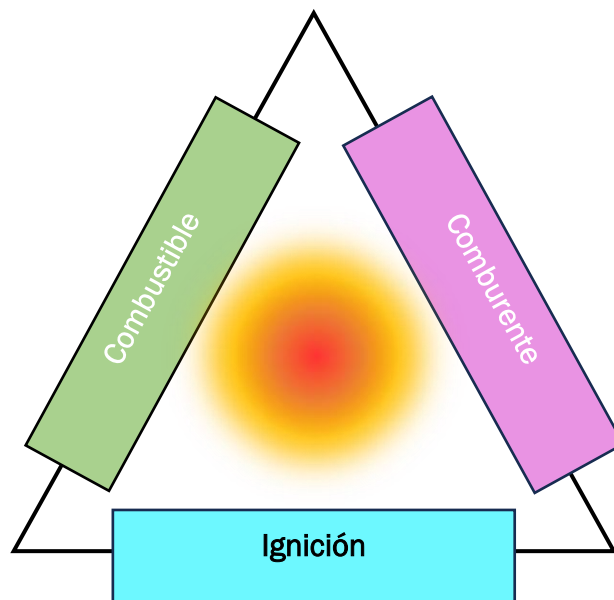
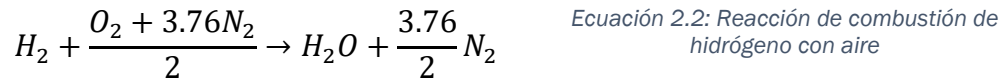


Figura 2.6 Triángulo de la combustión (ilustración propia)

2.3.1. Oxidación del combustible

Dado el elevado coste de obtener oxígeno diatómico puro a gran escala, se utilizan en la mayoría de las reacciones otros componentes. Uno cuyo uso es ampliamente extendido y de muy sencilla obtención es el propio aire, el cual es una mezcla compuesta por un 78% de Nitrógeno, 21% de oxígeno e impurezas de composición y concentración variable

Dada la facilidad de obtención del aire y su uso como comburente, el presente trabajo es otro ejemplo de la utilización de este compuesto. Se modifica la reacción principal, por tanto, dando lugar a la siguiente reacción química:



Sin embargo, esta no es la única reacción que ocurre durante la combustión. El caso real es la activación de una gran variedad de reacciones químicas distintas. En el caso de los motores de combustión interna hay que prestar especial atención a compuestos tóxicos como NO_x y OH. Las altas temperaturas favorecen la formación de los compuestos NO_x. Uno de los objetivos del presente trabajo será relacionar la recirculación y la cantidad de esta con la formación de estos compuestos.

2.3.2. Tipos de combustión

Atendiendo a distintos parámetros, se pueden clasificar los procesos de combustión de distintas formas. Se realizará una breve descripción de estas para entender en qué casos se centra el presente trabajo.

- **Combustión generalizada o autoencendido:** Un volumen diferencial se encuentra bajo las mismas condiciones en un instante dado en este proceso caracterizado por una discontinuidad temporal pero no espacial. Ningún agente externo (ninguna ignición) es responsable del inicio de la combustión, y la última fase de la combustión es increíblemente rápida y exotérmica, por lo que puede identificarse como una explosión.

Cuando las condiciones de la mezcla se elevan a condiciones de presión y temperatura que superan el umbral de autoencendido y el combustible

es un hidrocarburo de cadena corta (metano, benceno, benceno) se produce este fenómeno.

Tras un tiempo de retraso o inducción sucede la explosión o autoencendido de la mezcla.

- Combustión localizada. En este caso la discontinuidad es espacial y no temporal. Es necesario aplicar una ignición externa que actúa como fuente, que produce un frente de llama que progresa. El tipo de discontinuidad determina la clase de combustión localizada:
 - Combustión localizada con discontinuidad de presión. Proceso de combustión con velocidad de propagación de la llama del orden de la velocidad del sonido en la que no se puede considerar homogeneidad de presiones, obligando a tener en consideración la onda de choque generada. La causa general de este tipo de combustión en motores de encendido provocado es una combustión anómala. Este fenómeno se denomina detonación
 - Combustión localizada con discontinuidad de temperatura. Combustión en la que se considera que las variaciones de presión se transmiten de forma instantánea debido a velocidades de propagación de la llama considerablemente más bajas que la velocidad del sonido. Se halla una discontinuidad de temperatura en el frente de llama, que se mantiene por la energía liberada por la combustión. Este fenómeno se denomina deflagración. Se puede clasificar según mezclas homogéneas o heterogéneas, llamadas combustión premezclada o combustión por difusión respectivamente. Ambas pueden ser laminares o turbulentas

En la combustión por difusión el combustible y oxidante se mezclan en el punto en el cual ocurre la combustión. Este tipo de combustión puede dividirse en función de las fases iniciales de los reactivos, gas/gas o líquido/gas. [16]

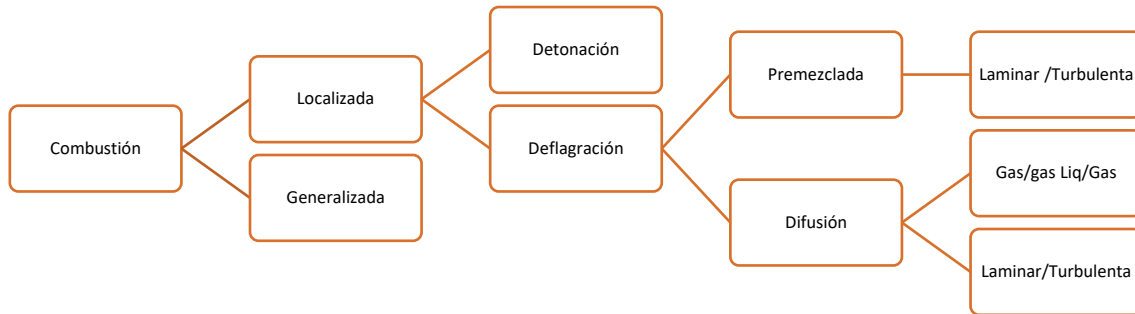


Figura 2.7: Clasificación de los procesos de combustión [16]

2.4. Combustión en MCIA

2.4.1. Propagación de la llama

El proceso de quemado del combustible en un motor de combustión interna (MCIA) ocurre en un periodo de tiempo muy corto. La llama puede conseguirse mediante el calentamiento y compresión de un compuesto gaseoso hasta su punto de autoinflamación.

La propagación del frente de llama es un parámetro importante en la combustión, del que dependen muchas características del motor. El que nos concierne es la velocidad de combustión. Cuanto mayor sea la velocidad de combustión, menores son los contaminantes de HC emitidos. La velocidad de propagación depende de la composición. Según

La velocidad de propagación de la llama depende en gran medida de la presencia y cantidad de 5 elementos químicos: carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre.

La velocidad de propagación del frente de llama depende también de la temperatura de reactivos y productos, la presión de la mezcla, la difusividad

térmica y el calor específico de los inertes, del dosado relativo, de la estructura molecular, de aditivos y de otros factores como tasa de stretch y celularidad.

2.4.2. Tasa de stretch

Se puede traducir como tasa de expansión o estiramiento de la llama. Se define como la lagrangiana del logaritmo del área A_t de un elemento diferencial de superficie del frente de llama [16]. Puede entenderse como la velocidad de crecimiento de la superficie de la llama. Una tasa de stretch nula corresponde a un frente de llama que no está en movimiento, mientras que una tasa de stretch positiva indica que el radio del frente de llama está aumentando con el tiempo.

La tasa de stretch no puede ser aplicada a simulaciones cinéticas. Esto se debe a que es una consecuencia de irregularidades de la llama, inestabilidades de esta o del entorno y característica de llamas turbulentas. Las simulaciones cinéticas solo tienen en su alcance a las llamas laminares.

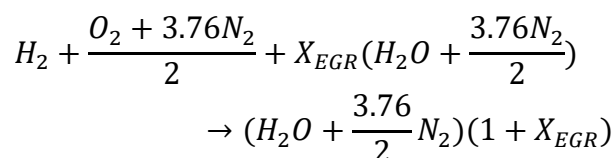
2.4.3. Celularidad

El frente de llama puede presentar un proceso de arrugamiento provocado por distintas inestabilidades. Esta estructura del frente de llama es denominada como celular. La celularidad consiste en la ruptura del frente de llama en celdas de combustión, con regiones de combustión debilitada lejos de los bordes de las celdas y regiones de combustión intensificada en las crestas de las celdas.

2.5. Recirculación

La recirculación es un método de gestión de los productos donde se dirige parte de estos hacia la alimentación de la cámara de combustión. De esta forma parte de los productos se mezclan con los reactivos, dando lugar a una combustión con compuestos y concentraciones distintas.

En este trabajo se denomina “Xegr” a la fracción molar de recirculación de los productos. Se modifica la reacción principal haciendo que en equilibrio estequiométrico quede la ecuación que sigue:



Ecuación 2.3 : Reacción de combustión de hidrógeno con recirculación

Parámetro λ : $\lambda = \frac{1}{Fr} = \frac{1}{\phi}$

Con $\phi = Fr$

El objetivo del presente trabajo es comparar las características de la combustión a distintos dosados con las características obtenidas a distintos grados de recirculación.

Observamos en la Figura 2.8 [1] un esquema simplificado de la recirculación de los productos de escape a través de una unidad de control electrónica. Estos productos son mezclados en la inyección con el compuesto de aire y combustible, provocando una dilución del combustible.

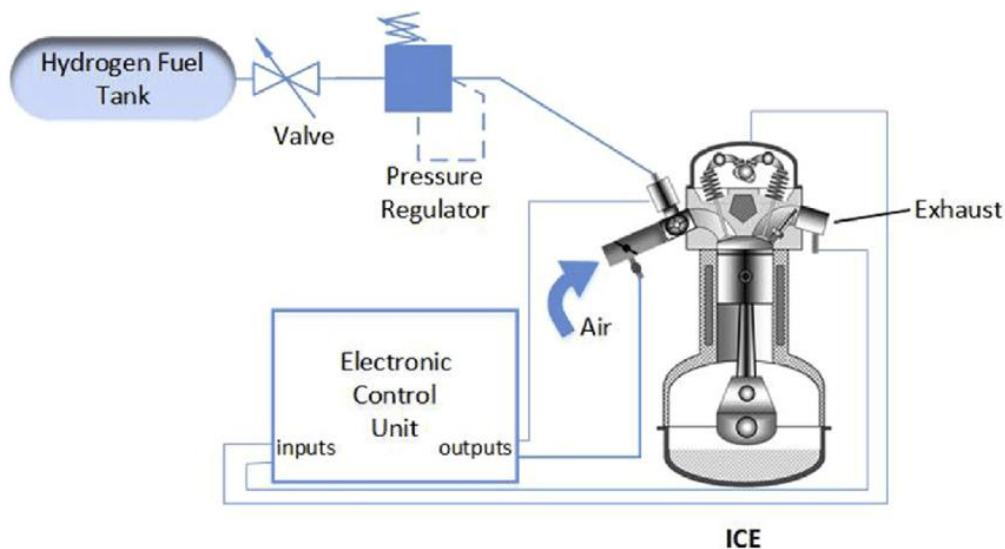


Figura 2.8 Esquema del circuito de recirculación en un motor de combustión interna alternativo, [1]

2.6. Sensibilidad

El frente de llama es esencialmente una singularidad espacial en la cual se está dando la transformación de reactivos en productos. La velocidad del frente depende, entre otros factores, de la concentración de reactivos y productos, así como de la energía interna de la mezcla. En el frente de llama no ocurre una sola reacción, sino muchas en períodos de tiempo muy cortos. Algunas de estas reacciones liberan energía con lo que facilitan alcanzar la energía de activación de otras y que acaben sucediendo todas las reacciones.

Las reacciones que provocan que comience esta cadena de reacciones tienen una gran importancia en la velocidad de propagación. Se puede determinar el efecto sobre esta velocidad que tiene cada reacción de la siguiente forma:

$$Sens = \frac{u_l - u_{l0}}{u_{l0} * d_k} \quad \text{Ecuación 2.4: Cálculo de la sensibilidad}$$

Donde d_k es el valor de la perturbación y u_l y u_{l0} son las velocidades de propagación laminar de la combustión original y tras la perturbación.

2.7. Efecto Soret

La difusión de partículas predominante sigue la Ley de Fick generalmente. Sin embargo, en casos con gradientes de temperatura significativos, las partículas pesadas y ligeras toman comportamientos opuestos. Las partículas pesadas tienen a desplazarse hacia las zonas más frías, mientras que las partículas más ligeras tienden a desplazarse a zonas más calientes. A esta forma de termodifusión se le llama efecto Soret.

El efecto Soret afecta a la velocidad del frente de llama, como vemos en distintos estudios [17], [18],[19] La presencia de hidrógeno como átomo ligero provoca un aumento de la velocidad de la llama. Los átomos de hidrógeno viajan

2.8. Eficiencia de combustión

La eficiencia de una combustión da una medida de la energía útil que puede extraerse de la reacción [20]. Para calcularla, se tienen en cuenta la energía de reactivos y productos

MHV es el poder calorífico de la mezcla, calculado de la siguiente manera:

$$MHV = H_{\text{productos}_{T_u, P_u}} - H_{\text{reactivos}_{T_u, P_u}} \quad \text{Ecuación 2.5: Poder calorífico de la mezcla}$$

Donde H es la entalpía de reactivos o productos a temperatura T_u y presión P_u

$$\eta_{\text{comb}} = \frac{MHV}{Y_{H_2} LHV_{H_2}} \quad \text{Ecuación 2.6: Eficiencia de la combustión}$$

Donde Y es la fracción másica en el combustible y LHV es el poder calorífico inferior

3. Metodología

3.1. Paquete Anaconda

Anaconda[21] es una compañía fundada en 2012 con el objetivo de proporcionar herramientas para explotar todo el potencial del entorno de programación Python.

A través de su página web, se puede obtener de manera gratuita el paquete Anaconda Free, que consta de distintas herramientas y entornos como son Jupyter Notebook, DataSpell, JupyterLab, Orange 3 o el utilizado en el presente trabajo, Spyder. El paquete nos permite crear y editar nuestros propios entornos, permitiendo de esta manera la creación de un entorno para Cantera y la instalación de diferentes librerías complementarias a esta.

La distribución Anaconda está diseñada específicamente para científicos de datos, ingenieros y desarrolladores que requieran de cálculos numéricos y análisis de datos.

Esta distribución tiene algunas características de alto interés. Trae consigo una amplia gama de bibliotecas preinstaladas tales como NumPy, SciPy, Pandas, Matplotlib, etc., que serán de gran utilidad en cuanto al tratamiento de datos numéricos y la representación de dichos datos. Otra ventaja del paquete Anaconda es su compatibilidad entre distintas plataformas, facilitando las posibilidades de trabajar desde distintos equipos.

3.1.1. *Spyder*

Spyder[22] es un entorno gratuito de desarrollo científico y de código abierto escrito en Python y para escribir en este lenguaje. Está diseñado por y para científicos, ingenieros y analistas de datos. Dispone de una interfaz gráfica intuitiva conformada por un editor de código, consola interactiva, explorador de variables y archivos, y otros elementos. El diseño unificado de la interfaz facilita la navegación entre distintas partes del proyecto y la realización de tareas de forma eficiente. Este entorno que permite la programación en Python de forma accesible para todos los usuarios ha sido seleccionado por su facilidad para nuevos usuarios, su interfaz de fácil comprensión y su potencia a pesar de ello.

Spyder proporciona un editor de código con características como resaltado de sintaxis, completado automático, manejo de múltiples archivos, etc. Esta

característica, en conjunto con el visualizador de variables en tiempo real y su diseño orientado a trabajar con bibliotecas populares como NumPy, SciPy y Matplotlib, contribuyen a que sea una interfaz muy recomendable para ser utilizada por ingenieros, analistas de datos o desarrolladores de software.

3.2. Cantera

Cantera[23] es un programa de código abierto escrito en C++ disponible para varias herramientas de computación, entre ellas para Matlab o Python. Su objetivo es el modelado y la resolución de problemas químicos cinéticos, termodinámicos y de transporte. Cantera permite modelar una amplia gama de procesos químicos, en los que se puede analizar el efecto de variables como presión o temperatura en procesos de combustión y cinética química, ofreciendo la posibilidad de estudiar otros parámetros como la formación de especies.

Cantera ofrece la posibilidad de abordar una variedad de problemas que va desde la síntesis en reactores químicos hasta la combustión en motores de combustión interna. Analizar la precisión, exactitud y fiabilidad del uso de Cantera para simular la combustión de hidrógeno es uno de los objetivos del presente trabajo.

3.3. Mecanismos cinéticos

Los mecanismos cinéticos son herramientas fundamentales para simulaciones de características similares a las del presente trabajo. Estos mecanismos describen la velocidad de reacción de las especies involucradas en la combustión, así como otros parámetros de gran interés como propiedades termodinámicas, de transporte, productos, etc.

Los mecanismos cinéticos aportan datos no solo sobre las reacciones principales, sino también sobre reacciones intermedias cuyos productos desaparecen al final de la combustión. Algunos parámetros como la energía de activación son obtenidos directamente de estos mecanismos.

El mecanismo principalmente utilizado en el presente trabajo es GRIMECH 3.0. GRIMEch es una abreviatura de “Gas Research Institute Mechanism”. Es uno de los mecanismos más ampliamente utilizados y reconocidos para simulación de combustión de hidrógeno, metano y otros hidrocarburos. Fue desarrollado en 1999 por Gas Research Institute (GRI) en Estados Unidos.

4. Programación simulaciones cinéticas

4.1. Cantera

El presente trabajo comienza con la base de un programa anterior [16] el cual obtenía, graficaba y exportaba resultados de:

1. Temperatura adiabática de la llama
 - A través de la simulación de la combustión del compuesto según sus condiciones iniciales.
2. Velocidad de propagación del frente de llama
 - Estimación mediante las ecuaciones de conservación de la energía y el momento cinético, en combinación con la simulación por celdas 1-D
3. Emisiones:
 - CO
 - CO₂
 - HC
 - NO
 - NO₂
 - OH
 - Estimadas según eficiencia en la combustión, proporciones estequiométricas y dosados, y condiciones de contorno.

Las variables de entrada que el programa utilizaba eran:

1. Dosado relativo
2. Composición molar
3. Temperatura de entrada
4. Presión de entrada

Se observa en la Figura 4.1 una fracción del programa original donde se observa la creación y utilización de las variables mencionadas.

```

28 Su0=np.zeros(points) #conjunto de valores para la velocidad de combustión laminar
29 X_NO=np.zeros(points)#fracción molas de las emisiones de NO
30 X_NO2=np.zeros(points)
31 X_CO=np.zeros(points)#fracción molas de las emisiones de CO
32 X_CO2=np.zeros(points)
33 tad=np.zeros(points) #temperatura adiabática
34
35
36 for i in range(points):
37
38     #definición del gas con el fichero de entrada en formato CANTERA
39     gas = ct.Solution('C:/Users/javii/Portatil javier/Ingeniería Mecánica/Curso 4/2 Cuatrimestre/Trabajo Fin de Grado/GASIFICACION/grimech30.dat-826..
40     #definición de las condiciones iniciales
41     Ti=383 #temperatura inicial (K)
42     Pi=80000 #presión inicial (Pa)
43     gas.TP=(Ti,Pi) #definición de la mezcla con los valores de presión y temperatura
44
45     #definición del valor de las variables
46     air_n2_o2_molar_ratio=3.76 #fracción molar del nitrógeno en el aire
47     width = 0.014 #anchura (m) de la red
48
49     er[i]=ermin+(ermax-ermin)*i/(points-1) #aumento del valor del dosado relativo dentro del bucle
50     gas.set_equivalence_ratio(er[i], {'CO': 0.117, 'CO2': 0.159, 'CH4': 0.017, 'H2': 0.073, 'N2': 0.634 }, {'O2': 1, 'N2': air_n2_o2_molar_ratio}) #com
51
52     f=ct.FreeFlame(gas,width=width) #generación de una llama plana que se propaga libremente
53
54     f.set_refine_criteria(ratio=5, slope=0.1, curve=0.1, prune=0.05) #características de a red
55
56     loglevel = 1 #Información de salida
57
58     f.solve(loglevel=loglevel, auto=True) #cálculo
59     Su0[i] = f.velocity[0] #vector con la velocidad de combustión laminar para cada dosado relativo
60     tad[i]=gas.T
61
62
63 #CONTAMINANTES-----
64 #Para localizar el número del compuesto
65 # for i, especie in enumerate(gas.species()):
66 #     print(str(i) + '. ' + str(especie))
67
68     X_NO[i] = f.X[35,-1]#El -1 significa que python va a sacar el ultimo valor del vector
69     X_NO2[i] = f.X[36,-1]
70     X_CO[i] = f.X[14,-1]#El -1 significa que python va a sacar el ultimo valor del vector
71     X_CO2[i] = f.X[15,-1]
72
73 #TEMPERATURE PLOT-----
74 import matplotlib.pyplot as plt
75 plt.figure()
76
77 plt.title("Dosado {0}".format(er[i]))
78 plt.plot(f.grid[100], f.T, 'o')
79 #o establece el gráfico de puntos
80 #grid está en m y lo pasa a cm

```

Figura 4.1: Extracto del programa de origen

Este programa había sido previamente utilizado en distintos estudios por el Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica de la Escuela de Ingenierías Industriales de la Universidad de Valladolid. Habían sido validados los resultados con los obtenidos en dichos estudios, pero no se había profundizado en la utilidad de esta herramienta de simulación, habiendo quedado como trabajo futuro la comprobación del alcance de este programa.

Sin embargo, se quiere aumentar la capacidad del programa para caracterizar a fondo la combustión, en este caso de hidrógeno. Una versión modificada del programa estaría capacitada para analizar combustiones de muy diversa naturaleza. Podrían obtenerse resultados con cualquier compuesto conocida su composición, pudiendo ser ajustadas también la temperatura, la presión del combustible, el dosado y la composición del comburente. Adicionalmente, también se ha dotado al programa de la capacidad para simular ensayos con recirculación de los gases de escape.

El programa se ha modificado capacitándolo para realizar estudios paramétricos en función de 2 vectores a elegir entre 3 opciones:

1. Composiciones molares junto con dosado

2. Temperaturas
3. Presiones.

La variable restante será constante, también fijada por el usuario.

```
import Funciones_hidrogeno5 as jt

p=[40,60,80] #presiones en bar
comp_gas=[[97.56,0.0,1],[95.17,0.05,1],[92.33,0.1,1],[89.38,0.15,1],
[86.2,0.2,1],[82.52,0.25,1],[79.47,0.3,1],[74.43,0.35,1],
[70.4,0.45,1],[64.92,0.5,1],[59.57,0.55,1],
[53.13,0.6,1],[46.98,0.65,1],[37.58,0.7,1]]

#composiciones de gases en: XH2, Xegr, dosado relativo

for i in range (len(comp_gas)):
    comp_gas[i][1]=(100-comp_gas[i][0])/100

t=[900] #temperaturas en kelvin
'''550,600,650,700,750,800,850,900'''
name=['EGR equivalentes']
iteracion=[[0,'/',len(t)*len(p)*len(comp_gas)]]
jt.studio_par(p,t,comp_gas, iteracion,name)
```

Figura 4.2: Entrada de parámetros de composición, dosado, temperatura y presión

Se ha introducido una función que dota de nombre al archivo de resultados. Esta función actuará siempre y cuando no se haya determinado un nombre específico para el archivo. El nombre mostrará la presión, temperatura o composición de los ensayos, siempre que una de estas 3 variables sea constante en todos los ensayos

Por objetivo del presente trabajo, las composiciones introducidas, se componen siempre de mezclas de hidrógeno, aire e inertes procedentes de la recirculación, aunque en distintas proporciones. No obstante, el programa sería válido para simular cualquier combustible conocida su composición, por ejemplo, gasolinas, gasóleos o querosenos comerciales, gases de petróleo, etano, metano, etc.

Los inertes que se han considerado son H₂O y N₂. En algunos estudios [24] se tiene solo en cuenta el nitrógeno haciendo referencia a que las masas de CO₂ y de vapor de agua son similares y tienen efecto opuesto en la velocidad. Por

el contrario, en el presente estudio al trabajar sin compuestos carbónicos no aparece dióxido de carbono, por lo que se ha de tener en cuenta la presencia de vapor de agua en la recirculación, afectando de esta forma a la combustión.

También se han ampliado las propiedades y características de cada combustión que calcula el programa. La ejecución del programa y obtención de resultados para cada ensayo se describe a continuación:

Se realizará un estudio paramétrico de 2 condiciones iniciales y otra condición inicial constante.

- Se analizan los datos de entrada para leer las condiciones iniciales correspondientes al ensayo actual.
- En caso de no haber introducido nombre en la variable dedicada a este fin, se asigna uno de forma automatizada.
- Se crean e inicializan vectores para almacenar de forma ordenada los parámetros obtenidos para cada ensayo. Estos son vectores bidimensionales o matrices, de dimensiones suficientes para almacenar la información de cada caso de estudio particular del conjunto correspondiente a un ensayo. Se crean variables para los siguientes parámetros:
 1. Velocidad de combustión laminar
 2. Fracción molar de hidrógeno a la salida
 3. Fracción molar de óxido de nitrógeno a la salida
 4. Fracción molar de dióxido de nitrógeno a la salida
 5. Fracción molar de hidróxido a la salida
 6. Temperatura adiabática de la llama
 7. Difusividad másica del Hidrógeno
 8. Conductividad térmica
 9. Viscosidad
 10. Calor específico a volumen constante
 11. N.º de Lewis
 12. Energía de activación
 13. Eficiencia de la combustión
 14. N.º de Prandtl
- Se observa en la Figura 4.3 a continuación la creación de las mencionadas variables. La longitud de los vectores de cada variable no es fija, pues está asociado a la longitud de los vectores de entrada, los cuales fijan las condiciones de contorno.

```

cp = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # valor de cp
lewis = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # Lewis
nom_reacc=[]#nombres de la reaccion principal para cada ajuste
Energ_activacion= np.empty((len(var1), len(var2)), float)#Energ
comb_eff= np.empty((len(var1), len(var2)), float)#eficiencia d

prandtl = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # Prandtl
comp_gas = comp # composiciones de gases en: H2, H2O, er

presiones = p # presiones a utilizar en bar
for i in range(len(p)):
    presiones[i] = presiones[i]*100000 # pasamos las presione
# definicion del valor de las variables
air_n2_o2_molar_ratio = 3.76 # fraccion molar del nitrogeno e

```

(a)

```

#inicializamos todas las variables que necesitaremos a lo largo del pr
# conjunto de valores para la velocidad de combustion laminar
Su0 = np.empty((len(var1), len(var2)), float)#velocidad de combustion
# fraccion molar de las emisiones de H2
X_H2 = np.empty((len(var1), len(var2)), float)
# fraccion molar de las emisiones de NO
X_NO = np.empty((len(var1), len(var2)), float)
# fraccion molar de las emisiones de NO2
X_NO2 = np.empty((len(var1), len(var2)), float)
# fraccion molar de las emisiones de OH
X_OH = np.empty((len(var1), len(var2)), float)
tad = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # temperatura adiabatic
diff_H2 = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # Difusividad_masic
# Conductividad_termica
cond_term = np.empty((len(var1), len(var2)), float)
visc = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # Viscosidad
cp = np.empty((len(var1), len(var2)), float) # valor de cp

```

(b)

Figura 4.3 a) y b) Inicialización de variables obtenidas y calculadas

- Para cada combinación, se simula la combustión.
 - Se importan las reacciones y compuestos mediante la lectura del archivo Grimech3.0
 - Se fija la composición del gas, utilizando como combustible el hidrógeno, como comburente el aire y una dilución de nitrógeno y agua correspondiente a la recirculación.
 - Se fijan para el caso de estudio actual la presión y temperatura.
 - Se simula la combustión. El modelo de combustión utilizado simula una llama plana que se propaga libremente. La llama es simulada entre celdas de longitud fijada por el programa.
 - De esta combustión, se obtienen los siguientes parámetros:

- Velocidad de combustión laminar
- Temperatura adiabática de la llama
- Difusividad másica del Hidrógeno
- Conductividad térmica
- Viscosidad
- Calor específico a volumen constante

- Y a partir de ellos se calculan:

N.º de Lewis, calculado según la ecuación:

$$Le = \frac{k}{\rho * cp * D}$$

Ecuación
4.1:-
Número de
Lewis

Donde:

- k = conductividad térmica
- ρ = densidad de la mezcla tras la combustión
- cp = calor específico a volumen constante de la mezcla tras la combustión
- D = coeficiente de difusividad másica del hidrógeno.

- N.º de Prandtl

Calculado según la fórmula:

$$Pr = \frac{\mu * cp}{k}$$

Ecuación 4.2:- Número de Prandtl

Donde:

- k = conductividad térmica
- μ = viscosidad dinámica del fluido tras la combustión

- cp = calor específico a volumen constante de la mezcla tras la combustión

```

tad[j][i] = gas.T
entalp_f=gas.enthalpy_mass
entalp_com=(f.enthalpy_mass)
MHV=(entalp_f-entalp_i)#poder calorifico de la mezcla
MHV=max(f.h)-min(f.h)

#PCI H2= 120011 kJ/kg
#kg--> kmol (H2) 1kmol H2=2kgH2
#PCI H2 = 120011000*2
comb_eff[j][i]=MHV/(fracc_mol1*120011000)

#print('\n\nComposicion:', gas.selected_species, '\n\n')#visualizar la

diff_H2[j][i] = gas.mix_diff_coeffs_mass[0] # Difusividad masica
cond_term[j][i] = gas.thermal_conductivity # Conductividad termica
visc[j][i] = gas.viscosity # Viscosidad
cp[j][i] = gas.cp_mass # valor de cp

lewis[j][i] = (cond_term[j][i]/(gas.density_mass *
cp[j][i]))/(diff_H2[j][i]) # Lewis
prandtl[j][i] = (visc[j][i]*cp[j][i])/(cond_term[j][i]) # Prandtl

```

Figura 4.4 :Obtención de variables en cada caso singular

- Concentración de especies contaminantes e inquemados en la salida:

Al no contener átomos de carbono el combustible, la emisión resultante de cualquier compuesto carbónico es inexistente. Se demuestra por lo tanto que la concentración de los siguientes compuestos es nula:

- CO
- CO₂
- HC

Siguen existiendo sin embargo algunos compuestos contaminantes, nocivos para la salud del ser humano y tóxicos para la naturaleza. Estos provienen mayoritariamente del nitrógeno del aire:

- NO
- NO₂
- OH

Adicionalmente, existe cierta concentración de hidrógeno diatómico no quemado, causado por una mezcla imperfecta del hidrógeno y el oxígeno, conllevando esto dosados locales distintos de 1

- H₂
- Reacción química crítica
 - Se realiza un análisis de sensibilidad de las 325 reacciones químicas incluidas en GRIMECH 3.0.
 - A continuación, se seleccionan todas las reacciones cuya sensibilidad sea >10% de la sensibilidad máxima.
 - Se obtiene la energía de activación de cada una de estas reacciones, leyendo este dato directamente del archivo GRIMECH.
 - Se selecciona la reacción con mayor energía de activación.
- Energía de activación
 - Durante el proceso de obtención de la reacción química crítica se almacena su valor de energía de activación.

```

for t in range(sensibilidadesSubset.shape[0]):
    num_reacc=sensibilidadesSubset.iloc[t,2]
    if ((gas.reaction(num_reacc-1).reaction_type)==('fall-off-legacy')or('elementary-legacy')):
        #si se tiene el fallo : "AttributeError: Legacy implementation does not use rate property."
        #ejecutar : gas.reaction(num_reacc-1).reaction_type
        #y añadir la cadena de texto al if, añadiendo un or

        sensibilidadesSubset.iloc[t,3]=max(abs(gas.reaction(num_reacc-1).high_rate.activation_energy),
        gas.reaction(num_reacc-1).high_rate.activation_energy)
    else:
        sensibilidadesSubset.iloc[t,3]=gas.reaction(num_reacc-1).rate.activation_energy

    #usar lo siguiente si se quiere graficar las sensibilidades
    Graficar=sensibilidadesSubset.iloc[:,[0,1]]
    Graficar=Graficar.set_index(['nombre_reacc'])
    indicesMeetingThreshold = Graficar['Sensibilidad'].abs().sort_values(ascending=False).index

    Graficar.loc[indicesMeetingThreshold].plot.barh(title="Sensitivities for GRI 3. %Hydrogen {0}".format(
    #sensitivities

    plt.gca().invert_yaxis()

    plt.rcParams.update({'axes.labelsize': 20})
    plt.xlabel(r'Sensitivity: $\frac{\partial \ln S_u}{\partial \ln k}$');

    Reacc_princ=(sensibilidadesSubset.sort_values('Ea',ascending=False)).iloc[0]
    Energ_activacion[j][i] = Reacc_princ['Ea']
    nom_reacc.append(Reacc_princ['nombre_reacc'])

```

Figura 4.5: Obtención de la reacción crítica y la energía de activación

- Finaliza el bucle de este ensayo dentro de la simulación actual y se realiza el mismo proceso para el siguiente ensayo.
- Se realiza el bucle descrito anteriormente para cada ensayo correspondiente a la simulación actual.
- Al finalizar todos los casos de ensayo, se exportan los resultados obtenidos. Cada vector corresponde a una variable y almacena de forma ordenada los resultados calculados para esa variable en cada ensayo. Todos los vectores son transformados al formato “.csv” (*comma separated values*) y se guarda un archivo con esta extensión en la carpeta de trabajo. El nombre del archivo corresponderá al asignado por el usuario o a uno generado según las condiciones de los ensayos si no hay un nombre asignado.

Se detallan a continuación algunas singularidades del programa en cuanto a su configuración, funcionamiento y métodos de cálculo.

Dado el crecimiento en complejidad del programa, se ha diseñado como un programa de dos ficheros, uno para manipulación a nivel usuario y otro a nivel programador, con el fin de ofrecer un programa más limpio y comprensible al primero de estos, y facilitar el rediseño, ampliación y mejora para el programador mediante este diseño modular. El fichero para usuarios solo necesita que sean introducidos los vectores de composición, presión y temperatura, además de proporcionar una variable que indique el número de ensayo actual y el total de ensayos necesarios según los parámetros de entrada introducidos.

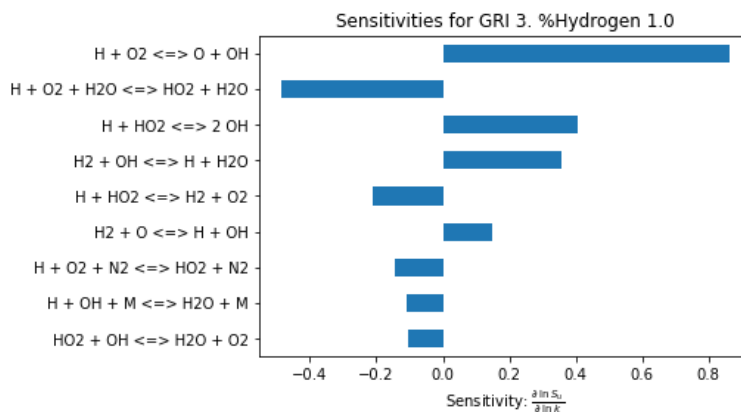
El software Cantera solo permite la simulación de llamas con frentes planos. Además, dichos frentes son de espesor nulo. Estas simplificaciones en el programa conllevan la imposibilidad de estudiar ciertos fenómenos, como son el N.º de Markstein o la variación del espesor del frente de llama.

Algunas propiedades se obtienen directamente mediante funciones built-in de Cantera. Además, el proceso de obtención de estas propiedades no está detallado en la documentación de Cantera. Es por ello posible encontrar algunos problemas en cuanto al significado de estas propiedades o a su definición. Es el caso de propiedades como la difusividad másica, conductividad térmica, viscosidad y el calor a volumen constante

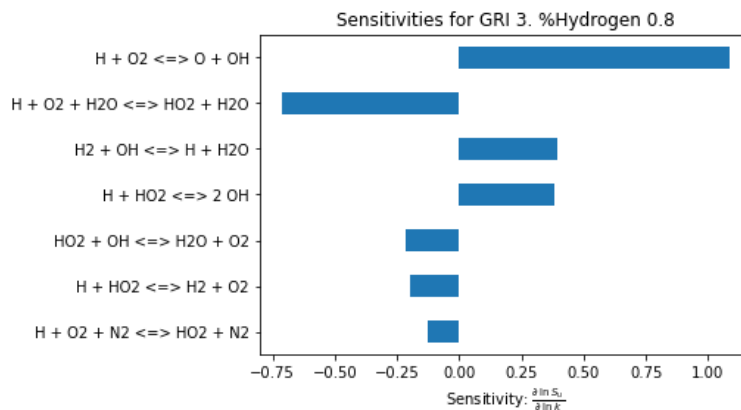
A partir de las propiedades built-in obtenemos los números adimensionales correspondientes al fluido. En caso de inconsistencias en los números adimensionales en estudios futuros, sería importante tratar de descifrar como

se realiza la obtención de los mencionados parámetros, pues podrían ser estos los causantes.

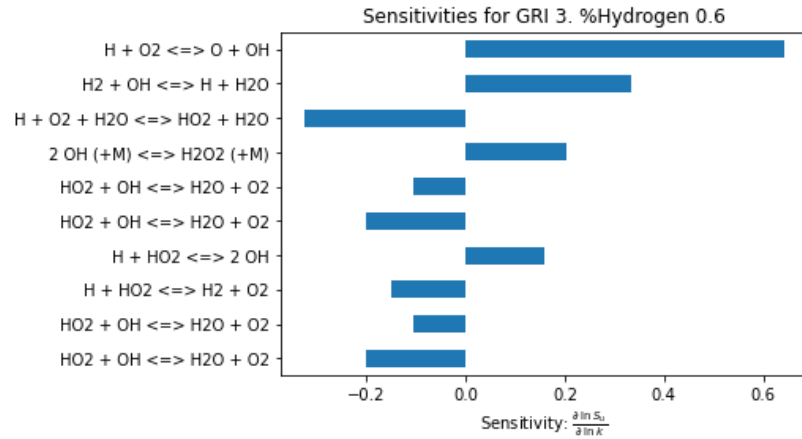
En cuanto a la obtención de la reacción principal de cada ajuste, el primer paso que realiza el programa es un estudio de la sensibilidad del frente de llama frente a las reacciones mediante funciones built-in. De este estudio se seleccionan las reacciones cuya sensibilidad sea de al menos un 10% la sensibilidad de la reacción que más afecta a la velocidad de la llama. De esta forma, se descartan del proceso reacciones que afectan en pequeña medida a la velocidad de combustión. A continuación, se accede al fichero del mecanismo, de donde se obtienen las energías de activación de todas las reacciones que han superado el filtro. Se elige la reacción con mayor energía de activación como reacción principal. De esta forma se asegura que la energía de activación que indica el programa es la mínima necesaria para que tengan lugar todas las reacciones que afectan significativamente a la velocidad de propagación.



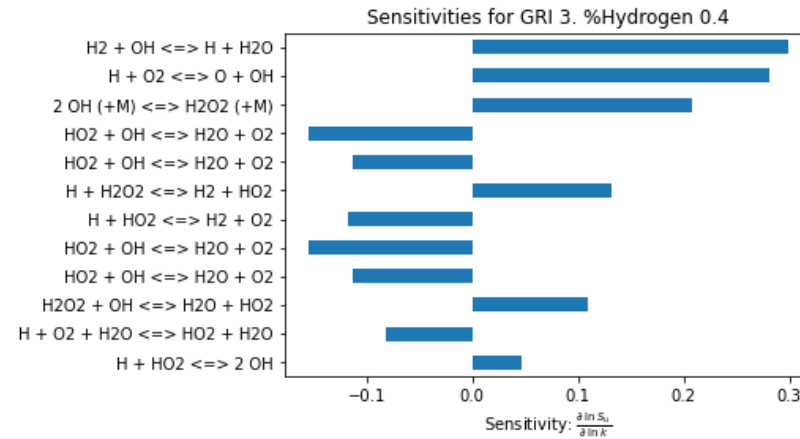
(a) 40 bar, 0% recirculación



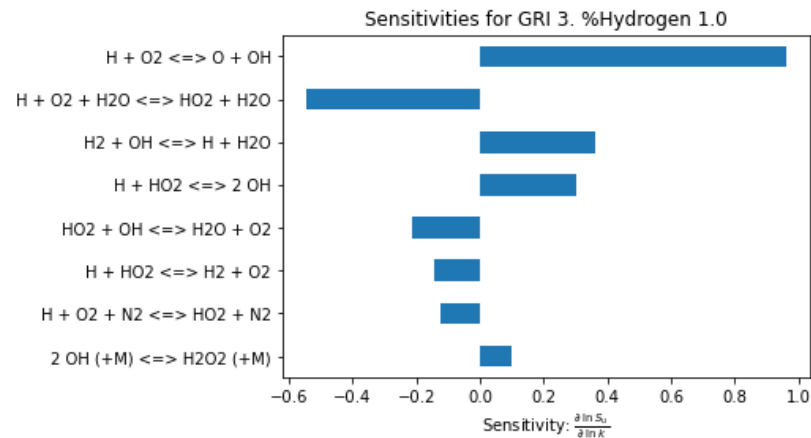
(b) 40 bar, 20% recirculación



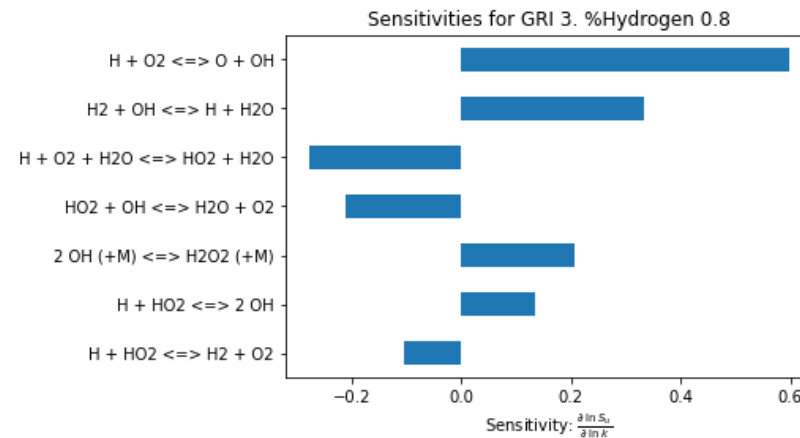
(c) 40 bar, 40% recirculación



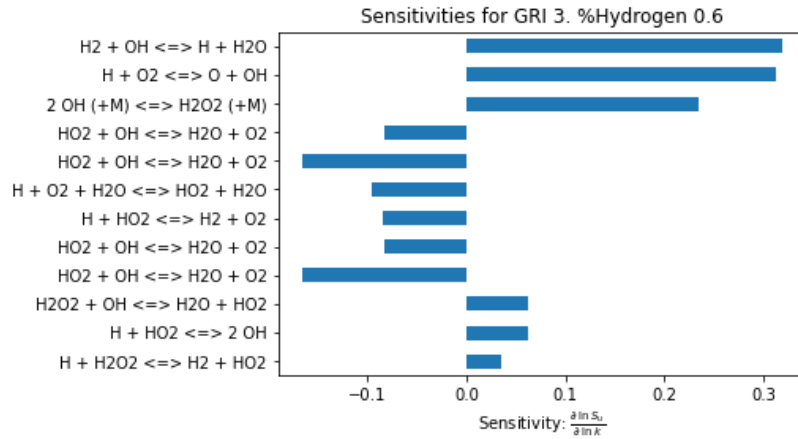
(d) 40 bar, 60% recirculación



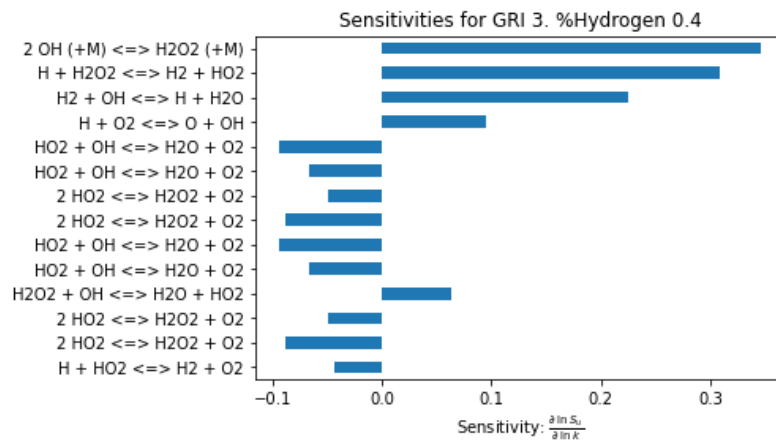
(e) 80 bar, 0% recirculación



(f) 80 bar, 20% recirculación



g) 80 bar, 40% recirculación



h) 80 bar, 60% recirculación

Figura 4.6 Estudio de sensibilidad para mezcla a 900K a 40 bar a), b), c), d) y 80 bar d), e), f), g

A la vista de los resultados, la sensibilidad varía mucho en función de la presión y la composición. La reacción a la que es más sensible la combustión no es siempre la misma, y en ocasiones hay una reacción muy dominante mientras que en otras hay varias reacciones con coeficientes de sensibilidad muy parecidos. Por todo esto, el estudio de sensibilidad se realiza para cada uno de los ensayos en cada ejecución del programa.

Ante los resultados del estudio de variación de coeficientes de sensibilidad en función de la presión y la fracción de recirculación, se concluye que estos coeficientes de sensibilidad varían significativamente, incluso cambiando de

reacción principal, por lo que en las simulaciones posteriores se calcularán automáticamente las reacciones con un coeficiente de sensibilidad de al menos un 50% de la mayor y se utilizará como energía de activación general del proceso la de la mayor de las 4, además de localizar cual es en cada caso dicha reacción

5. Validación de resultados

Inicialmente, en el presente capítulo se procede a validar los resultados obtenidos en el presente trabajo con otros obtenidos por otros autores, para ello se representan los resultados obtenidos y se comparan con los resultados obtenidos por los trabajos realizados por Verhelst y Bourgrine en sus estudios[24], [25], [19]. Estos estudios buscan correlaciones para obtener el valor de velocidades de combustión, temperaturas de llama y emisiones en función de temperatura, presión, dosado, y lo realizan en llamas de hidrógeno, mezclas de hidrógeno y gas natural y mezclas de estos con recirculación o con la adición de agua. Para ello, utilizan datos numéricos y experimentales.

Estos estudios se consideran adecuados para la validación dada su investigación en torno a la combustión de hidrógeno, comparación de resultados con los de otros autores y utilización de EGR o introducción de vapor de agua para simular recirculación de gases de escape.

5.1. Comparación con Verhelst

En el trabajo de S. Verhelst [25] se busca una correlación para encontrar la velocidad de combustión laminar para el proceso de combustión de hidrógeno. Para ello, estudia diversos factores que afectan a la combustión y obtiene diversos coeficientes para la relación. Estos coeficientes son exponentes de temperatura, presión y gas residual, variables que afectan a la combustión.

El rango de estudio en el que se han utilizado estas variables es el siguiente: $0.2 \leq \lambda \leq 3$, $500 \text{ K} \leq T \leq 900 \text{ K}$, $5 \text{ bar} \leq p \leq 45 \text{ bar}$, $0\% \text{ vol.} \leq f \leq 50\% \text{ vol.}$, donde f es la fracción volumétrica de gases residuales. Según Verhelst este es el rango en que se espera que se encuentren las condiciones de la mezcla de hidrógeno y aire antes de la combustión, aunque las investigaciones y desarrollos más recientes consideran muy importante la posibilidad de inyectar el hidrógeno o la mezcla a presiones mucho mayores, a 80, 150 o hasta 300 bar[13].

Verhelst se basa en el mecanismo de Konnov [26] y en el código Chem1D de cinética química unidimensional desarrollado en la Universidad Técnica de Eindhoven, simula y obtiene resultados numéricos de velocidades de combustión que compara con los resultados tanto experimentales como de simulación de otros autores. En ellos, obtiene correlaciones dependientes de presión y temperatura sin presencia de gases residuales, y después incorpora gases residuales y encuentra una correlación que muestra también el efecto de estos.

Sin embargo, sus resultados siempre se parecen más a otros resultados numéricos obtenidos mediante cálculos que a resultados experimentales. Esto se debe a que ciertos efectos intrínsecos a un proceso de combustión real como las inestabilidades, el stretch, la esfericidad y la celularidad no pueden ser calculados numéricamente en la actualidad.

Se observa en la Figura 5.1 la superposición de resultados obtenidos por este estudio y los presentes para el citado artículo en cuanto a velocidad del frente de llama con respecto al dosado.

Es importante observar que en este gráfico se ha utilizado lambda en vez del dosado, de acuerdo con el gráfico que se ha utilizado como referencia. Como se observa en la Ecuación 5.1 Lambda es el inverso del dosado, por lo que en este caso tenemos a la izquierda un dosado de 2, rico ($\lambda=0.5$), y en el extremo derecho nos aproximamos a dosados más pobres, siendo el último de valor 0.3 ($\lambda=3$).

$$\lambda = \frac{1}{\theta} = \frac{1}{F_r}$$

Ecuación 5.1 Relación entre lambda y el dosado

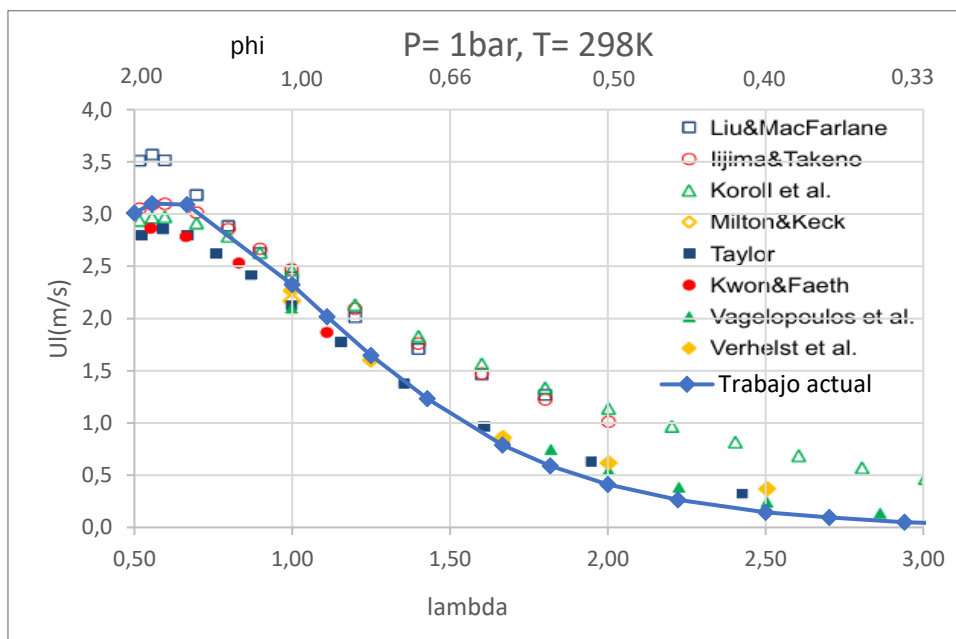


Figura 5.1: Velocidad de combustión respecto dosado. Comparación con resultados obtenidos por Verhelst.

Los resultados obtenidos por Verhelst [25] no tienen en cuenta los efectos del stretch de la llama. Los resultados graficados con símbolos rellenos provienen de llamas no afectadas por stretch, ya que son resultados obtenidos

numéricamente mediante simulaciones cinéticas. Por otra parte, los resultados con símbolos no rellenos no tienen en cuenta este fenómeno, se obtienen de resultados experimentales.

Los resultados de Verhelst experimentales varían respecto de los obtenidos numéricamente, aportando valores de velocidad de combustión mayores.

Se observa que los resultados obtenidos mediante Cantera siguen una curva similar a los resultados de Verhelst para llamas sin efectos de stretch. Este fenómeno tampoco puede ser tenido en cuenta por Cantera, ya que simula llamas sin espesor, es decir, no tiene en cuenta el espesor de la llama.

Observamos a continuación en la

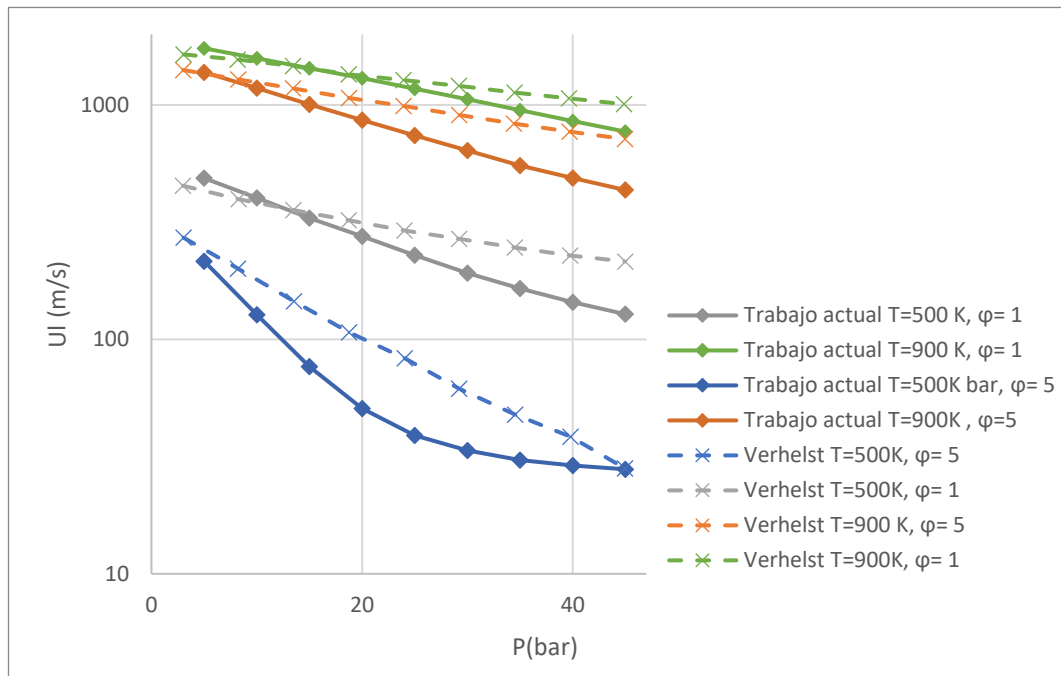
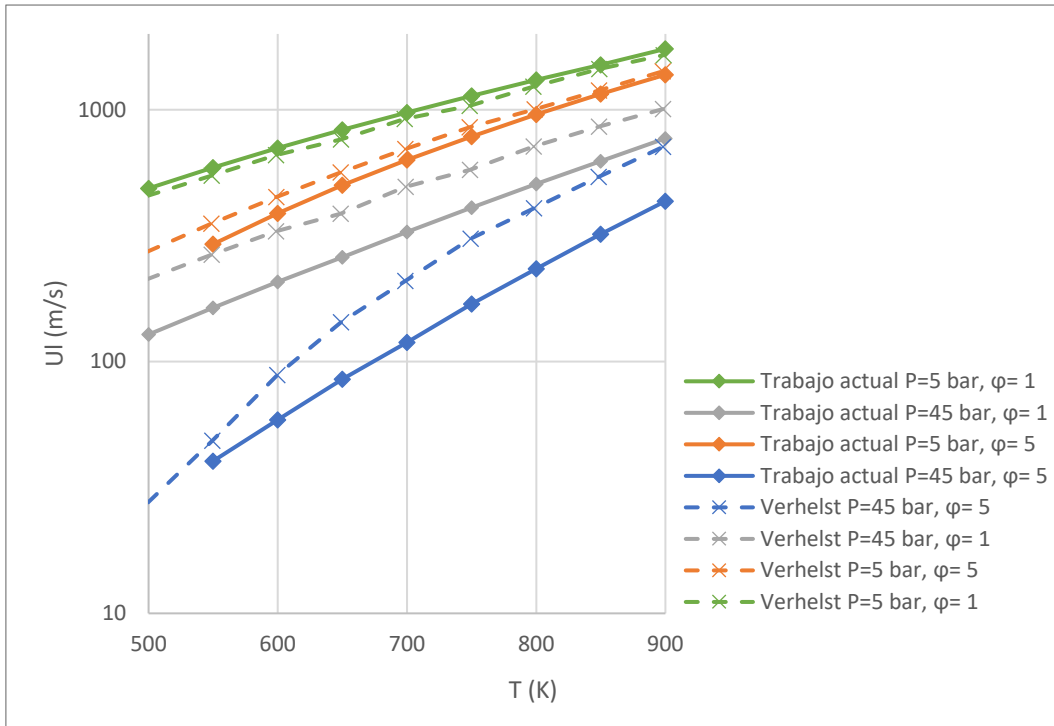
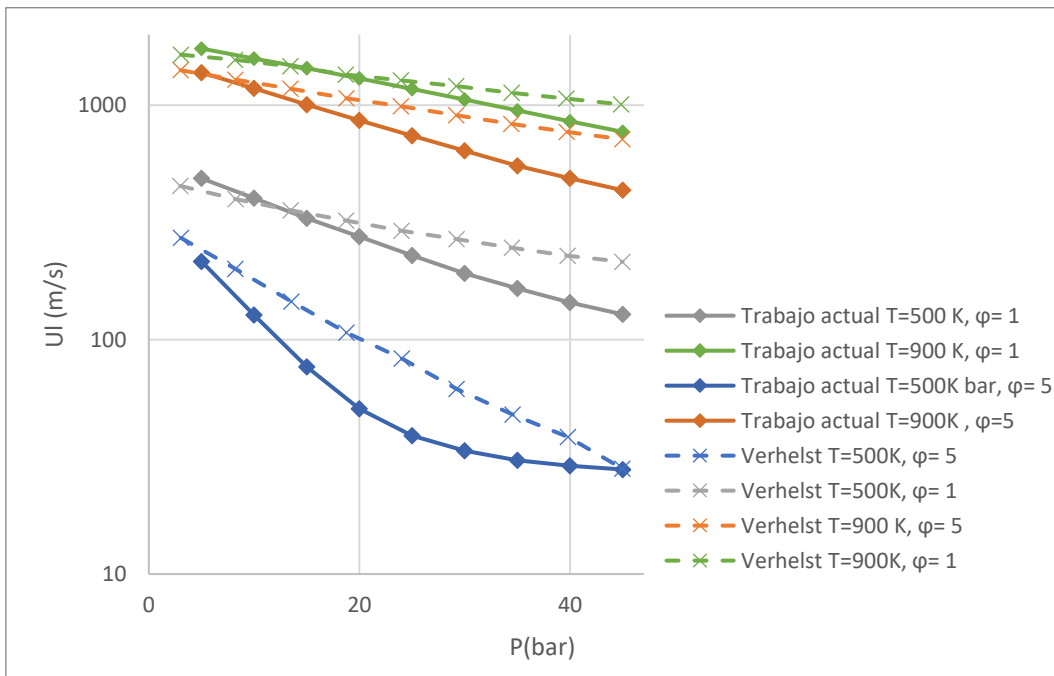


Figura 5.2 la comparación entre las velocidades de llama para distintas presiones, temperaturas y dosado según el presente trabajo y Verhelst. Aunque las curvas son similares, se aprecia mayor similitud de resultados para bajas presiones y para altas temperaturas.



(a)



(b)

Figura 5.2: Velocidad de frente de llama respecto de Temperaturas (a) y de presiones (b)

Cabe destacar en este sentido que los resultados de Verhelst [25] han sido validados para dosados entre 2 y 0.3 y presiones entre 5 y 45 bar, siendo la

zona de bajas presiones la más adecuada para trabajar. La zona de 45 bar de presión se encuentra, por el contrario, en el límite del rango en el cual es fiable dicho estudio. El dosado se encuentra también fuera del rango validado, puesto que encontramos aquí un dosado de 5 cuando el dosado mínimo validado es de 2

En relación con las temperaturas, los resultados son de una mayor similitud. Se tiene en cuenta de nuevo el hecho de que 500K se encuentra en el extremo inferior del rango en el que se señala que es fiable el estudio de Verhelst [25]

Por tanto, se validan los resultados de velocidad de combustión obtenidos en el presente TFG para variaciones de presiones y temperaturas.

5.2. Comparación con Bourgrine

A continuación, continuando la validación de los resultados que se obtienen en los ensayos realizados con Cantera, se comparan los valores obtenidos con los del artículo de Bourgrine et al. [24].

En el estudio mencionado se realiza un estudio numérico de combustiones de mezclas de hidrógeno y metano utilizando los mecanismos GRIMech3.0, Konnov 0.5 y Princeton. El estudio muestra que cuando aumenta la proporción de hidrógeno en la mezcla de combustible, la velocidad aumenta también. Este estudio compara sus resultados con otros resultados no experimentales, que muestran los mismos efectos en cuanto al aumento de la proporción de hidrógeno.

En su trabajo, Bourgrine busca una correlación para obtener la velocidad de combustión laminar. Observan que las variables de las que depende esta velocidad son la temperatura y presión iniciales, la proporción de gases residuales y de una velocidad de combustión para condiciones estándar para el dosado y gases residuales de cada ensayo.

En dicho estudio, Bourgrine compara las correlaciones de Zel'dovitch y de Blint para obtener el grosor del frente de llama, además de comparar ambos con el mecanismo GRIMech 3.0 y demostrar que este mecanismo puede obtener resultados fieles para este parámetro con mezclas de metano e hidrógeno con hasta el 40% de hidrógeno.

Todos los datos utilizados en este estudio son numéricos y no experimentales.

Acerca de este, hay algunos detalles para tener en cuenta antes de la comparación:

- En su artículo, Bourgrine no considera el H_2O ni CO_2 (que son los productos de la combustión) en la masa del disolvente porque tienen efectos opuestos en la velocidad de combustión laminar. Además, justifica que no se consideren dichos productos porque la masa del N_2 es mayor y prevalece sobre las masas de H_2O y CO_2 .

En el presente trabajo se toma la decisión de tener en cuenta la recirculación como una mezcla de $H_2O + 3.76N_2$. Esto se debe a que la combustión de hidrógeno sin metano no produce CO_2 , por lo que no existe efecto de compensación con el del H_2O producido.

Se observa en la Figura 5.3 que las simulaciones con recirculación obtienen resultados similares a los resultados para mezclas del estudio de Bourgrine [24] en las que predomina el hidrógeno. En dicha figura se grafican los resultados de velocidad de combustión de hidrógeno en condiciones iniciales de 300K y 1 bar según distintos autores y el presente trabajo.

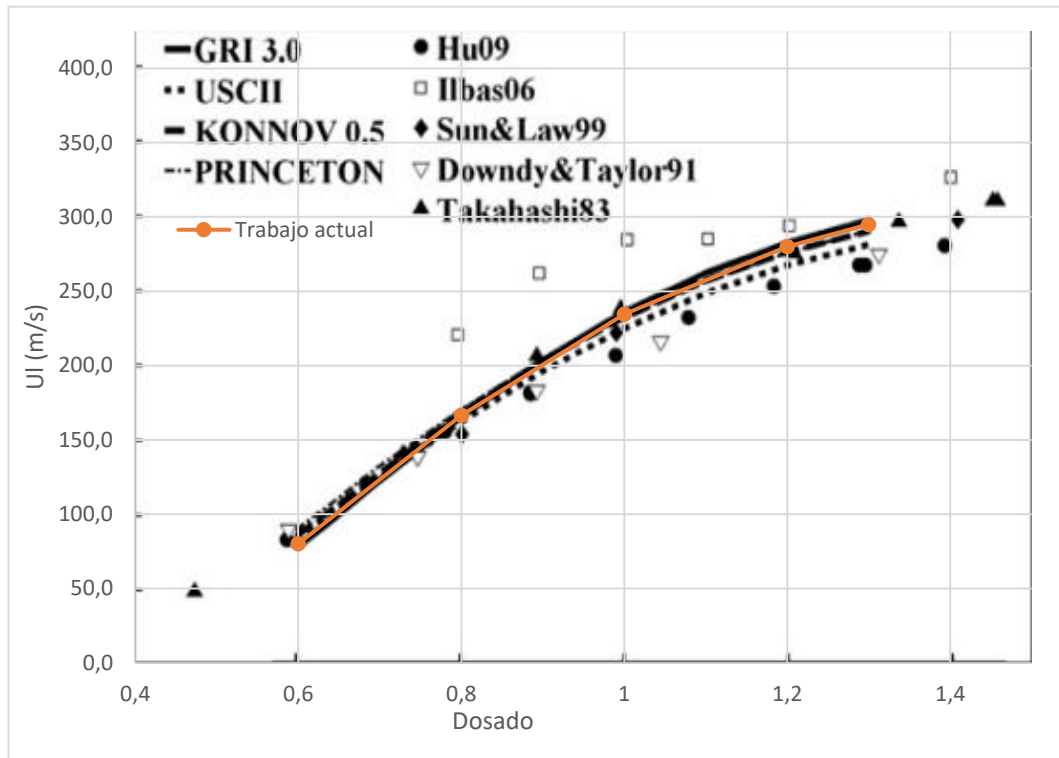


Figura 5.3: Velocidad de frente de llama frente a dosado. Resultados comparados entre obtenidos por Cantera y según estudio de Bourgrine. $T= 300K$ $P=1$ bar

Adicionalmente, se han comparado los resultados del estudio de sensibilidad según el artículo de Bourgrine [24] y el estudio actual. Es importante tener en cuenta que, en el estudio de Bourgrine, [24] las barras negras representan la máxima concentración de H₂ y esta es del 90%. El otro 10% contiene compuestos carbónicos. Por tanto, la comparación adecuada al presente estudio es entre los resultados de este y las mencionadas barras negras del estudio de Bourgrine. Observamos en la Figura 5.4 que las reacciones más importantes son las mismas. Sin embargo, el orden difiere. Cuando nos fijamos en la tendencia del estudio de sensibilidad según Bourgrine, se denota que la reacción $H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$ pierde importancia cuando crece el contenido de H₂. Sin embargo, la reacción $H_2 + OH \rightleftharpoons H + H_2O$ solo aparece para altos contenidos de H₂. Comprobamos por tanto que las reacciones son las mismas.

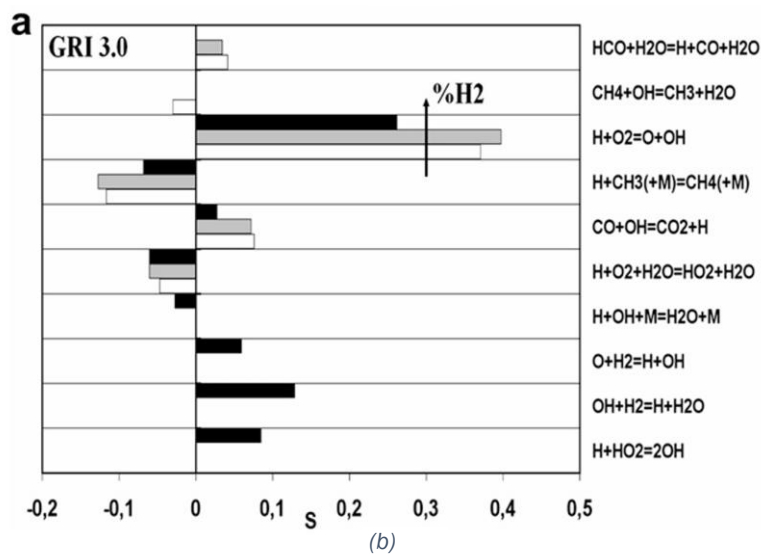
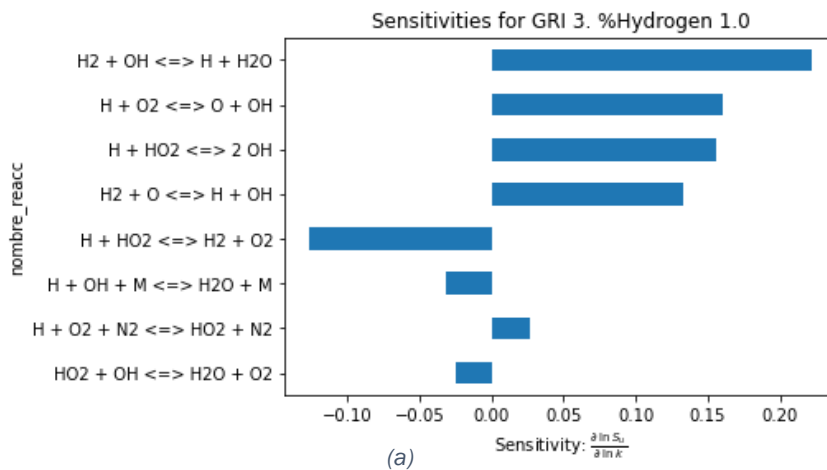


Figura 5.4: Estudio de sensibilidad para dosado 1, 0% recirculación, 300K, 1 bar. Resultados según Cantera (a) y Bourgrine (b)

5.3. Comparación con S. Wang

A continuación, con la intención de validar el uso de cantera y el mecanismo GRIMech 3.0, se han comparado los resultados obtenidos de esta forma con los obtenidos por S. Wang [19] en su estudio de combustión de hidrógeno con mezclas de aire o de recirculación.

En dicho estudio se recaban datos sobre la combustión de hidrógeno a 1 bar y 373K en una cámara de combustión cerrada. La combustión es iniciada por medio de un electrodo. En la cámara se simuló la presencia de EGR mediante la introducción de vapor de agua en la mezcla. Es importante señalar que de esta forma se está introduciendo solo vapor de agua y no se introduce N₂ adicional como tendríamos en el caso de EGR.

Se ha simulado la combustión para temperatura de 373K y 1 bar. Los dosados o recirculación han sido objeto de un estudio paramétrico, y cada valor puede ser obtenido por lectura directa de las gráficas.

5.3.1. *Velocidad de combustión*

Se grafican a continuación en la Figura 5.5 los resultados obtenidos de velocidad de combustión. Los resultados obtenidos mediante GRIMech 3.0 son muy similares a los obtenidos por experimentación de S. Wang.[19]

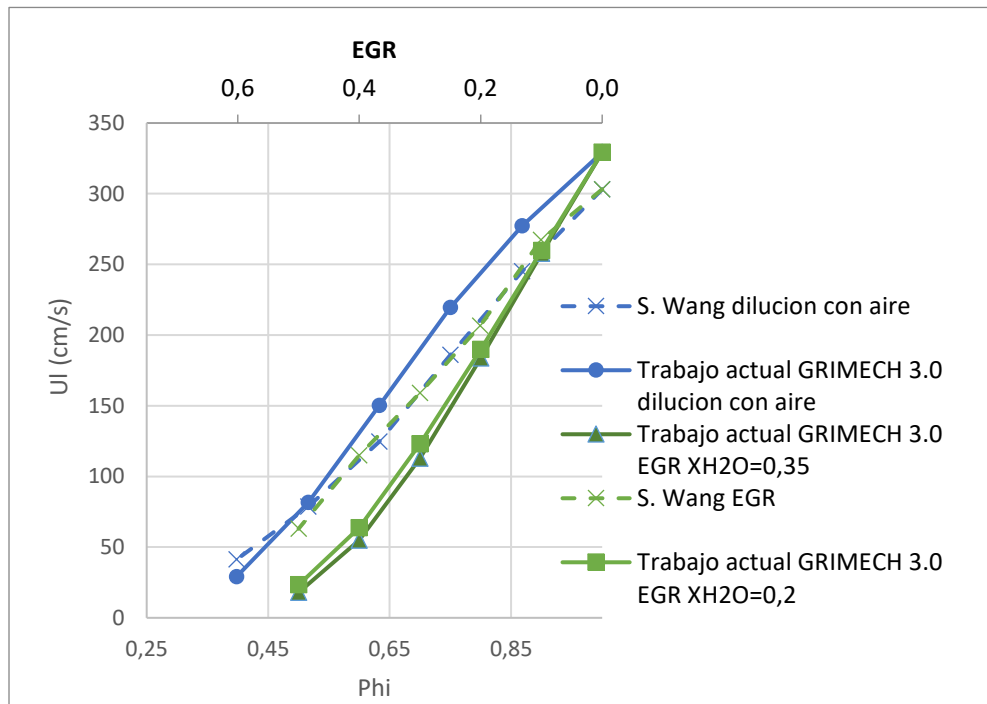


Figura 5.5 Comparación de resultados de velocidad de combustión en función de la cantidad de dilución

Se observa un buen acuerdo en los resultados obtenidos en el presente TFG con los obtenidos por los trabajos mencionados anteriormente, es considerada suficiente para considerar como válidos los resultados de velocidad de combustión obtenidos haciendo uso de Cantera con el mecanismo de reacción GRIMEch 3.0.

Una vez validada la metodología se procede a realizar un estudio paramétrico de la influencia de la adición de EGR en las combustiones de H₂ y validación y comparación con otros trabajos.

5.3.2. Temperatura adiabática de llama

Se grafican a continuación en la Figura 5.6 los resultados obtenidos de temperatura adiabática de la llama mediante GRIMEch 3.0 y se comparan estos con los resultados experimentales de S. Wang.

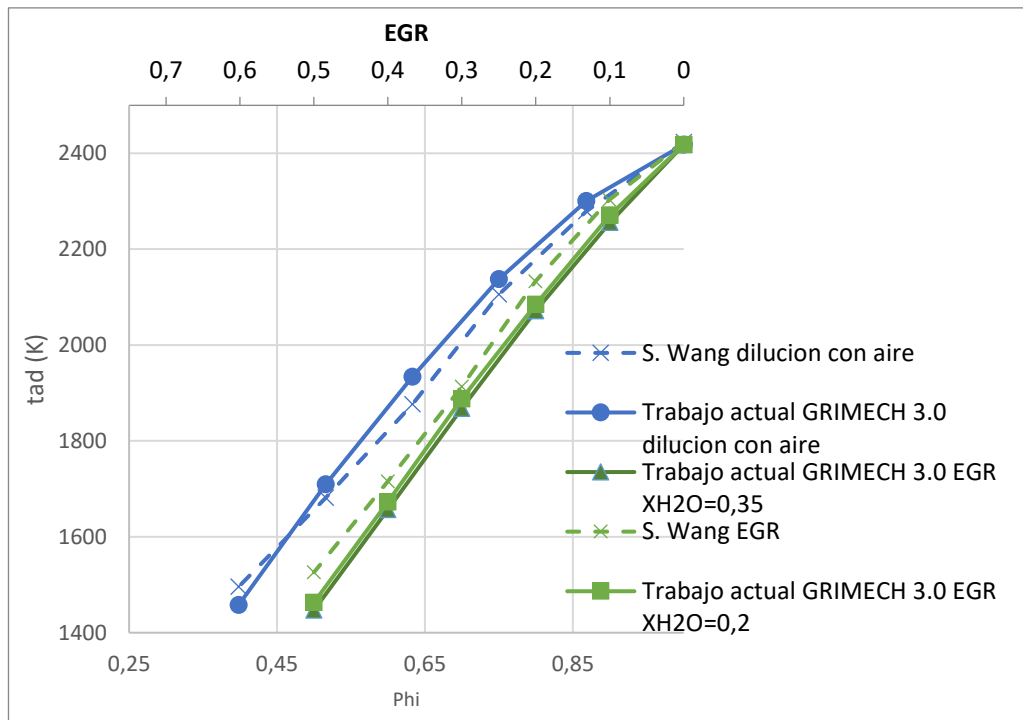


Figura 5.6 Comparación de resultados de temperatura de combustión en función de la cantidad de dilución

Los resultados obtenidos en el presente TFG son muy similares a los obtenidos por S. Wang [19] en cuanto a temperatura adiabática de llama. En ambos trabajos la tendencia al crecer el dosado es de que aumente la temperatura adiabática de llama. Además, la influencia de la adición de recirculación disminuye en ambos casos la temperatura de llama. En el trabajo actual tienen más influencia los EGR. Esto es debido a que en el estudio de S. Wang [19] solo se añade agua a la mezcla, faltando de añadir N_2 y siendo por ello distinta la composición final de la mezcla.

La similitud de resultados tanto para experimentación con recirculación como para cambio de dosado es suficiente para considerar los resultados de temperatura de llama adiabática obtenidos mediante GRIMEch 3.0 como válidos.

5.3.3. *Emisiones*

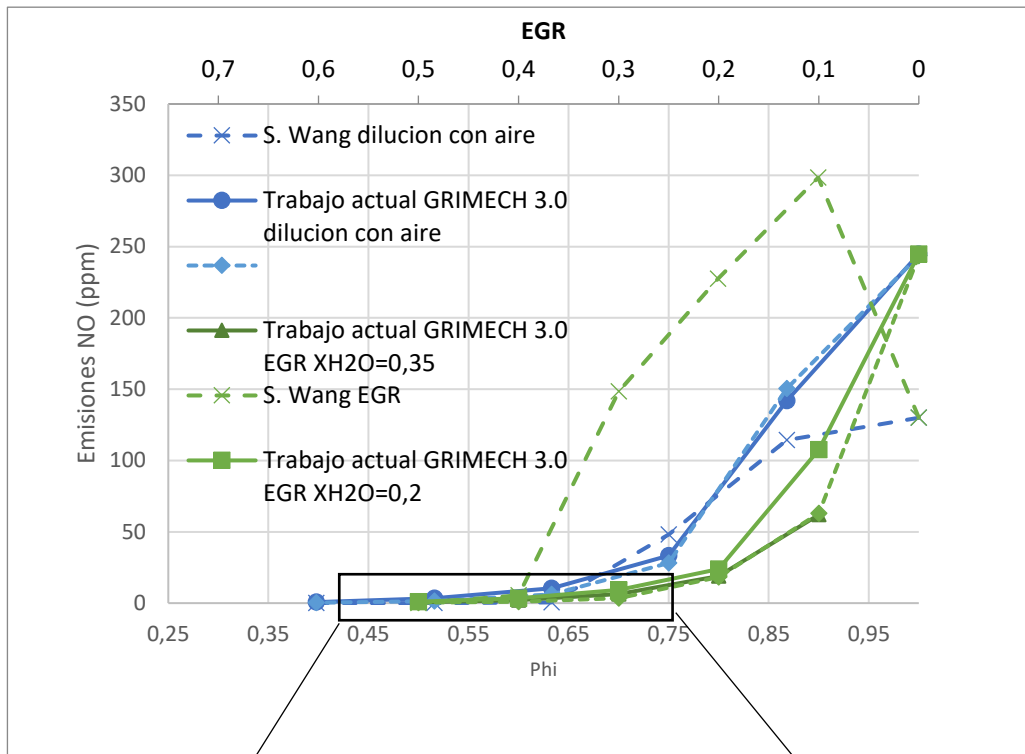
A continuación, se comparan las emisiones de NO y H₂ tras la combustión de hidrógeno en este estudio y el de S. Wang [19] en condiciones similares.

Se grafican a continuación en la Figura 5.7 los resultados obtenidos para emisiones de NO y se comparan estos con los valores medidos en el estudio de S. Wang. [19]

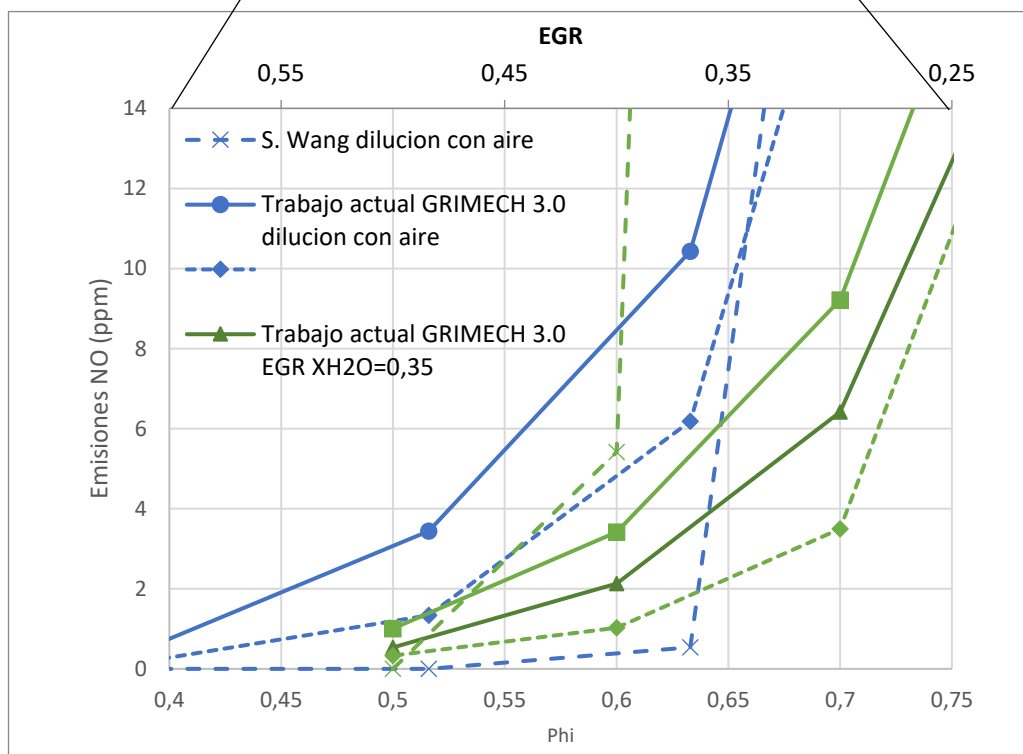
Se observan diferencias significativas en cuanto a emisiones de NO tanto en cambio de dosado como en casos con recirculación. Se ha utilizado por tanto otro mecanismo cinético para realizar los cálculos y compararlos con ambos grupos de datos.

El mecanismo adicional utilizado para obtener resultados ha sido el mecanismo Creck. Este mecanismo fue desarrollado en 2020 por el laboratorio de ingeniería de reacciones y cinética químicas. Este está diseñado originalmente para simular la cinética química de reacciones de metano, aunque se han optimizado varias versiones de este para trabajar con H₂, CO, NH₃, y otros combustibles entre los que se incluye gas natural y GLP [27]. Este mecanismo ha sido validado [28] para estudios paramétricos de emisiones de NO_x y velocidades de llama para ser utilizado en simulaciones cinéticas de combustión de hidrógeno. Los resultados muestran gran similitud con los obtenidos mediante GRIMech 3.0, siendo por tanto distintos de los resultados experimentales obtenidos por S. Wang.

Habiendo sido validados de esta forma, se van a tomar como válidos los resultados de emisiones de compuestos NO_x obtenidos mediante GRIMech 3.0.



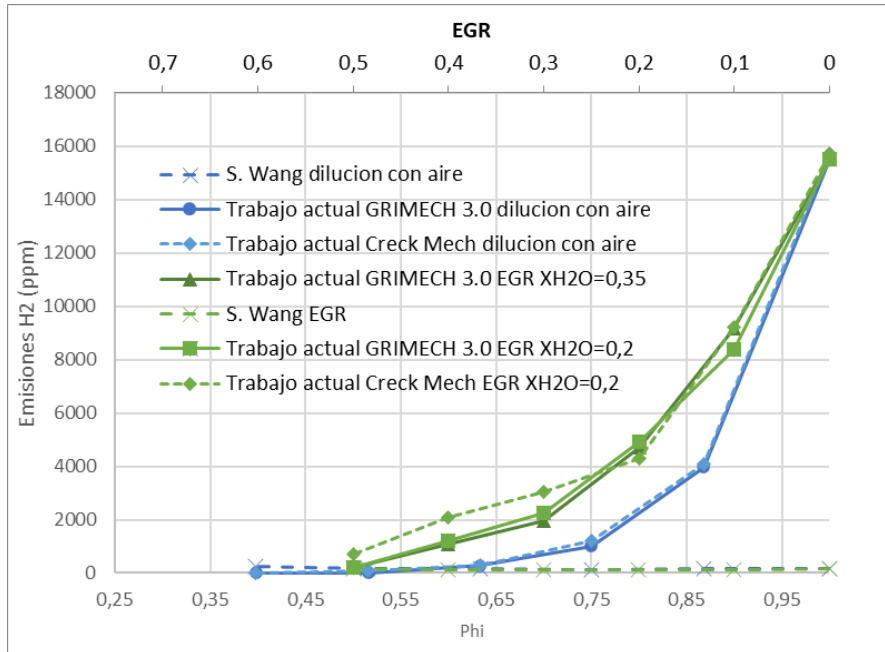
(a)



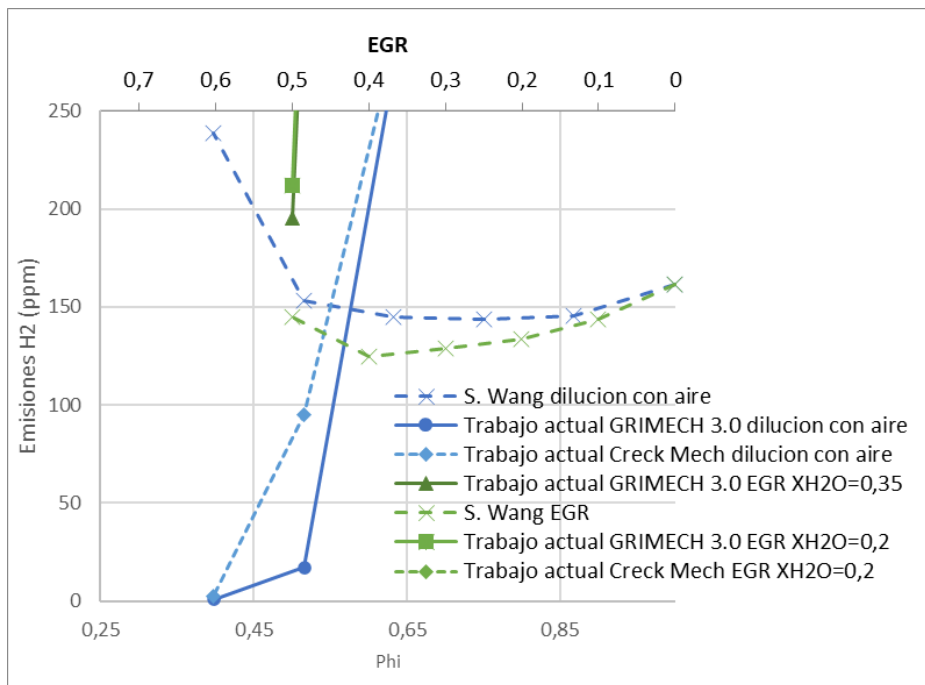
(b) Zoom figura (a)

Figura 5.7 Comparación de resultados de emisiones de NO en función de la cantidad de dilución

Se representan a continuación en la Figura 5.8 los resultados de emisiones de H_2 inquemado tras la combustión. Los resultados han sido obtenidos mediante el mecanismo GRIMEch 3.0, mediante el mecanismo Creck y comparados con los resultados del estudio de S. Wang.



(a)



(b)

Figura 5.8 (a) Comparación de resultados de emisiones de H_2 de combustión en función de la cantidad de dilución y (b) zoom en los resultados de S. Wang

Las emisiones de H₂ inquemado calculadas por Cantera arrojan valores muy distintos de los presentados por el estudio de referencia. Por ello, se han buscado otros mecanismos para simular reacciones de combustión de hidrógeno y emisiones. El mecanismo Creck ha sido indicado como uno fiable para este tipo de reacciones [28]. Tras comparar los resultados con los del mecanismo GRIMech 3.0, observamos resultados muy similares con ambos mecanismos. Por ello, se dan por válidos los resultados obtenidos según simulaciones con Cantera.

Después de los resultados presentados, se optará por realizar el resto de las simulaciones con el mecanismo GRIMech 3.0 ya que el mecanismo Creck, al ser más detallado y complejo, conlleva un alto coste computacional y temporal. En concreto, se estima que el coste computacional es 20 veces mayor [28].

5.4. Resultados de validación

Se ha comprobado la validez de diferentes parámetros de entrada y salida por comparación con otros estudios [19], [24], [25].

Los parámetros de entrada estudiados han sido dosado, fracción de EGR, temperatura y presión iniciales.

La validación del dosado y fracción de EGR es completa, ya que los resultados de velocidad de combustión obtienen resultados muy similares en comparación con los 3 estudios.

La validación de la presión y temperatura iniciales es correcta en los rangos en que han sido comparados los resultados con otros estudios. Dichos parámetros no han podido ser validados en todo el rango utilizado en el presente trabajo, dado a la carencia de estudios en estos rangos. Esta carencia se debe fundamentalmente a las dificultades técnicas de desarrollar equipos para combustión a altas presiones y temperaturas.

Los parámetros de salida estudiados han sido velocidad de combustión, temperatura adiabática de llama, sensibilidad de las reacciones, emisiones de NO y emisiones de H₂.

La validación de la velocidad de combustión y de sensibilidad es completa, al ser los resultados obtenidos por el presente estudio y por los estudios con los que se ha comparado enormemente similares.

La validación de las emisiones de NO y de H₂ se da por correcta por la comparación con el mecanismo Creck. De igual manera, la comparación con el estudio de S. Wang [19] es correcta para dosados pobres.

6. Estudio paramétrico: adición de EGR y disminución de dosado

Una vez validada la metodología y el mecanismo cinético utilizado, en este capítulo se presenta un trabajo en el que se estudian por separado el efecto de la adición de EGR a la combustión de hidrógeno y el efecto de la disminución del dosado en términos de emisiones, temperaturas y velocidades de combustión.

Para obtener resultados se han elegido una variedad de condiciones iniciales de presión, temperatura y composición que emulen las condiciones en el motor, de forma que se pueda realizar un estudio paramétrico de los tres parámetros de entrada.

Para ello, se han elegido 3 presiones y 3 temperaturas con valores a los que podría aclimatarse una cámara de combustión de un MCIA y que son valores verosímiles y posibles en nuestra aplicación.

En cuanto a la composición se han utilizado valores equiespaciados desde 1 hasta 0.3 para el dosado. El límite inferior está marcado por un valor a partir del cual el programa de simulaciones cinéticas no obtiene resultado válido: el resultado obtenido no sigue la misma tendencia o requiere de grandes recursos computacionales para ser obtenido. Se concluye que este valor presenta un límite inferior de inflamabilidad para las condiciones de presión y temperaturas estudiadas.

Las combustiones con recirculación han seguido una variación de 0 a 0.65 en la fracción de productos recirculados, manteniendo fijo un dosado igual a 1. El límite superior ha sido marcado por la misma razón mencionada anteriormente con respecto al límite inferior del dosado.

De esta forma, se han combinado los ensayos para realizar estudios en cuanto a la variación de dosados, temperatura, presión y grado de recirculación

Las condiciones de ensayo sin recirculación han sido las siguientes:

phi	P (bar)	T (K)
1	40	900
0,95	40	900
0,9	40	900
0,85	40	900
0,8	40	900
0,75	40	900
0,7	40	900
0,65	40	900
0,6	40	900
0,55	40	900
0,5	40	900
0,45	40	900
0,4	40	900
0,35	40	900

phi	P (bar)	T (K)
1	60	900
0,95	60	900
0,9	60	900
0,85	60	900
0,8	60	900
0,75	60	900
0,7	60	900
0,65	60	900
0,6	60	900
0,55	60	900
0,5	60	900
0,45	60	900
0,4	60	900
0,35	60	900

phi	P (bar)	T (K)
1	80	900
0,95	80	900
0,9	80	900
0,85	80	900
0,8	80	900
0,75	80	900
0,7	80	900
0,65	80	900
0,6	80	900
0,55	80	900
0,5	80	900
0,45	80	900
0,4	80	900
0,35	80	900

phi	P (bar)	T (K)
1	60	550
0,95	60	550
0,9	60	550
0,85	60	550
0,8	60	550
0,75	60	550
0,7	60	550
0,65	60	550
0,6	60	550
0,55	60	550
0,5	60	550
0,45	60	550
0,4	60	550
0,35	60	550

phi	P (bar)	T (K)
1	60	800
0,95	60	800
0,9	60	800
0,85	60	800
0,8	60	800
0,75	60	800
0,7	60	800
0,65	60	800
0,6	60	800
0,55	60	800
0,5	60	800
0,45	60	800
0,4	60	800
0,35	60	800

phi	P (bar)	T (K)
1	60	900
0,95	60	900
0,9	60	900
0,85	60	900
0,8	60	900
0,75	60	900
0,7	60	900
0,65	60	900
0,6	60	900
0,55	60	900
0,5	60	900
0,45	60	900
0,4	60	900
0,35	60	900

Mientras que las condiciones de ensayo con recirculación han sido las siguientes, manteniendo $\phi=1$:

XEGR	P (bar)	T (K)
0,05	40	900
0,1	40	900
0,15	40	900
0,2	40	900
0,25	40	900
0,3	40	900
0,35	40	900
0,4	40	900
0,45	40	900
0,5	40	900
0,55	40	900
0,6	40	900
0,65	40	900

XEGR	P (bar)	T (K)
0,05	60	900
0,1	60	900
0,15	60	900
0,2	60	900
0,25	60	900
0,3	60	900
0,35	60	900
0,4	60	900
0,45	60	900
0,5	60	900
0,55	60	900
0,6	60	900
0,65	60	900

XEGR	P (bar)	T (K)
0,05	80	900
0,1	80	900
0,15	80	900
0,2	80	900
0,25	80	900
0,3	80	900
0,35	80	900
0,4	80	900
0,45	80	900
0,5	80	900
0,55	80	900
0,6	80	900
0,65	80	900

XEGR	P (bar)	T (K)
0,05	60	550
0,1	60	550
0,15	60	550
0,2	60	550
0,25	60	550
0,3	60	550
0,35	60	550
0,4	60	550
0,45	60	550
0,5	60	550
0,55	60	550
0,6	60	550
0,65	60	550

XEGR	P (bar)	T (K)
0,05	60	800
0,1	60	800
0,15	60	800
0,2	60	800
0,25	60	800
0,3	60	800
0,35	60	800
0,4	60	800
0,45	60	800
0,5	60	800
0,55	60	800
0,6	60	800
0,65	60	800

XEGR	P (bar)	T (K)
0,05	60	900
0,1	60	900
0,15	60	900
0,2	60	900
0,25	60	900
0,3	60	900
0,35	60	900
0,4	60	900
0,45	60	900
0,5	60	900
0,55	60	900
0,6	60	900
0,65	60	900

6.1. Efecto de la presión y dosado a temperatura constante

Una vez validado el software Cantera para realizar este tipo de simulaciones, se procede a analizar los resultados obtenidos con este programa y realizar estudios paramétricos en función de diferentes variables, empezando con la presión inicial.

En la Figura 6.1 se observan los resultados de graficar la velocidad del frente de llama para mezclas al 100% H₂ frente al dosado (líneas continuas) o para mezclas de H₂ y diferente porcentaje de EGR (línea discontinua). En ella, se ve la relación que tiene la velocidad de combustión en función de estos parámetros. Las presiones a la que se ha realizado esta simulación son de 40, 60 y 80 bar, para una temperatura de 900K.

Para entender el efecto que tiene el dosado en la velocidad de combustión, basta con fijarse si la velocidad de combustión crece o decrece en las series de línea continua de izquierda a derecha.

Para realizar el análisis de la influencia del EGR, han de observarse las series de líneas discontinuas de derecha a izquierda, de forma que si los valores a la derecha son mayores que a la izquierda, la conclusión es que el EGR ayuda a que disminuyan estos valores.

El efecto que tiene la presión, y la temperatura en figuras del apartado siguiente, puede entenderse al leer la gráfica en dirección vertical. Para resultados obtenidos para el mismo dosado o EGR, si los resultados crecen para mayores presiones quiere decir que los aumentos de presión favorecen el aumento del parámetro estudiado.

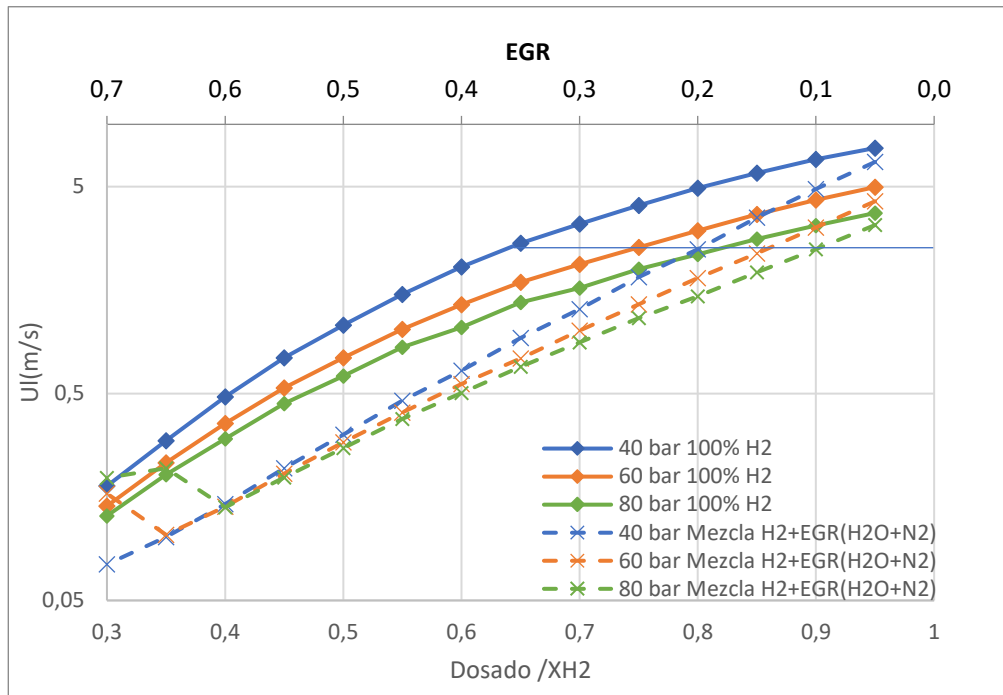


Figura 6.1: Velocidad de la llama en función de dosado composición. Ensayos a 900K y varias presiones

Se observa el efecto de la presión en la velocidad de llama. Para descensos de presión la velocidad de llama aumenta.

Se aprecia también el efecto de la variación de dosado o recirculación y la diferencia de estas. Cuando el dosado se empobrece la velocidad de llama disminuye. Ocurre lo mismo al aumentar la recirculación, haciendo que disminuya la velocidad de combustión. Sin embargo, El aumento de recirculación afecta de forma mucho más significativa a este descenso de velocidad de llama. Esto se debe a que como ha sido mencionado anteriormente, el H₂O y el N₂ son retardantes del proceso de combustión.

Por ejemplo, si nos fijamos en la línea horizontal de color azul que representa igualdad de velocidades de combustión, se obtiene la misma velocidad con aproximadamente un 18% de EGR que con un dosado de 0.65. Y se observa lo mismo para el resto de las presiones. Por tanto, el efecto del dosado es menor que el efecto de la adición de EGR.

Observamos a continuación en la Figura 6.2 como varían las temperaturas de llama en función del dosado y con distintos ajustes de presión.

Las variaciones de presión no tienen consecuencias en la temperatura de llama. Por otro lado, las variaciones de dosado o recirculación sí que afectan a la temperatura de llama. Se vuelve a observar cómo se obtienen las mismas

temperaturas para porcentajes de EGR por ejemplo de 30% y un dosado de 0.6. Dosados más pobres o recirculaciones de mayor valor implican una combustión de menor temperatura.

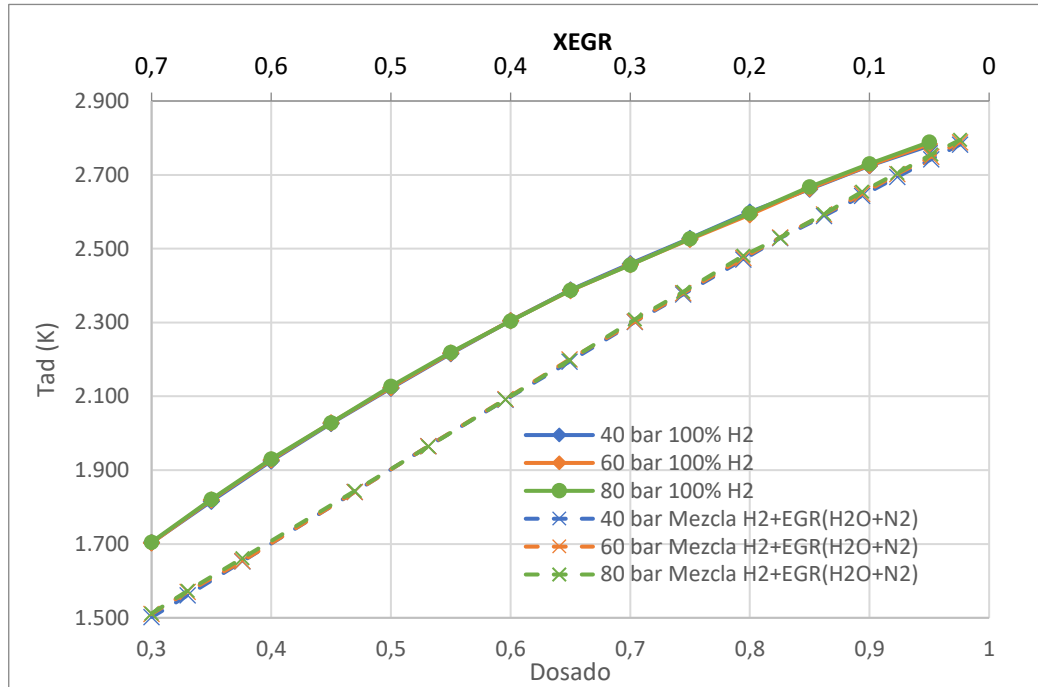


Figura 6.2: Temperatura adiabática de llama para (a) diversas presiones a 900K y (b) diversas temperaturas a 60 bar

En la Figura 6.3 se representan las emisiones de NO para ensayos a 40, 60 y 80 bar y a 900K. Se presentan también los resultados de emisiones de NO₂ en la Figura 6.4.

Las emisiones presentan un máximo en el caso de combustión sin recirculación. Este máximo de emisiones de NO se sitúa entre los dosados 1 y 0.8 para las presiones estudiadas. El aumento de la presión conlleva que este máximo se desplace hacia dosados más pobres. El máximo está situado en dosado 0.9 para presión de 40 bar, en dosado 0.85 para presión de 60 bar y en dosado 0.8 para presión de 40 bar. En el caso de las emisiones de NO₂ los máximos están en los dosados 0.8, 0.75 y 0.7 respectivamente.

Se observa que con el aumento de EGR se consigue una reducción de las emisiones más pronunciada que mediante una disminución de dosado. En los casos de recirculación no se observan máximos en la región de ensayo. Podría aparecer uno para dosados mayores al estequiométrico.

Generalmente, la disminución en la presión es favorable para una disminución en las emisiones. Esto se debe a que las reacciones de formación de NO requieren de gran energía de activación. Al trabajar con mayores presiones, la

mezcla posee mayor energía, por lo que requiere de menos energía calorífica para formar compuestos NO. Sin embargo, se destaca que, para recirculaciones de valores grandes (70%), las emisiones pueden ser menores a mayores presiones.

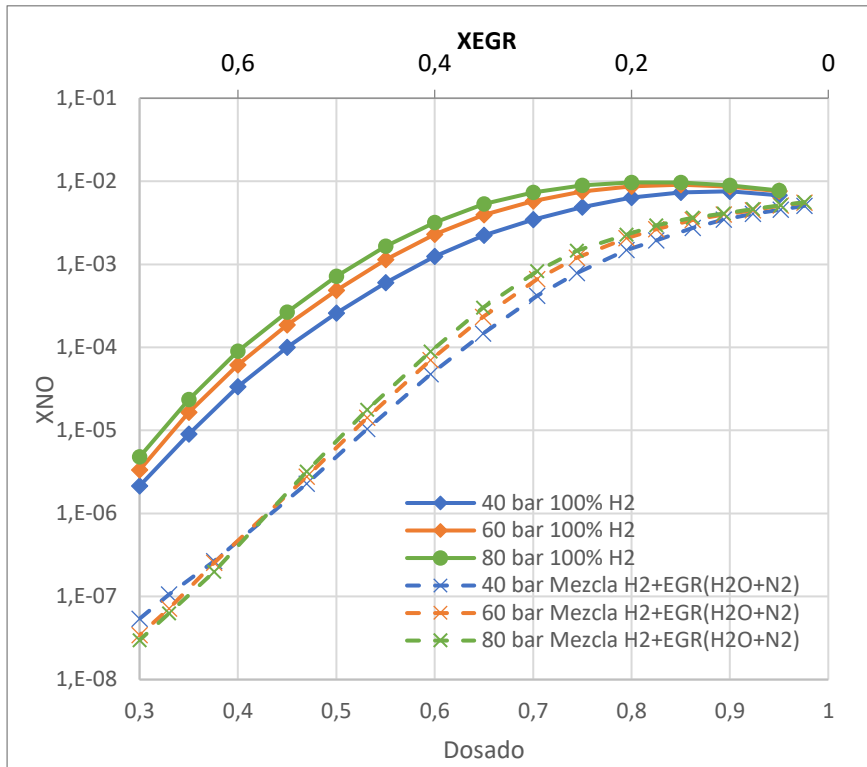


Figura 6.3 :Emisiones de NO en función de dosados a 900K y diferentes presiones

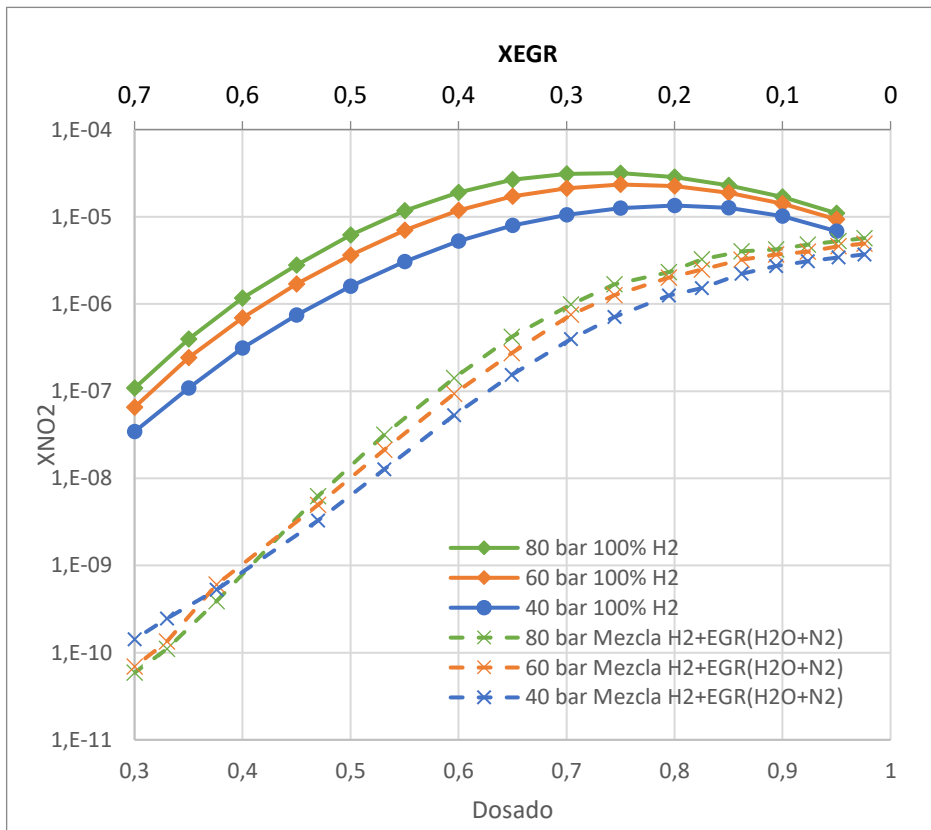


Figura 6.4 :Emisiones de NO₂ para distintos dosados a 900K y distintas presiones

Se grafican a continuación en la Figura 6.5 de nuevo la disminución de emisiones de OH con la recirculación.

El empobrecimiento del dosado y el aumento de la recirculación llevan de nuevo a emisiones de hidróxidos de valores menores.

En este caso, la presión tiene efectos poco significativos en la formación de OH.

Los efectos de la recirculación son de nuevo significativos para este parámetro. La combustión con recirculación tiene una presencia mucho menor de emisiones de OH. Este descenso crece cuando nos acercamos a zonas con menor presencia de hidrógeno en la mezcla inicial. Estos son ensayos con mayores recirculaciones o menores dosados.

Se grafican en la Figura 6.6 las emisiones de gas H_2 inquemado. Observamos un aumento de la presencia de gas H_2 sin quemar al introducir recirculación. Vemos por tanto que con recirculación aumenta la fracción de hidrógeno que no se ha quemado. Al disminuir el dosado o aumentar la recirculación, disminuye la fracción de hidrógeno en los productos. Vemos por tanto que de esta forma se agota más el hidrógeno de los reactivos.

La presión tiene un efecto pequeño en la fracción molar de hidrógeno a la salida, como observamos en la Figura 6.6. A mayores presiones, el H_2 disminuye ligeramente, ya que se favorece la formación de H_2O .

Se han graficado en la Figura 6.7 los resultados de las simulaciones para las emisiones de iones hidrógeno tras la combustión. Una mayor presencia de estos le daría un brillo anaranjado característico a la combustión.

Se observa que con la disminución del dosado o el aumento de la recirculación, desciende la emisión de estos iones. Sin embargo, en los casos de recirculación se observa una menor presencia de iones H^+ .

Las variaciones de presión afectan de forma mínima a las emisiones de OH, H_2 y H^+ . Los aumentos de presión favorecen ligeramente la emisión de OH y H_2 , mientras que hacen disminuir las emisiones de H^+

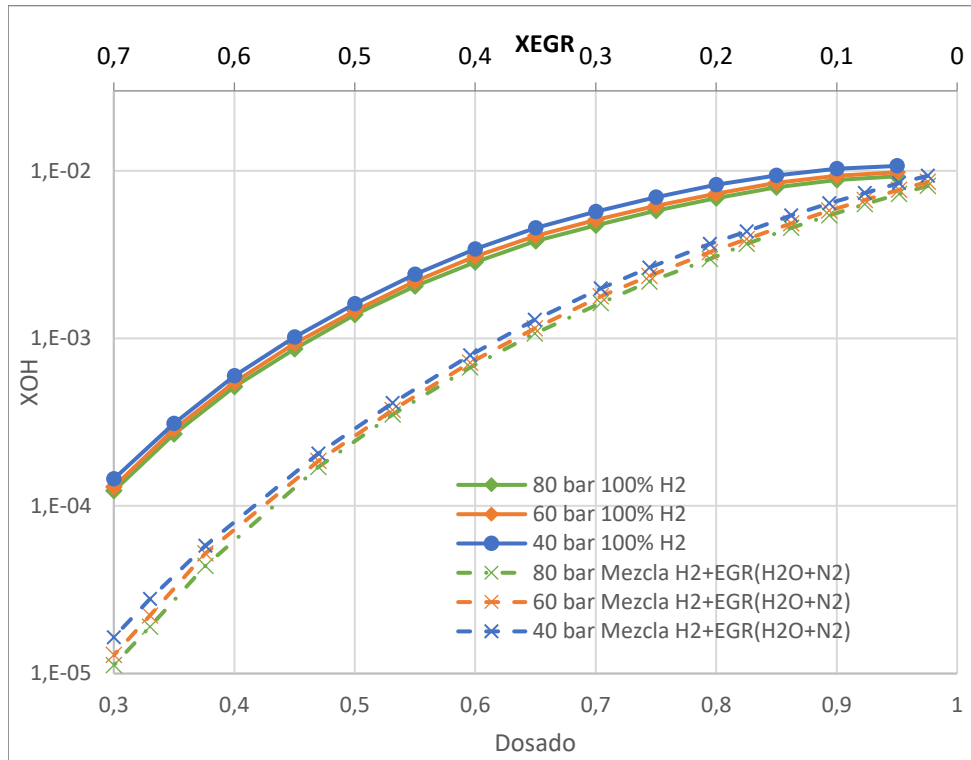


Figura 6.5 :Emisiones de OH para distintos dosados a 900K y distintas presiones

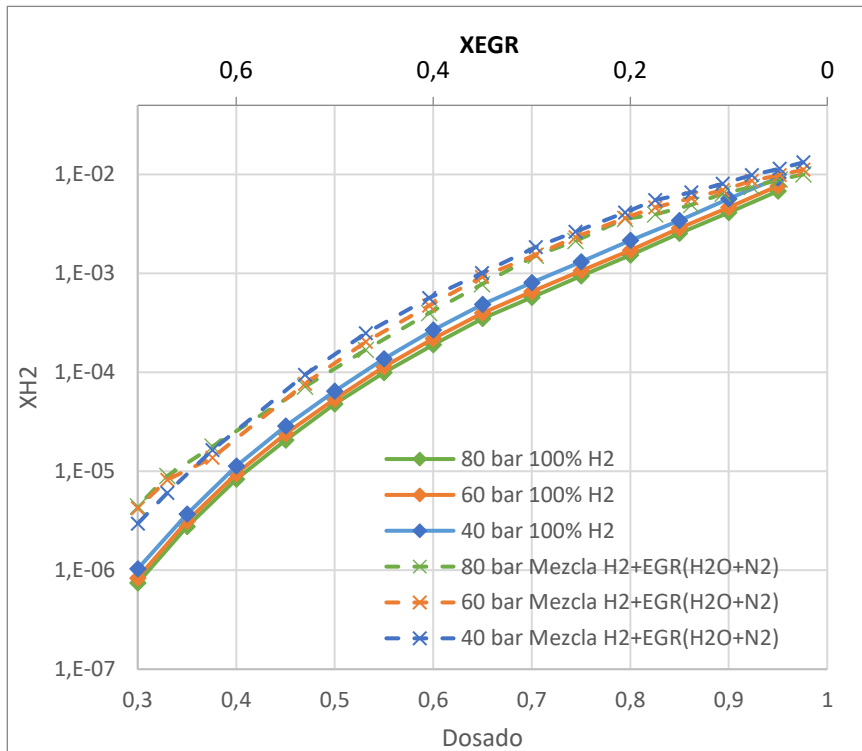


Figura 6.6 :Emisiones de H₂ inquemado para distintos dosados a 900K y distintas presiones

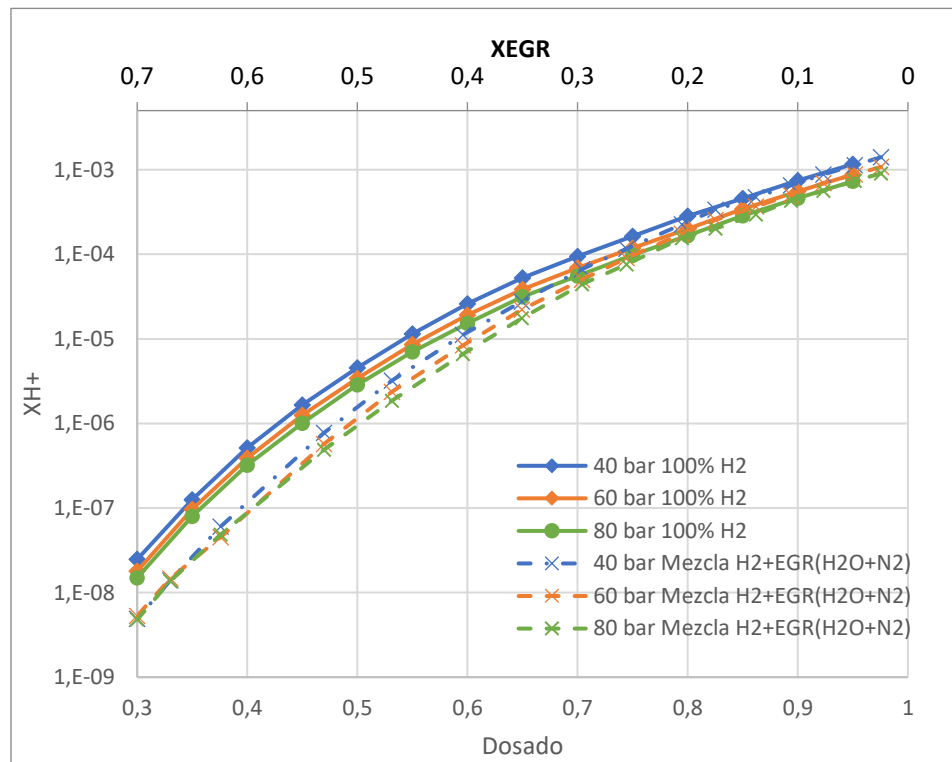


Figura 6.7 :Emisiones de H^+ quemado para distintos dosados (a) 900K, distintas presiones y (b) 60 bar y diversas temperaturas

6.2. Efecto de la temperatura y dosado a presión constante

Se presenta la Figura 6.8 para relacionar las variaciones de temperatura con la velocidad de combustión.

Con respecto al efecto de la disminución del dosado en combustiones 100% H₂ o la adición de EGR, se observa el mismo efecto que veíamos en el apartado anterior.

Para el estudio del efecto de la variación de temperaturas sobre la temperatura de combustión se ha realizado la Figura 6.9.

Las diferencias de temperatura inicial provocan variaciones significativas en la temperatura de la llama. La relación es directa. A mayor temperatura inicial, crece también la temperatura de la llama.

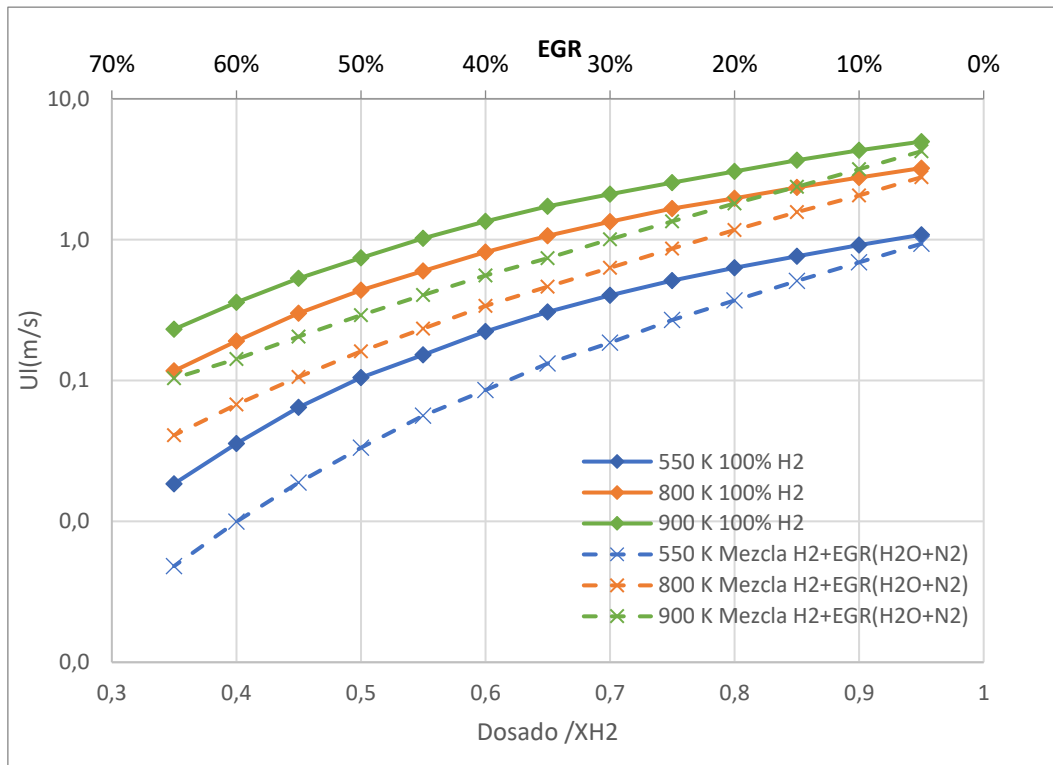


Figura 6.8 Velocidad de la llama en función de dosado composición. Ensayos a 60 bar y varias temperaturas

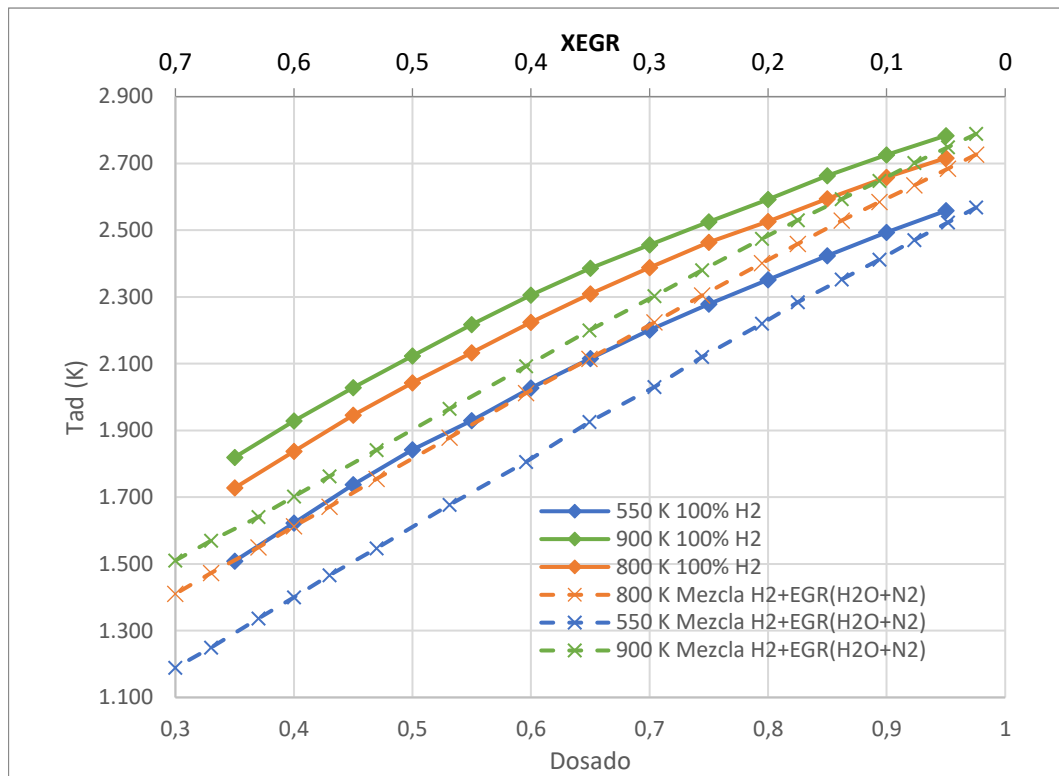


Figura 6.9: Temperatura adiabática de llama para diversas temperaturas a 60 bar

Estudiando estos efectos se observa que la temperatura inicial afecta significativamente a la velocidad de combustión. Una mayor temperatura se traduce en una velocidad de combustión mucho mayor. Esto puede deberse a que los reactivos tienen mayor energía, por lo que es necesaria menos energía para alcanzar la energía de activación y comenzar la reacción.

Se han graficado también las emisiones de NO y NO₂ en relación con las temperaturas iniciales en la Figura 6.10 y la Figura 6.11 respectivamente.

Observamos que un descenso de temperaturas favorece la disminución de emisiones de ambos compuestos. Se observa además que, en los casos de recirculación, el efecto del descenso de temperaturas es más significativo.

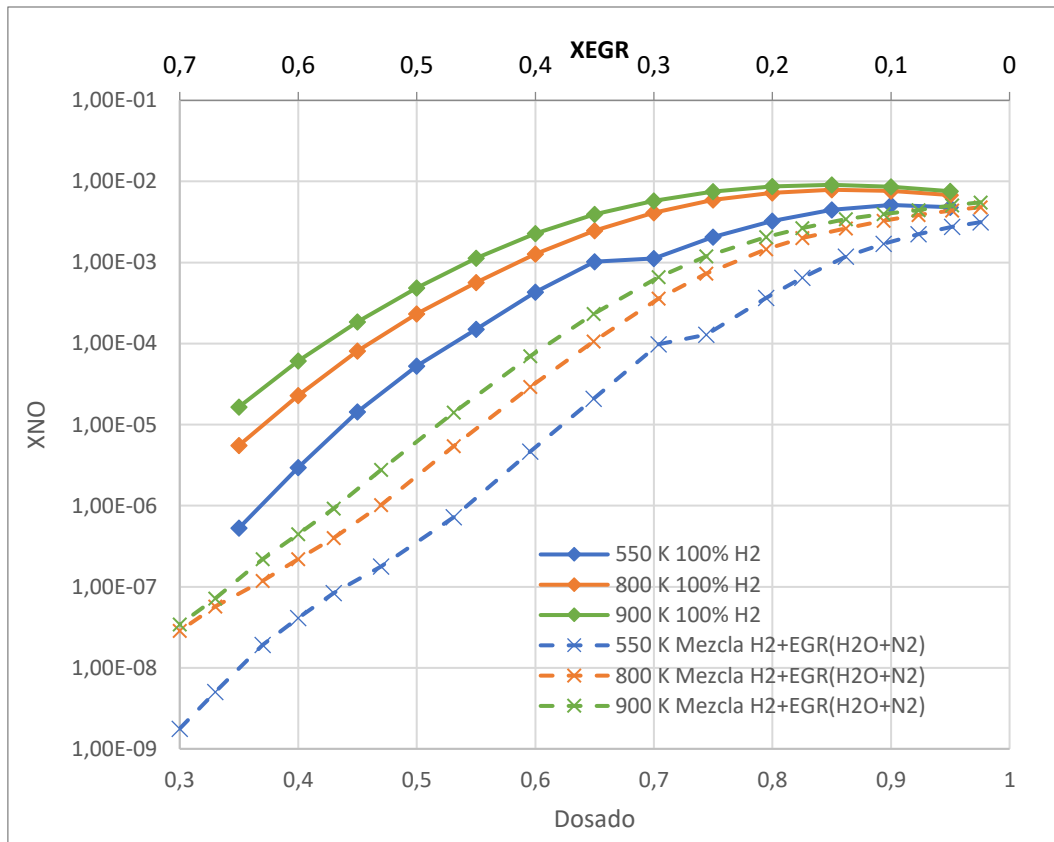


Figura 6.10 :Emisiones de NO para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas

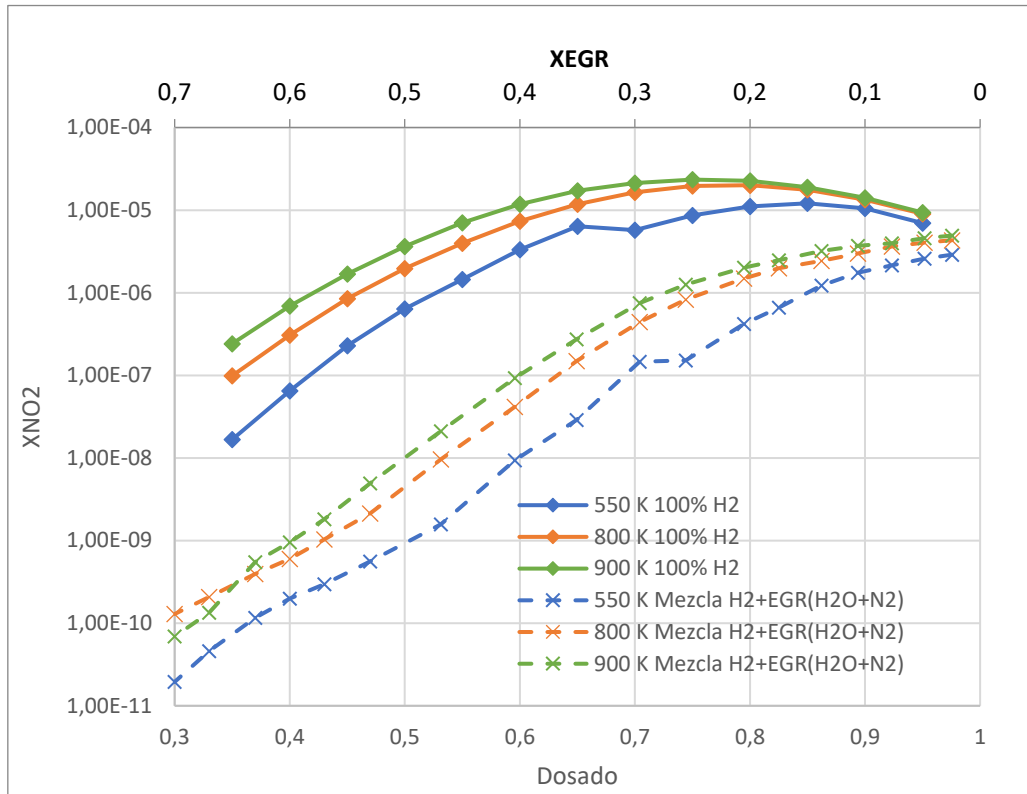


Figura 6.11 :Emisiones de NO₂ para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas

Se han analizado también los efectos de la variación de temperaturas iniciales para la emisión de OH, H₂ y H⁺ en la Figura 6.12, Figura 6.13 y Figura 6.14 respectivamente.

La disminución de temperaturas iniciales favorece la emisión de una menor cantidad de OH. Esta disminución es de nuevo más efectiva para casos de recirculación de productos.

En cuanto a la emisión de H₂, la disminución de temperaturas conlleva también una emisión menor de estos compuestos. Sin embargo, la relación con la recirculación varía en función de la temperatura. Para el caso de 900K y 800K, la recirculación hace que aumenten las emisiones de H₂. Para el caso de 800K, las emisiones son solo ligeramente superiores con recirculación para recirculaciones menores del 60%. Todo esto indica que, para una presión dada, la recirculación puede favorecer o dificultar la emisión de inquemados dependiendo de la temperatura.

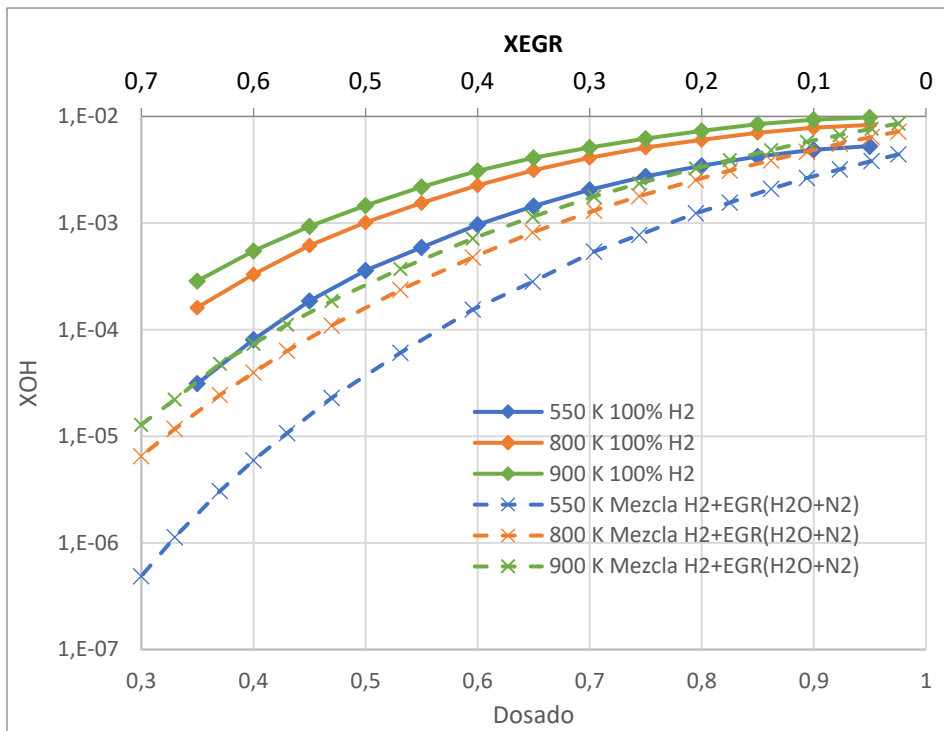


Figura 6.12 :Emisiones de OH para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas

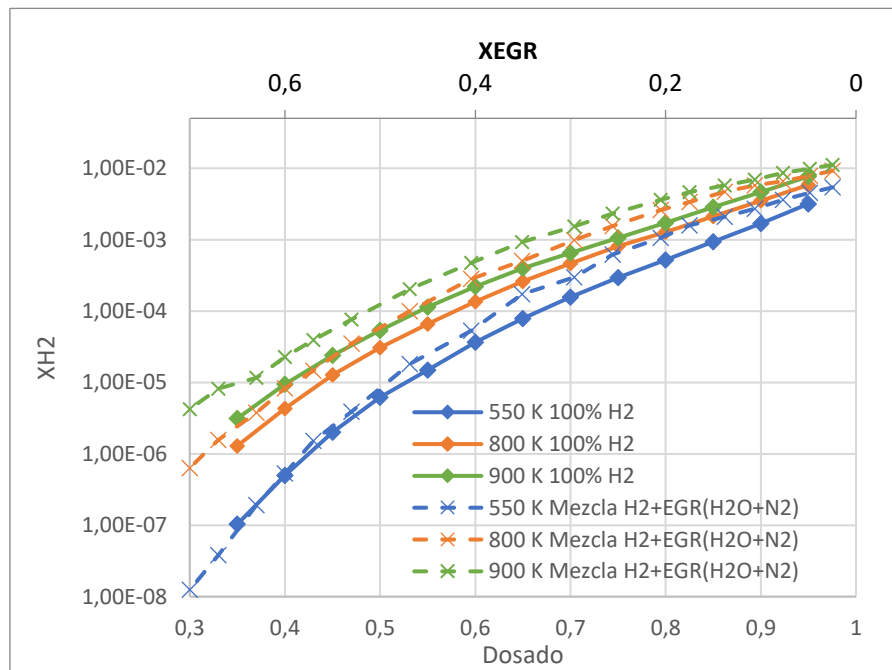


Figura 6.13 :Emisiones de H₂ quemado para distintos dosados a 60 bar y diversas temperaturas

En relación con la emisión de iones H⁺ observamos un descenso de este tipo de emisiones cuando desciende la temperatura. De nuevo, un descenso de

temperaturas dificulta la emisión de estos iones, haciéndose más significativo este descenso en casos de recirculación.

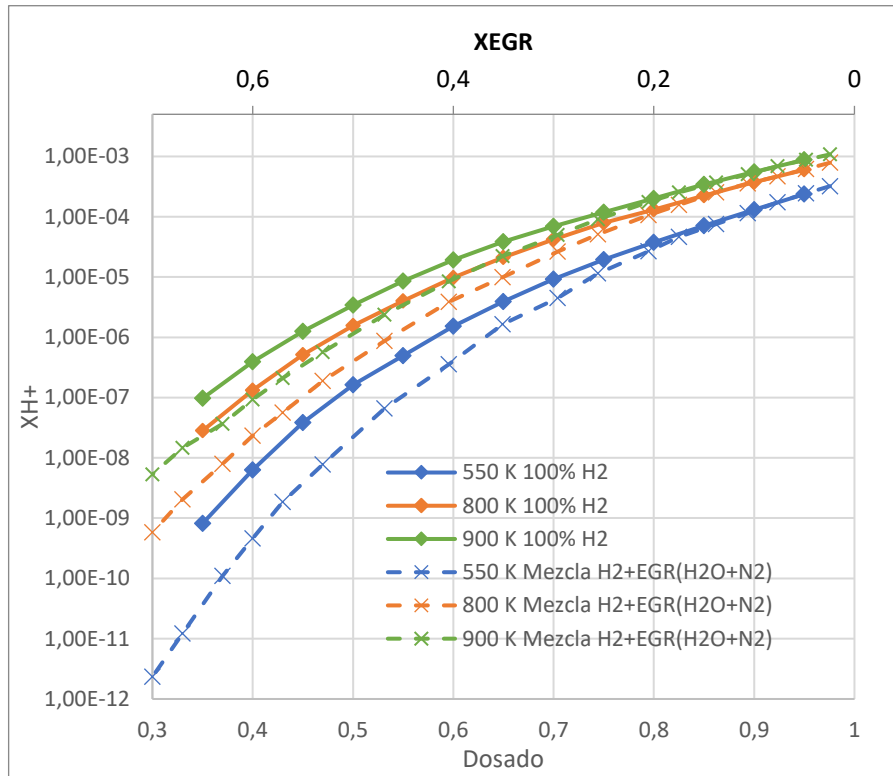


Figura 6.14: Emisiones de H^+ inquemado en función del dosado a 60 bar y diversas temperaturas

Tras esta sección, parece que el efecto general del uso de EGR disminuye las emisiones, aunque también hace que disminuya la velocidad de combustión y por tanto la calidad de la combustión. Esto podría ser debido a que al introducir EGR se está disminuyendo el gasto de H_2 en mayor medida que al reducir el dosado.

Para clarificar cual de los dos métodos es mejor para disminuir las emisiones contaminantes, se elabora en el apartado 6.3 un análisis extensivo de varias de las propiedades en conjunto la introducción de EGR en la combustión. En esa sección también se arrojan conclusiones sobre la conveniencia de uno u otro método según el caso de estudio y del objetivo de cada ensayo.

6.3. Análisis de resultados del estudio paramétrico

Se procede a analizar los resultados obtenidos tratando de integrarlos en la construcción de un motor MCIA.

El siguiente parámetro indica una combustión de más calidad y un trabajo del motor más eficiente cuanto mayor sea su valor:

- Velocidad de combustión: Cuanto mayor sea la velocidad de combustión, será también más eficiente.

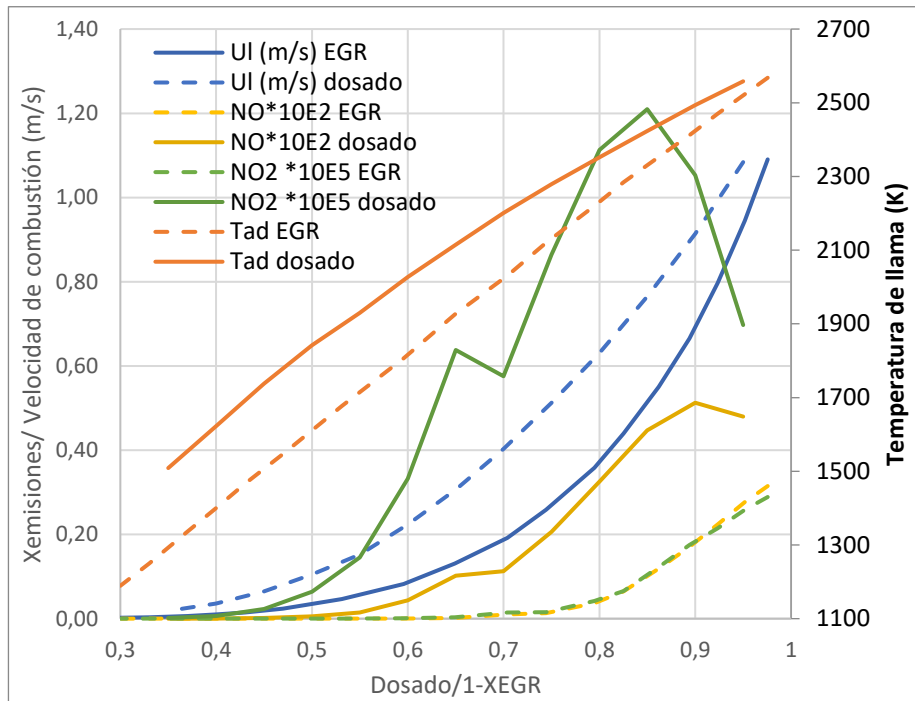
Los siguientes parámetros son seleccionados para buscar el menor valor entre ellos:

- Emisiones de NO_x : Cuanto menor sea el valor de estas emisiones, menor será el impacto de los MCIA que utilicen hidrógeno como combustible en la salud pública. Tendrán además mayor facilidad para cumplir con regulaciones de emisiones y serán menos perjudiciales para el medio ambiente, ya que estos compuestos desintegran la capa de ozono.
- Temperatura adiabática de llama: Cuanto mayor sea la temperatura de la llama, mayor será el calor transmitido a las paredes del motor y por tanto mayor será la energía perdida

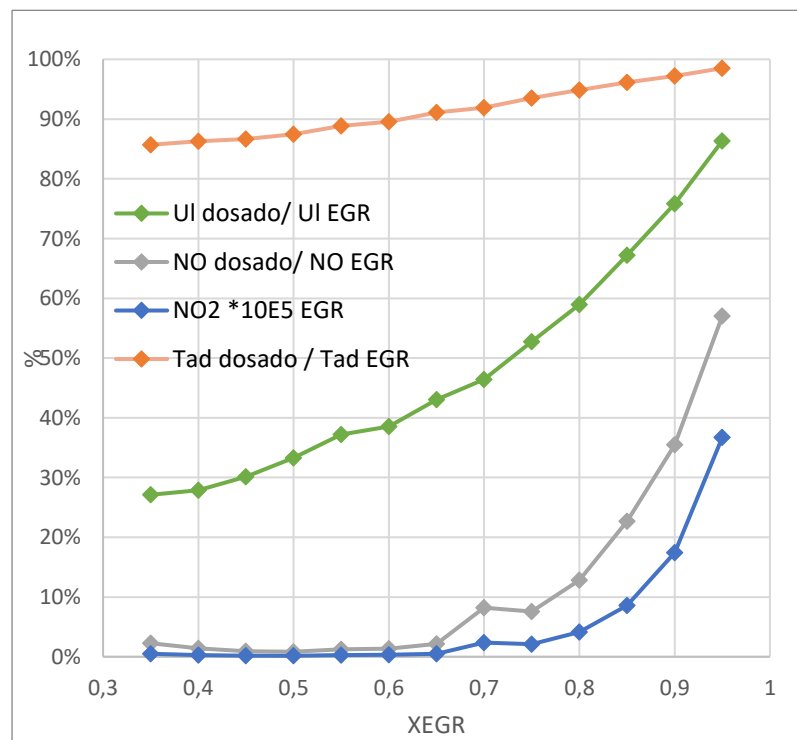
Estos parámetros han sido graficados en la Figura 6.15. Para una combustión a 550K y 60 bar. Observamos de los resultados que, en el caso de la recirculación, se reducen las emisiones en gran medida. La velocidad de combustión también se reduce, aunque en una menor medida. Esto contribuye a conseguir unas emisiones de un valor mucho menor perdiendo menos velocidad de combustión que si se actuase sobre el dosado.

En el análisis de cómo se reduce cada variable, vemos que con la creciente recirculación aumenta la reducción de emisiones, velocidades y temperatura que consigue esta. De esta forma, para valores de recirculación mayores al 30% se obtiene una reducción drástica de las emisiones.

En caso de un EGR de 30%, la reducción de emisiones que se obtiene es del 92% en NO y del 97.5% en NO_2 . La velocidad de combustión se reduce un 53% y la temperatura de combustión desciende en 200K. Estas reducciones en las emisiones son muy significativas y positivas, mientras que la reducción velocidad de combustión es asumible en ese valor.



(a)



(b)

Figura 6.15 Emisiones de NO y NO₂, velocidad de combustión y temperatura de llama en función de dosado y recirculación para combustión a 550K y 60 bar. Valores totales (a) y cociente entre resultados con dosado y con recirculación (b)

Con la intención de representar las posibilidades del uso de EGR en MCIA de hidrógeno, se han calculado las emisiones en las unidades que sigue la normativa Euro VI[29] y Euro VII[30] de emisiones para vehículos pesados.

Dichos resultados están representados en la Figura 6.16, donde se representan las emisiones específicas de compuestos NO_x por unidad de energía producida. La energía calculada se obtiene una masa unitaria de hidrogeno, del PCI del hidrógeno y un 40% de eficiencia, El valor de eficiencia se ha escogido de acuerdo con eficiencia ya alcanzada en combustión de hidrógeno.

Observamos cómo la recirculación permite cumplir con la normativa para recirculaciones a partir del 40%, mientras que sin recirculación sería necesario un dosado menor a 0.4. Trabajar en dosados tan pobres es una desventaja, ya que el límite de inflamabilidad inferior se encuentra en torno a 0.33 Fijándonos en ambos puntos y en relación con valores obtenidos anteriormente para velocidades de combustión, se obtendría una velocidad de combustión 3 veces mayor para el caso de recirculación que para el caso de dosado (ver Figura 6.16).

El análisis con relación a la futura normativa a aplicar Euro VII es similar. El valor de emisiones será muy difícil de alcanzar mediante dosado, estando muy cerca del límite inferior de inflamabilidad. Con EGR se podría sin embargo cumplir con el límite mínimo de emisiones obteniendo además mejores resultados en algunos parámetros como velocidad de combustión.

También se concluye de esta gráfica un aprovechamiento mucho más eficiente de la energía en el caso de EGR. Por cada unidad de potencia útil obtenida se produce un valor mucho menor de emisiones de compuestos nocivos.

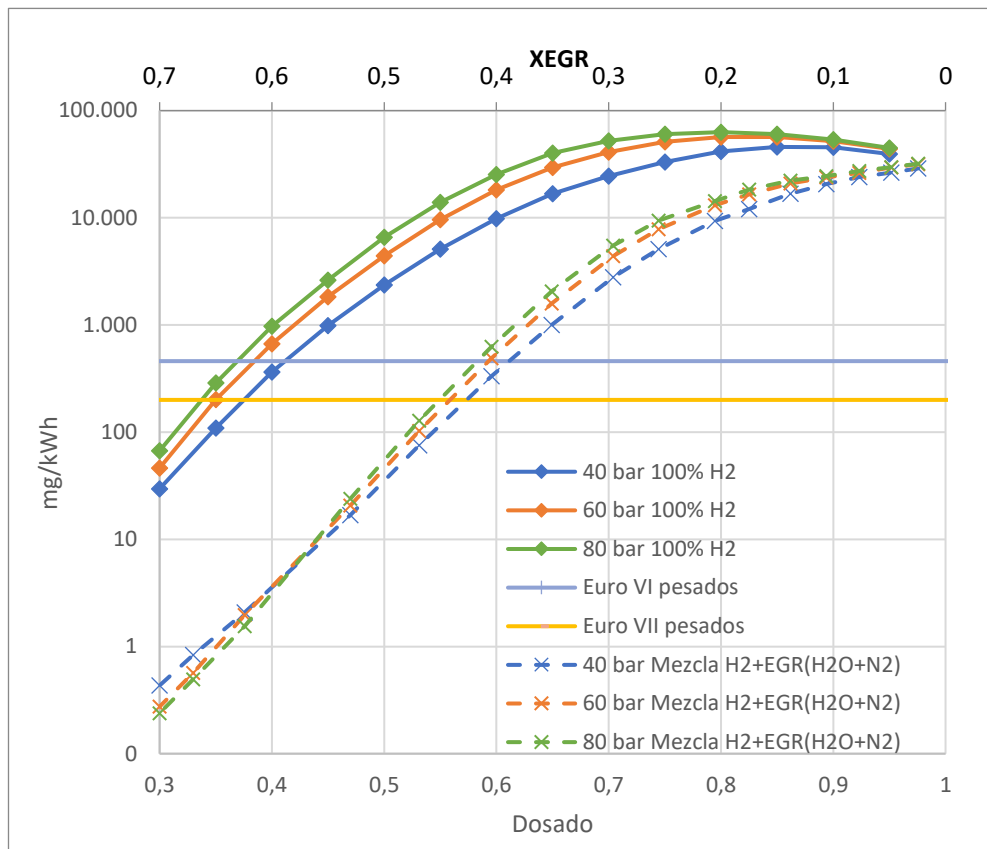


Figura 6.16 Emisiones de NOx a 900K para distintas presiones en comparación con el límite impuesto por la normativa Euro VI

Para relacionar la disminución del dosado con la recirculación, se han calculado los valores que proporcionan la misma velocidad de frente de llama para uno u otro. Todo ello se representa en la Figura 6.17. Estos valores equivalentes comparten una gran similitud en cada una de las tres presiones.

Obtenemos por tanto una tendencia que se puede asumir como no dependiente de la presión, de la que extraemos la ecuación:

$$X_{EGR} = 0.8581\varphi^2 - 1.9602\varphi + 1.1196$$

Ecuación 6.1: Relación entre tasa de recirculación y dosado

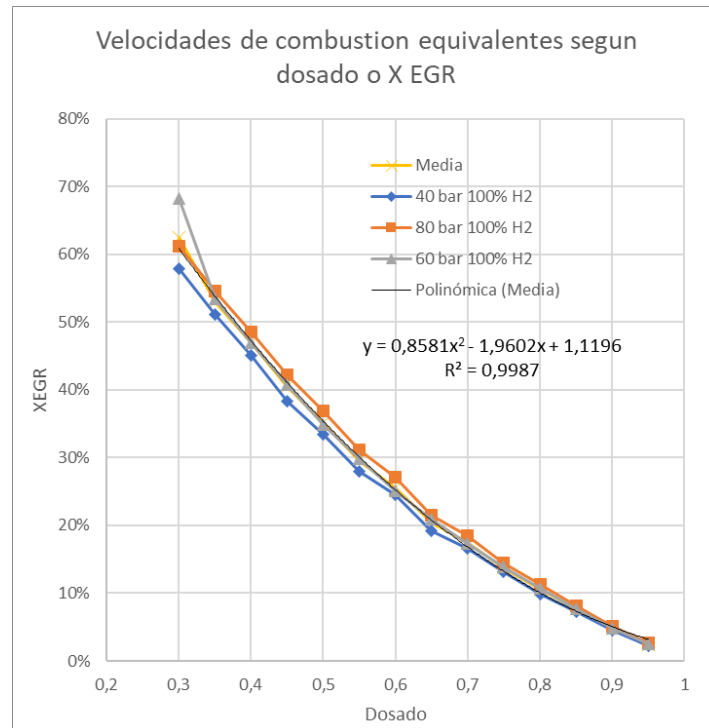
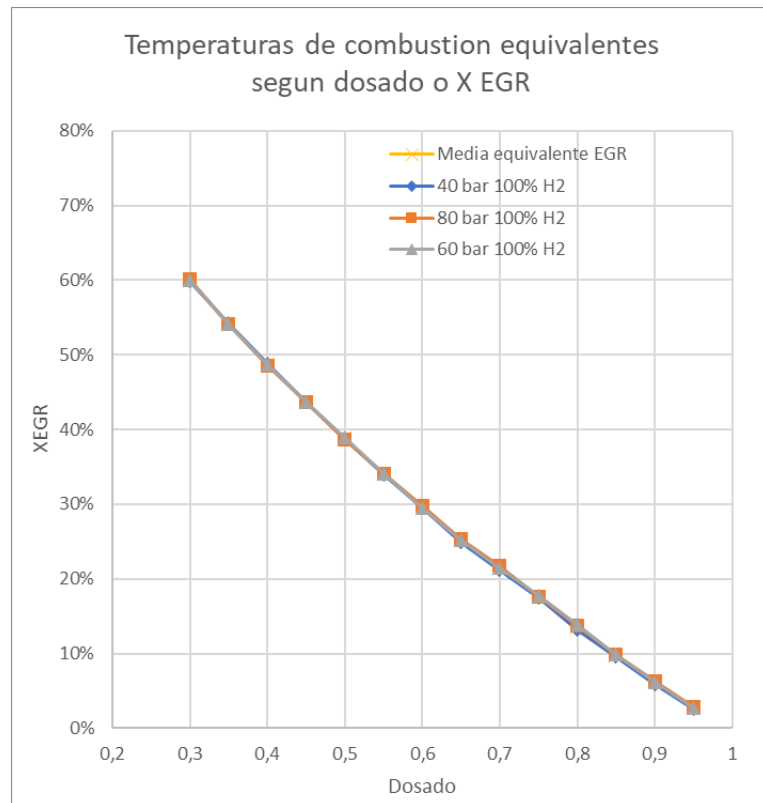


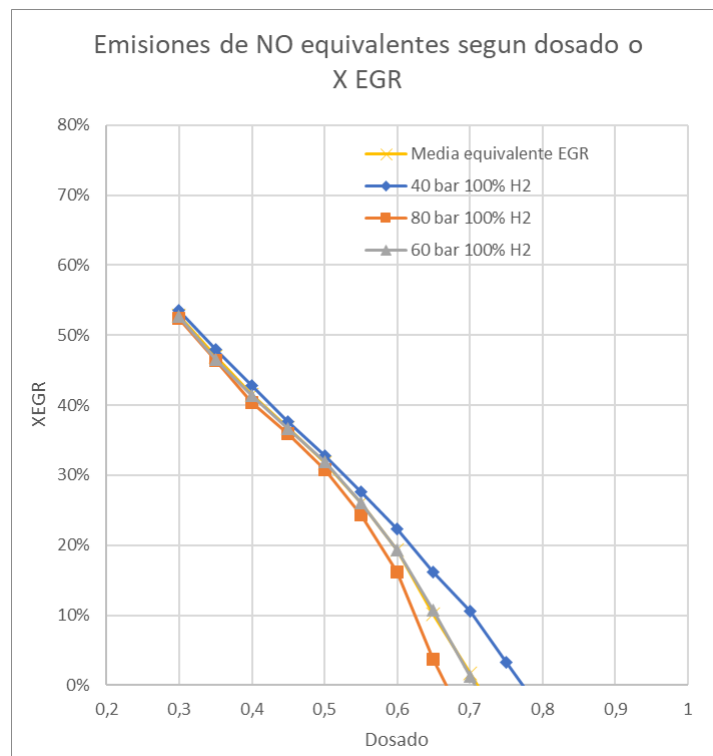
Figura 6.17: Relación entre recirculación y dosado para velocidades de combustión iguales

También se han obtenido valores de EGR cuya temperatura adiabática de llama y emisiones de NO, NO₂ y OH son equivalentes. Los resultados han sido graficados en la Figura 6.18.

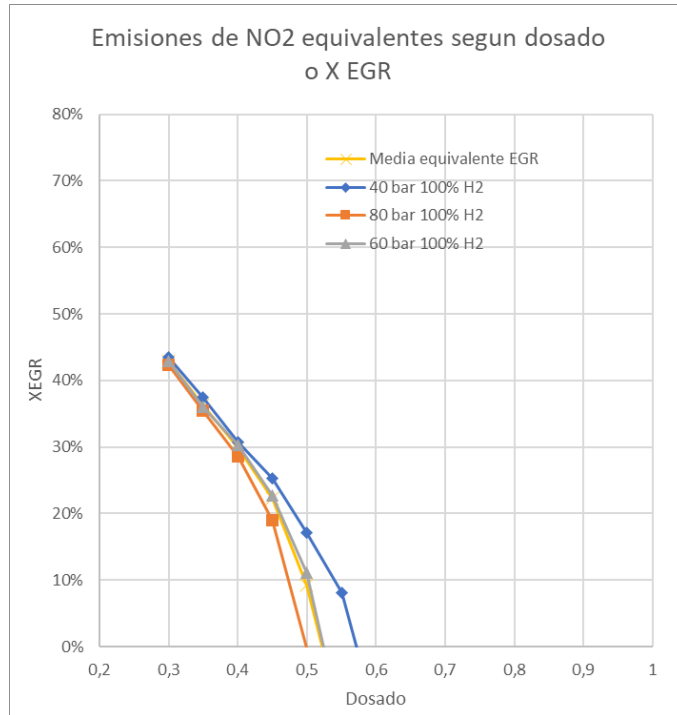
Se observa en las gráficas (b) y (c) de la Figura 6.18 que con recirculación se obtiene una gran reducción de las emisiones, sobre todo para valores de recirculación menores al 30% en el caso del NO y 55% en el caso del NO₂. Para valores de recirculación mayores, utilizar recirculación sigue siendo más favorable, aunque la diferencia entre usar dosado y recirculación es menos acusada.



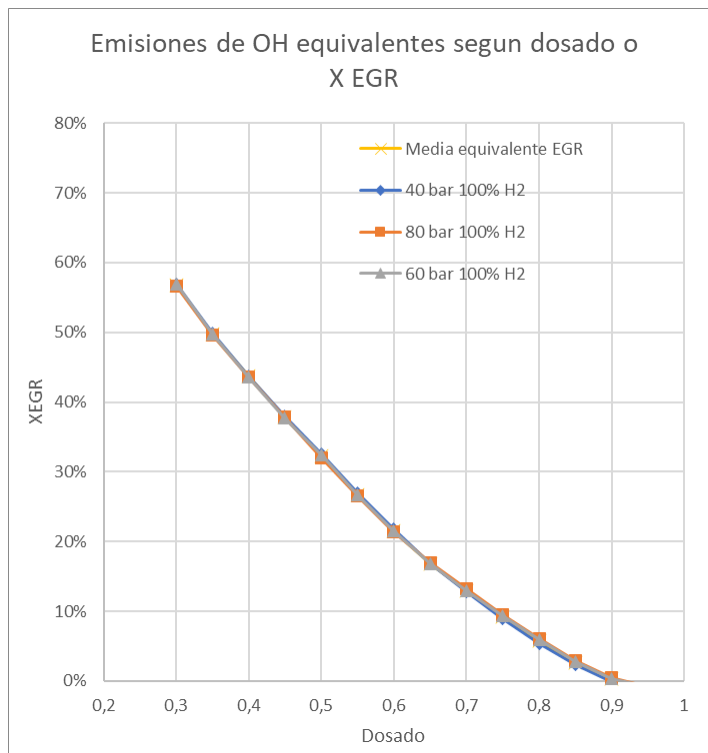
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.18 Valores de EGR equivalentes a dosado en temperatura adiabática de llama (a), emisiones de NO (b), de NO₂ (c) y OH (d)

Puesto que la versión de Cantera a fecha de realización de este trabajo no permite obtener la eficiencia de la combustión, se han representado los resultados de emisiones y temperatura adiabática de llama para iguales velocidades de combustión con objetivo de comparar la calidad de la combustión.

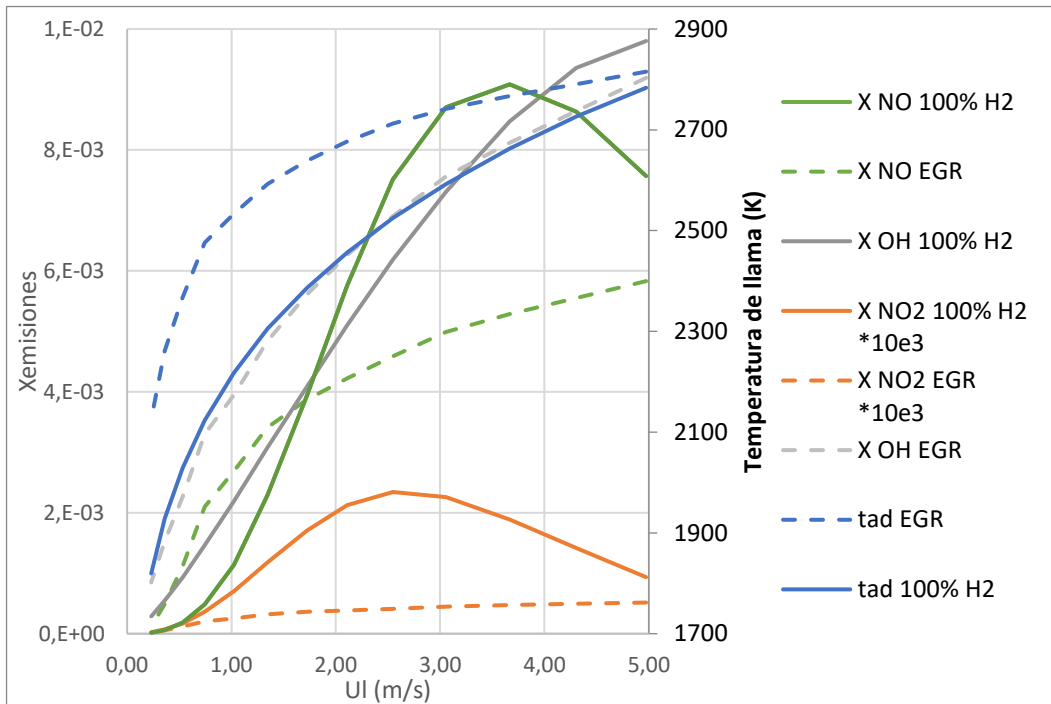
Estos resultados son observados en la . Figura 6.19. Se representan las emisiones de simulaciones de combustión de 100% H₂ en línea continua, mientras que las emisiones de simulaciones con EGR se representan con líneas discontinuas.

La temperatura adiabática de llama es siempre mayor en caso de utilizar EGR dentro del rango de estudio

Las emisiones de NO₂ son siempre menores en caso de utilizar EGR en el rango de estudio.

Si tomamos como referencia las emisiones de NO, en este caso utilizar EGR reduce las emisiones para velocidades de combustión mayores a 1,8 m/s. El valor de EGR con el que obtenemos esta velocidad es de un 20%, y en el caso del dosado es un 65%. Para valores de EGR mayores al 20% observamos que las emisiones son menores en el caso de variación de dosado.

En el caso de las emisiones de OH, utilizar EGR reduce las emisiones para velocidades de combustión mayores a 3.2 m/s. Esto son dosados > 0.87 o EGR < 6.5%, por lo que el rango en que es beneficioso el uso de EGR es muy limitado.



. Figura 6.19: Comparación de emisiones y temperaturas de llama adiabáticas para combustiones a 60 bar, 900K para velocidades de combustión iguales

Tras este análisis se concluye que los EGR no son mejor opción que la variación de dosado si la velocidad de combustión es un parámetro crítico en el caso de estudio.

Finalmente, se ha realizado un análisis de las emisiones y la temperatura de llama adiabática en función de la fracción molar de hidrógeno en la mezcla inicial. Los resultados obtenidos para una combustión a 900K y 60 bar se representan en la Figura 6.20. En ella se observa una reducción en todos los valores de emisiones y temperaturas en el caso de combustión con EGR frente a combustiones de 100% H₂.

En cuanto a la cantidad de emisiones por mol de hidrógeno utilizada, la combustión con EGR ofrece mejores resultados que sin recirculación de gases de escape. Por cada unidad de masa que se queme o por cada unidad de potencia que se obtenga, se estarán produciendo menos emisiones contaminantes si se realiza combustión con EGR.

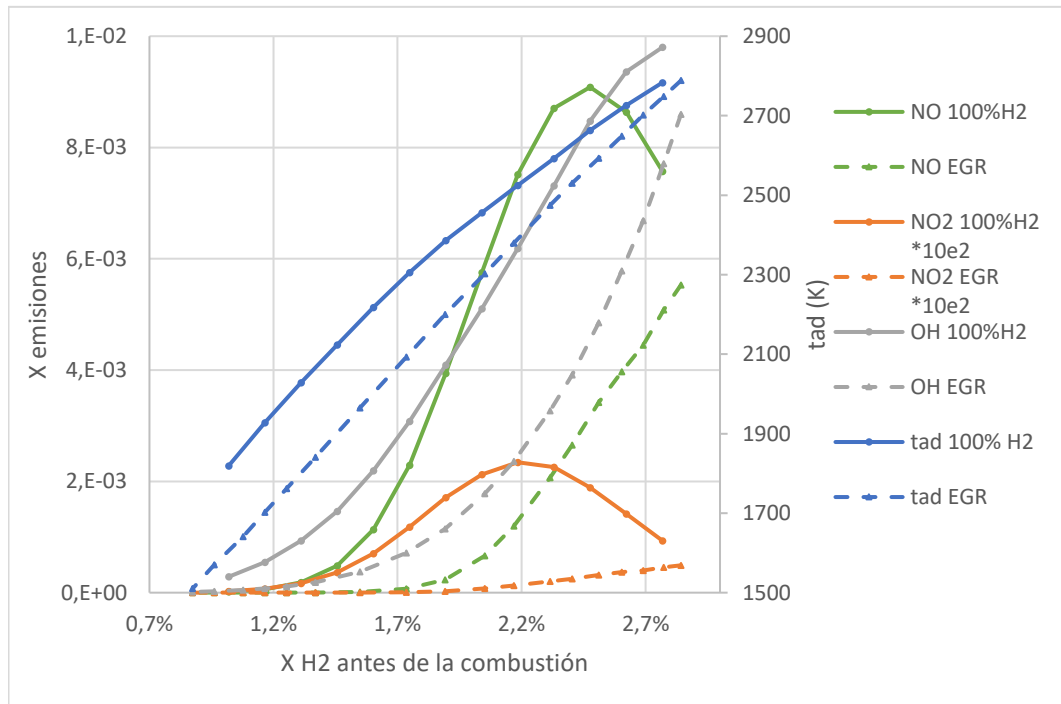


Figura 6.20: Comparación de emisiones en combustión de 100% H₂ o EGR en función de la fracción molar inicial de H₂. Ensayos a temperatura 900K y presión 60 bar

7. Cálculo de parámetros

Se realiza a continuación un estudio de la influencia de temperatura, presión, dosado y grado de recirculación en otros parámetros termodinámicos importantes en caso de aplicaciones reales de la combustión de hidrógeno, como en el caso de la aplicación a MCIA. Dichos parámetros son capacidad calorífica, conductividad térmica, números de Lewis y Prandtl, viscosidad, emisiones de H⁺, densidad de reactivos y de productos y energías de activación.

7.1. Capacidad calorífica y conductividad térmica

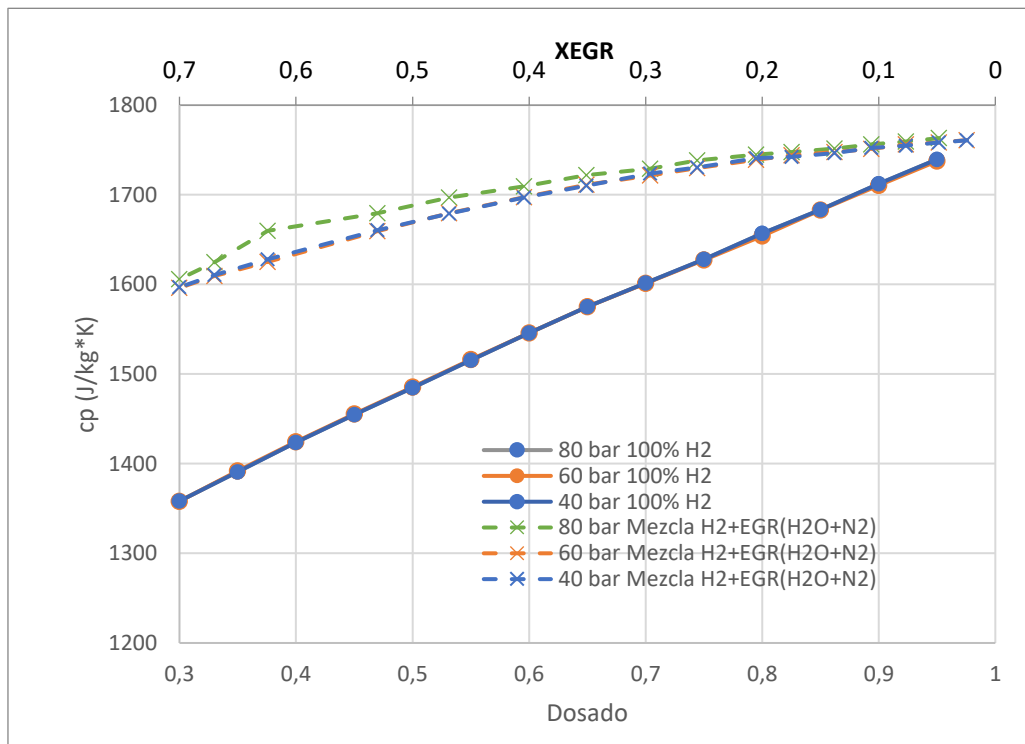
La capacidad calorífica y la conductividad térmica de la mezcla caracterizan la eficiencia de un motor. Cuanto más calor absorba el fluido, más trabajo transmitirá a los pistones, ya que se dilatará más. De la misma forma, cuanto menos calor transmita a las paredes del cilindro, tendremos menos pérdidas de energía por calor. De ellas dependerá la energía calorífica que será perdida al ser disipada por las paredes del motor. El valor de estas tendrá también consecuencias en parámetros como la carga frigorífica necesaria para refrigerar el motor y la temperatura de los gases de escape, entre otros.

Se grafican los resultados de estos parámetros en la Figura 7.1 para diferentes dosados y presiones y en la Figura 7.2 para diversos dosados y temperaturas. Observamos un aumento de la conductividad y del calor específico para recirculaciones menores y dosados mayores.

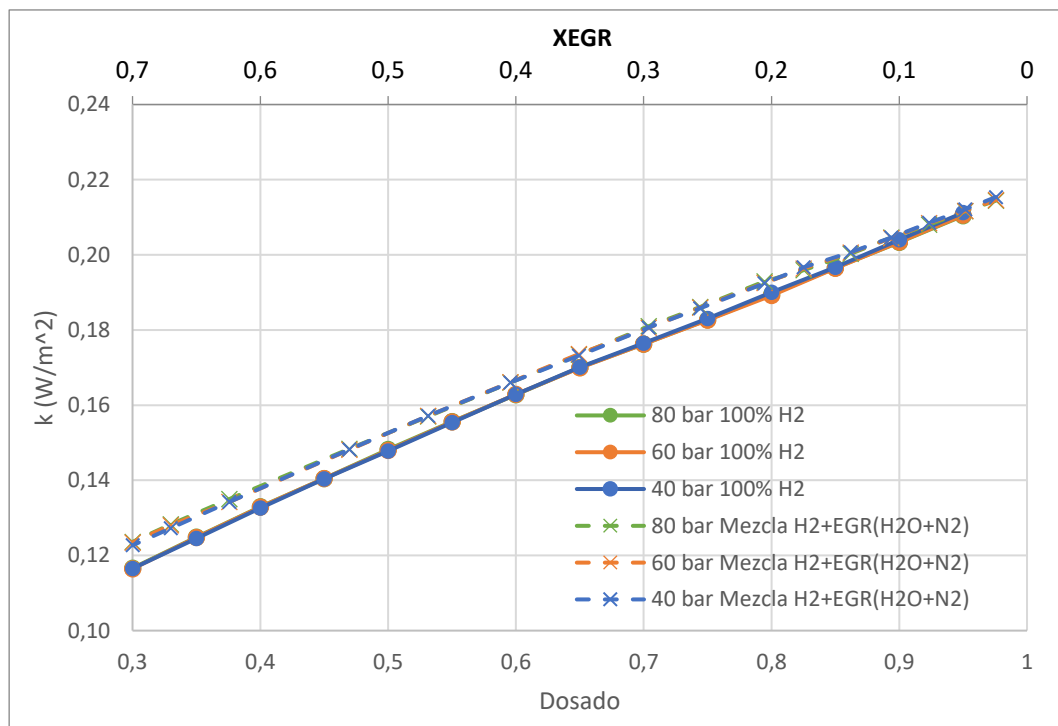
Los efectos de la presión son despreciables para ambos parámetros.

Los aumentos de la temperatura favorecen la conductividad térmica y la capacidad calorífica.

El uso de EGR favorece el aumento de capacidad calorífica y de conductividad térmica. El aumento en capacidad calorífica es mucho mayor que el de conductividad térmica, por lo que en este sentido el uso de EGR es beneficioso.

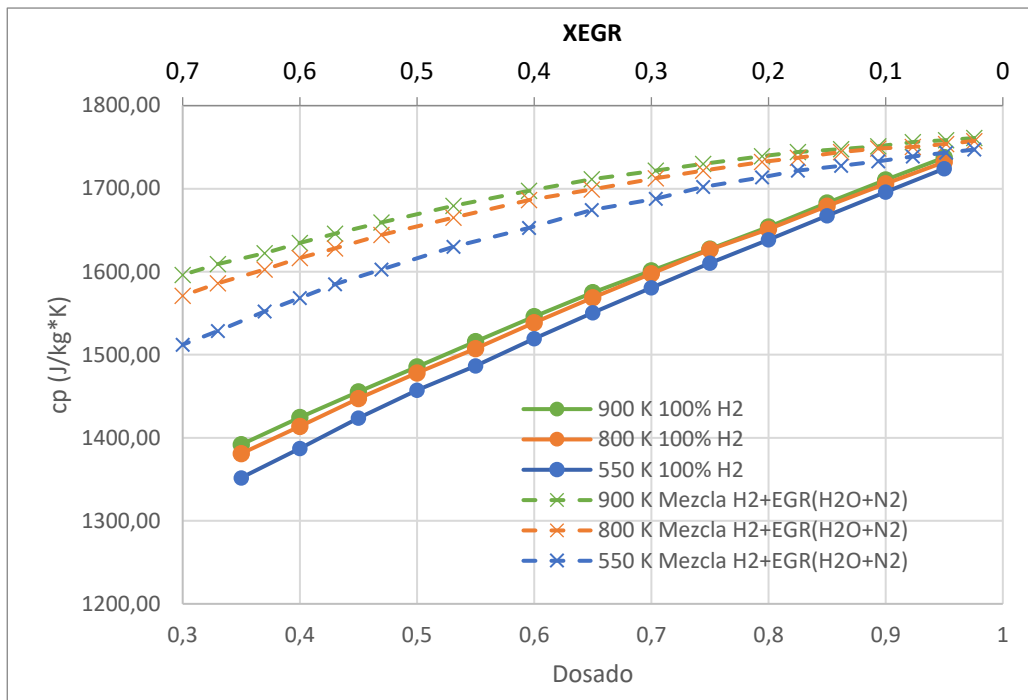


(a)



(b)

Figura 7.1 Capacidad calorífica (a) y conductividad térmica (b) a 900K en función de dosado, presión y EGR



(a)

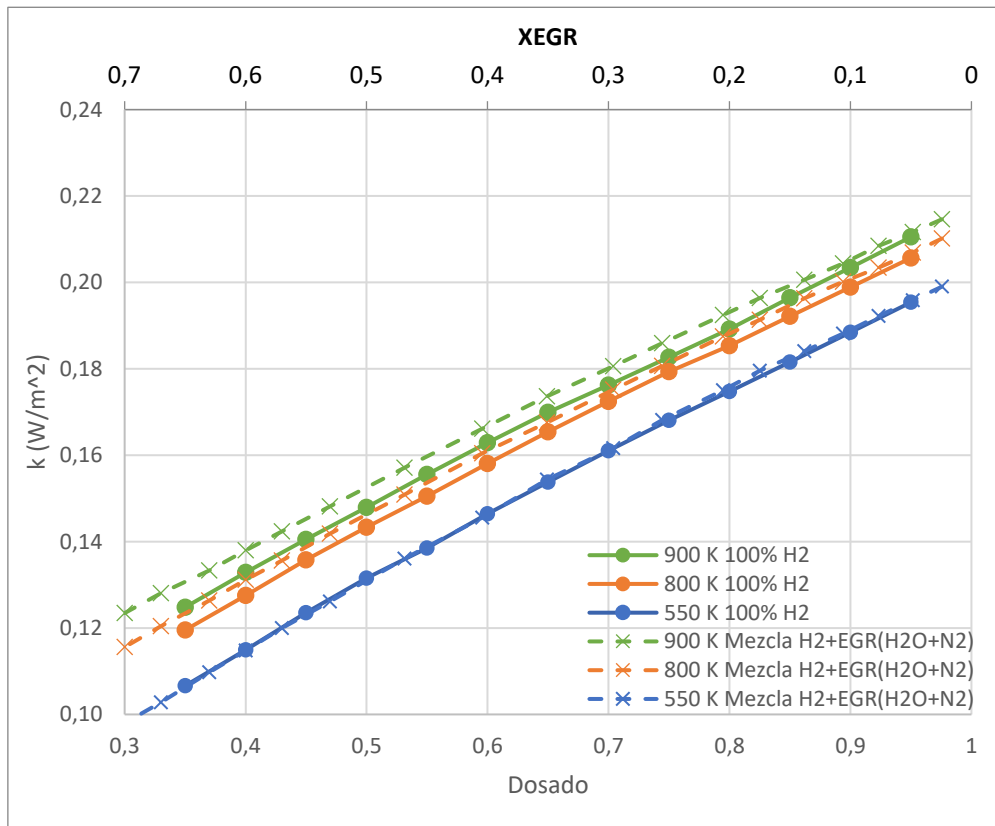


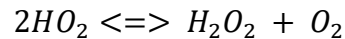
Figura 7.2: Capacidad calorífica (a) y conductividad térmica (b) a 60bar en función de dosado, temperatura y EGR

7.2. Reacción principal y energía de activación

Tras realizar el estudio de sensibilidad para combustión a 40,60 y 80 bar a 900K y distintos dosados o grados de recirculación, se han graficado los resultados en la Figura 7.3. Para casos sin recirculación, se observa que la reacción limitante es en la mayoría de los casos la de $H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$. Esta es la reacción limitante por ser la de mayor energía de activación entre las energías a las cuales es más sensible la combustión.

Cuando desciende el dosado o aumenta la recirculación es cuando se perciben cambios. Para casos de recirculación se encuentran con $H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$ entre un 0.65 y un 0.35 de dosado equivalente, manteniéndose esta reacción como la principal para presiones menores. Esta reacción también aparece como limitante para casos sin recirculación, en ensayos con dosado menor que 0.4.

Para el caso de recirculaciones grandes, encontramos que la reacción limitante puede ser distinta para las presiones mayores. Para 60 y 80 bar y dosados equivalentes menores de 0.4, la reacción limitante es



En cuanto a las variaciones de temperatura, el efecto observado es que a menores temperaturas cambia la reacción limitante a una que necesita de una mayor energía de activación.

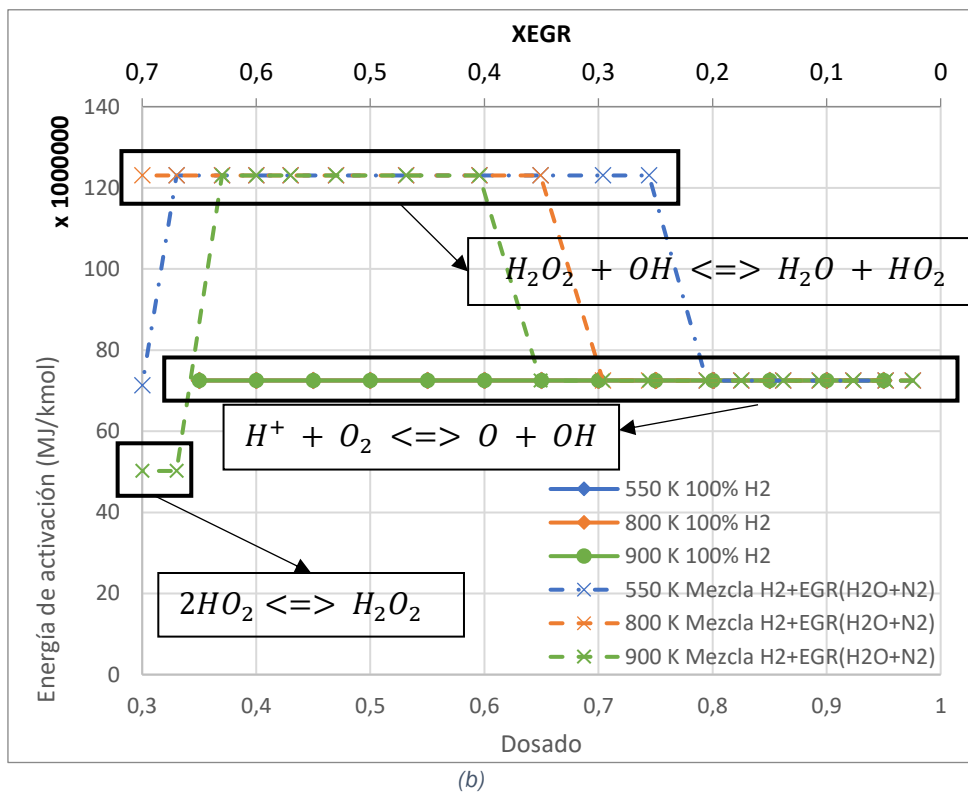
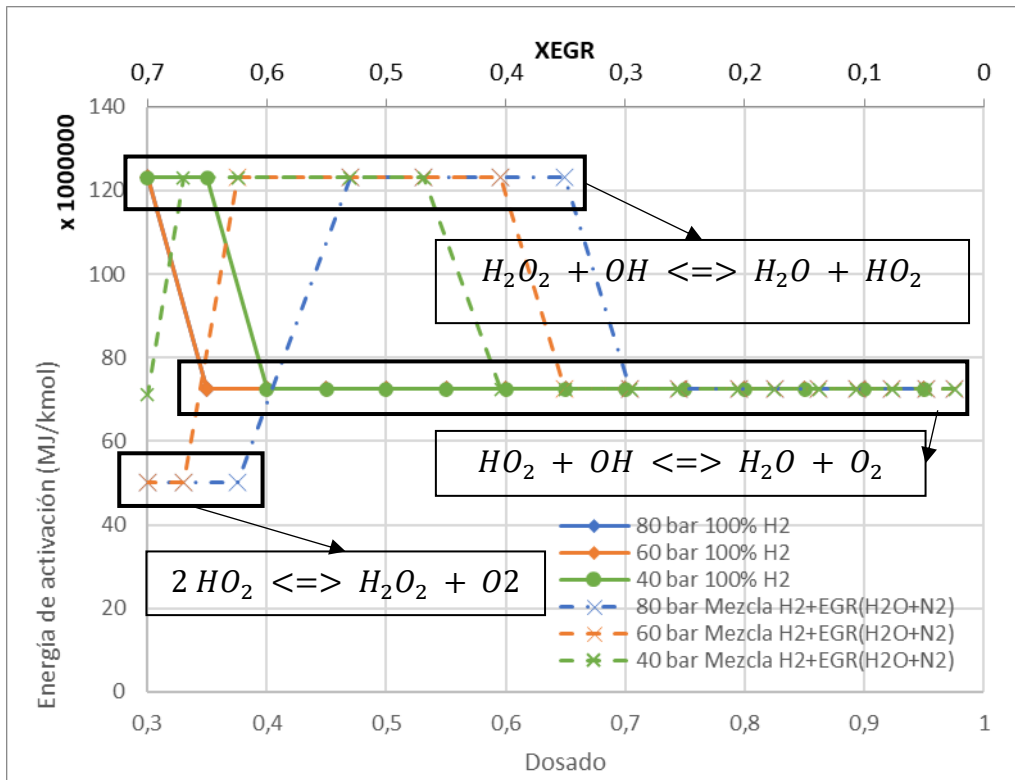


Figura 7.3 : Reacción principal y su energía de activación en función de dosado y (a) diversas presiones con temperatura 900K, (b) distintas temperaturas a 60 bar

7.3. N.º de Lewis y Prandtl

El N.º de Lewis se define como la relación entre la difusividad térmica y la difusividad másica. Se observa su fórmula en la Ecuación 7.1, donde α representa la difusividad térmica y D representa la difusividad másica. Este parámetro es >1 cuando predomina la difusividad térmica, mientras que varía entre 0 y 1 en caso contrario

El N.º de Prandtl es un número adimensional que representa la relación entre la difusión de cantidad de momento y la difusividad térmica. Se observa su fórmula en la Ecuación 7.2. Si el valor es >1 , predomina la difusividad de momento.

En el caso de un MCIA conviene que predomine la difusividad másica sobre la térmica, de forma que la mezcla sea lo más homogénea posible en todos los puntos de la cámara en el momento de combustión. Interesa por tanto un N.º de Lewis lo más alto posible. En cuanto al número de Prandtl, interesa el valor más bajo posible, de forma que el calor se difunda de forma homogénea por la cámara antes de que los compuestos sean empujados hacia las paredes de la cámara de combustión por la presión.

$$Le = \frac{\alpha}{D} \quad \text{Ecuación 7.1 N.º de Lewis}$$

$$Pr = \frac{\frac{\mu}{\rho}}{k * (\rho * cp)} \quad \text{Ecuación 7.2 N.º de Prandtl}$$

Tras el estudio de los números de Lewis y Prandtl a distintos dosados y presiones para $T=900K$, se han graficado los resultados en la Figura 7.4.

En ella se observa que el Prandtl crece para dosados más ricos, así como con recirculaciones de menor valor. Observamos que para la zona de dosados entre 1 y 0.5, las recirculaciones equivalentes implican un Prandtl mucho menor. Para dosados más pobres que 0.5, los resultados se homogenizan.

Es también notable el efecto de la presión, que provoca un Prandtl mayor cuanto mayor es la presión. Este efecto es más notable para dosados mayores y valores de EGR pequeños.

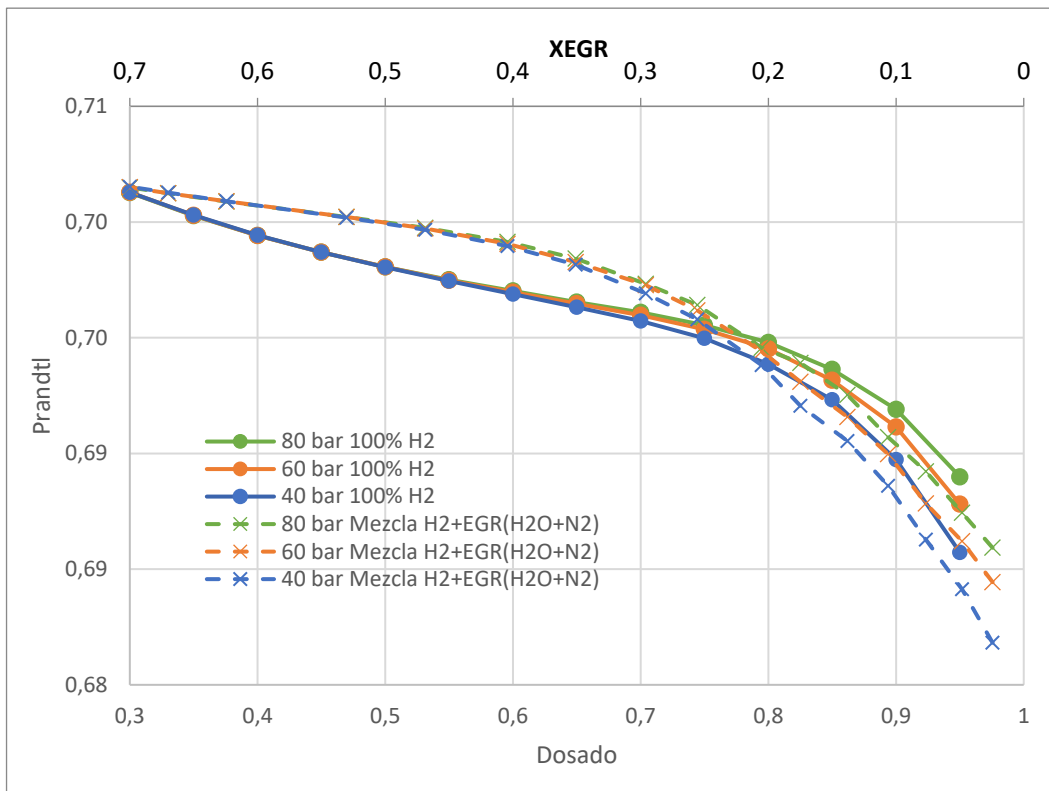
En el caso del N.º de Lewis, la tendencia es de crecimiento hacia dosados más ricos o recirculaciones menores. En este caso, las diferencias más significativas entre el uso de variación dosado y de EGR se encuentran en la zona de dosado

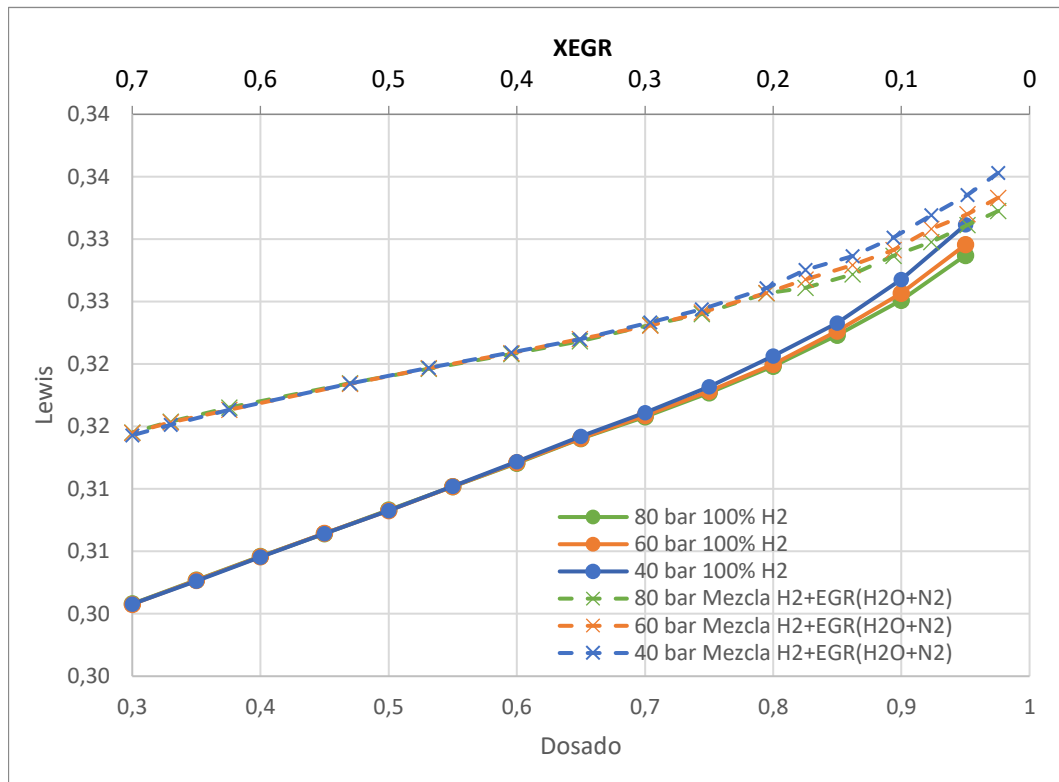
más pobre. En toda la zona estudiada, el Lewis es mayor en los casos de recirculación

En el caso del N.º de Lewis, la presión afecta a este resultado provocando valores mayores para presiones menores.

La curva que siguen los resultados de ambos valores nos indica que al disminuir el dosado o aumentar la recirculación, la difusividad térmica pierde importancia frente a la difusividad másica y de momento.

El efecto es el mismo al aumentar la presión, donde al disminuir el espacio entre los átomos, estos son más susceptibles a transmitir energía mecánica entre ellos o a moverse orientados por gradientes de concentración.





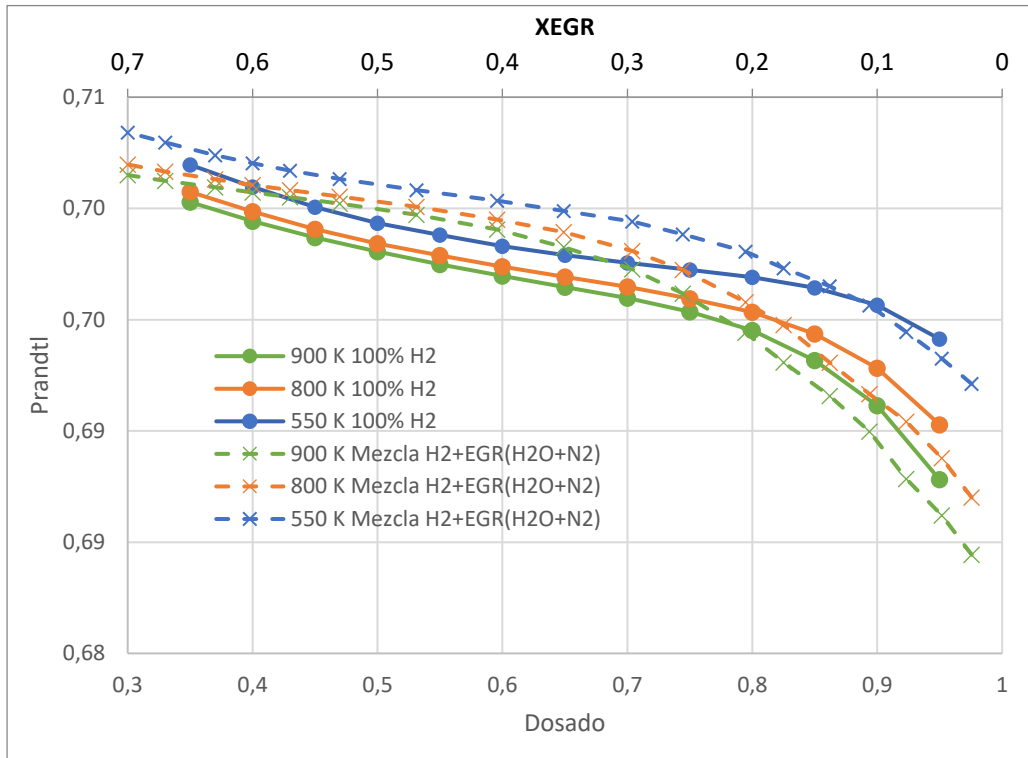
(b)

Figura 7.4 N.º de Prandtl (a) y de Lewis (b) a 900K en función de dosado y presión

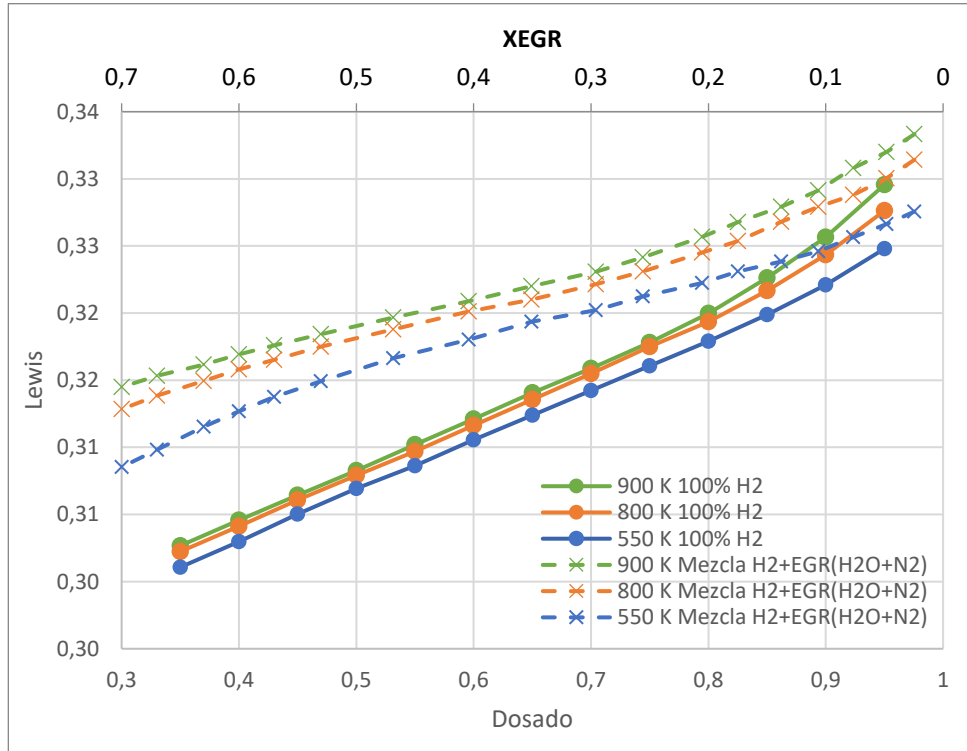
Se han realizado ensayos a presión constante de 60 bar para determinar la influencia de la temperatura. En estos ensayos, se varían la temperatura, el dosado y el EGR. Los resultados han sido graficados en la Figura 7.5.

El valor de temperatura inicial antes de la combustión afecta al valor del Prandtl. Cuanto menor es la temperatura inicial, mayor es el Prandtl

La temperatura inicial afecta al N.º de Lewis de forma en que cuanto menor es la temperatura, mayor es el Lewis. Este efecto es más significativo en el caso del uso EGR.



(a)



(b)

Figura 7.5 N.º de Prandtl (a) y de Lewis (b) a 60 bar en función de dosado y temperatura

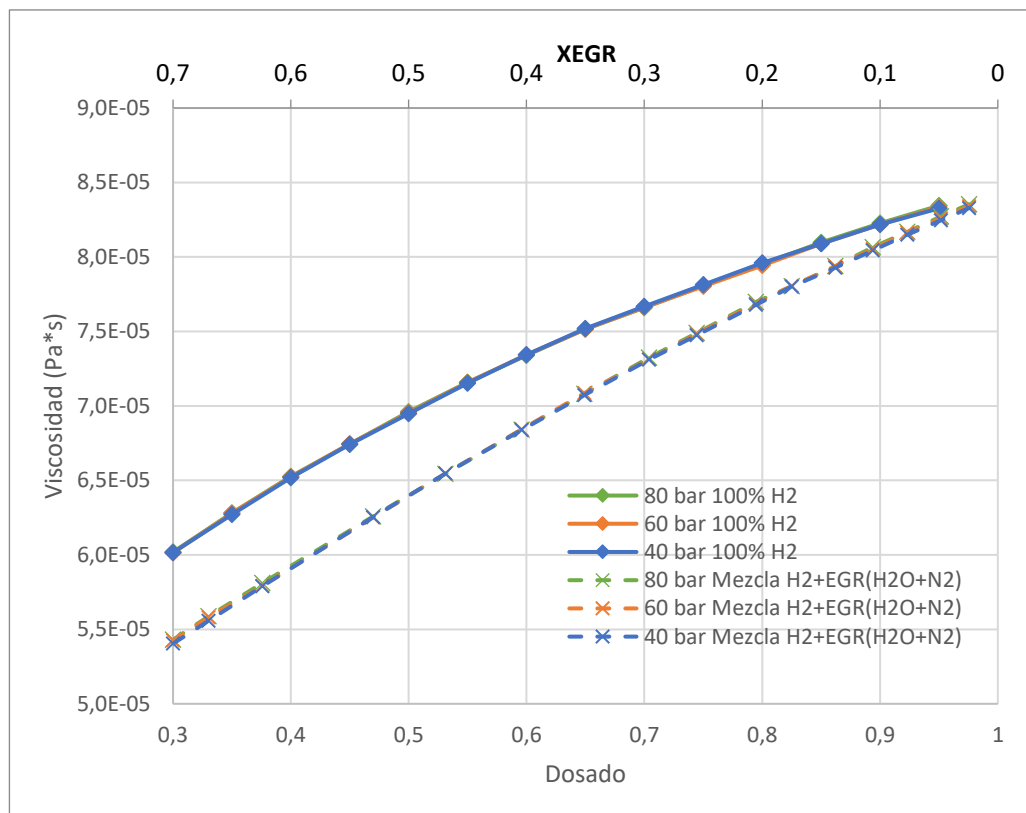
7.4. Viscosidad

La viscosidad es un parámetro de vital importancia en un MCI. Esta define gran parte del comportamiento del fluido dentro del cilindro, caracterizando el paso de este por la cámara de combustión tanto en la admisión como en el escape.

Para estudiar el cambio de viscosidades en función de temperatura, presión, dosado y recirculación, se ha realizado la Figura 7.6. Observamos en ella que los dosados ricos y los valores bajos de recirculación favorecen un aumento de la viscosidad.

En cuanto a la presión, no tiene efecto significativo sobre la viscosidad. Sí que lo tiene la temperatura, ya que observamos que a mayores temperaturas aumenta la viscosidad.

En cuanto a la comparación de dosado con recirculación, obtenemos menores viscosidades para los casos de recirculación.



(a)

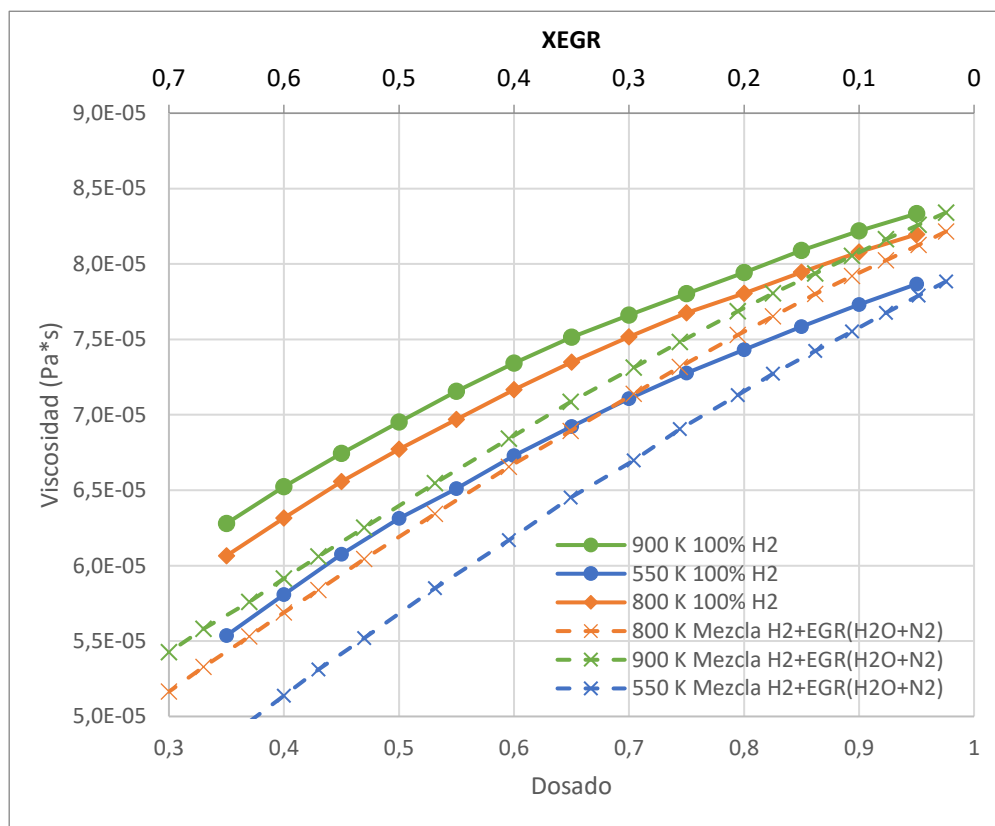


Figura 7.6 Viscosidad de la mezcla tras la combustión para 900K (a) y 60 bar (b)

7.5. Densidad de reactivos

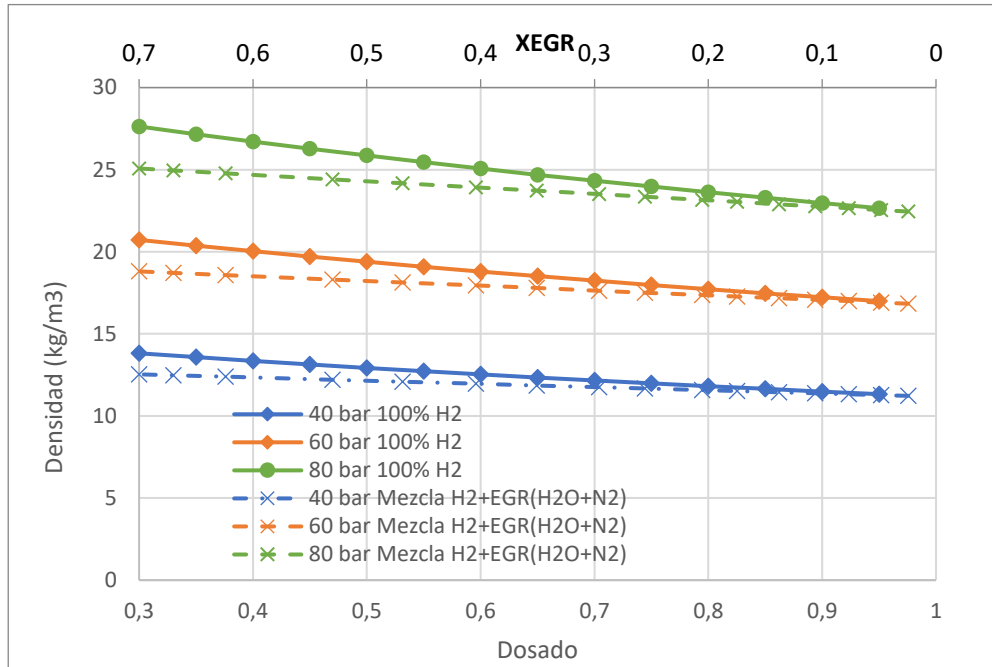
Se han graficado en la Figura 7.7 las densidades obtenidas previas a la combustión en los distintos ensayos.

En cuanto a la variación de presiones, observamos que los aumentos de presión provocan un aumento en la densidad. Los aumentos de temperatura afectan de forma inversa. Para mayores temperaturas obtenemos densidades menores.

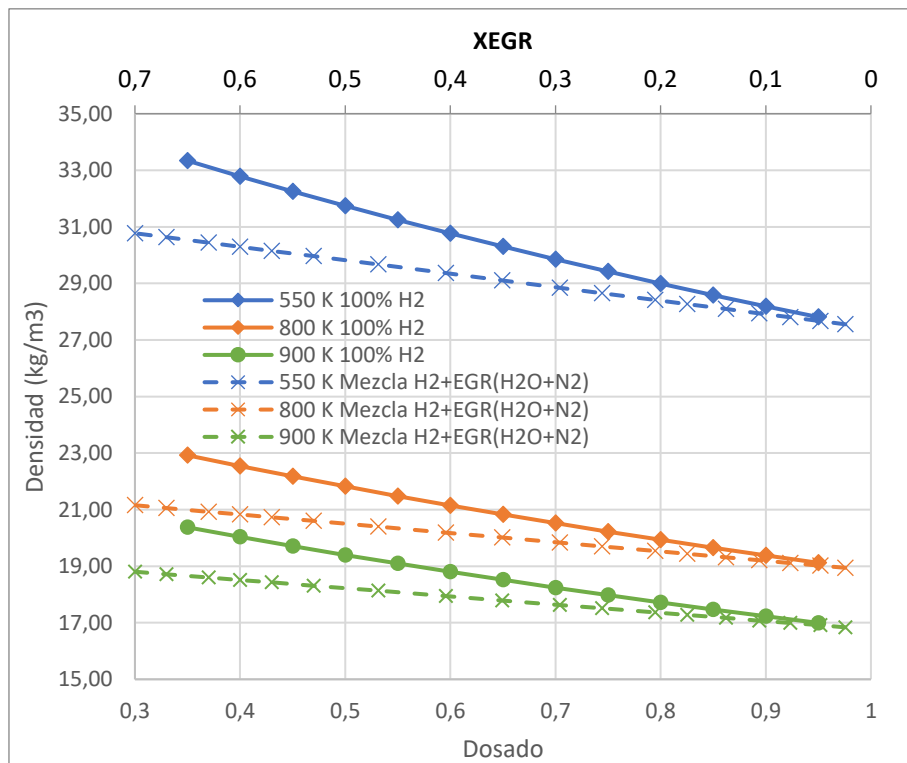
En cuanto a la variación de dosado, el efecto es de una disminución de la densidad para dosados más ricos. Esto se debe a que al introducir una mayor cantidad de aire disminuye la fracción de hidrógeno, el cual es el componente más ligero de la mezcla.

El crecimiento de la recirculación conlleva un aumento de la densidad, al igual que en el caso de cambiar a dosados más pobres. De nuevo, hay una menor presencia de hidrógeno, por lo que la mezcla resulta más densa y pesada. En

este caso, el aumento de recirculación provoca un menor aumento de la densidad que en el caso del descenso del dosado.



(a)



(b)

Figura 7.7 Densidad de la mezcla antes de la combustión para 900K (a) y 60 bar (b)

7.6. Densidad de productos

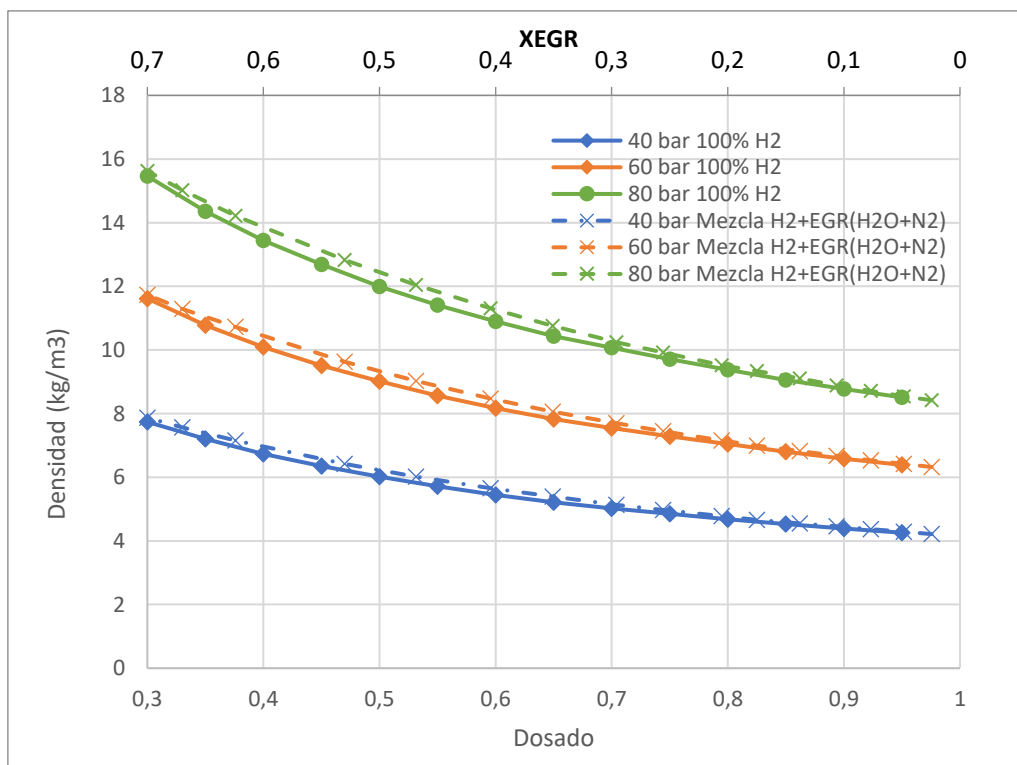
Se grafican a continuación en la

Figura 7.8 el efecto de la temperatura, presión, dosado y recirculación en la densidad de los productos.

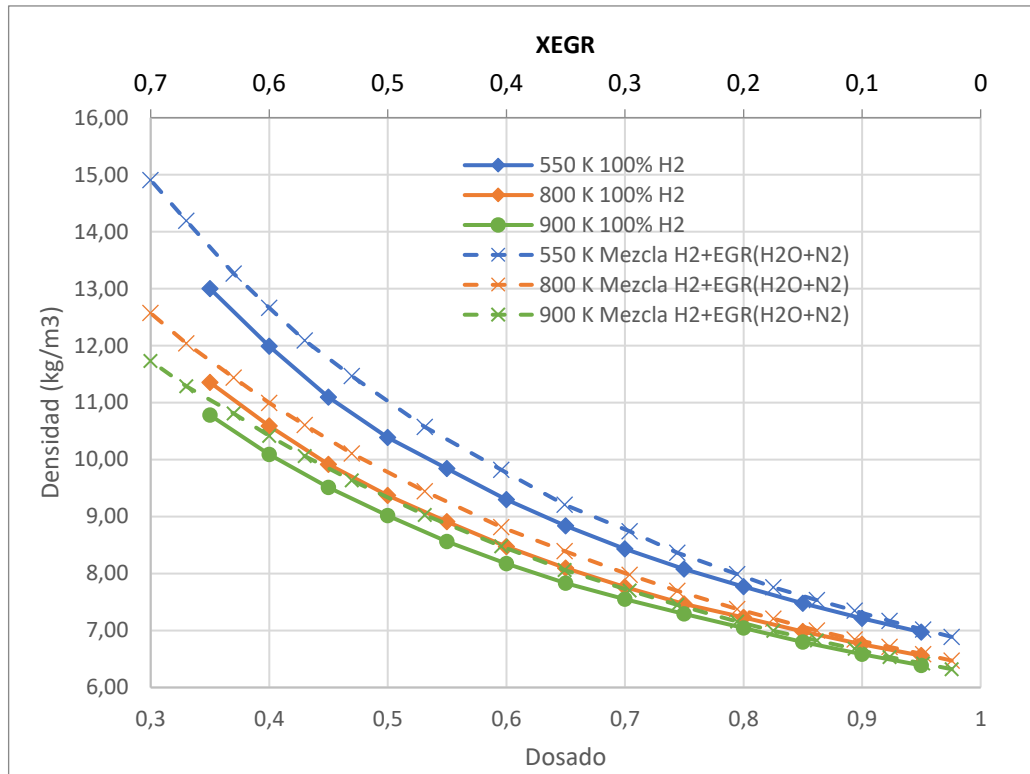
Observamos que al igual que con la densidad de reactivos, el aumento de presiones y el descenso de temperaturas favorecen el aumento de la densidad.

Con el aumento de dosado y la reducción de la recirculación favorecen la obtención de menores densidades en los productos. Esto se debe a una mayor temperatura en los productos, como se ha visto anteriormente.

El uso de EGR provoca que aumente la densidad de productos debido al menor peso molar del hidrógeno cuando introducimos recirculación. Al introducir EGR, la fracción molar de hidrógeno es menor, por lo que hay mayor presencia de compuestos más pesados, lo que hace que la densidad de la mezcla aumente.



(a)



(b)

Figura 7.8 Densidad de la mezcla tras la combustión para 900K (a) y 60 bar (b)

8. Conclusiones

Se ha analizado el uso de EGR en MCIA de hidrógeno y el impacto que tiene en la combustión. Se ha estudiado el impacto del dosado en la combustión y se ha comparado el uso de EGR o dosado según los parámetros que interesa mejorar.

Se ha concluido que el uso de EGR provoca una gran disminución en las emisiones de NO_x y OH facilita el cumplimiento de normativas de emisiones. Económicamente, el gasto de H_2 provoca menos emisiones contaminantes en el caso de utilizar EGR. Si la velocidad de combustión es un parámetro crítico, el uso de EGR puede no ser beneficioso, ya que para velocidades alcanzadas con más del 10% de EGR, las emisiones pueden ser menores en caso de utilizar 100% H_2 .

Se ha observado que la disminución de presión y temperatura previas a la combustión favorecen la reducción de emisiones contaminantes. El caso concreto de las emisiones de OH es una excepción. Aunque las temperaturas menores contribuyen a menores emisiones de este gas, las presiones menores hacen que aumenten estas emisiones. Este efecto de las presiones es sin embargo de pequeña influencia, por lo que la recomendación general sigue siendo de realizar combustiones a valores bajos de presión y temperatura dentro de los límites de inflamabilidad cuando el objetivo sea el de reducir emisiones.

Se ha comprobado y aprobado la viabilidad del software Cantera para realizar simulaciones cinéticas de combustión de hidrógeno mediante la comparación con otros autores. Cantera presenta resultados fiables y se recomienda como herramienta para simular combustión de hidrógeno de forma que ayude a prever comportamientos de la combustión, agilice la investigación en este campo y evite experimentación innecesaria. Mediante el uso de Cantera puede evitarse el diseño y construcción de experimentos que se encuentren a presiones, temperaturas, o condiciones de mezcla que no obtengan resultados mejores que los ya estudiados o que no consigan la combustión.

En el caso del uso de Cantera para la simulación cinética de combustión de hidrógeno se recomienda tomar los resultados como orientativos, ya que los resultados de simulaciones cinéticas difieren de la realidad por la incapacidad de la tecnología actual de tener en cuenta efectos como inestabilidades y turbulencias. Es necesaria una validación con datos experimentales en cuanto a variación de temperaturas y presiones previas a la combustión.

Referencias

- [1] J. Hardy, "Fueling Innovation: Discovering Who Invented the Internal Combustion Engine," History Cooperative. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://historycooperative.org/who-invented-the-internal-combustion-engine/>
- [2] "De Rivaz engine," Wikipedia. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/De_Rivaz_engine
- [3] N. LePan, "The Evolution of Hydrogen: From the Big Bang to Fuel Cells," Visual Capitalist. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://www.visualcapitalist.com/evolution-of-hydrogen-fuel-cells/>
- [4] K. Wróbel, J. Wróbel, W. Tokarz, J. Lach, K. Podsadni, and A. Czerwiński, "Hydrogen Internal Combustion Engine Vehicles: A Review," *Energies*, vol. 15, no. 23. MDPI, Dec. 01, 2022. doi: 10.3390/en15238937.
- [5] D. Villarreal, "El motor de doce cilindros de BMW que diseñó para quemar hidrógeno y gasolina," DiarioMotor. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://www.diariomotor.com/reportajes/motor-hidrogeno-doce-cilindros-bmw/>
- [6] R. Garcia Vita, "Mazda RX-8 Hydrogen RE: ¡Cuando el motor rotativo funcionó con hidrógeno!," TopGear. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://www.topgear.es/noticias/mazda-rx-8-hydrogen-re-cuando-motor-rotativo-funciono-hidrogeno-1135449>
- [7] "Fuels - Higher and Lower Calorific Values," The Engineering Toolbox . Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: https://www.engineeringtoolbox.com/fuels-higher-calorific-values-d_169.html
- [8] "Hydrogen Compared with Other Fuels," HydrogenTools. Accessed: May 23, 2024. [Online]. Available: <https://h2tools.org/bestpractices/hydrogen-compared-other-fuels>
- [9] "Comparative properties of hydrogen and other fuels," HydrogenTools. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://h2tools.org/hyarc/hydrogen-data/comparative-properties-hydrogen-and-other-fuels>
- [10] D. Seboldt, M. Mansbart, P. Grabner, and H. Eichlseder, "Hydrogen Engines for Future Passenger Cars and Light Commercial Vehicles," *MTZ*. 2021.

- [11] C. Bekdemir, E. Doosje, and X. Seykens, "H2-ICE Technology Options of the Present and the Near Future," 2022-01-0472.
- [12] A. Onorati et al., "The role of hydrogen for future internal combustion engines," *International Journal of Engine Research*, vol. 23, no. 4. SAGE Publications Ltd, pp. 529–540, Apr. 01, 2022. doi: 10.1177/14680874221081947.
- [13] A. Boretti, "Hydrogen internal combustion engines to 2030," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 43, pp. 23692–23703, Sep. 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.06.022.
- [14] "MAHLE Jet Ignition," Mahle Powertrain. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://www.mahle-powertrain.com/en/experience/mahle-jet-ignition/>
- [15] R. Oung, R. Oung, F. Foucher, J.-M. Neveu, A. Vucher, and E. Rieser, "H2 efficient and near zero emissions operation on a PFI HD single cylinder Diesel ICE," 2022. [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/364327591>
- [16] C. Sesma Gutiérrez, "Estudio cinético del proceso de combustión mediante métodos computacionales," 2021.
- [17] M. Hemmat Esfe, S. Esfandeh, and M. H. Kamyab, "History and introduction," in *Hybrid Nanofluids for Convection Heat Transfer*, Elsevier, 2020, pp. 1–48. doi: 10.1016/B978-0-12-819280-1.00001-X.
- [18] W. Liang, Z. Chen, F. Yang, and H. Zhang, "Effects of Soret diffusion on the laminar flame speed and Markstein length of syngas/air mixtures," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, no. 1, pp. 695–702, 2013, doi: 10.1016/j.proci.2012.06.048.
- [19] S. Wang, Y. Zhai, Z. Wang, R. Hou, T. Zhang, and C. Ji, "Comparison of air and EGR with different water fractions dilutions on the combustion of hydrogen-air mixtures," *Fuel*, vol. 324, Sep. 2022, doi: 10.1016/j.fuel.2022.124686.
- [20] Z. Wang, C. Ji, D. Wang, R. Hou, T. Zhang, and S. Wang, "Experimental and numerical study on premixed partially dissociated ammonia mixtures. Part II: Numerical study of premixed combustion characteristics," *Fuel*, vol. 306, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2021.121660.

- [21] Anaconda Inc., “About Anaconda.” Accessed: Jun. 05, 2023. [Online]. Available: <https://www.anaconda.com/about-us>
- [22] SpyderIDE, “SpyderIDEHome.” Accessed: Jun. 06, 2023. [Online]. Available: <https://www.spyder-ide.org/>
- [23] “Cantera Resource.” Accessed: Jun. 06, 2023. [Online]. Available: <https://www.cantera.org/>
- [24] S. Bougrine, S. Richard, A. Nicolle, and D. Veynante, “Numerical study of laminar flame properties of diluted methane-hydrogen-air flames at high pressure and temperature using detailed chemistry,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 18, pp. 12035–12047, Sep. 2011, doi: 10.1016/j.ijhydene.2011.06.053.
- [25] S. Verhelst, C. Tjoen, J. Vancoillie, and J. Demuynck, “A correlation for the laminar burning velocity for use in hydrogen spark ignition engine simulation,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 1, pp. 957–974, Jan. 2011, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.10.020.
- [26] A. Konnov, “Refinement of the kinetic mechanism of hydrogen combustion.,” *Journal Adv Chem Phys*, no. 23, pp. 5–18, 2004.
- [27] “Detailed kinetic mechanisms,” CRECK Modeling Group. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: [https://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics-detailed-mechanisms/](https://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms/)
- [28] Y. Wang, H. S. Han, and C. H. Sohn, “A Comparative Study of Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion of Methane/Hydrogen/Air Mixtures,” *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 2023, doi: 10.1007/s42405-023-00671-8.
- [29] “REGLAMENTO (CE) N o 595/2009 DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO,” *Diario oficial de la Unión Europea*, 2009.
- [30] “Euro 7: así será la nueva normativa de emisiones,” Total Energies. Accessed: May 04, 2024. [Online]. Available: <https://blog.totalenergies.es/euro-7-nueva-normativa-emisiones/>