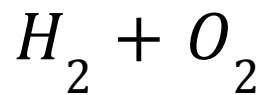


INSTITUTO TECNOLÓGICO
DE BUENOS AIRES

INGENIERÍA MECÁNICA
Proyecto Final: 174



Análisis, simulación y evaluación de un motor de combustión interna de



Alumnos:

Cardelle, Juan Ignacio
Carlioni, Maria Gema

Tutores:

Lic. Juan Ricardo Lauretta
Ing. Patricio Pedreira
Lic. Ernesto Ivan Gulich

Fecha de entrega: 3 de febrero 2024

Índice

Simbología.....	4
Capítulo 1 - Introducción.....	6
1.1 Motivación.....	6
1.2 Objetivo general.....	7
1.3 Objetivos particulares.....	7
Capítulo 2 - Generación de energía a partir de hidrógeno.....	8
2.1 Máquinas térmicas y celda de combustible.....	8
2.2 Características del hidrógeno.....	9
2.2.1 Rango de inflamabilidad.....	10
2.2.2 Temperatura de autoignición.....	11
2.2.3 Energía de ignición.....	11
2.3 Características del oxígeno.....	12
2.4 Motor de Combustión Interna.....	12
2.4.1 Relaciones entre aire y combustible.....	13
2.4.2 Relación de compresión.....	13
2.4.3 Rendimiento térmico y volumétrico.....	14
2.4.4 Operación con mezcla pobre.....	15
2.4.5 Emisiones.....	17
2.4.6 Características operativas.....	18
2.4.6.1 El impacto de la velocidad de llama laminar en la combustión.....	18
2.4.6.2 Avance de encendido.....	19
2.4.6.3 Consideraciones de seguridad en la inyección.....	19
Capítulo 3 - Análisis teórico.....	20
3.1 Análisis termodinámico.....	20
3.1.1 Relación aire-oxígeno-combustible y balance de masa.....	21
3.1.2 Balance energético.....	23
3.1.3 El impacto del agregado de oxígeno en la potencia.....	24
3.2 Temperatura de llama adiabática.....	25
3.3 Rendimiento térmico.....	28
3.4 Rendimiento volumétrico modificado.....	29
3.5 Emisiones.....	31
Capítulo 4 - Simulación.....	33
4.1 Simulación Modelo GT-Power.....	33
4.1.1 Introducción a GT-Power.....	33
4.1.2 Funcionamiento de GT-Power.....	33
4.1.3 Modelo y validación.....	35
4.1.4 Objetivo del modelo.....	36
4.2 Parámetros del modelo.....	36
4.2.1 Parámetros constantes.....	36
4.2.2 Parámetros variables.....	37
4.2.3 Parámetros de inyección.....	37
4.2.4 Parámetros de encendido.....	37

4.3 Modelo de combustión.....	37
4.3.1 Modelo de combustión turbulenta para motores de encendido a chispa.....	38
Capítulo 5 - Resultados.....	40
5.1 Resultados experimentales H2+Aire.....	41
5.1.1 Potencia.....	41
5.1.2 Rendimiento térmico.....	41
5.1.3 Rendimiento volumétrico.....	42
5.1.5 Emisiones.....	42
5.2 Validación del modelo.....	43
5.3 Resultados H2+O2+Aire Simulación.....	44
5.3.1 Potencia.....	44
5.3.2 Rendimiento térmico.....	44
5.3.3 Rendimiento volumétrico modificado.....	45
5.3.4 Temperatura máxima.....	46
5.3.5 Emisiones.....	46
5.3.6 Curvas de presión.....	47
5.3.7 Resumen de resultados.....	49
Capítulo 6 - Conclusiones.....	52
Capítulo 7 - Bibliografía.....	56

Simbología

Símbolo	Descripción
A	Área
\dot{m}	Caudal másico
\dot{n}	Caudal molar
\dot{Q}	Calor intercambiado
CIL	Cilindrada
λ	Cociente de relaciones aire-combustible real y estequiométrico
λ'	Cociente de relaciones oxígeno-combustible real y estequiométrico
k	Coefficiente adiabático para gases
C_f	Coefficiente de fricción de Fanning
K_p	Coefficiente de pérdida de presión
U	Coefficiente de transferencia de calor global
R	Constante universal de los gases ideales
ρ	Densidad
D	Diámetro
F	Efecto de dilución
\bar{h}	Entalpía específica
H	Entalpía específica total
α	Exponente de temperatura
z	Factor de concentración de oxígeno
f	Factor de dilución
dil	Fracción de gases diluyentes
$frac$	Fracción de masa
GEI	Gases de efecto invernadero
H_2	Hidrógeno
m	Masa
M	Masa molar
ε	Microescala de Taylor
MCI	Motor de combustión interna
n	Número de moles
NOx	Óxidos de nitrógeno
O_2	Oxígeno
PCI	Poder calorífico inferior

P	Potencia
p	Presión
EGR	Recirculación de gases de escape
R_{ac}	Relación aire/combustible
$R_{ac_{eq}}$	Relación aire/combustible estequiométrico
R_C	Relación de compresión
ϕ	Relación de equivalencia
$\tilde{S}C_T$	Relación sustancia combustible estequiométrica
$\tilde{S}C$	Relación sustancia combustible real
η_t	Rendimiento térmico
η_{vol}	Rendimiento volumétrico
T	Temperatura
T_{LA}	Temperatura de llama adiabática
T_{max}	Temperatura máxima
\dot{W}	Trabajo intercambiado
u	Velocidad
ω	Velocidad angular
S_L	Velocidad de llama laminar
S_T	Velocidad de llama turbulenta
V	Volumen
\bar{v}	Volumen específico

Capítulo 1 - Introducción

1.1 Motivación

“El sistema energético comprende las formas en la que una sociedad se organiza para obtener la energía de su entorno y distribuirla para hacer todo lo que hace. Una forma sencilla de entender este concepto es pensar que el sistema energético es para una sociedad lo que una dieta es para una persona [...] Pero hoy tenemos un problema: lo que comemos nos está matando”[1]

El cambio climático y la crisis ambiental que protagonizamos se debe, en gran parte, a las consecuencias de una matriz energética global que aún sigue dominada por combustibles fósiles que emiten gases de efecto invernadero (*GEI*), contribuyendo al cambio climático. En 2015, el acuerdo de París marca un hito en la agenda mundial que compromete a los países a colaborar en la reducción de *GEI* y en la transición hacia nuevas formas de producir energía. Por lo tanto, migrar hacia tecnologías renovables y sustentables se vuelve inminente. En este sentido, este proyecto se propone analizar la factibilidad del desarrollo y simulación de un motor estacionario que produzca energía a partir de recursos naturales. Particularmente, una máquina térmica que utiliza hidrógeno (H_2) y oxígeno (O_2).

El hidrógeno es el elemento más abundante en el universo, representando más del 75% de la materia [28]. Sin embargo, el hidrógeno en la tierra es abundante, pero se lo encuentra formando compuestos, hidrocarburos, agua, etc. Para obtenerlo, es necesario extraerlo por algún medio. Una posibilidad es separar las moléculas que componen al agua por electrólisis, obteniéndose hidrógeno y oxígeno ($H_2 + O_2$) de una forma limpia y sostenible. El resultado de este proceso es conocido como *hidrógeno verde* y se espera un crecimiento exponencial de este [19]. Según la Agencia Internacional de la Energía, se espera que la producción mundial de hidrógeno verde crezca desde 0,5 millones de toneladas en 2022 a 5,2 millones de toneladas en 2030. Junto con el crecimiento de la producción de hidrógeno molecular, se produce el crecimiento de la producción de oxígeno molecular. Este proyecto busca combinar ambas moléculas para generar un proceso de combustión libre de emisiones de *GEI*, dado que el único producto de su combustión es vapor de agua. Por lo tanto, el desarrollo de este proceso implica no sólo una mayor disponibilidad de hidrógeno, sino que también de oxígeno, lo que será beneficioso para este tipo de máquinas térmicas.

En la actualidad, se está avanzando en el desarrollo de motores de combustión interna que operan con hidrógeno y aire. A diferencia de los motores convencionales a gasolina, esta nueva tecnología de motores presenta desafíos asociados a la generación de óxidos de nitrógeno (*NOx*) debido a la alta temperatura de llama del hidrógeno. También, se enfrentan a la reducción de la eficiencia volumétrica debido al volumen que ocupa el hidrógeno gaseoso en la cámara de combustión, en comparación con combustibles líquidos donde este volumen es prácticamente nulo. Una posible alternativa es la combustión de oxígeno e hidrógeno gaseosos, si bien estos elementos son difíciles de encontrar en la naturaleza, se espera que su disponibilidad incremente con el avance de la producción de hidrógeno por electrólisis. Esta mezcla no produce *NOx* y puede resultar en eficiencias volumétricas más altas, al no producirse la aspiración del nitrógeno disponible en la atmósfera al motor.

1.2 Objetivo general

El objetivo de este trabajo es modelar un motor operado con hidrógeno-oxígeno y determinar sus condiciones operativas utilizando el software GT-Power.

1.3 Objetivos particulares

Se trabajará con mezclas *aire + hidrógeno*, aumentando gradualmente la cantidad de oxígeno hasta obtener únicamente hidrógeno + oxígeno para evaluar:

1. El rendimiento térmico: se espera que aumente debido a una mayor velocidad de combustión. Sin embargo, una mayor temperatura puede provocar mayores pérdidas de calor.
2. El rendimiento volumétrico: se espera que aumente por la sustitución del nitrógeno a un comburente no inerte.
3. Las emisiones generadas: se debe lograr un equilibrio entre reducir el nitrógeno y el aumento de la temperatura por la reacción de combustión. Esto genera la necesidad de definir relaciones de mezclas adecuadas.

Capítulo 2 - Generación de energía a partir de hidrógeno

2.1 Máquinas térmicas y celda de combustible

Las máquinas térmicas a hidrógeno y oxígeno son una alternativa prometedora para la generación de energía limpia y eficiente. Este tipo de máquinas se basan en la combustión de estos dos gases para generar trabajo mecánico, y como único producto de la combustión tienen vapor de agua. A diferencia de los motores convencionales que funcionan con combustibles fósiles, este tipo de generadoras de energía no emitirían gases de efecto invernadero ni partículas contaminantes, lo que las convertiría en una opción atractiva para la reducción de la contaminación ambiental.

Como punto de partida para la construcción de este modelo alternativo, se deben tener en cuenta qué máquinas térmicas pueden funcionar a H_2 y O_2 :

1. *Motores de combustión interna*
2. *Turbinas de gas*
3. *Células de combustible*

Cada tipo de máquina térmica tiene sus propias ventajas y desventajas, y la elección del tipo de máquina térmica dependerá de varios factores, como la aplicación específica y las condiciones de operación. Actualmente, la alternativa que parece ser la más prometedora en el campo del hidrógeno y el oxígeno es la celda de combustible.

Las celdas de combustible son dispositivos electroquímicos que convierten la energía química directamente en electricidad, mediante la reacción del hidrógeno y el oxígeno para producir agua y electricidad. Su principal ventaja es su alta eficiencia energética y su capacidad para producir energía de manera limpia y silenciosa. Además, tienen una alta densidad de energía y son altamente escalables, lo que significa que pueden adaptarse para su uso en vehículos y aplicaciones estacionarias. Sin embargo, también tienen algunas desventajas, como el alto costo y las elevadas emisiones embebidas asociadas a su proceso de fabricación. A su vez, es importante tener en cuenta que las celdas de combustible todavía se encuentran en una fase relativamente temprana de desarrollo y todavía hay desafíos importantes que deben superarse antes de que puedan ser ampliamente adoptadas en la industria.

Las turbinas de gas son máquinas térmicas que convierten la energía térmica en energía mecánica rotativa. En el caso de una turbina de gas la energía térmica se produciría mediante la combustión. Una de sus principales ventajas es su alta densidad de potencia, que se debe en gran parte a su capacidad para operar a altas velocidades y presiones. Además, son altamente escalables y se pueden adaptar para su uso en una amplia variedad de aplicaciones, desde plantas de energía hasta aviones. Sin embargo, una de las principales desventajas es su alto costo, tanto en términos de capital como de mantenimiento. Más aún, emiten altos decibeles de ruido y no son flexibles a variaciones de mezcla de oxidante y combustible.

Los motores de combustión interna (*MCI*) son máquinas térmicas que convierten la energía térmica en energía mecánica. Utilizan la combustión para generar una expansión de

gas que mueve un pistón. La energía mecánica se transfiere luego a través de un eje a una carga útil. Estos motores se utilizan ampliamente en la industria, dado que tienen un buen rendimiento energético y pueden ser construidos para diferentes tamaños y capacidades, con flexibilidad de adaptación a diferentes mezclas. Sin embargo, requieren mantenimiento y son máquinas generadoras de ruido.

El *MCI* se presenta como la tecnología predilecta para la investigación aquí propuesta, porque han sido probados y optimizados para todo tipo de aplicaciones. Cuentan con la mayor trayectoria de estudio, desarrollo científico y tecnológico de las máquinas térmicas: se conocen las ecuaciones matemáticas que permiten realizar esta investigación, y a su vez, hay softwares especializados disponibles que facilitan una evaluación exhaustiva de su viabilidad para este proyecto. Por esta razón, se decide continuar el análisis para la transición de un motor de combustión interna de hidrógeno y aire a hidrógeno y oxígeno puro.

2.2 Características del hidrógeno

El hidrógeno es el elemento más común del universo: es el combustible de las estrellas y el componente principal del agua, compuesto esencial para la vida. En condiciones normales de presión y temperatura, el hidrógeno es un gas incoloro, inodoro e insípido. También, es el elemento químico más liviano que existe, su átomo está formado por un protón y un electrón, y es estable en forma de molécula diatómica H_2 .

El hidrógeno es un buen combustible en términos ambientales. No genera emisiones que perjudican al medio ambiente ni a las personas y se puede producir a partir de energías renovables. En la *Tabla 2.1* se muestran las propiedades del hidrógeno que interesan para la aplicación de la generación de energía.

Propiedad	Gasolina	Hidrógeno
M	$117 \frac{g}{mol}$	$2,01594 \frac{g}{mol}$
ρ_{gas}	$730 \frac{g}{l} @20^{\circ}C, 1atm$	$0,08988 \frac{g}{l} @0^{\circ}C, 1atm$
$T_{LA} @ p = cte$	2138 °C @Aire	2254 °C @Aire 3200 °C @Oxígeno
S_L	$40 \frac{cm}{s}$	$270 \frac{cm}{s}$
Difusividad	$0,15 \frac{cm^2}{s}$	$0,63 \frac{cm^2}{s}$
PCI	$46 \frac{MJ}{kg}$	$120 \frac{MJ}{kg}$
Octanaje	97 [RON]	120 [RON]

Tabla 2.1. Propiedades de los combustibles gasolina e hidrógeno [20].

Cabe aclarar que las propiedades más importantes en relación con su funcionamiento como combustible son:

- Rango de inflamabilidad.
- Temperatura de autoignición.
- Energía de ignición.
- Velocidad de quemado.

2.2.1 Rango de inflamabilidad

Este parámetro se refiere a la gama de proporciones volumétricas entre el combustible y el comburente en la cual es posible que ocurra la ignición. La *Figura 2.1* ilustra los diferentes rangos para gases comunes. Cuando se trata de una mezcla de hidrógeno y aire seco, en condiciones de 1 atmósfera de presión y 25 °C, el rango de inflamabilidad se extiende desde un 4,1% hasta un 74,8% en volumen. Este intervalo es notoriamente amplio en comparación con otros combustibles, como se evidencia en la figura. Este amplio margen permite el funcionamiento con diversas proporciones de mezcla, y las mezclas más pobres son especialmente interesantes (consulte la Sección 2.4.3). Sin embargo, es crucial tener en cuenta que esta amplia gama también implica que las mezclas que contienen hidrógeno son potencialmente más peligrosas, ya que son inflamables en un amplio rango de proporciones.

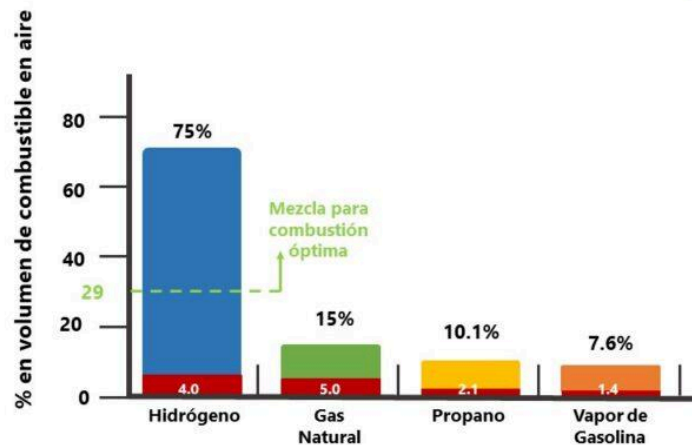


Figura 2.1. Rango de inflamabilidad del hidrógeno, gas natural, propano y vapor de gasolina [12].

2.2.2 Temperatura de autoignición

Este parámetro corresponde a la temperatura mínima a la cual un combustible puede iniciar una reacción sin requerir una fuente externa de ignición, como una chispa o una llama. En el caso del hidrógeno, la temperatura de autoencendido es relativamente elevada, alrededor de 585 °C, lo que la sitúa en un nivel similar al del gas natural y considerablemente superior al de la gasolina, como se evidencia en la *Figura 2.2*. Esta característica tiene un efecto directo en la posibilidad de aumentar la relación de compresión R_c en motores que utilizan hidrógeno como combustible.

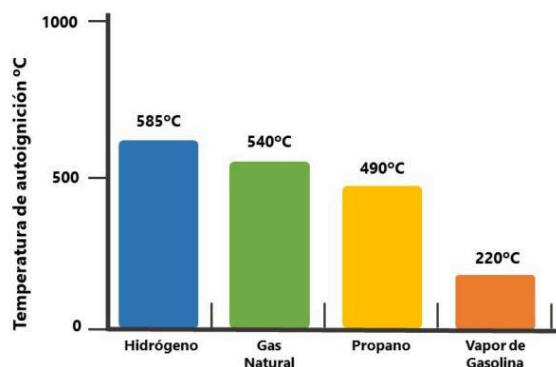


Figura 2.2. Temperaturas de autoignición del hidrógeno, gas natural, propano y vapor de gasolina [12].

2.2.3 Energía de ignición

En contraste con otros combustibles, la energía mínima requerida para iniciar la combustión del hidrógeno, conocida como energía de ignición, es extremadamente baja, apenas 0,02 mJ, como se ilustra en la *Figura 2.3*. Este valor está vinculado al extremo inferior del rango de inflamabilidad mencionado anteriormente. Debido a esta energía de ignición reducida, se incrementa la probabilidad de que los gases calientes y las zonas calientes del cilindro o la admisión puedan provocar el pre-encendido de la mezcla. Aunque la temperatura de autoignición homogénea puede no alcanzarse, el fenómeno de detonación puede desencadenarse por puntos calientes.

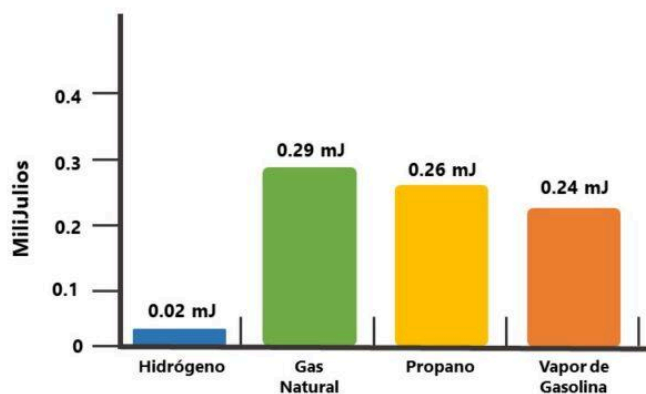


Figura 2.3. Energías mínimas de ignición del hidrógeno, gas natural, propano y vapor de gasolina [12].

2.3 Características del oxígeno

El oxígeno es un gas incoloro e inodoro que se encuentra en grandes proporciones en el aire que respiramos, es estable en su forma diatómica O_2 . Este gas es un subproducto de la producción de hidrógeno por electrólisis y es una herramienta fundamental en la búsqueda de generación de energía limpia. El oxígeno es el elemento que pertenece a todas las reacciones de combustión, las cuales liberan una gran cantidad de energía. Las máquinas térmicas que funcionan en la superficie terrestre lo adquieren del aire, pero este viene mezclado con otros elementos que en algunas condiciones producen partículas contaminantes.

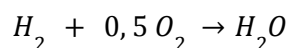
En este trabajo se propone el agregado del oxígeno puro a una máquina térmica para aumentar su rendimiento y reducir su impacto ambiental. Las propiedades de interés del oxígeno se exhiben en la *Tabla 2.2*.

Propiedad	Oxígeno
M	$15.9994 \frac{g}{mol}$
ρ_{O_2}	$1.429 \frac{kg}{m^3} @20^\circ C, 1atm$

Tabla 2.2. Propiedades del oxígeno.

2.4 Motor de Combustión Interna

La máquina térmica seleccionada para modelar este trabajo es un MCI. Se propone el uso de un motor monocilíndrico de 4 tiempos, que funcione con aire y oxígeno agregado, en diversas proporciones, cuyo combustible es el hidrógeno premezclado. La mezcla es encendida por una chispa, generada por una bujía convencional. Para comenzar el análisis de esta máquina térmica, hay que definir la reacción de combustión de hidrógeno y oxígeno:



La reacción es altamente exotérmica, liberando una gran cantidad de calor que se convierte en trabajo y pérdidas. El porcentaje de calor que se convierte en trabajo se

denomina rendimiento térmico, el resto del calor se pierde por las paredes de la cámara de combustión. Generalmente, cuanto mayor es el calor aportado, mayores son las temperaturas alcanzadas y esto genera mayores pérdidas.

El uso de hidrógeno y oxígeno como reactivos presenta algunos desafíos. En primer lugar, el hidrógeno es un gas altamente inflamable y explosivo que requiere de un manejo cuidadoso y especializado para garantizar la seguridad en su almacenamiento, transporte y uso. Además, el costo de producción y distribución del hidrógeno aún es alto en comparación con los combustibles fósiles, lo que limita su viabilidad comercial. Se debe considerar que la temperatura adiabática de llama del hidrógeno cuando se quema según la reacción estequiométrica a 1 atm es de 3473K [2]. Esta temperatura supera los límites de temperatura para los metales normalmente utilizados en estas aplicaciones.

En esta sección, se analizan diversos aspectos del hidrógeno en su aplicación en motores de ciclo Otto con aire y oxígeno como comburentes en distintas proporciones. A su vez, se comparan con el desempeño de estos motores utilizando gasolina.

2.4.1 Relaciones entre aire y combustible

La relación aire/combustible se puede expresar en términos de la relación de aire/combustible real comparada con la relación aire/combustible estequiométrica para una combustión completa con la cantidad teórica de aire. Esta comparación se denota por la letra λ , donde:

$$\lambda = \frac{R_{ac}}{R_{ac_{eq}}}$$

Para una mezcla estequiométrica, la relación aire/combustible real es igual a la relación aire/combustible estequiométrica y, por lo tanto $\lambda = 1$. Para mezclas pobres ($\lambda > 1$) se tiene una relación aire/combustible real mayor que la estequiométrica. Otra relación muy utilizada en el marco de la combustión es la relación de equivalencia, que se calcula como la inversa de λ :

$$\phi = \frac{1}{\lambda}$$

2.4.2 Relación de compresión

La relación de compresión (R_c) es un valor que se calcula a partir de una razón de volúmenes geométricos y expresa cuánto se comprime la mezcla de gases que ingresan al cilindro. Tiene influencia directa en el rendimiento térmico, es decir, en el grado de aprovechamiento de la potencia absorbida por el motor mediante la mezcla de aire-combustible aportada al cilindro. Cuanta mayor R_c tenga un motor, mayor será su rendimiento. Sin embargo, existe un límite para R_c en un motor de combustión interna, además de las relacionadas a los aspectos constructivos del mismo. Este límite se da por el fenómeno de detonación del combustible, que es una combustión rápida y violenta de la mezcla en la cámara de combustión. La aparición de la detonación impone ciertas condiciones a las que se puede someter a la mezcla dentro del cilindro. El octanaje es una característica de los combustibles que hace referencia a la resistencia a la detonación. Mayor octanaje significa que el combustible puede soportar condiciones de operación más severas y entonces el motor puede optimizarse con mayor relación de compresión. En este aspecto, el hidrógeno presenta una ventaja respecto de la gasolina, ya que su octanaje es

notablemente mayor (120 vs. 97 RON) [21]. Esto significa que permite un aumento considerable de la R_c del motor.

2.4.3 Rendimiento térmico y volumétrico

Se ha demostrado experimentalmente que los motores de ciclo Otto alimentados con hidrógeno pueden alcanzar una R_c de hasta 14:1 sin presentar problemas de detonación [27]. La relación entre el R_c y el rendimiento térmico teórico η_t en un ciclo Otto de aire se obtiene de la forma:

$$\eta_t = 1 - \frac{1}{R_c^{k-1}} ; \text{ donde } k_{\text{Aire}} = 1,4; k_{O_2} = 1,395$$

k_{Aire} : relación de calores específicos del aire a 20°C

k_{O_2} : relación de calores específicos del oxígeno a 20°C

η_t : rendimiento térmico

Si se considera el valor de R_c para el motor utilizado en este trabajo, que es igual a 10, el rendimiento térmico teórico será de 60,2%. En cambio, para el caso de $R_c = 14$ con hidrógeno y oxígeno y oxígeno, su valor es de 64,7%. Es decir, que el aumento del rendimiento teórico es de un 4,5%.

La anterior ecuación de rendimiento considera el funcionamiento ideal, reversible e isoentrópico, o sea adiabático, de los procesos de compresión y expansión en el ciclo. Es el límite termodinámico máximo para el rendimiento. Por lo tanto, aunque la curva guarda relación con el aspecto de las curvas reales, los valores obtenidos solo indican una mejora posible que deberá ser evaluada luego con pruebas experimentales. Es decir, si bien el valor de rendimiento en cada caso no es representativo del valor real, resulta útil para entender la tendencia.

El rendimiento térmico indica qué porción del calor de combustión se pierde en el funcionamiento de la máquina. Una de las maneras en las que se pierde el calor es por transferencia a través de las paredes del cilindro. Esta transferencia es mayor cuanto menor sea la distancia de extinción de llama. El hidrógeno presenta una distancia de extinción de llama muy baja (Figura 2.4), razón por la cuál se debe cuidar que las temperaturas de combustión no sean elevadas.

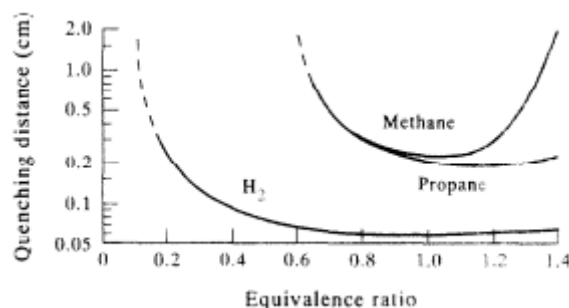


Figura 2.4. Distancia de extinción de llama para distintos gases a presión constante.

El rendimiento volumétrico de un motor (η_{vol}) indica qué fracción de la masa de aire, que teóricamente cabe en la cilindrada, ingresa efectivamente cuando el motor está funcionando, en un ciclo. Como es de esperar, este rendimiento varía con las revoluciones por minuto del motor (ω) y la posición de la mariposa de aceleración. Si su valor es elevado cuando la mariposa está completamente abierta, esto indica un correcto diseño de los conductos de admisión. Cuanto mayor sea este rendimiento, mejor será el aprovechamiento de la cilindrada del motor.

En los motores de gasolina, el combustible no ocupa un volumen considerable, ya que en su estado líquido la energía por unidad de volumen es elevada. En cambio, cuando el motor funciona con hidrógeno admitido por inyección indirecta, este desplaza una parte considerable del aire, porque combustible y comburente se encuentran en estado gaseoso. Este efecto es una de las desventajas principales de los motores a hidrógeno con inyección indirecta.

En la *Figura 2.5* se puede observar un gráfico del cociente de presión parcial de aire en admisión y la presión total de la mezcla en la admisión en función de la relación de equivalencia. Al tener en cuenta la ley de gases ideales, una presión parcial de aire menor indica una masa de aire menor, ergo, menor rendimiento volumétrico. A partir de este gráfico, se puede afirmar que al disminuir la relación de equivalencia, el volumen que ocupa el hidrógeno en la cámara de combustión disminuye, pero no llega a valores tan pequeños como el volumen que ocupa un combustible líquido, como la gasolina, que es despreciable.

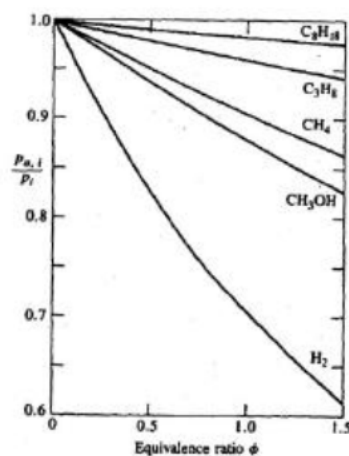


Figura 2.5. Cociente de presión parcial de aire en admisión y de mezcla en admisión en función de la relación aire combustible, para varios combustibles [10].

2.4.4 Operación con mezcla pobre

La combustión del hidrógeno se puede llevar a cabo en un rango de valores de λ (relación aire-combustible) más amplio en comparación con la gasolina. En este caso, λ puede tomar valores entre $1 < \lambda < 5,4$. Dentro de este intervalo, la elección de un valor óptimo de λ debe equilibrar adecuadamente los siguientes factores:

- Rendimiento térmico.
- Potencia.
- Emisiones de NO_x .

La *Figura 2.6* muestra la eficiencia térmica para diferentes relaciones λ en una prueba de simulación que se llevó a cabo para distintas cargas. Este gráfico muestra que el uso de mezclas pobres tiene un impacto positivo en el rendimiento térmico del motor.

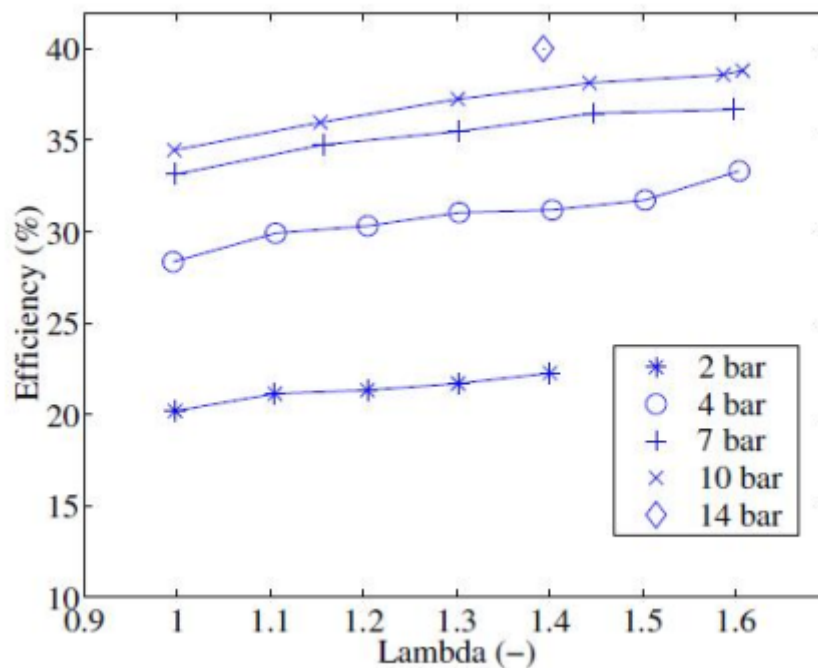


Figura 2.6. Eficiencia térmica en función de la relación de equivalencia para distintas cargas de operación [22].

El hidrógeno presenta algunas características que deben de tenerse en cuenta en el diseño del sistema de admisión:

1. La posibilidad de autoignición.
2. La elevada temperatura de llama.
3. Aspectos de seguridad relacionados con la presión de almacenamiento y la compatibilidad con los materiales.

Los combustibles convencionales se diferencian notoriamente del hidrógeno por tener una temperatura de autoencendido más baja y una energía de ignición más alta, como se describió anteriormente en este Capítulo. Estos factores influyen en el diseño, debido a la necesidad de evitar el fenómeno de *retroceso de llama*: este consiste en la propagación de la llama desde las cercanías de la cámara de combustión hacia el sistema de admisión, y en su peor caso, hasta el depósito de almacenamiento.

El retroceso de llama puede ocurrir debido a que, al finalizar la etapa de escape de un motor de 4 tiempos, las temperaturas alcanzadas en la cámara por los gases residuales son muy elevadas y pueden superar los valores de autoignición. Entonces, puede producirse la inflamación y propagarse “aguas arriba” si existiese mezcla proveniente del sistema de dosificación de combustible. Al tener estos combustibles una mayor energía de activación, la temperatura elevada debiera ser mantenida por un mayor tiempo. Los gases que ingresan durante la admisión tienen una función refrigerante, que logra bajar lo suficiente la temperatura en la zona en que se mezclan con los gases residuales.

Sin embargo, cuando el combustible utilizado es hidrógeno, la aparición de un retroceso de llama es mucho más factible, ya que si bien su temperatura de autoencendido es más alta, la energía de ignición es significativamente menor, lo que provoca el encendido de la mezcla inmediatamente luego de entrar en contacto con cualquier punto caliente a lo largo de la admisión. Este fenómeno representa un peligro serio cuando se trabaja cerca de la relación estequiométrica. Esta es otra de las razones por las que se define trabajar con una mezcla pobre.

2.4.5 Emisiones

Los principales parámetros que deben considerarse al operar un motor de hidrógeno son el rendimiento y las emisiones. El motor de hidrógeno debe ofrecer el mejor rendimiento posible con las emisiones de NO_X más bajas. Si se logra reducir la temperatura de la llama en la cámara de combustión o la carga térmica dentro del cilindro, se reducen las emisiones de NO_X del motor de hidrógeno [6]. Al mismo tiempo, también se reducen las pérdidas de calor en las paredes de la cámara de combustión, lo que conduce a un aumento en la eficiencia térmica. Debido a esto, el riesgo de retroceso y pre encendido también disminuye, ya que la reducción de la temperatura en la cámara de combustión indirectamente conlleva una reducción en los puntos calientes dentro de la cámara de combustión. La temperatura de la llama puede reducirse mediante el uso de una mezcla pobre. Para lograr las emisiones de NO_X más bajas al trabajar con aire, debemos operar el motor en una relación de equivalencia ϕ que varía de 0.5 a 0.6 ($1.5 < \lambda < 2$), como se puede observar en la *Figura 2.7*. En este rango de relación de equivalencia ϕ , la temperatura de la llama se reduce, lo que resulta en una disminución de las emisiones de NO_X [7].

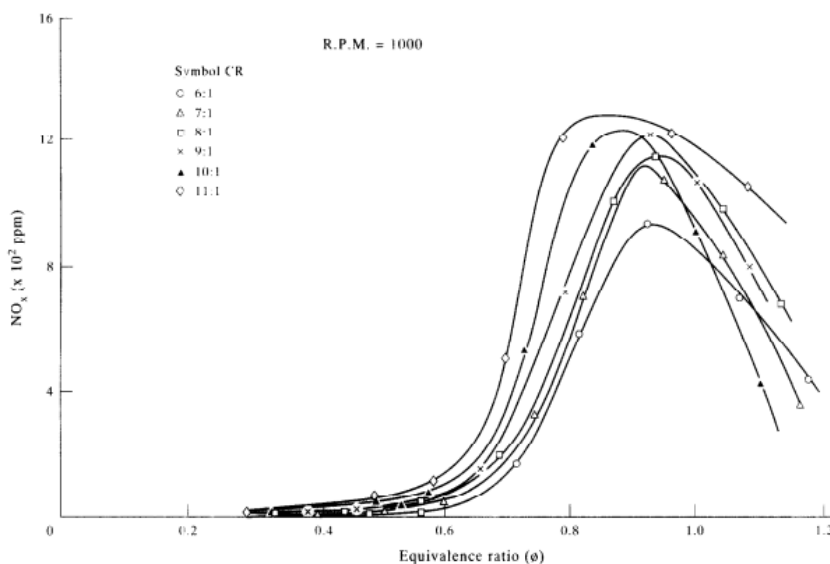
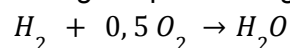
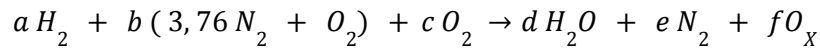


Figura 2.7. Emisiones de NO_X en función de la relación de equivalencia [5].

La combustión del hidrógeno con oxígeno produce agua como único producto:



por lo tanto, un motor que opera a $H_2 + O_2$ no tiene como producto la reacción NO_x . El problema de esta reacción cuando se aumenta el porcentaje de aire como comburente es la alta temperatura adiabática de llama. Como se pudo ver en la Tabla 2.1 de la Sección 2.2 Características del hidrógeno, se espera que una reacción con $O_2 + Aire$ tenga una temperatura de llama adiabática entre los 2254 °C para aire puro y 3200 °C para oxígeno puro como comburente. La presencia de aire en la reacción de combustión puede generar NO_x como se observa en la siguiente ecuación:



Dependiendo de la estrategia de funcionamiento utilizada (relación aire/combustible rica o pobre), un motor de hidrógeno puede producir desde emisiones casi nulas (tan bajas como unos pocos ppm) hasta niveles significativos de NO_x .

2.4.6 Características operativas

2.4.6.1 El impacto de la velocidad de llama laminar en la combustión

Cuando se enciende la mezcla de hidrógeno y aire previamente comprimida, se produce una combustión. En toda combustión se pueden identificar 3 regiones.

- $\theta_s < \theta < \theta_{10\%}$: región de desarrollo de llama.
- $\theta_{10\%} < \theta < \theta_{90\%}$: región de quemado rápido.
- $\theta_{90\%} < \theta$: región de extinción de llama.

La región de desarrollo de llama ($\theta_s < \theta < \theta_{10\%}$) es la que inicia cuando salta la chispa y termina cuando el 10% de la mezcla se ha quemado. En esta región, el frente de llama avanza por la mezcla a la velocidad de llama laminar en forma de esfera. La región de quemado rápido ($\theta_{10\%} < \theta < \theta_{90\%}$) inicia cuando la anterior finaliza y termina cuando se ha quemado el 90% de la mezcla. En esta región la turbulencia difunde la llama por todo el cilindro y la velocidad de quemado aumenta drásticamente. La velocidad de quemado depende de la velocidad de llama turbulenta y de la velocidad de llama laminar. La región de extinción de llama ($\theta_{90\%} < \theta$) también está caracterizada por la velocidad de llama laminar, ya que en la misma se queman los eddies de la turbulencia de afuera hacia adentro a esa velocidad. En la *Figura 2.8* se muestran las regiones mencionadas de la combustión.

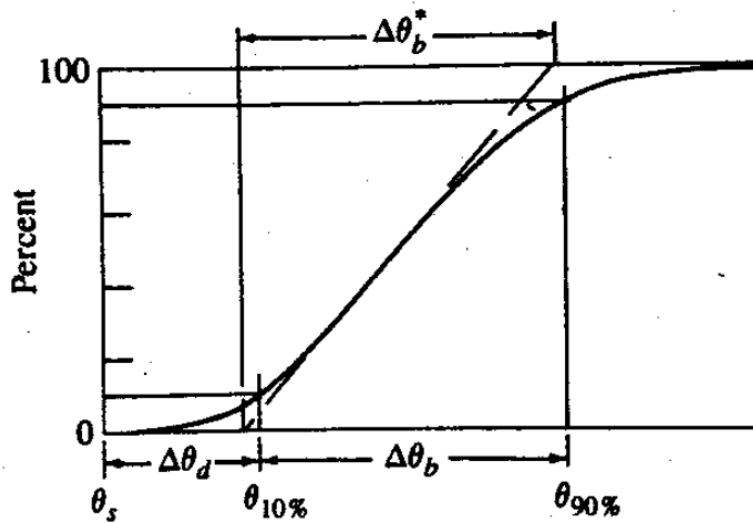


Figura 2.8. Perfil de quemado en función de ángulo de cigüeñal.

En resumen, la velocidad de llama laminar es un parámetro que puede predecir el comportamiento de un combustible en una combustión turbulenta como es la de un *MCI*.

2.4.6.2 Avance de encendido

La velocidad de llama influye en el avance requerido para la ignición de la mezcla. A mayor velocidad, el avance necesario es menor. Por lo tanto, la configuración de ignición para hidrógeno requerirá menor avance que para funcionamiento con gasolina. Sin embargo, en mezclas más pobres, la velocidad de la llama laminar disminuye significativamente, por lo que existe un avance óptimo para cada condición.

2.4.6.3 Consideraciones de seguridad en la inyección

Los depósitos de hidrógeno industrial consisten en cilindros a alta presión. Al trabajar con cualquier gas a presión, se deben tomar consideraciones de seguridad. Se prioriza un diseño compacto de la etapa de alta presión para minimizar la extensión de la tubería que contiene presión elevada, y también disminuir al mínimo la cantidad de conexiones especiales para alta presión. En esta etapa, se deben realizar los cortes de alimentación en caso de fallas, como el aumento indebido de la temperatura del motor o de la presión del combustible en los distintos puntos de control de la línea de alimentación. La etapa de baja presión también se debe asegurar contra pérdidas, aunque esta tarea no presenta el mismo nivel de dificultad, ya que se trabaja con un rango de presión relativa entre 1 y 3 bar, lo que permite utilizar tuberías flexibles y uniones que no requieran altas prestaciones.

Capítulo 3 - Análisis teórico

La estructura de este capítulo se enfoca en comprender la respuesta de un motor ante el enriquecimiento con oxígeno. El análisis se fundamenta en la aplicación de herramientas técnicas como el balance de masa en la cámara de combustión y la evaluación del rendimiento térmico del ciclo Otto. El objetivo primordial es discernir la tendencia en la potencia del motor en función de dichos enriquecimientos y su impacto en diversos parámetros operativos. Este abordaje permite una comprensión más profunda de los fenómenos asociados con la combustión y el desempeño del motor en condiciones específicas.

3.1 Análisis termodinámico

El objetivo de este análisis es determinar el balance de masa en la cámara de combustión y obtener valores teóricos característicos de un motor de combustión interna cuyo combustible es el hidrógeno gaseoso premezclado, utilizando una mezcla de aire y oxígeno en distintas proporciones. Los resultados de este análisis se utilizarán para realizar una primera estimación de las características de la combustión de la mezcla aire-oxígeno-hidrógeno y de la operación de un motor de combustión interna alimentado con esta mezcla. Cuando se hace referencia a mezcla aire-oxígeno se quiere significar una mezcla de aire a la que se le agrega oxígeno desde una fuente externa.

La combustión es una reacción química en donde los enlaces de las moléculas de los reactivos se rompen, y los átomos y electrones se arreglan para formar los productos. En una combustión, la rápida oxidación de los combustibles resulta en una gran liberación de energía. En el marco teórico de la combustión, se dice que una combustión es completa cuando se alcanza la oxidación de cada molécula de combustible. Una de las hipótesis que se tiene en cuenta para este análisis es que la combustión es completa. Se asume esta hipótesis porque:

- La difusividad del hidrógeno es muy alta, relativamente hablando. Esto implica que la existencia simultánea de zonas ricas y pobres de hidrógeno, que resulten en distintas tasas de quemado, es muy improbable.
- La distancia de extinción de llama es relativamente baja, en comparación a otros combustibles, lo que resulta en una fracción de masa no quemada pequeña.

Se asume que el aire utilizado en el motor es 21% oxígeno y 79% nitrógeno. El nitrógeno del aire tiene baja reactividad, es decir, requiere de mucha energía para reaccionar, por lo tanto, se lo considera inerte en este análisis. Esta hipótesis es válida para operación en mezcla pobre, como se ha visto en la Sección 2.4.4. Para operación estequiométrica, esto es una aproximación.

Para analizar la combustión, se define el volumen de control (VC) del análisis que se muestra en la *Figura 3.1*. Donde:

T_p : temperatura de productos

T_R : temperatura de reactivos

T_A : temperatura ambiente

\dot{W}_{cv} : trabajo intercambiado en el volumen de control

\dot{Q}_{cv} : calor intercambiado en el volumen de control

El volumen de control, es una región en el espacio en la que ingresan los reactivos de combustión, egresan los productos y se intercambia calor y trabajo. Los reactivos y los productos tienen entalpía, la diferencia de las entalpías de entrada y salida deben igualar la suma del calor y trabajo intercambiado por el VC.

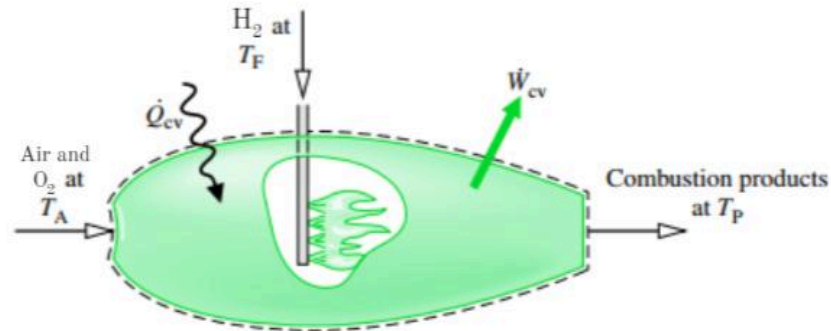
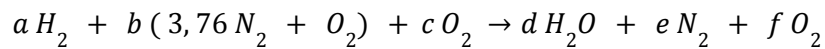


Figura 3.1. Volumen de control de estudio.

3.1.1 Relación aire-oxígeno-combustible y balance de masa

Para iniciar el análisis termodinámico, se realiza un balance de masa del sistema. El VC se alimenta con hidrógeno, aire y oxígeno



$$H: a = d = n_{H_2}$$

$$N: 7,52 b = 2 e$$

$$O: 2 b + 2 c = d + 2 f$$

Este sistema tiene 6 incógnitas y solo 3 ecuaciones, por lo tanto, es indeterminado. Para lograr definirlo se deben definir los caudales de hidrógeno, aire y oxígeno y la relación entre ellos. A continuación, se denomina **sustancia** a la mezcla de oxígeno y nitrógeno, sin importar su proporción. El número de moles de la sustancia y el número de moles de oxígeno queda determinado por las siguientes expresiones:

$$n_s = 4,76. b + c$$

$$n_{O_2} = b + c$$

Se introduce el factor de concentración de oxígeno (z) que relaciona las expresiones anteriores:

$$n_s = z n_{O_2}$$

n_s : número de moles de sustancia

n_{O_2} : número de moles de oxígeno

Los límites de z son:

$z = 1$: oxígeno puro

$z = 4,76$: aire puro

En la *Figura 3.2* se puede ver cómo cambian las fracciones en masa de nitrógeno y oxígeno en función del valor de z .

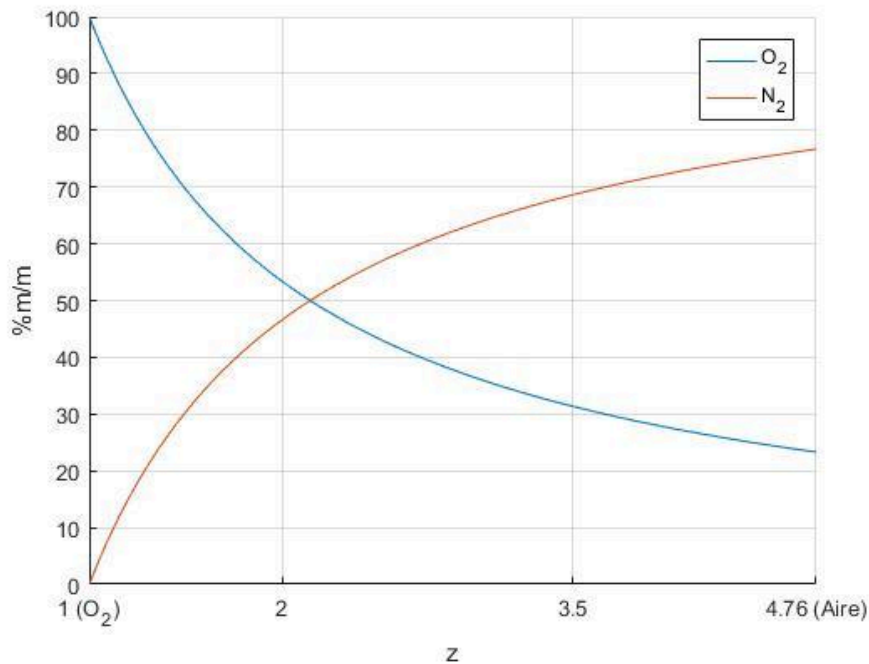


Figura 3.2. Porcentaje de masa de nitrógeno y oxígeno en función de z .

En un análisis de combustión convencional, se define el factor λ como el cociente de relaciones aire-combustible real y estequiométrico, pero el comburente en este caso no es aire. Por esa razón, se debe cambiar la definición del factor que relaciona las proporciones entre combustible y comburente. Se introduce un análogo a la relación aire combustible, llamado λ' , que relaciona las cantidades de oxígeno real y teórica. Esta relación es útil para poder representar como varían los indicadores del motor con el agregado de O_2 . Se calcula como un cociente entre la relación sustancia combustible real y estequiométrica:

$$\tilde{SC} = \frac{n_S}{n_{H_2}} = \frac{z n_{O_2}}{n_{H_2}}$$

$$\tilde{SC}_T = \frac{n_{ST}}{n_{H_2}} = \frac{z n_{O_2,T}}{n_{H_2}}$$

$$\lambda' = \frac{\tilde{SC}}{\tilde{SC}_T} = \frac{n_{O_2}}{n_{O_2T}} = \frac{n_{O_2}}{1/2 n_{H_2}} = 2 \frac{n_{O_2}}{n_{H_2}}$$

\tilde{SC}_T : relación sustancia combustible estequiométrica

\tilde{SC} : relación sustancia combustible real

n_{H_2} : número de moles de hidrógeno

λ' : cociente de relaciones oxígeno/combustible real y estequiométrico

A medida que el aire es enriquecido por oxígeno, la relación λ convencional deja de tener validez. Esto se debe a que el agregado de oxígeno desplaza el aire que ingresa al VC. Por lo tanto, λ se reduce porque se reduce la cantidad de aire. Por este motivo, se introduce la relación λ' en las siguientes ecuaciones:

$$b = \frac{c(z-1)}{4,76-z}$$

$$c = \frac{\lambda' n_{H_2} (4,76-z)}{7,52}$$

$$b = \frac{\lambda' n_{H_2} (z-1)}{7,52}$$

$$f = \frac{n_{H_2} (\lambda'-1)}{2}$$

Finalmente, reemplazando las ecuaciones en el balance de masa, este resulta:

$$n_{H_2} H_2 + \frac{\lambda' n_{H_2} (z-1)}{7,52} (3,76N_2 + O_2) + \frac{\lambda' n_{H_2} (4,76-z)}{7,52} O_2 \rightarrow n_{H_2} H_2 O + \frac{\lambda' n_{H_2} (z-1)}{2} N_2 + \frac{n_{H_2} (\lambda'-1)}{2} O_2$$

3.1.2 Balance energético

El paso siguiente de este análisis es realizar el balance energético. Este balance depende principalmente de la entalpía de los productos y reactivos de la reacción. La entalpía específica en un estado no estándar se describe como la suma de la entalpía de formación del compuesto y la entalpía relativa a la de referencia, como se muestra a continuación:

$$\bar{h}(T, p) = \bar{h}_f^0 + \left[\bar{h}(T, p) - \bar{h}(T_{ref}, p_{ref}) \right] = \bar{h}_f^0 + \Delta \bar{h}$$

\bar{h} : entalpía específica

El balance energético debe tener en cuenta que la diferencia de energía de los reactivos y productos, es energía entregada al sistema en forma de calor.

$$\frac{\dot{Q}_{cv}}{\dot{n}_F} = \sum_P n_e \bar{h}_e - \sum_R n_i \bar{h}_i$$

La potencia calorífica intercambiada por el VC es específica con el caudal molar de combustible. La sumatoria con subíndice 'P' indica las entalpías de los productos, con subíndice 'e' porque escapan del volumen de control. La sumatoria con subíndice 'R' indica las entalpías de los reactivos, con subíndice 'i' porque ingresan al volumen de control. El calor obtenido por este medio es el que el motor debe convertir a trabajo mecánico, pero por limitaciones propias del mecanismo y del ciclo, no puede hacerlo en su totalidad. El rendimiento térmico indica cuánto calor entregado por la combustión es convertido a trabajo sobre el pistón.

3.1.3 El impacto del agregado de oxígeno en la potencia

Se quiere conocer el impacto de agregar oxígeno en la sustancia en la potencia del motor de combustión interna. Para ello, si se asume rendimiento térmico ideal en un motor de combustión interna de 4 tiempos funcionando con hidrógeno, se tiene que:

$$\dot{Q}_{cv} = n_{H_2} PCI_{H_2} \frac{\omega [rpm]}{2 \cdot 60}$$

PCI_{H_2} : poder calorífico inferior del hidrógeno

ω : velocidad angular

Si además se asume rendimiento volumétrico ideal, se tiene que:

$$V_b = (n_s + n_{H_2}) \bar{v}_o$$

V_b : volúmen barrido en una carrera

\bar{v}_o : volúmen molar estándar

Reemplazando:

$$V_b = \left(\left(\frac{z \cdot \lambda'}{2} + 1 \right) \cdot n_{H_2} + n_{H_2} \right) \bar{v}_o$$

Despejando n_{H_2} queda:

$$n_{H_2} = \frac{V_b}{\left(\frac{z \cdot \lambda'}{2} + 1 \right) \bar{v}_o}$$

Finalmente, resulta:

$$\dot{Q}_{cv} = \frac{V_b}{\left(\frac{z \cdot \lambda'}{2} + 1 \right) \bar{v}_o} \cdot PCI_{H_2} \cdot \frac{\omega [rpm]}{2 \cdot 60}$$

Para conocer la variación de la potencia calórica con el agregado de oxígeno, debemos fijar un valor de λ' y barrer z desde 4.76 (aire puro) a 1 (oxígeno puro). Se selecciona una velocidad de operación del motor de 1200 rpm y se supone un rendimiento térmico de 0.3. Este barrido para varios valores de λ' se puede apreciar en la *Figura 3.3*.

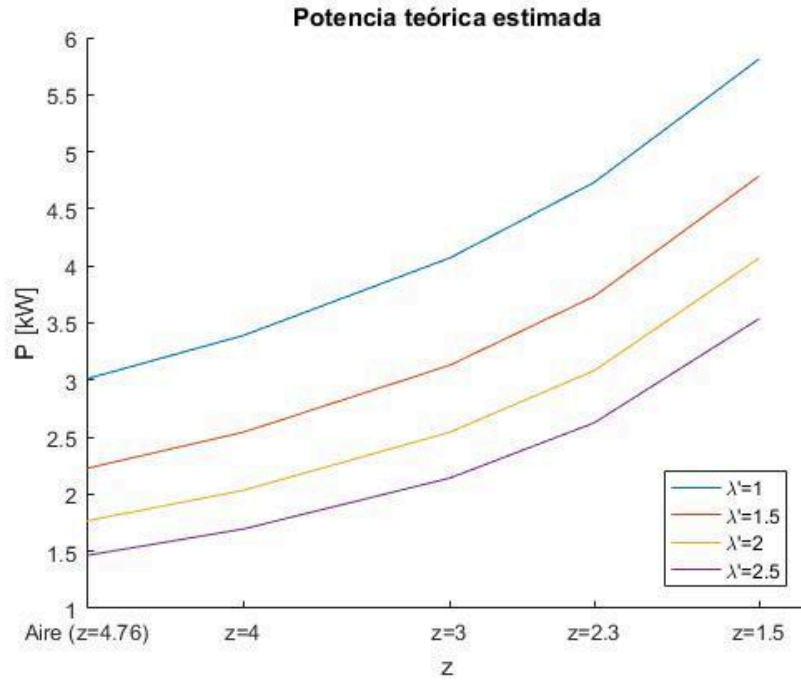


Figura 3.3. Potencia calorífica en función de z, para varios valores de λ'.

Bajo estas premisas, se evidencia que la inclusión de oxígeno conlleva un incremento en la potencia del motor. Este efecto deriva de la sustitución del aire por oxígeno, lo que resulta en un aumento de la proporción de oxígeno en la mezcla. En consecuencia, el caudal de hidrógeno debe incrementarse para mantener la relación λ'.

3.2 Temperatura de llama adiabática

La temperatura de llama adiabática (T_{LA}) es la temperatura que alcanza una mezcla combustible dentro de un recinto adiabático, este puede ser a volumen constante (resultados útiles para ciclo Otto) o a presión constante (resultados útiles para ciclo Diesel). Es un parámetro útil para predecir la potencia, el rendimiento y las emisiones de un motor. Esta temperatura se obtiene al plantear el balance de energía del sistema, anulando la potencia calorífica intercambiada del VC (adiabático) e iterar para balancear la ecuación. El resultado de esta operación es el siguiente:

$$\sum_P n_e \bar{h}_e = \sum_R n_i \bar{h}_i$$

Las entalpías específicas dependen de la temperatura. La temperatura a la que esa ecuación se balancea, es la T_{LA} . Para calcular la T_{LA} se hace uso del programa CEARUN [26] de NASA, en el cual se simula una reacción química en un recinto con características determinadas. Este programa usa los polinomios desarrollados por NASA para definir las entalpías de los componentes en cada condición. En este caso se usará el tipo de problema "uv" [26], en el cual se plantea una combustión en un recinto a volumen constante, con una temperatura inicial estimada a partir de la compresión isoentrópica del aire, con $R_c = 10$ y $T_0 = 298 K$.

$$T_2 = T_1 \left(\frac{v_1}{v_2} \right)^{k-1} = 748.5K$$

A continuación se presentan gráficos con los resultados obtenidos (*Figura 3.4*), haciendo barridos de λ' entre 0.5 y 3, y de z entre 1 y 4,76.

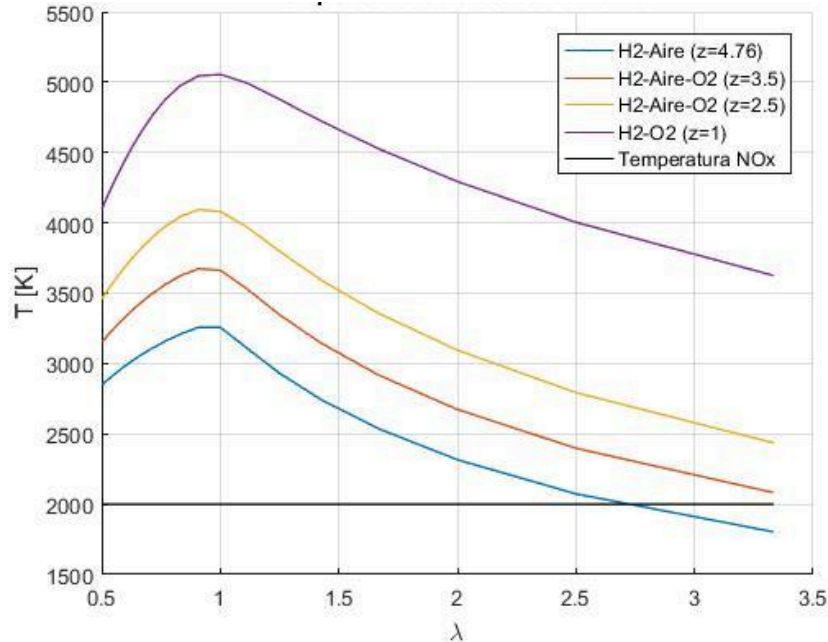


Figura 3.4. Temperatura de llama adiabática para diversas mezclas de hidrógeno, aire y oxígeno y una estimación de temperatura de formación de NO_x .

El mapa de T_{LA} mostrado en la *Figura 3.4* no expresa lo que le pasa a un *MCI* al que se le agrega oxígeno en la admisión durante su funcionamiento. Para ver esto, se expone el siguiente caso de estudio: un *MCI* de H_2 que funciona con $\lambda = 1$ se le agrega oxígeno en la admisión. En la *Figura 3.5* se muestra cómo varían las proporciones de sustancia a medida que el oxígeno es agregado. Como se puede observar, se mantiene el número de moles de combustible (n_{H_2}) constante y se varía la proporción de N_2 y O_2 disponible en la sustancia de entrada al *VC*. Es importante destacar que el número de moles de sustancia (n_s) se mantiene constante para todos los cálculos realizados.



Figura 3.5. Proporciones de combustible y sustancia utilizados en CEARUN.

El caudal de sustancia es constante, pero la proporción de oxígeno aumenta. Se espera que la T_{LA} se mantenga ya que se reemplaza nitrógeno (inerte) por oxígeno que no participa en la combustión. Se computan los 5 casos de la *Figura 3.5* en CEARUN para obtener la temperatura de llama adiabática. En la *Figura 3.6* se muestran los resultados obtenidos.

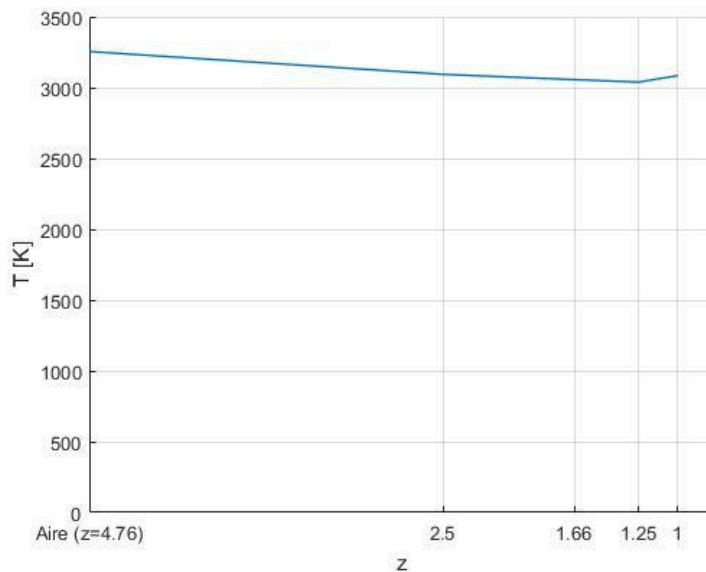


Figura 3.6. T_{LA} para los valores de z y λ' presentados en la *Figura 3.4*.

Los resultados de los cálculos realizados por CEARUN muestran que la T_{LA} tiene una variación del 6.5% entre la temperatura máxima y mínima y que la temperatura desciende a medida que se agrega oxígeno. En la figura, se observa que el valor de la temperatura de llama adiabática para todos los z y λ' calculados supera los 3000K. En términos generales una T_{LA} elevada representa una alta velocidad de combustión, esto tiende a aproximarse al comportamiento de una combustión ideal. Sin embargo, una temperatura excesivamente alta puede generar considerables pérdidas de calor en el cilindro, lo que a su vez reduce el rendimiento térmico del sistema. Además, cuando se

opera con presencia de nitrógeno a temperaturas superiores a los 2000K se obtiene en los productos de la reacción de combustión contaminantes tales como los óxidos de nitrógeno (NO_x). Para mitigar la emisión de contaminantes las estrategias más efectivas implican la operación con mezcla pobre y la dilución con oxígeno. La formación de NO_x requiere la existencia de nitrógeno, oxígeno, altas presiones y temperaturas. Al incluir oxígeno en la mezcla, la temperatura aumenta, pero el nitrógeno disponible para formar los NO_x disminuye en proporción. La formación de estos compuestos será revisada en la etapa de simulación.

También, se debe considerar que una elevada T_{LA} representa una desventaja significativa debido a sus efectos adversos en los materiales utilizados en el motor. Muchos de los materiales comúnmente utilizados en los motores de combustión, como el acero, tiene un punto de fusión de alrededor de 1370 °C, y algunas aleaciones de aluminio, que tienen puntos de fusión en el rango de 600 a 700 °C. Estas temperaturas de fusión son relativamente bajas en comparación con las temperaturas alcanzadas durante la combustión de hidrógeno y oxígeno, que pueden superar los 2000 Kelvin (K).

Para abordar este desafío, se requieren materiales de alta resistencia térmica que puedan soportar temperaturas significativamente más altas. Entre estos materiales se incluyen aleaciones de níquel, titanio y cerámicas avanzadas, que tienen puntos de fusión mucho más altos y pueden resistir las condiciones extremas presentes en el motor durante la combustión de hidrógeno y oxígeno. Sin embargo, incluso estos materiales de alta resistencia térmica pueden tener limitaciones en términos de temperaturas extremadamente altas. Por lo tanto, además de utilizar materiales resistentes a altas temperaturas, también es importante implementar sistemas de refrigeración efectivos. Una opción consiste en introducir vapor de agua [2] en el cilindro durante el proceso de combustión. El vapor de agua actúa como un agente de enfriamiento al absorber parte del calor generado durante la combustión, lo que ayuda a reducir la temperatura en la cámara de combustión y en los componentes cercanos. Esta técnica puede ayudar a proteger los materiales del motor y a prolongar su vida útil al tiempo que se reduce el riesgo de daños por altas temperaturas.

3.3 Rendimiento térmico

Como se observa en la *Sección 2.4.3*, el rendimiento térmico (η_t) máximo teórico se puede estimar a partir de la relación:

$$\eta_t = 1 - \frac{1}{R_c^{k-1}}$$

La relación de compresión se mantiene porque se compara el mismo motor en funcionamiento con $H_2 + Aire$ contra el funcionamiento de $H_2 + O_2 + Aire$. Por lo tanto, la única variable es la constante relación de poderes caloríficos k , que depende de la composición del medio y de la temperatura. De la solución del CEARUN se pueden obtener los coeficientes k para cada caso analizado, valores que se muestran en la *Tabla 3.1*.

$z \setminus \lambda'$	3	2.5	2	1.5	1
4.76	1.2741	1.2578	1.245	1.2353	1.21
3.5	1.2516	1.2338	1.221	1.2057	1.1889
2.5	1.2253	1.2076	1.1961	1.1841	1.1719

Tabla 3.1. Coeficientes k para las mezclas de hidrógeno, aire y oxígeno.

Finalmente, considerando una relación de compresión de 10, se obtiene el rendimiento térmico teórico para cada caso y se muestra en la *Figura 3.6*. Se puede ver que el aumento de lambda produce una mejora en el rendimiento térmico, pero el agregado de oxígeno lo perjudica. Se debe mencionar que estos valores son una aproximación parcial para el rendimiento térmico que se puede alcanzar en un motor real en estas condiciones.

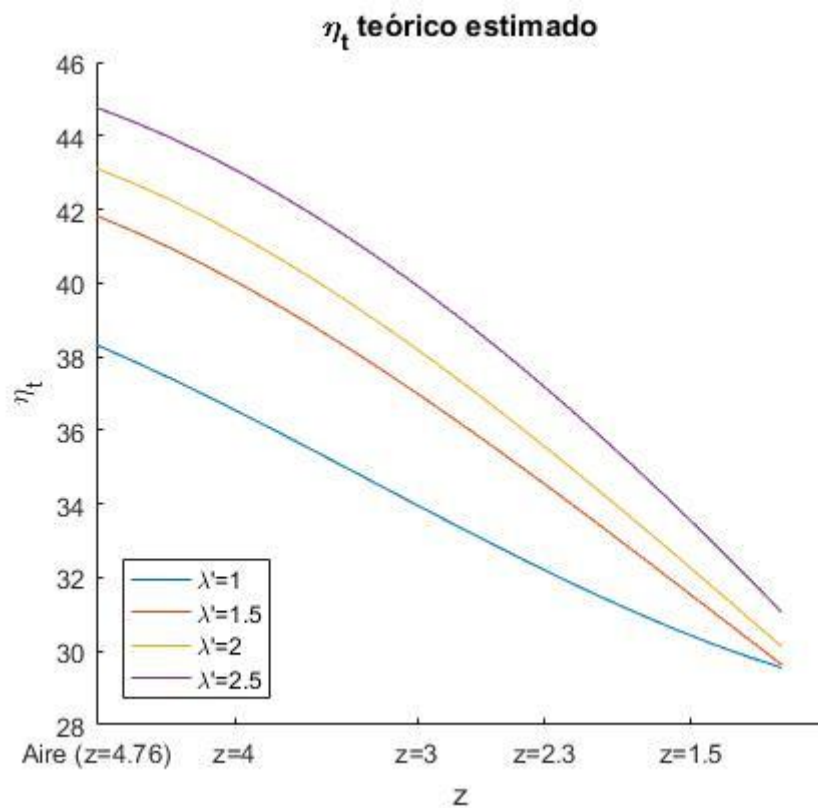


Figura 3.6. Rendimiento térmico estimado teórico

3.4 Rendimiento volumétrico modificado

El rendimiento volumétrico es un cociente entre la masa de aire que ingresó al cilindro, y la masa de aire que podría entrar en un ciclo. Es un parámetro que indica el grado de llenado del cilindro en un motor. En este trabajo, el fluido que circula por el motor no es aire, entonces se debe redefinir el rendimiento volumétrico para que contabilice el agregado de oxígeno. El rendimiento volumétrico modificado (η_{vol}') es un cociente entre la masa de oxígeno que ingresa al cilindro y la masa de oxígeno que podría entrar en un ciclo al funcionar con aire (masa de oxígeno teórica). Esto se expresa a continuación:

$$frac_{O_2}(z) = \frac{32}{32+28(z-1)}$$

$$frac_{O_2}(4.76) = 0.21$$

$$\eta_{vol}' = \frac{frac_{O_2}(z) m_g}{m_{O_2_{teo}}} = \frac{m_{O_2}}{frac_{O_2}(4.76) \cdot \rho_a \cdot V_{cil}}$$

Donde:

m_g : masa de gas en el cilindro

m_{O_2} : masa de oxígeno

ρ_a : densidad del aire a 20°C

V_{cil} : volumen del cilindro

$frac_{O_2}$: fracción en masa de oxígeno

Para demostrar cómo cambia el rendimiento volumétrico modificado en función del agregado de oxígeno en la entrada, se puede observar cuánto combustible (H_2) debe ingresar al cilindro para mantener λ' . A partir del balance de masa, se puede deducir una expresión para el número de moles de hidrógeno, la cuál se muestra a continuación:

$$n_{H_2} = \frac{2 \cdot n_{O_2}}{\lambda'}$$

Luego, la fracción de masa de hidrógeno inyectada se puede expresar como:

$$m_{H_2} = n_{H_2} \cdot M_{H_2} = \frac{2 \cdot n_{O_2}}{\lambda'} \cdot M_{H_2} = \frac{2(frac_{O_2}(z) \cdot m_g / M_{O_2}) M_{H_2}}{\lambda'}$$

$$frac_{H_2} = \frac{m_{H_2}}{m_g} = \frac{2 M_{H_2} frac_{O_2}(z)}{\lambda' M_{O_2}}$$

Donde:

m_{H_2} : masa de hidrógeno

M_{O_2} : masa molar de oxígeno

En la *Figura 3.7* se grafica la fracción de masa de hidrógeno en función de la cantidad de gas que entra al cilindro ($1 < z < 4.76$). Como se ilustra en la figura, la fracción de combustible quemado aumenta conforme aumenta la cantidad de oxígeno, por lo tanto, aumenta el rendimiento volumétrico modificado.

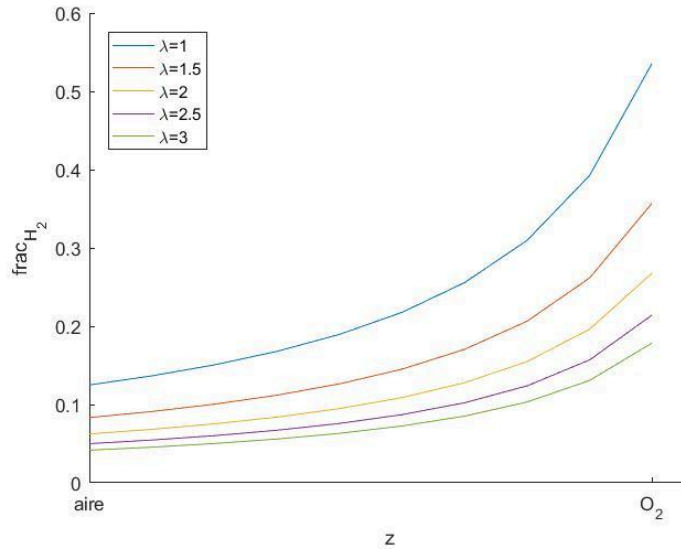
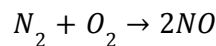


Figura 3.7. Evolución de la fracción de hidrógeno con el agregado de oxígeno.

3.5 Emisiones

El agregado de oxígeno en la mezcla provoca cambios importantes en el comportamiento del motor. A continuación se realiza una estimación del límite máximo de emisiones. Se espera que se produzca un aumento en la formación de NO_x debido al incremento de temperatura. Sin embargo, a medida que aumenta la proporción de oxígeno agregado, disminuye la cantidad de aire en la mezcla. Esto limita la cantidad de nitrógeno disponible para la formación de NO_x , por lo que se espera que a partir de cierta fracción de agregado de O_2 , las emisiones de NO_x bajen. Para tener una noción de los valores máximos de concentración de NO_x que se pueden alcanzar, se realiza una estimación tomando como hipótesis que todo el oxígeno disponible, luego de la combustión, formará óxido de nitrógeno.



Si se asume combustión completa, la masa de oxígeno y de nitrógeno restante puede obtenerse del balance de masa realizado en el Capítulo 3.

$$n_{O_2} = \frac{n_{H_2}(\lambda'-1)}{2}$$

$$n_{N_2} = \frac{\lambda' n_{H_2}(z-1)}{2}$$

n_{N_2} : número de moles de nitrógeno

Luego:

$$n_{NO} = \min(n_{O_2}, n_{N_2})$$

n_{NO} : número de moles de óxidos de nitrógeno

Estimando un rendimiento térmico aproximado de 37% y una potencia de 3 kW a 1200 rpm, se obtiene que el número de moles de hidrógeno por ciclo es:

$$\dot{m}_{H_2} = \frac{P}{\eta_t \cdot PCI} = 0.0677 \text{ g/s}$$

$$\dot{n}_{H_2} = \frac{\dot{m}_{H_2}}{M_{H_2}} = 0.0338 \text{ mol/s}$$

$$n_{H_2} = \dot{n}_{H_2} \frac{60}{\omega} = 0,00169 \text{ mol}$$

\dot{m}_{H_2} : caudal másico de hidrógeno

\dot{n}_{H_2} : caudal molar de hidrógeno

P : potencia

Finalmente, la concentración de NO_x en función de z para varios λ' se muestra en la *Figura 3.8*. Se puede ver que a $z = 1,5$ las curvas presentan un corte debido al faltante de nitrógeno para hacer la reacción.

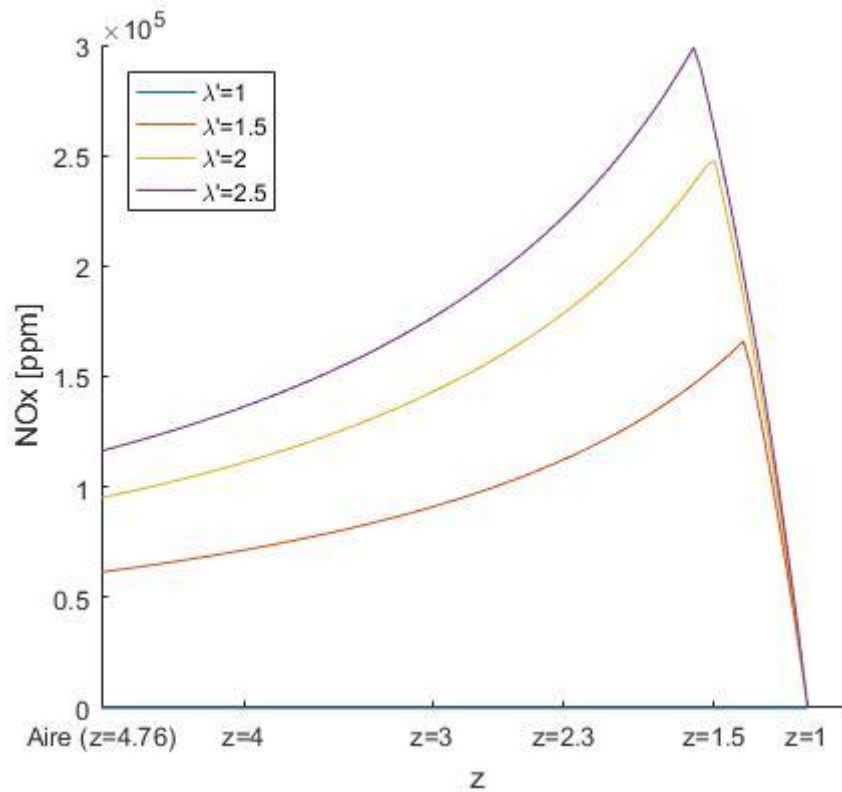


Figura 3.8. Emisiones límite máximas de NO_x [ppm] en función de λ' para $z = 4,76$ ($H_2 + Aire$), $z = 3,5$ ($H_2 + O_2 + Aire$) y $z = 2$ ($H_2 + O_2 + Aire$).

Capítulo 4 - Simulación

4.1 Simulación Modelo GT-Power

4.1.1 Introducción a GT-Power

La evaluación experimental de cada punto de operación de un motor en un dinamómetro puede ser una tarea costosa y laboriosa. Por lo tanto, la simulación por computadora es una gran alternativa. GT-Power es un programa de simulación de motores que permite a los investigadores analizar virtualmente el rendimiento del motor.

De manera análoga a otras simulaciones de motores, el proceso comienza con la definición de las dimensiones físicas de todo el sistema. Esto implica dividir el sistema en sus componentes principales, que incluyen el acelerador, el múltiple de admisión, el inyector de combustible, el motor y el sistema de escape. Al modelar el colector de admisión, es fundamental caracterizar con precisión las curvas de las tuberías y las divisiones de flujo. Afortunadamente, GT-Power proporciona componentes preestablecidos para tuberías rectas, curvas y divisiones de flujo, cada uno definido por parámetros como coeficientes de descarga, área transversal y longitud.

Más allá de las propiedades físicas, un modelo de combustión precisa es esencial. Replicar la compleja mezcla interna del cilindro debido a la apertura y cierre de las válvulas con un modelo simple es un desafío. Sin embargo, GT-Power ofrece modelos de combustión para tener en cuenta esta complejidad. Estos modelos simplifican la dinámica de fluidos teniendo en cuenta su impacto en la combustión, lo que reduce significativamente el tiempo de simulación sin sacrificar la precisión.

Las condiciones de flujo interno del cilindro, en particular el swirl (rotación alrededor de la línea central del cilindro) y el tumble (rotación alrededor del diámetro del cilindro), influyen significativamente en la eficiencia de la combustión. Si bien es posible capturar todos los matices del movimiento de fluidos interno del cilindro, a menudo conduce a tiempos de simulación significativamente más largos. El uso de modelos de combustión ofrece un compromiso práctico, asegurando resultados precisos al tiempo que mantiene un costo computacional razonable.

4.1.2 Funcionamiento de GT-Power

GT-Power se basa en modelos de mecánica de fluidos unidimensionales, que tiene en cuenta los flujos de fluidos y la transferencia de calor. El modelo se divide en componentes (ambiente, conductos, motor, etc.) por donde el fluido circula. Además, cada uno de estos componentes está discretizado en pequeños volúmenes donde las propiedades de los fluidos como la presión, temperatura, densidad, energía interna, son constantes. Cada volumen también tiene propiedades vectoriales que pueden transferirse a través de sus superficies. Estas propiedades incluyen el flujo de masa y la velocidad del fluido. En la *Figura 4.1* se diferencian las propiedades escalares de las vectoriales para cada volumen:

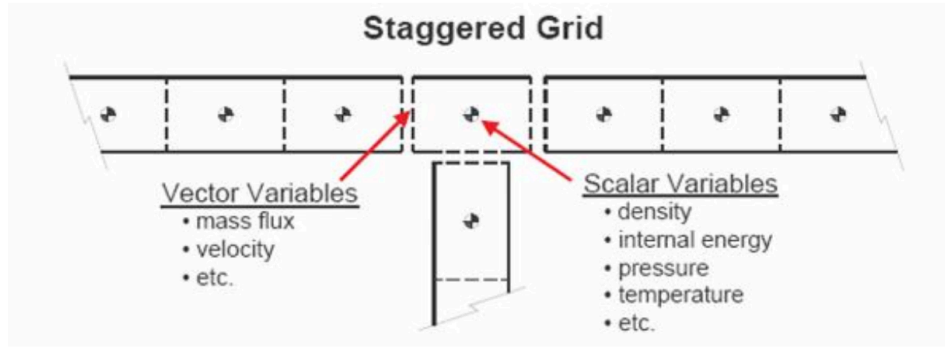


Figura 4.1. Ilustración de una discretización de un componente en GT-Power [23]

En cada volumen de cada componente se plantea la conservación de la masa, la conservación de energía, la conservación de cantidad de movimiento y una forma implícita de la ecuación de exergía. Dichas formulaciones se pueden ver en las ecuaciones:

$$\frac{dm}{dt} = \sum_{SC} \dot{m}$$

$$\text{Energía: } \frac{d(me)}{dt} = -p \frac{dV}{dt} + \sum_{SC} (\dot{m}H) - U_s A_s (T_{gas} - T_{pared})$$

$$\text{Entalpía: } \frac{d(\rho HV)}{dt} = \sum_{SC} (\dot{m}H) + V \frac{dp}{dt} - U_s A_s (T_{gas} - T_{pared})$$

$$\text{Momento: } \frac{d\dot{m}}{dt} = A \frac{dp}{dx} + \sum_{SC} \frac{(\dot{m}u)}{dx} - 2C_f \frac{\rho u |u| A}{D} - K_p \frac{\rho u |u| A}{2 dx}$$

Donde:

SC : superficie de control

H : entalpía específica total

U_s : coeficiente de transferencia de calor global

A_s : área de superficie

C_f : coeficiente de fricción de Fanning

K_p : coeficiente de pérdida de presión

T_{gas} : temperatura del gas en la superficie

T_{pared} : temperatura de pared

u : velocidad del gas en la superficie

D : diámetro equivalente

La resolución del problema es iterativa, se proponen valores iniciales para los cálculos y luego se itera hasta la convergencia o hasta un número predeterminado de iteraciones.

4.1.3 Modelo y validación

El modelo a realizar debe poder ser validado con ensayos reales. A su vez, el modelo debe ser una fiel representación del motor ensayado. El ITBA cuenta con un motor Villa RV 650 modificado para funcionar en ciclo Otto a hidrógeno, acoplado a un dinamómetro activo y varios sensores. Esta configuración puede verse en la *Figura 4.2*.

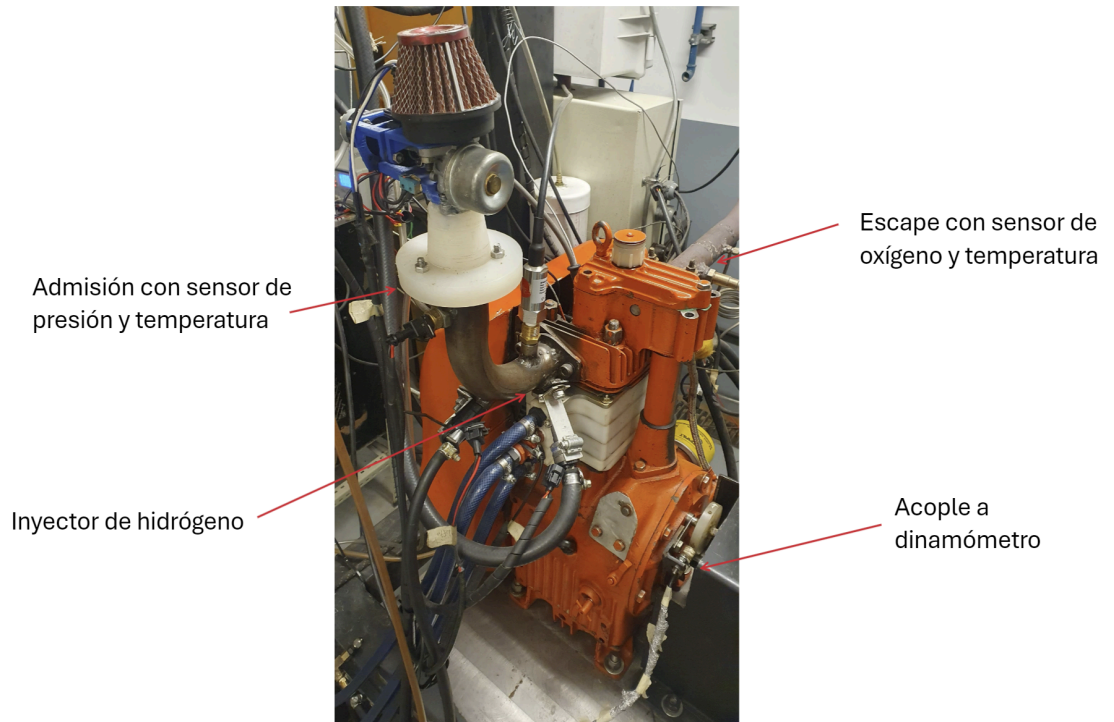


Figura 4.2. Configuración del motor Villa RV650 en el banco de ensayos del ITBA.

Para lograr la precisión del modelo, se debe representar todos los elementos de la admisión y del escape, es decir, todas las curvas, ductos, restricciones, etc. También se debe relevar precisamente los datos del motor, como las leyes de movimiento de las válvulas, diámetro de los conductos, posición de la bujía, forma de la cámara de combustión, etc. En la *Figura 4.3* se muestra la plantilla de trabajo del GT-Power del modelo realizado sobre el motor RV650.

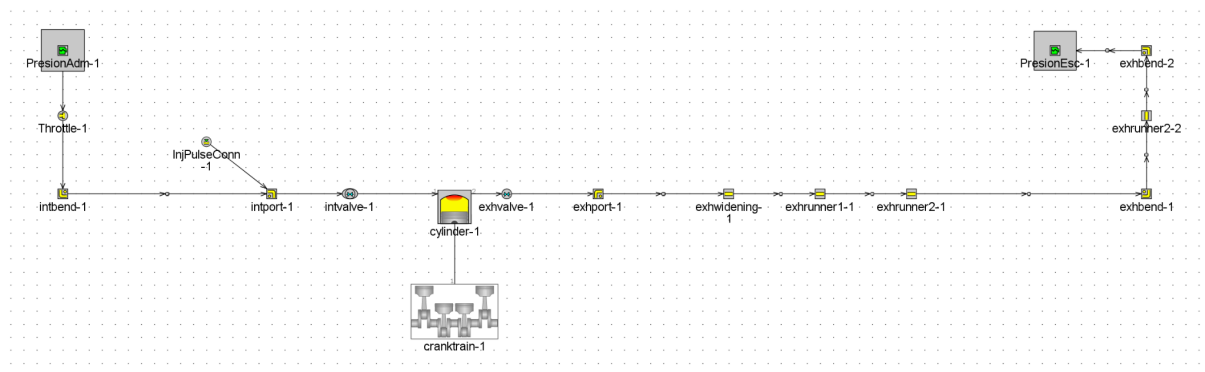


Figura 4.3. Canvas de GT-Power del modelo utilizado.

La validación del modelo se lleva a cabo realizando el mismo ensayo tanto en el dinamómetro como en el software. La diferencia entre los resultados debería ser menor al 10% para aceptar el modelo como válido. De no cumplirse, se debería corregir el modelo utilizando como referencia los datos relevados del ensayo.

4.1.4 Objetivo del modelo

El objetivo de la simulación es obtener valores característicos del motor para ciertos regímenes de operación y así poder realizar comparaciones con las estimaciones hechas y obtener conclusiones acerca de la viabilidad de la implementación del agregado de oxígeno

- Los regímenes de operación deben estar caracterizados en función de:
 - La relación λ' .
 - La relación z .

- Los resultados de la simulación que serán evaluados son:
 - Potencia neta.
 - Rendimiento térmico.
 - Rendimiento volumétrico modificado.
 - Temperatura máxima.
 - Emisiones.

GT-Power permite la creación de varios casos de simulación en un mismo modelo. Esta herramienta sirve para simular varias condiciones de operación en el mismo modelo, ya que permite la variación de los parámetros que definen al mismo. Se hace uso de esto para evaluar el funcionamiento del motor con diferentes λ' y z .

4.2 Parámetros del modelo

El modelo tiene una serie de parámetros que son constantes y otra serie que son variables. Los parámetros que se consideran constantes son los que describen la geometría del motor y algunas propiedades de los fluidos (temperatura y presión ambiente, poder calorífico del hidrógeno, etc), estos no van a ser modificados en ninguno de los casos del modelo. Los parámetros variables son los que se pueden modificar para obtener distintos regímenes de operación del motor. Estos son los que ajustan la relación entre combustible y comburente (λ') y el factor de concentración de oxígeno (z).

4.2.1 Parámetros constantes

La mayoría de los parámetros introducidos en el modelo tienen valores que permanecen constantes a través de los casos de simulación. En el modelo se decide dejar constante los valores de los siguientes parámetros:

- Las propiedades geométricas del motor
- Los valores de presión y temperatura del ambiente
- El avance de encendido
- La velocidad del motor
- Las propiedades del combustible
- Las características de la turbulencia del cilindro en el instante de combustión

4.2.2 Parámetros variables

Para cumplir con el objetivo del modelo, se deben hacer varias simulaciones con diferentes valores de algunos parámetros. Los parámetros que cambian su valor a través de los casos de simulación son los denominados parámetros variables.

Los parámetros variables de este modelo son:

- Relación λ'
- Factor de concentración de oxígeno z
 - Fracción de nitrógeno en el fluido de trabajo
 - Fracción de oxígeno en el fluido de trabajo

4.2.3 Parámetros de inyección

El modelo cuenta con un inyector teórico que regula el caudal de combustible para cumplir con la relación aire-combustible determinada. Esto quiere decir que el caudal de hidrógeno inyectado depende del caudal de oxígeno en la admisión y de la relación λ' . Se determina un caudal de hidrógeno arbitrario de $1 \frac{g}{s}$, ya que el ancho de pulso utilizado será calculado durante la simulación. El inyector comienza a inyectar a 65° DPMS y lo hace en el múltiple de admisión.

4.2.4 Parámetros de encendido

El avance de encendido es un parámetro crítico del modelo. Si no se selecciona correctamente, el motor puede funcionar ineficientemente, arrojando malos resultados en la simulación. Por eso, se toma como referencia los valores de la *Tabla 4.1* para seleccionar el avance de encendido. Los valores fueron seleccionados cuidadosamente para obtener un funcionamiento similar en todas los casos de simulación, teniendo en cuenta de no superar las temperaturas máximas posibles de los materiales mencionadas en la Sección 3.2.

z	avance [deg]
4.76	10
4	6
3	4
2.3	2
1.5	2

Tabla 4.1. Valores de avance de encendido en función de z .

4.3 Modelo de combustión

El modelo de combustión es el elemento más complejo e importante de la simulación, es crítico para obtener un modelo bien calibrado para simulación. Existen tres clases de modelos de combustión, predictivos, no predictivos y semi predictivos. Los modelos no predictivos son aquellos que utilizan información relevada de ensayos experimentales, donde la curva de tasa de quemado es impuesta a través de las trazas de

presión del cilindro. Los modelos predictivos son los que deducen la curva de quemado mediante datos geométricos del cilindro y la cámara de combustión, velocidad del motor, carga del cilindro y propiedades de la mezcla aire-combustible. Este tipo de modelo requiere una extensa calibración para que el mismo sea una buena representación del motor real. Los modelos semi-predictivos son una mezcla de los anteriores. En estos modelos también se impone una curva de tasa de quemado mediante una traza de presión del cilindro, pero permite realizar modificaciones a algunos parámetros como la velocidad del motor, carga, avance de encendido, etc.

Se utiliza el modelo de combustión predictiva, ya que no se cuenta con ensayos que permitan obtener los datos de input de un modelo no predictivo, como en el caso de H₂+Aire. Este modelo predictivo define el comportamiento del motor en el régimen de operación establecido (velocidad e inyección).

4.3.1 Modelo de combustión turbulenta para motores de encendido a chispa

Este modelo predice la tasa de quemado para una mezcla homogénea encendida por chispa, usando parámetros del motor, carga y propiedades de la mezcla. Para calcular la tasa de masa encendida y quemada se usan las ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{dM_e}{dt} &= \rho_u A_e (S_T + S_L) \\ \frac{dM_b}{dt} &= \frac{(M_e - M_b)}{\tau} \\ \tau &= \frac{\lambda}{S_L}\end{aligned}$$

Donde:

M_e : masa encendida

ρ_u : densidad de masa no quemada

A_e : área del borde del frente de llama

S_T : velocidad de llama turbulenta

S_L : velocidad de llama laminar

M_b : masa quemada

τ : constante de tiempo

λ : microescala de Taylor (tamaño de los eddies más chicos)

Estas ecuaciones indican que la mezcla no quemada de combustible y aire se incorpora en el frente de llama a través del área de la llama a una velocidad proporcional a la suma de las velocidades de la llama turbulenta y laminar. La velocidad de combustión es proporcional a la cantidad de mezcla no quemada detrás del frente de llama, $(M_e - M_b)$, dividida por una constante de tiempo, τ . La constante de tiempo se calcula dividiendo la micro-escala de Taylor, λ , por la velocidad de la llama laminar.

La velocidad de llama laminar se debe obtener mediante una correlación, ya que depende de las condiciones de presión, temperatura y composición. GT-Power cuenta con un modelo propio de velocidad de llama laminar para hidrógeno, pero el mismo funciona solo para mezclas de hidrógeno y aire.

Se propone usar la correlación de Verhelst [25] que describe la velocidad de llama laminar para mezclas de hidrógeno, aire y diluyente. La misma se calcula a partir de la siguiente ecuación:

$$S_{Ll}(\lambda, p, T, f) = S_{L_0}(\lambda, p) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha(\lambda, p)} \cdot F(\lambda, p, T, f)$$

Donde:

S_{L_0} : velocidad de llama laminar a T_0

α : exponente de temperatura

F : efecto de dilución

f : factor de dilución

Para poder implementar la correlación con mezclas de hidrógeno, aire y oxígeno, se debe reformular el efecto de dilución. Se puede pensar que el aire es una mezcla de oxígeno y diluyente y que la correlación tiene su coeficiente de dilución centrado en "aire". Al implementar diluciones negativas, se le estaría restando diluyente al aire, lo que representaría el agregado de oxígeno en la mezcla. Se reescribe el factor de dilución para implementar un "offset" que depende del factor de concentración de oxígeno (z), el cual se muestra en la ecuación:

$$f = dil - dil_{offset}$$

Donde:

dil : fracción de gases diluyentes

$$dil_{offset} = 0.766 - m_{\%N_2}(z) + dil_{offset_0}$$

$m_{\%N_2}$: fracción en masa de N_2 en el fluido

dil_{offset_0} : constante de ajuste

En la *Figura 4.4* se muestran valores de velocidad de llama laminar en función de λ' para diferentes valores de dilución:

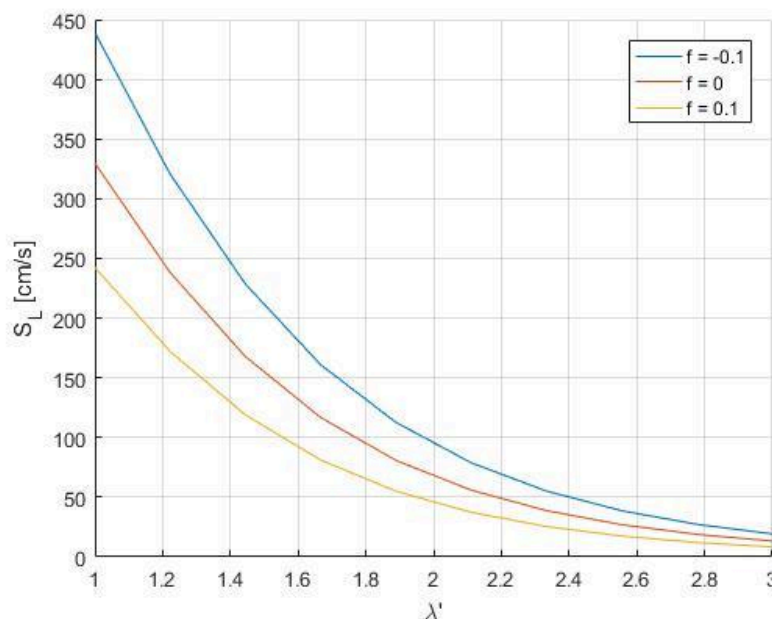


Figura 4.4. Velocidad de llama laminar en función de λ' para distintas diluciones.

Se puede ver que cuando se aplica dilución en la mezcla ($f > 0$) la velocidad decae. Al implementar una dilución negativa, la velocidad crece. A su vez, la velocidad decrece al aumentar λ' para todos los casos de dilución. Se implementa esta correlación utilizando un código programado y compilado en FORTRAN. La constante de ajuste se determina en la validación con el ensayo experimental. Como se ha comentado en la Sección 2.4.5.1, la combustión inicia con la etapa de desarrollo de llama, donde el comportamiento lo establece la velocidad de llama laminar. Luego, se pasa a la etapa de quemado rápido, donde entra en juego la turbulencia. La velocidad de llama turbulenta depende principalmente de la intensidad de la turbulencia y del tamaño del núcleo de llama en la transición. El modelo de combustión incluye multiplicadores de tamaño de núcleo, intensidad de turbulencia (micro-escala de Taylor) y un multiplicador general de velocidad de llama turbulenta. Los multiplicadores facilitan el ajuste de la curva de presión, ya que cada uno modifica un aspecto bien definido de ella. En la *Tabla 4.2* se muestran los efectos que tiene cada multiplicador en la curva de presión:

Nombre multiplicador	Efecto
Tamaño de núcleo (Flame Kernel Growth)	Influencia el retardo de la etapa de quemado rápido
Micro-escala de Taylor (Taylor Length Scale)	Influencia la finalización de la combustión
Velocidad de llama turbulenta (Turbulent Flame Speed)	Tiene un gran efecto en la duración de la combustión

Tabla 4.2. Efecto de los multiplicadores en la curva de presión

Capítulo 5 - Resultados

5.1 Resultados experimentales $H_2 + Aire$

Se ensaya el motor RV 650 con $H_2 + Aire$ con $\lambda' = 2$ en el banco de ensayos del ITBA. Se realizan 3 casos de estudio variando el tiempo de inyección de combustible (H_2) y el ángulo de avance de encendido. Se relevan trazas de presión en admisión, escape y cilindro para luego realizar un post-procesado en GT-Power. Los parámetros iniciales del sistema se encuentran en la *Tabla 5.1*.

Caso	Pamb [kPa]	Tamb [°C]	Caudal H2 [g/s]	Tiny [ms]	Lambda	Adelanto [deg]	Velocidad [rpm]	T refri [°C]	P [W]
244	99,5	21,1	0,043	6	2	10	1200	59	1548
245	99,5	21,8	0,066	8,19	2	12	1200	61	2376
248	100,2	20,7	0,055	7,03	2	10	1200	62	1980

Tabla 5.1. Parámetros de entrada del motor RV 650 para mezcla $H_2 + Aire$ con $\lambda' = 2$.

5.1.1 Potencia

Los resultados de potencia obtenidos se muestran en la *Tabla 5.2*.

Caso	Potencia [kW]
244	1.548
245	2.376
248	1.98

Tabla 5.2. Resultados de potencia del motor RV 650 para mezcla $H_2 + Aire$ con $\lambda = 2$.

5.1.2 Rendimiento térmico

El rendimiento térmico del motor es uno de los parámetros calculados por GT-Power durante el post-procesado de los datos del ensayo. Los valores de rendimiento térmico para cada ensayo se muestran en la *Tabla 5.3*.

Caso	Rendimiento térmico
244	37.06
245	39.06
248	40.76

Tabla 5.3. Resultados de rendimiento térmico del motor RV 650 para mezcla $H_2 + Aire$ con $\lambda' = 2$.

5.1.3 Rendimiento volumétrico

El rendimiento volumétrico del motor es uno de los parámetros calculados por GT-Power durante el post-procesado de los datos del ensayo. Los valores para cada ensayo se muestran en la *Tabla 5.4*.

Caso	Rendimiento volumétrico
244	38.03
245	52.45
248	68.78

Tabla 5.4. Resultados de rendimiento volumétrico del motor RV 650 para mezcla $H_2 + Aire$ con $\lambda' = 2$.

5.1.5 Emisiones

Los resultados de las emisiones computados en GT-Power durante el post-procesado de los datos del ensayo se muestran en la *Tabla 5.5*.

Caso	NOx [ppm]
244	85.48
245	33.08
248	28.09

Tabla 5.5. Resultados de las emisiones de NOx del motor RV 650 para mezcla $H_2 + Aire$ con $\lambda' = 2$

5.2 Validación del modelo

Como se había comentado en el Capítulo 4, el modelo debe validarse para asegurar que los resultados entregados por GT-Power son correctos. Para ello, se realizó una comparación de las curvas de presión de los ensayos previamente estudiados con la de la simulación realizada. En la *Figura 5.1* se muestran las trazas de presión y el cálculo del error relativo para cada instante.

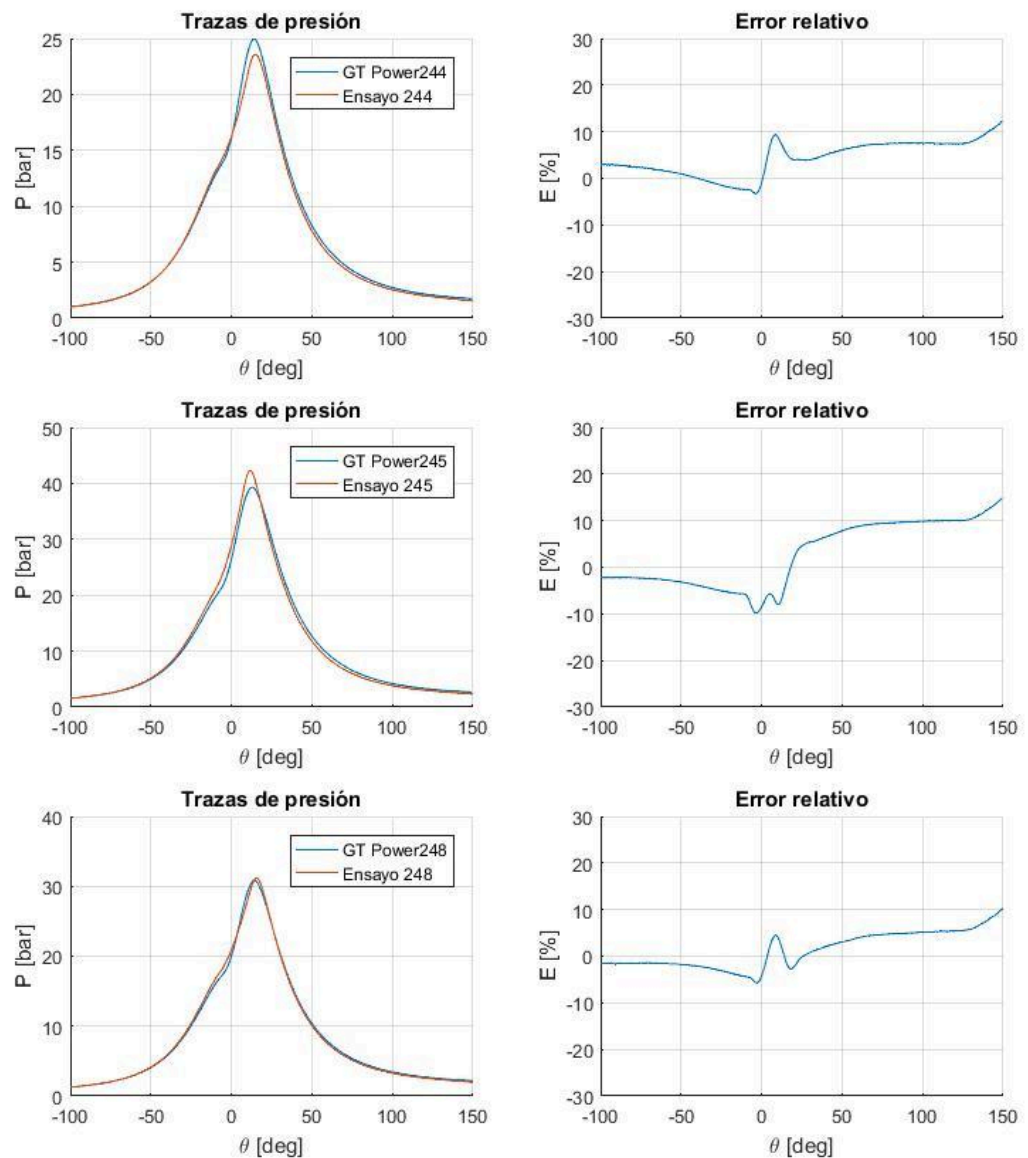


Figura 5.1. Validación del modelo para los ensayos 244, 245 y 248 realizados con el motor RV 650 del banco de ensayos del ITBA.

Se puede apreciar que para cada caso, el modelo supo alcanzar un error menor al 10%. De acuerdo al criterio elegido para la validación, el modelo es apto para desarrollar las simulaciones.

5.3 Resultados $H_2 + O_2 + Aire$ Simulación

Como se ilustra en los Capítulos 2 y 3, el agregado de oxígeno produce un aumento en la potencia del motor a costa de una reducción en el rendimiento térmico y un aumento de rendimiento volumétrico modificado y temperatura. A continuación se exponen los resultados de potencia, rendimiento térmico y volumétrico, máxima temperatura registrada y emisiones, de las simulaciones realizadas en GT-Power con hidrógeno, aire y enriquecimiento de oxígeno.

5.3.1 Potencia

En la *Figura 5.2* se muestran los resultados para la potencia máxima obtenida en función de z . Como fue anticipado, el agregado de oxígeno produjo un aumento en la potencia. Si se desea maximizar la potencia del motor, se debe operar en mezclas cercanas a la estequiométrica y con la mayor adición de oxígeno posible.

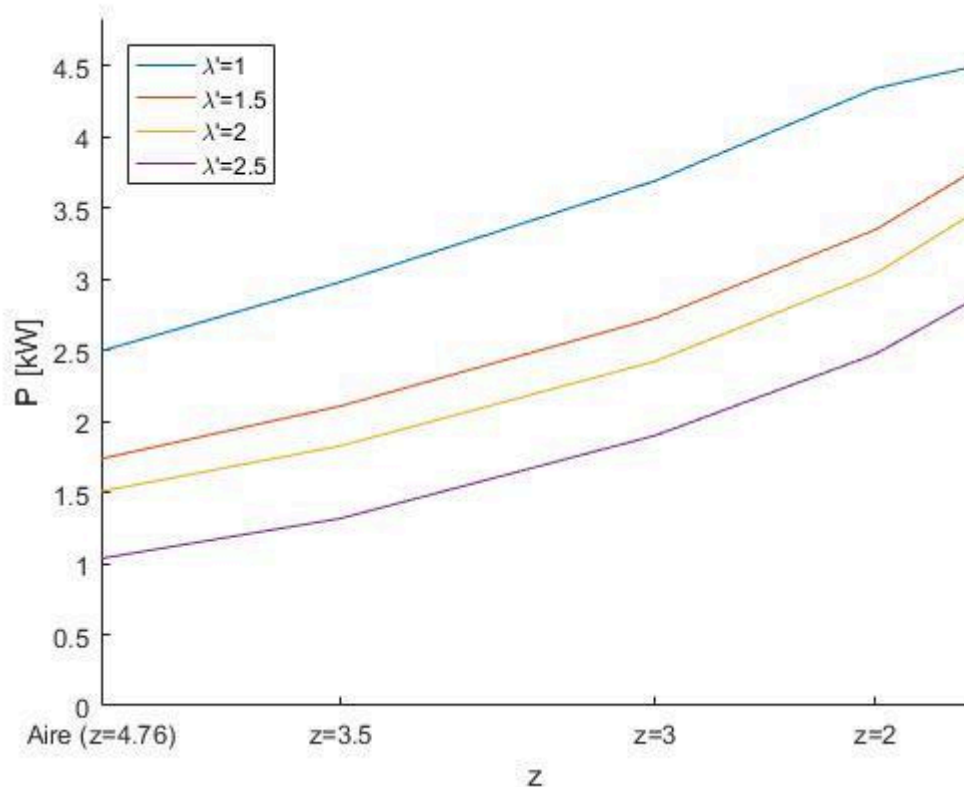


Figura 5.2. Potencia en función de z para determinadas λ'

5.3.2 Rendimiento térmico

En la *Figura 5.3* se muestran los resultados de rendimiento térmico calculado en la simulación. Se puede apreciar que como regla general, el rendimiento térmico aumenta cuando λ' aumenta y disminuye cuando z aumenta. Esto coincide con la predicción realizada en la teoría. Esto se cumple cuando $\lambda' < 2$, al pasar de este límite, la regla deja de tener validez, ya que la combustión en estos regímenes se torna inestable. Esto se debe a que la velocidad de quemado es tan baja que no se llega a quemar todo el combustible [22].

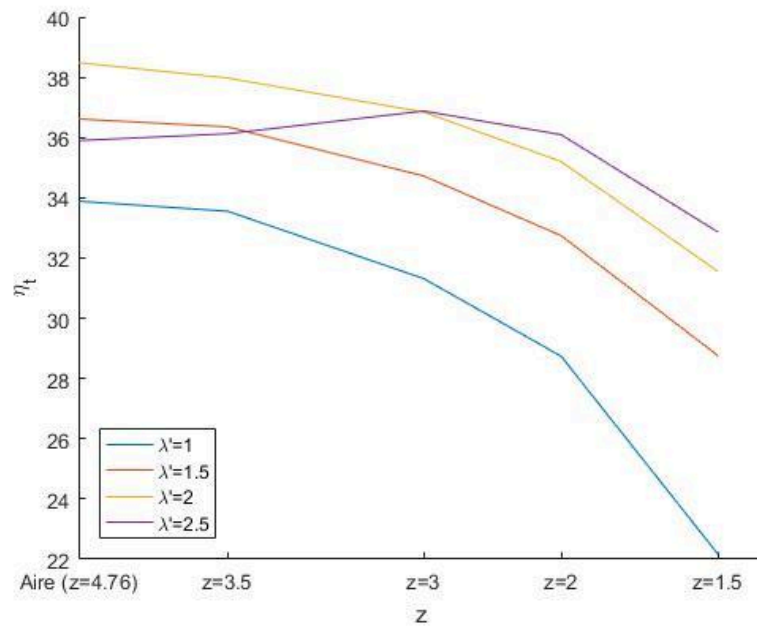


Figura 5.3. Rendimiento térmico en función de z para determinadas λ'

5.3.3 Rendimiento volumétrico modificado

En la *Figura 5.4* se muestran los resultados del rendimiento volumétrico calculado. En este gráfico queda en evidencia que al agregar oxígeno a la mezcla, el rendimiento volumétrico aumenta. Además, se puede apreciar que a mayores λ' , el rendimiento es mayor, lo cual coincide con lo mencionado en la Sección 2.4.2.

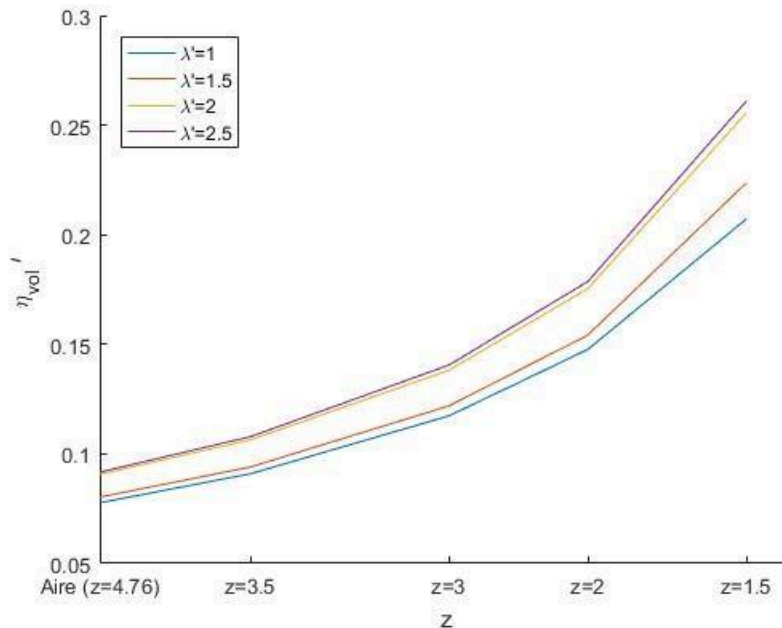


Figura 5.4. Rendimiento volumétrico en función de z para determinadas λ'

5.3.4 Temperatura máxima

En la *Figura 5.5* se pueden ver las temperaturas máximas registradas. Los resultados coinciden con las predicciones realizadas con la T_{LA} en la Sección 3.2. Las temperaturas aumentaron con el agregado de oxígeno en la mezcla y el aumento es similar para todos los λ' ensayados.

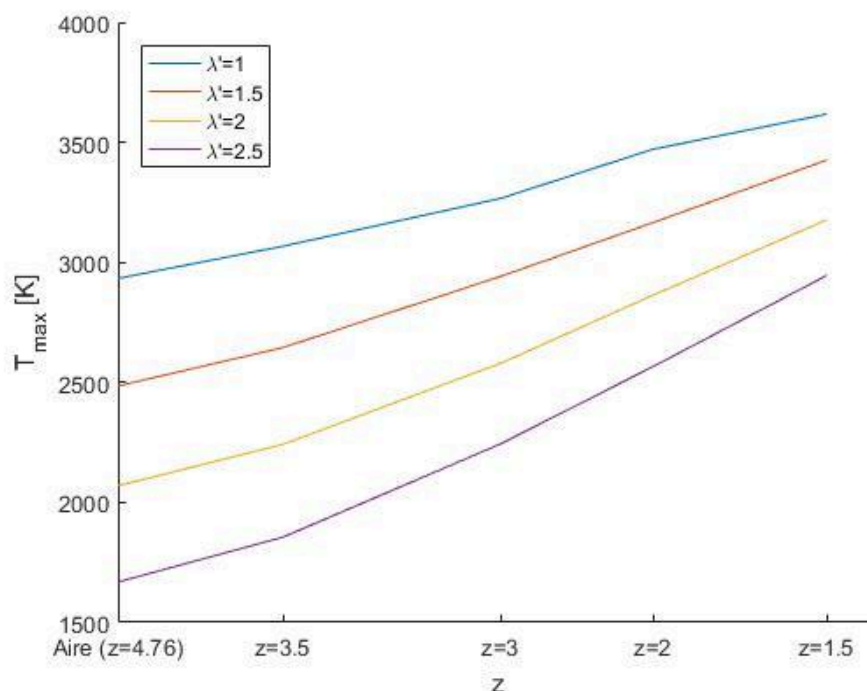


Figura 5.5. Temperatura máxima en el cilindro en función de z para determinadas λ'

5.3.5 Emisiones

En la *Figura 5.6* se presenta el análisis de las emisiones de NO_x obtenidas a través de simulación. Se observa que en los casos donde se emplean mezclas de aire y un leve agregado de oxígeno con un exceso de aire ($\lambda' > 2$), las emisiones se mantienen dentro de niveles aceptables (<100 ppm). Sin embargo, en situaciones donde las mezclas están altamente enriquecidas con oxígeno o presentan un bajo valor de λ' , las emisiones sobrepasan considerablemente el límite aceptable. Cabe destacar una excepción a este patrón observado en el caso de $\lambda' = 1$ y $z = 1,5$. En esta configuración, se registra una concentración de NO_x de aproximadamente 60 ppm. Este fenómeno se explica por la naturaleza estequiométrica de la mezcla, donde todo el oxígeno disponible reacciona con el hidrógeno, generando agua de manera prácticamente espontánea. Además, parte del nitrógeno presente se ve desplazado debido a la introducción de oxígeno durante la admisión.

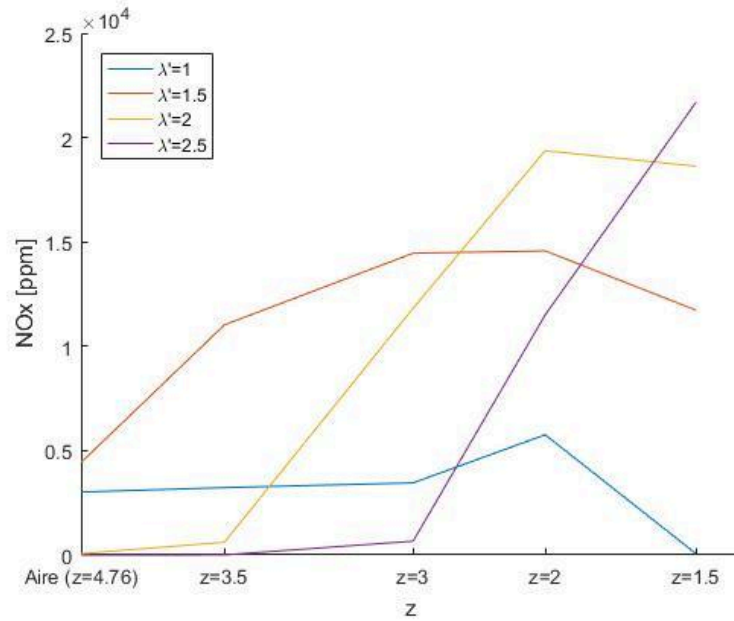


Figura 5.6. Emisiones de NO_x en función de z para determinadas λ' .

5.3.6 Curvas de presión

A continuación, en la *Figura 5.7*, *Figura 5.8*, *Figura 5.9*, *Figura 5.10*, *Figura 5.11*, *Figura 5.12* y *Figura 5.13* se presentan las curvas de presión obtenidas de la simulación. Cada figura muestra el efecto de agregar oxígeno manteniendo λ' constante.

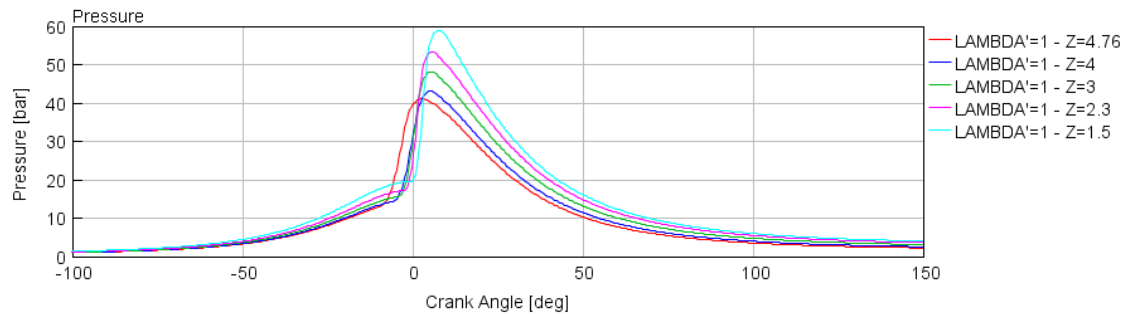


Figura 5.7. Curvas de presión para $z = \{4.76, 4, 3, 2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 1$

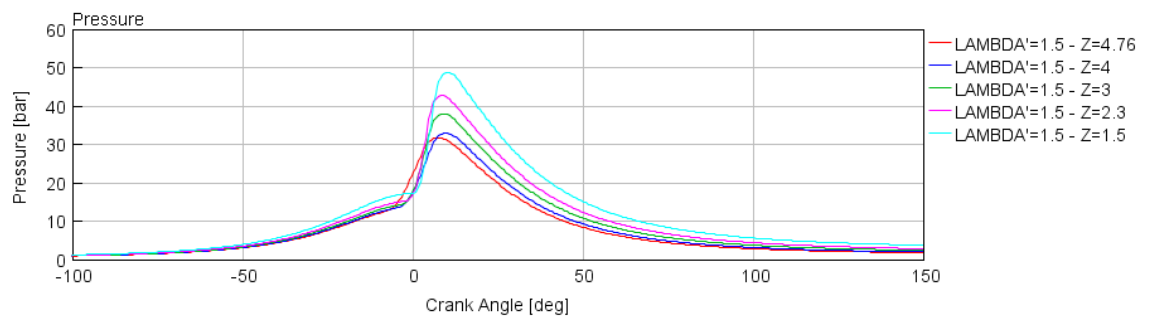


Figura 5.8: Curvas de presión para $z = \{4.76, 4, 3, 2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 1.5$

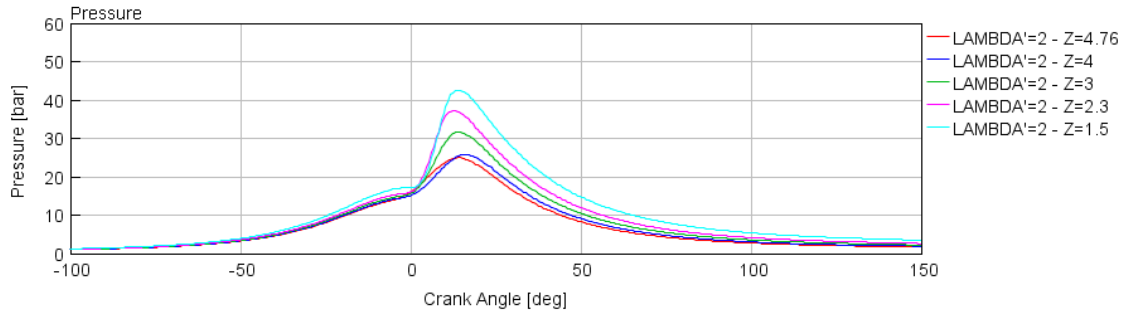


Figura 5.9: Curvas de presión para $z = \{4.76, 4, 3, 2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 2$

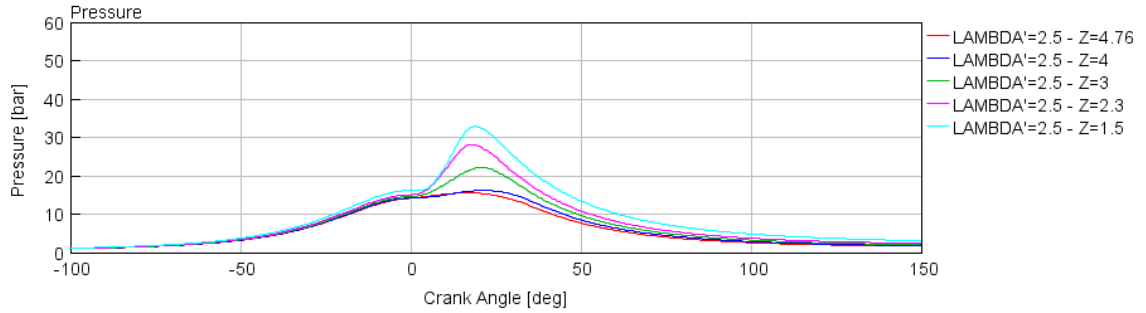


Figura 5.10: Curvas de presión para $z = \{4.76, 4, 3, 2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 2.5$

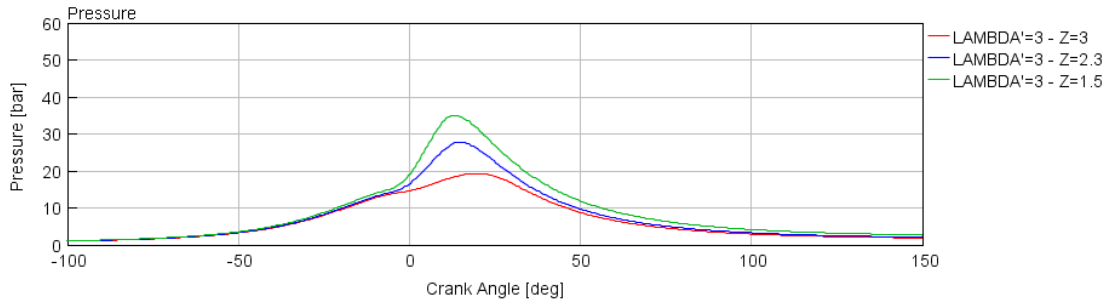


Figura 5.11: Curvas de presión para $z = \{3, 2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 3$

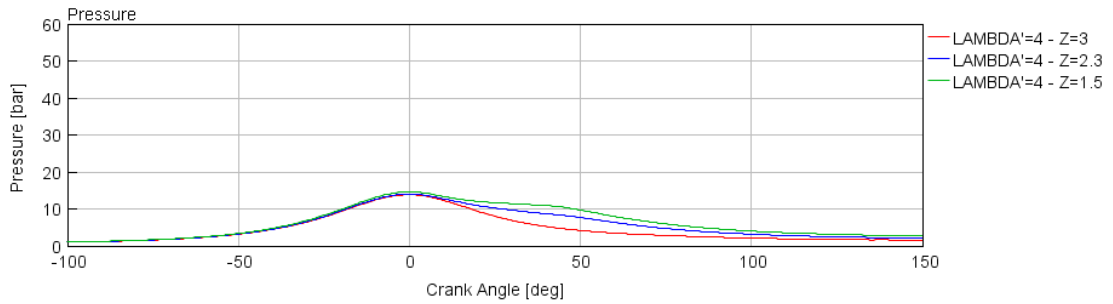


Figura 5.12: Curvas de presión para $z = \{3, 2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 4$

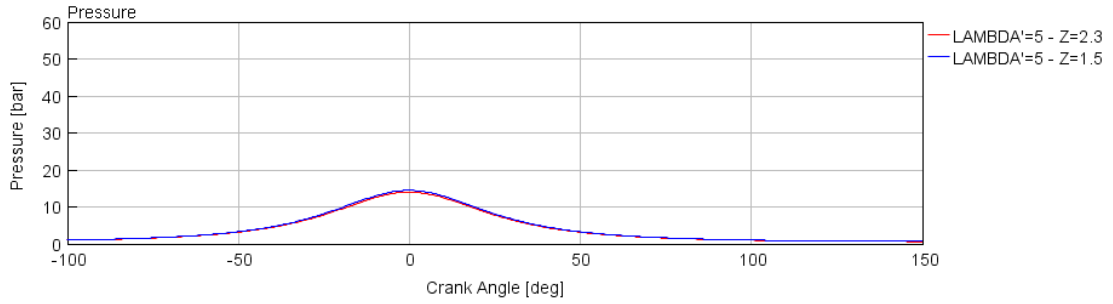


Figura 5.13: Curvas de presión para $z = \{2.3, 1.5\}$ y $\lambda' = 5$

Se puede apreciar que las curvas de presión se atenúan al usar mezclas más pobres y con aire. Para $\lambda' > 3$ puede verse que la combustión no produce un aumento de presión considerable, esto se debe a que las mezclas pobres alcanzan menores temperaturas, generando menor expansión de los gases de combustión.

5.3.7 Resumen de resultados

Esta sección pretende dar un cierre a los resultados con la *Figura 5.14*, *Figura 5.15*, *Figura 5.16*, *Figura 5.17* y *Figura 5.18*, haciendo una puesta en común con las predicciones realizadas. En líneas generales, los resultados fueron los esperados, aunque existen excepciones. En la siguiente figura se presentan dos columnas de gráficos. La columna de gráficos de la izquierda utiliza los datos calculados en el Capítulo 3, mientras que la derecha son los gráficos obtenidos de los resultados de simulación.

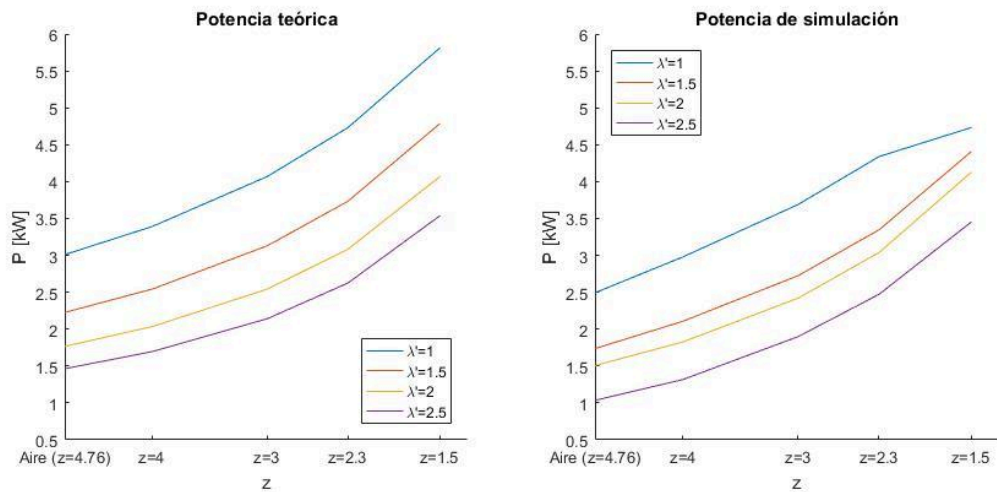


Figura 5.14. Comparación de potencia del motor RV 650 operado con $H_2 + Aire + O_2$.

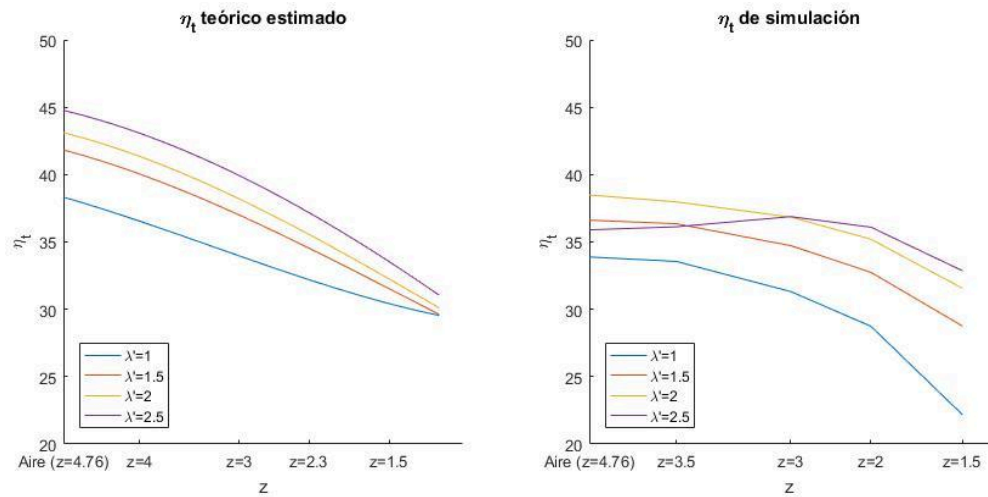


Figura 5.15. Comparación de rendimiento térmico del motor RV 650 operado con $H_2 + Aire + O_2$

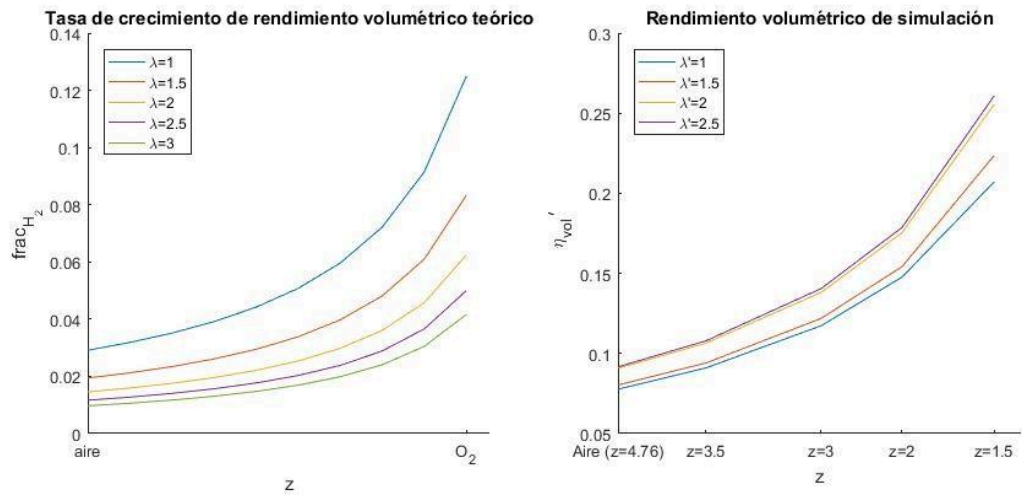


Figura 5.16. Comparación de rendimiento volumétrico modificado del motor RV 650 operado con $H_2 + Aire + O_2$.

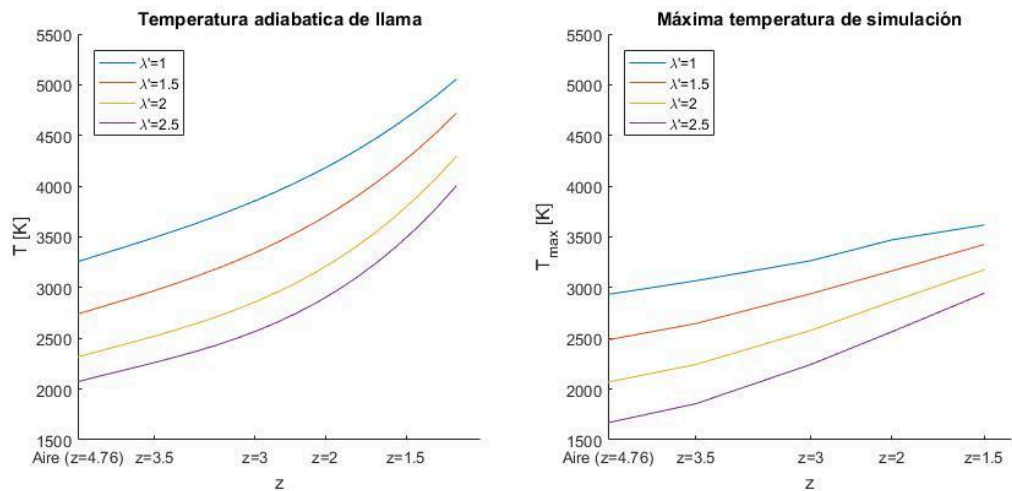


Figura 5.17. Comparación de temperatura del motor RV 650 operado con $H_2 + Aire + O_2$.

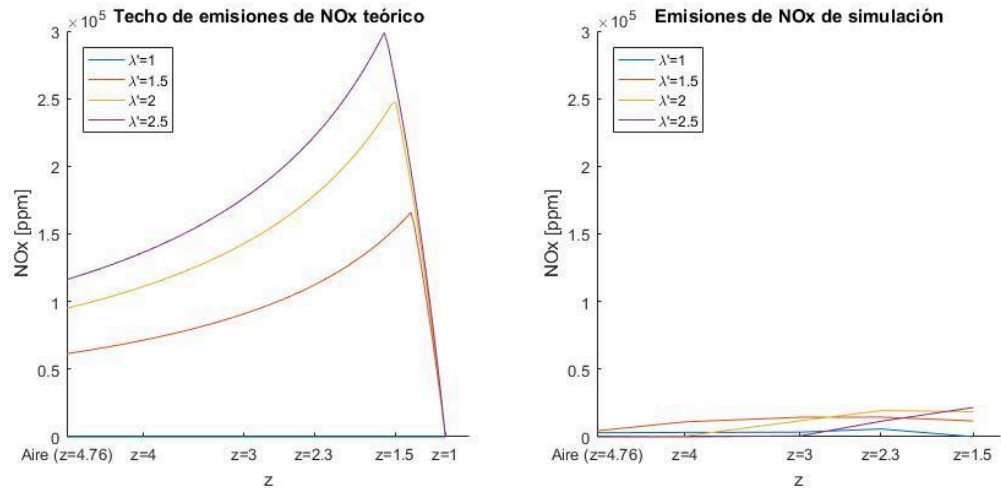


Figura 5.18. Comparación de las emisiones de NO_x del motor RV 650 operado con $H_2 + Aire + O_2$.

Las principales diferencias con las estimaciones realizadas son las siguientes:

- En el rendimiento térmico se estima que a mayor λ' , mayor rendimiento. Esto en realidad no es así, ya que la combustión comienza a ralentizarse al punto que queda combustible sin quemar, generando un descenso del rendimiento.
- Las emisiones de óxido de nitrógeno son mucho menores al techo estimado. Aún así, alcanzan valores de más de 100ppm, lo cuál es inaceptable

Capítulo 6 - Conclusiones

Este capítulo está dedicado a comentar acerca de las conclusiones obtenidas para este trabajo y a dar una respuesta acerca de la viabilidad de agregar oxígeno en la admisión de un motor a hidrógeno premezclado con encendido por chispa. Se debe tener en cuenta que el modelo de combustión se basa en una correlación de velocidad de llama laminar para hidrógeno, aire y diluyente; no considera el agregado de oxígeno, sino que disminuye la cantidad de gas inerte del aire. La limitación de este modelo de combustión es que la dilución negativa solo puede implementarse en pequeña medida para no inducir en el modelo un error inaceptable ($e > 10\%$). Es por este motivo que en este trabajo no se logra obtener resultados simulados de $H_2 + O_2$ puro ($z = 1$), sino que $1,5 < z < 4,76$. Es decir, que los resultados van de $H_2 + O_2 + Aire$ a $H_2 + Aire$. Además, los ensayos realizados validan el modelo para combustión del hidrógeno en aire, no brindan información sobre el agregado de oxígeno, lo comentado en ese aspecto es una aproximación basada en la simulación del GT-Power y no un resultado experimental. En primer lugar, se comenta acerca de los objetivos planteados en la Sección 1.3.

1. A pesar de que se espera un aumento del rendimiento térmico debido a una mayor velocidad de combustión, el mismo se reduce con el agregado de oxígeno debido a altas temperaturas alcanzadas que redundan en grandes pérdidas de calor. En la *Tabla 6.1* se muestran los cambios porcentuales del rendimiento térmico, tomando como referencia los ensayos realizados con aire y estimando los resultados de $z = 1.5$ ($H_2 + O_2 + Aire$). Sin embargo, al trabajar con mezcla pobre, se reducen porcentualmente las pérdidas de calor, ya que se obtienen temperaturas máximas similares a la combustión de $H_2 + Aire$.

λ'	Cambio de rendimiento térmico
1	-34.6%
1.5	-21.5%
2	-18%
2.5	-8.5%

Tabla 6.1. Cambio porcentual de rendimiento térmico para diferentes λ'

2. Tal y como se esperaba en los inicios de este trabajo, el rendimiento volumétrico modificado aumenta con el agregado de oxígeno. En la *Tabla 6.2* se muestran los cambios porcentuales del rendimiento volumétrico modificado, tomando como referencia los ensayos realizados con aire y estimando los resultados de $z = 1.5$ ($H_2 + O_2 + Aire$). Esto sucede debido a que el oxígeno desplaza al nitrógeno (gas inerte) en la cámara de combustión. Por lo tanto, al ingresar más comburente (O_2) debe ingresar más combustible (H_2) para mantener λ' , generando un aumento del combustible quemado que conlleva a un aumento en el rendimiento del motor.

λ'	Cambio de rendimiento volumétrico modificado
1	166.8%
1.5	178.7%
2	181.9%
2.5	184.8%

Tabla 6.2. Cambio porcentual de rendimiento volumétrico modificado para diferentes λ' .

3. En la *Tabla 6.3* se muestran los valores de emisiones de NO_x en ppm, tomando como referencia los ensayos realizados con aire y estimando los resultados de $z = 1.5$ ($H_2 + O_2 + Aire$). En general, las emisiones se elevan a causa de la presencia de nitrógeno, oxígeno y las mayores temperaturas alcanzadas. Este no es el caso para $\lambda' = 1$, donde todo el oxígeno se consume durante la reacción de combustión, lo que produce un descenso de las emisiones. En los objetivos dispuestos se menciona la necesidad de definir relaciones de mezclas adecuadas, esto no fue posible de realizar debido a que la limitación de la correlación de la velocidad de llama laminar no permite calcular los resultados de $H_2 + O_2$. De igual manera, al observar la tendencia de las emisiones y de las temperaturas, se observa que la temperatura tiene mayor influencia en la generación de NO_x siempre que haya un mínimo de N_2 disponible en la cámara de combustión. Esto indica que si se logra simular la combustión de $H_2 + O_2$ el problema no va a radicar en las emisiones de NO_x , sino que en el rediseño del motor (sistema de refrigeración, materiales) para que soporte las altas temperaturas. Por lo tanto, el único caso que proporciona una relación de mezcla adecuada estudiada en este trabajo sería:

$$z = 1.5 \text{ y } \lambda' = 1.$$

λ'	NO_x [ppm] con $H_2 + Aire$	NO_x [ppm] con $H_2 + O_2 + Aire$ $z = 1.5$
1	3016	60
1.5	4435	11730
2	70	18620
2.5	0	21690

Tabla 6.3. Cambio de emisiones para diferentes λ' .

4. Como es de esperar luego de un aumento en el rendimiento volumétrico modificado, el agregado de oxígeno en la mezcla produce un aumento en la potencia del motor.

En la *Tabla 6.4* se muestran los cambios porcentuales la potencia, tomando como referencia los ensayos realizados con aire y estimando los resultados de $z = 1.5$ ($H_2 + O_2 + Aire$).

λ'	Cambio de potencia
1	89.8%
1.5	153.8%
2	173.9%
2.5	233.6%

Tabla 6.4. Cambio porcentual de potencia para diferentes λ' .

- La temperatura experimenta un significativo aumento, lo que favorece la generación de partículas contaminantes como los NO_x . En la *Tabla 6.5* se muestran los cambios porcentuales de la temperatura máxima, tomando como referencia el caso $z = 4.76$ y como caso final $z = 1.5$. Este es un factor muy importante a considerar antes de implementar un motor a $H_2 + O_2$ ya que el motor Villa RV 650 que se encuentra en el banco de ensayos del ITBA y los motores estándar que funcionan a gasolina no fueron diseñados para tener temperaturas máximas mayores de 2500 K. Se recomienda realizar una verificación del sistema de refrigeración y la integridad de los diferentes componentes, evaluando la necesidad de cambios de materiales.

λ'	Cambio de máxima temperatura
1	23.3%
1.5	37.9%
2	53.5%
2.5	76.5%

Tabla 6.5. Cambio porcentual de máxima temperatura para diferentes λ' .

- No se recomienda operar el motor para mezclas con $\lambda' > 3$ debido a que se reduce drásticamente el rendimiento del motor. Esto se debe a que las mezclas pobres alcanzan menores temperaturas, generando menor expansión de los gases de combustión. A su vez, a partir de $\lambda' > 4$ no se genera combustión para ningún valor de z simulado en este trabajo, como se observa en la Sección 5.3.6 en la *Figura 5.13*.

Finalmente, a continuación se detallan las posibles mejoras para poder continuar con esta línea de trabajo que no fue contemplada en el alcance de este proyecto:

1. Mejorar el objeto modelo de combustión: se recomienda realizar una simulación de un reactor químico mezclado (stirred reactor) con los compuestos de combustión. Esto independiza la simulación de la correlación de velocidad de llama laminar y haría posible la simulación con $z = 1$, es decir, hidrógeno y oxígeno puro.
2. Se recomienda realizar ensayos con el agregado de oxígeno para mejorar la precisión del modelo actual basado en resultados experimentales. Según el manual de GT-Power, para calibrar un modelo de combustión predictiva se deben obtener 25 puntos de operación en varios rangos de funcionamiento (velocidad, carga, tiempo de apertura de válvulas, EGR, etc).
3. Se debe calibrar el modelo de emisiones del modelo actual del GT-Power basado en resultados experimentales.
4. En una eventual aplicación real de un motor alimentado con $H_2 + O_2$ en mezcla pobre, será necesario recuperar el oxígeno excedente para no incurrir en un gasto innecesario de ese gas. Una posible solución sería una instalación como la que se muestra en la *Figura 6.1*.

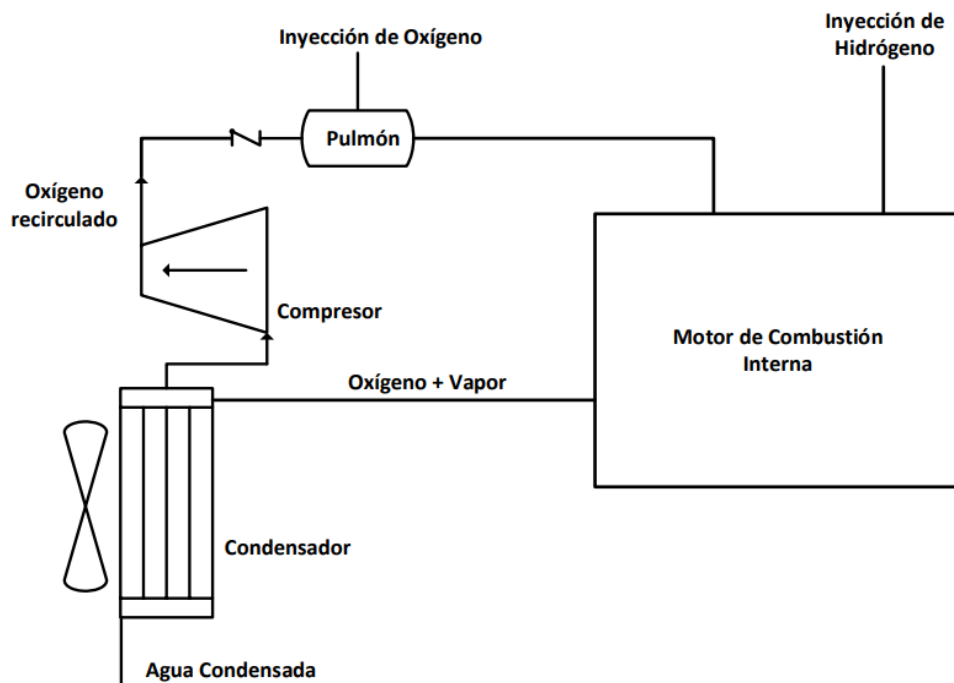


Figura 6.1. Esquema general de motor de combustión interna estacionario a $H_2 + O_2$ con recirculación del oxígeno en exceso.

En el esquema se observa que el oxígeno que no reacciona en la combustión se recircula, y el vapor producido se condensa para ser extraído. El estudio, cálculo y diseño de esa instalación puede ser tema de un futuro trabajo de desarrollo.

En resumen, en un motor con inyección de hidrógeno y oxígeno, sus parámetros característicos de funcionamiento, tales como: potencia, rendimiento térmico y volumétrico, temperatura máxima en el ciclo, producción de NO_x , dependen de las variables z , n_s y λ' . Pero cuando $z = 1$ entonces desaparecen por completo las emisiones de NO_x . Se recomienda continuar con un estudio experimental para poder verificar los resultados obtenidos. Además, se debe tener en cuenta que para reducir las emisiones contaminantes

y cumplir con las normativas vigentes se debe trabajar con mezclas altamente concentradas de oxígeno, lo que implica elevadas temperaturas que requieren de la verificación integral del Motor Villa RV 650 del banco de ensayos del ITBA.

Capítulo 7 - Bibliografía

- [1] Arroyo Juan (2022). *Clima, Capítulo "Energía"*.
- [2] Boretti, A., Osman, A., & Aris, I. (2011). *Direct injection of hydrogen, oxygen and water in a novel two stroke engine. International journal of hydrogen energy*, 36(16), 10100-10106. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.05.033>
- [3] João P. M. Pires, Rui M. M. Brito, & José M. G. Vilarinho. (2013). *Numerical Simulation of a Hydrogen Internal Combustion Engine Using GT-Power. Energies*, 6(6), 3146-3165. <https://doi.org/10.3390/en6063146>
- [4] Yusaf, T.F. & Yusoff, M. & S.H, Hussein. (2005). *A Quasi One-dimensional Simulation of a 4 Stroke Spark Ignition Hydrogen Fuelled Engine. American Journal of Applied Sciences*. 2. 10.3844/ajassp.2005.1206.1212.
- [5] Verhelst, S., Verstraetran, S., and Sierens, R., "A comprehensive overview of hydrogen engine design features", Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering 2007, Vol. 221(8), pp 911-920.
- [6] kunal, R., Natarajan, S., Abraham, M., Subash, G. et al., "Effects of Governing Parameters on the Performance and Emissions of Hydrogen Engine for Automotive Application," SAE Technical Paper 2013-01- 2891, 2013, doi:10.4271/2013-01-2891.
- [7] Das L.M., "Exhaust Emission characterization of Hydrogen Operated Engine System: Nature of pollutants and their control techniques", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 16, Issue 11, pp.765-775, 1991.
- [8] Das, L.M., Gulati, Rohita and P.K. Gupta, 2000. Performance characteristics of a hydrogen fuelled spark ignition engine using electronically controlled solenoid actuated injection system. *Int. J. Hydrogen Energy*, 25: 783-93
- [9] DAS, L. (2002). *Hydrogen engine: research and development (R&D) programmes in Indian Institute of Technology (IIT), Delhi. International Journal of Hydrogen Energy*, 27(9), 953–965. doi:10.1016/s0360-3199(01)00178-1.
- [10] J. B. Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw Hill, 1988.
- [11] Boris E. Gelfand Mikhail V. Silnikov Sergey P. Medvedev Sergey V. Khomik. *Thermo-Gas Dynamics of Hydrogen Combustion and Explosion*. Springer, 2012.}
- [12] Pacific Northwest National Laboratory (2023) <https://h2tools.org/bestpractices/hydrogen-compared-other-fu>.
- [13] Anil W. Date & N. N. Kulkarni. (2017). *Effect of compression ratio on the performance of hydrogen internal combustion engine. International Journal of Ambient Energy*, 38(4), 370-377. <https://doi.org/10.1080/01430750.2016.1228302>
- [14] Paul A. Erickson, Lyle M. Pickett, & Rolf D. Reitz. (2007). *Modeling of Hydrogen and Hydrogen-Oxygen Combustion in Diesel Engines. Combustion Science and Technology*, 179(12), 2593-2616. <https://doi.org/10.1080/00102200701578406>
- [15] Philippe Higelin, Markus Kettner, & Karlheinz Bock. (2014). *Simulation of a hydrogen internal combustion engine with a detailed chemistry model. Fuel*, 120, 132-140. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.12.045>
- [16] F. Al-Milhim, A. Essa, & A. M. Al-Salem. (2009). *Thermodynamic analysis of an internal combustion engine powered by hydrogen. International Journal of Hydrogen Energy*, 34(5), 2249-2259. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.11.109>
- [17] J. Kato, et al. (2019). *Safety of hydrogen storage and transportation: An overview on mechanisms, techniques, and challenges*.

- [18] L. Zhang, et al. (2017). *Safety issues associated with the use of hydrogen as a fuel*.
- [19] M. Pein, N. C. Neumann, L. J. Venstrom, J. Vieten, M. Roeb, C. Sattler, Two-step thermochemical electrolysis: An approach for green hydrogen production, *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (2021) 24909– 640 24918.
- [20] G. A. Karim, Hydrogen as a spark ignition engine fuel, *International Journal of Hydrogen Energy* 28 (2003) 569–577.
- [21] Karim GA, Klat SR. The Knock and autoignition characteristics of some gaseous fuels and their mixtures. *J Inst Fuel* 1966;39:109 –19.
- [22] Pedro José Orbaiz. *Hybrid Chemical Recuperation of a Spark Ignited Natural Gas Internal Combustion Engine* (2012)
- [23] Gamma Technologies (2004) - *GT-Power Manual*
- [24] Xiaoguo Tang Daniel M. Kabat Robert J. Natkin William F. Stockhausen. *Ford p2000 hydrogen engine dynamometer development*. SAE TECHNICAL PAPER SERIES, 2002.
- [25] Verhelst (2011) - *A correlation for the laminar burning velocity for use in hydrogen spark ignition engine simulation*
- [26] NASA - CEARUN (2023)- <https://cearun.grc.nasa.gov/>
- [27] De Ruschi, Gentile, Reale (2022) - *Adaptación y ensayo de un motor monocilíndrico para su uso con hidrógeno*
- [28] Centro Nacional del Hidrogeno (2023) - <https://www.cnh2.es/el-hidrogeno/>