



Aumento de potencia en un motor comercial de encendido provocado alimentado con hidrógeno: mezclas hidrógeno-metano y combustiones anómalas

UNIVERSIDAD PÚBLICA DE NAVARRA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA

JUNIO-2020

Memoria presentada para optar al grado de Doctor.
Programa de Ciencias y Tecnologías Industriales

José Carlos Urroz Unzueta

Directores:

Pedro M^a Diéguez Elizondo

Luis M^a Gandía Pascual

upna
Universidad
Pública de Navarra
Nafarroako
Unibertsitate Publikoa

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

AGRADECIMIENTOS

Tras finalizar este trabajo al que he dedicado tanto tiempo y esfuerzo, quiero recordar a las personas que lo han hecho posible, a las que me han ayudado y, sobre todo, a las que quiero. A todas ellas mi agradecimiento.

A mi mujer Josune y mi hija Ainara, mis amores y eje de mi vida. Sus palabras de ánimo, su insistencia y voluntad para llevar a cabo este trabajo han sido la clave para realizarlo.

A mi madre M^a Asunción recientemente fallecida, quien en sus últimos días tuvo tanta ilusión en este trabajo como yo mismo. Le hubiera encantado otro “título” de su hijo, el pequeño.

A mis directores de tesis, Pedro y Luis, que en todo momento han estado para ayudarme. A David, compañero de largas horas frente al banco de ensayos del motor; su conocimiento sobre la electrónica del banco de motores ha sido de gran ayuda. A Carlos (DEP), pionero del motor de hidrógeno a quien sin ninguna duda le hubiera encantado el trabajo realizado por uno de sus primeros alumnos.

A mis compañeros docentes, de la Universidad Pública de Navarra que han participado activamente en la consecución de los artículos presentados; Sara, Amaya, Marta, Jorge, Miguel y Pepe.

A mis compañeros de administración y servicios, por las muchas veces que me han dedicado su tiempo y colaboración. Mención especial a mi profesor, compañero y amigo Santos.

A Carlos de Volkswagen, por su siempre eficaz ayuda.

A Acciona Biocombustibles por su financiación en el origen de la investigación sobre hidrógeno. A Volkswagen Navarra por el apoyo recibido en forma de donaciones de motores y vehículos para la investigación.

A los muchos que me han ayudado, aunque no hayan sido conscientes de ello, gracias.

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

RESUMEN

Este trabajo se ha centrado en el aumento de potencia de un motor comercial de encendido provocado alimentado con hidrógeno. La extremadamente baja densidad del hidrógeno conlleva una menor potencia, frente a otros combustibles como la gasolina, por unidad de cilindrada del motor.

Con el objetivo de paliar esta deficiencia, el presente trabajo se centra en dos líneas de investigación. En primer lugar, se estudian las mezclas de hidrógeno con metano, compuesto éste de alto contenido energético por unidad de volumen. En segundo lugar, se analizan las combustiones anómalas, problemática inherente a los combustibles, pero muy determinante para el hidrógeno debido a su elevada reactividad química.

El uso de mezclas de hidrógeno-metano con bajos contenidos de metano como combustibles para motores de combustión interna alternativos (MCIA) puede ayudar al desarrollo del mercado de la energía del hidrógeno y contribuir a la descarbonización del sector del transporte. Las mezclas hidrógeno-metano con 5–20 % en volumen de metano (29,6–66,7 % en peso), ofrecen excelentes prestaciones en el motor comercial Volkswagen de 1,4 L y 59 kW empleado en este trabajo, el cual fue previamente adaptado para funcionar con hidrógeno puro.

Se han realizado ensayos experimentales variando la composición del combustible (η), la relación aire/combustible (λ), el avance al encendido y a diferentes regímenes del motor. Se han analizado los resultados con respecto al rendimiento del motor (par motor efectivo, presión media efectiva, rendimiento térmico efectivo) y emisiones (óxidos de nitrógeno (NOx), monóxido de carbono (CO) e hidrocarburos sin quemar (HC)). Los resultados ponen en evidencia que la relación aire/combustible (λ) es la variable más influyente en el comportamiento del motor debido a su elevado efecto en la temperatura de combustión. El rendimiento efectivo del motor disminuye conforme se utilizan valores relativamente altos de λ con el fin de evitar fenómenos asociados a combustiones anómalas, como la detonación. Sin embargo, como aspecto positivo, las emisiones específicas de óxidos de nitrógeno disminuyen debido a una menor formación de NOx térmico, así como al efecto positivo de la reducción del avance al encendido.

En cuanto a la formación de CO e hidrocarburos no quemados, sus emisiones específicas aumentan, como es lógico, con el contenido de metano de la mezcla de combustible. Sin

embargo, también aumentan a medida que λ se incrementa a pesar de la menor concentración de combustible debido a una proporcional reducción de la potencia.

Finalmente, el efecto del aumento del régimen del motor es positivo en las emisiones de CO y HC, pero negativo para las emisiones de NOx. Estos resultados son debidos a una mejora en la combustión de la mezcla provocada por un aumento de la turbulencia en los cilindros y el consiguiente aumento de la temperatura de combustión, respectivamente.

Los fenómenos de combustión anómala se encuentran entre los principales obstáculos para la introducción de hidrógeno en el sector del transporte mediante el uso de motores de combustión interna (ICE). Es fundamental garantizar un funcionamiento sin anomalías para la combustión en condiciones próximas a las que proporcionan las mejores prestaciones del motor (par y potencia efectiva máxima); por tanto, lograr una detección temprana y precisa de combustiones anómalas es decisiva.

En este trabajo se han empleado tres métodos distintos, basados en medidas de presión en el cilindro, vibración en el bloque motor y sonido, para la caracterización de las combustiones anómalas provocadas a través del enriquecimiento de la mezcla de aire-hidrógeno que alimenta a los cilindros bajo una amplia gama de regímenes del motor (1000–5000 rpm).

Se ha encontrado que las componentes de alta frecuencia de la presión en el cilindro y las señales de aceleración del bloque motor obtenidas después de un análisis de la transformada de Fourier de las señales de presión y aceleración, respectivamente, son muy sensibles y, por tanto, de gran utilidad, para la detección del fenómeno de detonación. Por otro lado, las mediciones de ruido ambiental permitieron una caracterización precisa mediante un análisis espectral de las bandas de tercera octava de la señal grabada por un micrófono. Las anomalías de combustión podrían detectarse a través de las bandas de octava más intensas con frecuencias entre 250 Hz y 4 kHz para el fenómeno de retroceso de llama, y entre 8 kHz y 20 kHz para el de detonación.

Por otra parte, se ha comprobado mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), la acumulación de hidrógeno en el colector de admisión -debido a su diseño para un combustible líquido como la gasolina- y a las limitaciones de los inyectores de gas. Este efecto es la causa del fenómeno de retroceso de llama detectado.

ABSTRACT

This work focuses on the power increase of a spark-ignited commercial engine fueled with hydrogen. The very low density of hydrogen leads to a reduced engine power per cylinder volume unit compared to other fuels, especially the conventional liquid ones.

In order to overcome this drawback, in this work, two research lines have been developed. The first one includes the use as fuel of hydrogen-methane mixtures. The second line focuses on the analysis of abnormal combustion phenomena promoted by hydrogen due to its high chemical reactivity.

Using hydrogen-methane mixtures with low methane content as fuels for internal combustion engines (ICEs) has big potential to contribute to the development of the hydrogen energy market and to the decarbonization of the transport sector in accordance with the most recent European environmental policies. Mixtures containing 5–20 % (vol.) methane (29.6–66.7 wt. %), allow significantly improving the performance of a commercial Volkswagen 1,4 L and 59 kW engine previously adapted to run on hydrogen.

Several series of experiment were carried out by varying the fuel mixture content of methane (η), the air-to-fuel ratio (λ), spark advance and engine speeds. The results were analyzed in terms of the engine performance (maximum brake power, maximum brake torque, mean effective pressure, thermal efficiency) and pollutant emissions (nitrogen oxides (NO_x), carbon monoxide (CO) and unburned hydrocarbons (HC)). Results evidenced that λ is the parameter that most influences the engine performance due to its strong effect on combustion temperature. Engine thermal efficiency decreases as λ increases in order to avoid abnormal combustion events such as knock. However, this leads to an important positive effect consisting in reduced thermal NO_x formation; thanks also to the use of shorter spark advances.

As for the CO and HC specific emissions, as expected, they increase with η due to increased contents of methane in the mixture. However, they also increase with λ though the fuel concentration decreases which is associated to the simultaneous power decrease.

Finally, the engine speed has positive effects on the specific CO and HC emissions but negative effects on the NO_x ones. These results are due to a better combustion associated

to improved mixing by more intense turbulences within the cylinder. As a result, less CO and HC are formed whereas thermal NO_x is favored.

Abnormal combustion phenomena are among the main obstacles to be overcome in order to introduce hydrogen as a fuel of ICEs. It is of utmost importance to be able of operating an ICE at conditions close to those yielding the best performance (highest torque and thermal efficiency) and free from anomalous combustion events. Therefore it is necessary to develop efficient and prompt detection systems.

In this work three characterization methods have been used: in-cylinder pressure, block engine vibration, and acoustic measurements. Anomalous combustion events were provoked by progressively increasing the fuel content of the hydrogen-air mixture fed to the cylinders under a variety of engine speeds (1000–5000 rpm).

It has been found the high-frequency components of the signals given by a transducer and an accelerometer measuring the in-cylinder pressure and block engine vibrations, respectively, were very sensitive after a Fourier-transform analysis for the detection of knock events. On the other hand, ambient noise measurements allowed after a spectral analysis in terms of third octave bands the identification of abnormal combustion events. In this regard, backfire could be detected by more intense bands at frequencies within 250 Hz and 4 kHz whereas knock was detected by stronger third octave bands within 8 kHz and 20 kHz. These results have demonstrated for the first time the utility of using acoustic measurements for detecting and identifying abnormal combustion phenomena in ICEs.

Finally, Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations have shown that hydrogen accumulation in the intake manifold is possible under the conditions used in this work. This could be the main cause of the abnormal combustion events observed when increasing the mixture richness. It is very likely that the valves size, originally designed for gasoline, was not high enough to allow a sufficiently high hydrogen flow. Similarly the hydrogen flow provided by the injectors used has to be higher to allow sufficiently rapid feeding at high engine speeds. It can be concluded that these key components required dedicated design when hydrogen will be used as an ICE fuel.

ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS	13
ÍNDICE DE TABLAS	17
ÍNDICE DE EXPRESIONES	18
NOMENCLATURA	19
1 INTRODUCCIÓN	21
1.1 Antecedentes	21
1.2 Combustibles	26
1.2.1 Situación actual	26
1.2.2 Tendencias: nuevos combustibles.....	27
1.2.3 Hidrógeno	29
1.2.3.1 Introducción	29
1.2.3.2 Características: combustión	30
1.2.3.3 Aplicaciones: antecedentes	33
2 OBJETIVOS	35
3 INSTALACIONES.....	37
3.1 Banco de ensayos.....	37
3.2 Motor	38
3.3 Sistema de adquisición de datos, equipamiento.....	39
3.4 Sistema de suministro de gases combustibles.....	43
3.5 Electrolizador.....	44

3.6 Seguridad	45
4 PUBLICACIONES CIENTÍFICAS	47
4.1 Contenido y estructura de la memoria de tesis doctoral	47
4.2 Indicios de calidad	49
4.2.1 Applied Energy	49
4.2.2 Energy Conversion and Management	50
5 RESULTADOS	55
5.1 Introducción	55
5.2 Estudio experimental de las prestaciones y emisiones de un MEP comercial, para funcionar con H ₂ , CH ₄ y sus mezclas	56
5.2.1 Introducción.....	56
5.2.2 Motor, equipamiento y métodos experimentales.....	57
5.2.3 Resultados.....	59
5.2.4 Prestaciones del motor.....	60
5.2.5 Emisiones contaminantes	62
5.2.5.1 Óxidos de nitrógeno (NO _x).....	62
5.2.5.2 Monóxido de carbono (CO)	66
5.2.5.3 Hidrocarburos sin quemar (HC).....	67
5.2.6 Conclusiones.....	69
5.3 Caracterización de anomalías de combustión en un MEP comercial, alimentado con H ₂ mediante medidas de presión, vibración y acústicas	71
5.3.1 Introducción.....	71
5.3.2 Características del motor, configuración experimental y métodos.....	73
5.3.3 Resultados.....	74

5.3.3.1	Caracterización de combustiones anómalas.....	74
5.3.3.2	Ciclos de combustión con detonación: análisis de la presión en el cilindro y vibración .	78
5.3.3.3	Análisis del ruido	82
5.3.4	Simulación mediante dinámica de fluidos computacional (CFD).....	85
5.3.4.1	Objetivo y alcance.....	85
5.3.4.2	Condiciones de simulación	86
5.3.4.3	Resultados de las simulaciones	88
5.3.5	Prestaciones óptimas del motor	91
5.3.6	Conclusiones.....	93
6	CONCLUSIONES GENERALES	95
7	FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO	99
8	BIBLIOGRAFÍA.....	101
9	ANEXOS.....	107
9.1	ANEXO I.....	109
	Artículo I: “ <i>Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures</i> ”	
9.2	ANEXO II.....	121
	Artículo II: “ <i>Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block- engine vibration, and acoustic measurements</i> ”	

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig.1 Motor comercial Volkswagen 1,4 L 59 kW	21
Fig.2 Grupo electrógeno	22
Fig.3 Volkswagen Polo bicomcombustible.....	23
Fig.4 Electrolizador.....	25
Fig.5 Esquema banco de ensayo de motores	37
Fig.6 Motor utilizado en la celda de ensayos.....	38
Fig.7 Sistema de adquisición CompacDAQ (izquierda) y control del motor (derecha).....	39
Fig.8 Bujía instrumentada Kistler (izquierda) y encoder de cigüeñal Kistler (derecha)	40
Fig.9 Acelerómetro Bruel & Kjaer 4504 (izquierda) y micrófono G.R.A.S. 40AC (derecha)	41
Fig.10 Programación en Labview del sistema de monitorización de la presión en el cilindro	41
Fig.11 Ciclo medio indicado con SA 10 °, 15 ° y 20 ° a 2000 rpm, con H ₂ puro y $\lambda=1,6$	42
Fig.12 Instalación de gases fuera de la celda	43
Fig.13 Electrolizador y depósito	44
Fig.14 Sensores de combustible (arriba), panel y mando de control (abajo).....	45
Fig.15 Sensor portátil CO	46
Fig.16 Índice de impacto 2 años Applied Energy	49
Fig.17 Índice de impacto 5 años Applied Energy	50
Fig.18 Orden áreas temáticas Applied Energy.....	50
Fig.19 Índice de impacto 2 años Energy Conversion and Management.....	51

Fig.20 Índice de impacto 5 años Energy Conversion and Management.....	51
Fig.21 Orden áreas temáticas Energy Conversion and Management	52
Fig.22 Evolución de la temperatura adiabática de la llama en función de λ y η	59
Fig.23 Par motor efectivo en función de λ y η , WOT, 3400 rpm y SA óptimo	60
Fig.24 Rendimiento térmico efectivo en función de λ y η , WOT, 4200 rpm y SA óptimo ...	61
Fig.25 Diagramas Presión-Volumen (Ciclos indicados) según las condiciones de la Tabla 5	63
Fig.26 Velocidad de calor liberado frente a CA para las condiciones de la Tabla 5 y 10 ° BTCD	64
Fig.27 Emisiones de NOx (g/kWh) frente η y SA para, $\lambda=1,6$, WOT y 3400 rpm.....	64
Fig.28 Emisiones de NOx (g/kWh) frente λ y η para WOT, 2000 rpm y SA óptimo.....	65
Fig.29 Emisiones de CO (g/kWh) frente SA y η a WOT, $\lambda=1,6$, línea continua 4200 rpm y trazos 3400 rpm.....	66
Fig.30 Emisiones de CO (g/kWh) frente λ y η a WOT, 3400 rpm y SA óptimo	67
Fig.31 Emisiones de HC (g/kWh) frente SA y η a WOT, $\lambda=1,6$. Las líneas continuas, de puntos, trazos-puntos y de trazos corresponden a 4200, 3400, 2600 y 1800 rpm, respectivamente..	68
Fig.32 Emisiones de HC (g/kWh) frente λ y η a WOT y SA óptimo. Las líneas continuas, de puntos, trazos-puntos y de trazos corresponden a 4200, 3400, 2600 y 1800 rpm, respectivamente.....	69
Fig.33 Evolución de la presión en el cilindro con CA a 5000 rpm para ciclos: normal, detonante y con retroceso de llama.....	75
Fig.34 De arriba abajo, evolución con el tiempo a 2000 rpm de: presión del cilindro, señal del acelerómetro, señal del micrófono y T ^a aire de admisión	77
Fig.35 Evolución de parámetros del motor a 2000 rpm. Par motor (Me), NOx, (λ) y pulso inyección de H ₂	77

Fig.36 Evolución de la presión en cilindro con CA a 2000 rpm para ciclos normales (izquierda) y detonantes (derecha). Se muestra la señal de presión sin procesar y sus componentes de baja y alta frecuencia	79
Fig.37 Evolución de la señal del acelerómetro con CA a 2000 rpm para ciclos normales (izquierda) y detonantes (derecha). Se muestra la señal del acelerómetro y sus componentes de baja y alta frecuencia.....	79
Fig.38 Datos del promedio integral del módulo de las componentes de alta frecuencia de la señal del acelerómetro para cada uno de los ciclos a 1000, 2000, 4000 y 5000 rpm	80
Fig.39 Datos del promedio integral del módulo de las componentes de alta frecuencia de la señal de presión en cilindro para cada uno de los ciclos a 1000, 2000, 4000 y 5000 rpm	81
Fig.40 Evolución con el tiempo de las presiones en el cilindro (señal azul) y acústica (señal roja) para una serie de ciclos de combustión normales a 2000 rpm	83
Fig.41 Evolución con el tiempo de las presiones en el cilindro (señal azul) y acústica (señal roja) para una serie de ciclos de combustión normales y anómalos a 2000 rpm.....	84
Fig.42 Análisis espectral de ciclos normales y con detonación a 2000 rpm.....	84
Fig.43 Análisis espectral de ciclos normales, con detonación y retroceso de llama a 2000 rpm	85
Fig.44 Modelo CFD del colector de admisión, inyector, cámara de combustión y cilindro .	86
Fig.45 Fracción molar de H ₂ en el colector de admisión y el cilindro a valores de CA (ATDC) de: (A) 40 °; (B) 90 °; (C) 150 ° y (D) 195 ° (2000 rpm)	89
Fig.46 Resultados de simulación de CFD, H ₂ (línea azul) y aire (línea roja) en el cilindro en la carrera de admisión (2000 rpm).....	90
Fig.47 Ensayos de ruido en el habitáculo de un vehículo.....	99
Fig.48 Modelo para la predicción del comportamiento de mezclas gaseosas combustibles .	99

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 Características del H ₂ y CH ₄ en las condiciones más habituales	31
Tabla 2 Características del motor VW utilizado	39
Tabla 3 Equipamiento utilizado	42
Tabla 4 Composiciones de las mezclas combustibles consideradas	56
Tabla 5 Parámetros de las mezclas combustibles ensayadas	57
Tabla 6 Influencia del avance al encendido en la presión máxima y concentración de NO _x , utilizando H ₂ puro, con $\lambda=1,6$, WOT y 2000 rpm.....	62
Tabla 7 Resultados de las simulaciones de CFD realizadas para distintas inyecciones de H ₂	91
Tabla 8 Las mejores prestaciones del motor a las velocidades indicadas y condiciones normales de combustión	92

ÍNDICE DE EXPRESIONES

Ec.1 Temperatura adiabática de la llama teórica (K).....	59
Ec.2 Concentración específica de NOx (g/kWh).....	62
Ec.3 Desplazamiento pistón (m).....	87
Ec.4 Desplazamiento de la válvula de admisión (m).....	87

NOMENCLATURA

ABDC	After bottom dead centre / Después del punto muerto inferior	EVC	Exhaust valve closing / Cierre de la válvula de escape
ATDC	After top dead centre / Después del punto muerto superior	GLP	Gases licuados del petróleo
BDC	Bottom dead centre / Punto muerto inferior	H ₂ FCs	Hydrogen-fueled fuel cells / Celdas de combustible alimentadas con hidrógeno
BMEP	Brake mean effective pressure / Presión media efectiva	H ₂ ICE	Hydrogen-fueled ICE / Motor de combustión interna alimentado con hidrógeno
BTDC	Before top dead center / Antes del punto muerto superior	HCs	Unburned hydrocarbons / Hidrocarburos no quemados
CA	Crank angle (°) / Ángulo del cigüeñal	HHV	Higher heating value / Poder calorífico superior
CFD	Computational fluid dynamics / Dinámica de fluidos computacional	ICE	Internal combustion engine / Motor de combustión interna
CNG	Compressed natural gas / Gas natural comprimido	MAP	Manifold air pressure / Presión en el colector de admisión
C _{NOx}	NOx concentration in the engine exhaust (ppm) / Concentración de NOx en los gases de escape del motor	MBP	Maximum brake power (kW) / Máxima potencia efectiva
CO	Carbon monoxide / Monóxido de carbono	MBT	Maximum brake torque (N m) / Máximo par efectivo
c _p	Specific heat (J/mol K) / Calor específico a presión constante	MEP	Motor de encendido provocado
CR	Compression ratio / Relación de compresión	M _{NOx}	NOx molecular weight (g/mol) / Masa molecular de NOx
DI	Direct injection / Inyección directa	n	Engine speed (rpm) / Régimen del motor
ECU	Engine control unit / Unidad de control del motor	ñ	Molar flow rate (mol/s) / Caudal molar
EGR	Exhaust gas recirculation / Recirculación de gases de escape	N _e	Exhaust moles formed per mol of fuel / Moles de escape formados por mol de combustible

NEDC	New european driving cycle / Nuevo ciclo de conducción europeo	STA	Sociedad de técnicos de automoción
NGVs	Natural gas-fueled vehicles / Vehículos alimentados con gas natural	t	Time / Tiempo
NOx	Nitrogen oxides (ppm) / Óxidos de nitrógeno	W	Power delivered by the engine (W) / Potencia entregada por el motor
\dot{Q}	Power associated to the heat losses (W) / Potencia asociada a las pérdidas de calor.	WLTP	World harmonized light-duty vehicle test procedure / Procedimiento mundial armonizado de prueba de vehículos ligeros
R	Universal gas constant / Constante universal de los gases	WOT	Wide open throttle / Acelerador completamente abierto
RDE	Real driving emissions / Emisiones de gases en conducción real	Z_{iv}	Intake valve positioning (m) / Posicionamiento de la válvula de admisión
RON	Research octane number / Número de octano	Z_p	Piston positioning (m) / Posicionamiento del pistón
SA	Spark advance (° BTDC) / Avance al encendido	Δh	Specific enthalpy change (J/mol) / Variación de entalpía específica
SCR	Selective catalytic reduction / Reducción Catalítica Selectiva	h_f^o	Specific enthalpy of formation at the standard state, J/mol / Entalpía específica de formación en condiciones estándar
SI	Spark-ignition / Encendido por chispa		

Greek letters

η	Molar fraction of methane in the fuel mixture / Fracción molar de metano en la mezcla de combustible	η_t	Thermal efficiency / Rendimiento térmico efectivo
λ	Air-to-fuel ratio / Relación aire-combustible		

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

El Grupo Hidrógeno de la Universidad Pública de Navarra (UPNA), al que pertenezco desde su creación, ha trabajado en la modificación, puesta a punto y posterior explotación de varios motores comerciales de gasolina para ser alimentados con hidrógeno.

El primer motor modificado fue un motor comercial Volkswagen de 1,4 L y 59 kW alimentado con gasolina y de aspiración natural que fue instalado en el banco de ensayos del laboratorio de motores térmicos “Carlos Sopena” de la UPNA. Mi participación consistió en diseñar, construir e implantar las modificaciones necesarias para su uso con hidrogeno (*Figura 1*). Los ensayos realizados se describen en Sopena et al.[1] donde se estudian las prestaciones del motor así como sus emisiones de NOx.



Fig.1 Motor comercial Volkswagen 1,4 L 59 kW

El segundo motor fue un motor comercial Honda bicilíndrico componente de un grupo electrógeno MOSA GE 10000 BES/GS de 0,61 litros de gasolina. Este motor originalmente disponía de carburador. Mi colaboración sirvió para convertirlo en inyección gasolina-hidrógeno, siendo el primer motor bicomcombustible modificado en la UPNA por nuestro grupo

de investigación (*Figura 2*). Este trabajo se describe en Sáinz et al. [2]. Fue necesario diseñar, fabricar y montar elementos nuevos como:

- Rampa de inyectores de gasolina
- Rampa de inyectores de H₂
- Bomba eléctrica de gasolina y línea
- Manorreductor, manómetro y línea de gas
- Sensores de posición árbol de levas, mariposa, rpm, λ .
- ECU e instalación eléctrica
- Puesta a punto



Fig.2 Grupo electrógeno

El tercer motor modificado estaba a bordo de un vehículo Volkswagen Polo y fue modificado también para funcionar de manera bicomcombustible hidrógeno-gasolina, convirtiéndose en el primer vehículo de hidrógeno de estas características en España, presentado en la UPNA el 20 de diciembre 2010 (*Figura 3*). La investigación se describe en Sáinz et al.[3].Mi contribución a este proyecto consistió en:

- Instalación de las botellas de H₂ en el vehículo, así como de la línea de gas
- Acumulador de H₂
- Rampa e instalación de los inyectores de H₂
- Puesta a punto
- Conductor de pruebas



Fig.3 Volkswagen Polo bicombustible

La investigación hasta ahora descrita contó con la financiación de la empresa Acciona Biocombustibles S.A mediante contrato OTRI 2006 13 118 (CENIT proyecto SPHERA). Asimismo, fue fundamental la donación de Volkswagen Navarra de los motores y vehículo utilizados en las investigaciones.

La investigación desarrollada sobre estos tres motores, además de dar origen a las publicaciones citadas, fue la base de la tesis doctoral de mi compañero del Grupo de Hidrógeno de la UPNA, David Sáinz Casas “Adaptación de un motor de combustión interna alternativo de gasolina para su funcionamiento con hidrógeno como combustible. Aplicaciones energéticas y de automoción”, enero de 2015 [4].

El cuarto motor modificado fue un motor comercial Honda bicilíndrico integrante de un grupo electrógeno GESAN G 12000 H de 0,69 litros de gasolina. Este proyecto fue financiado por Hynergreen Technologies S.A., grupo Abengoa por medio de la convocatoria del Ministerio de Defensa “Equipos estacionarios para la generación de energía eléctrica por combustión de hidrógeno (H₂-Electrogen-M)”, Expediente:1003211003600, BOE 10 de enero de 2012, mediante contrato OTRI 2011 012 066. Mi aportación a este proyecto empezó con la elección del equipo a modificar según requerimientos del cliente. Diseño, fabricación y montaje de:

- Acumulador de H₂
- Rampa de inyectores de H₂
- Manómetro, válvulas y línea de gas
- Sensores de posición árbol de levas, mariposa, rpm, λ , temperatura gases de escape, presóstato y temperatura del aceite motor, presión y temperatura del aire de admisión

- ECU e instalación eléctrica
- Puesta a punto
- Transporte y entrega en las instalaciones del cliente, e impartición de un curso de formación del uso y mantenimiento del equipo

Como ya se ha indicado, mi participación en las investigaciones ha sido muy directa. He estado implicado en el manejo del banco de ensayos, en el diseño y fabricación de piezas, montaje de los prototipos. Asimismo, el grupo de investigación dispone de una pequeña planta de producción de hidrógeno, integrada por un electrolizador de agua alcalino de 5 kW que produce 90 g/h de hidrógeno (*Figura 4*). He colaborado en el seguimiento y redacción de todos los informes de los proyectos desarrollados. Para llevar a cabo todas estas tareas he tenido que formarme en:

- Programación mediante el software Labview para la visualización y adquisición de parámetros de control del motor
- Software de funcionamiento del electrolizador y mantenimiento de la instalación
- Instalaciones de gases combustibles a presión, líneas de acero inoxidable desmontables.
- Seguridad en el manejo de gases combustibles a presión
- Uso y mantenimiento de un compresor de gases combustibles

Dada mi condición de socio de AeH₂ (Asociación Española del Hidrógeno), he asistido a congresos y seminarios del sector orientado hacia la automoción. Como divulgador he sido guía en multitud de visitas externas para conocer el trabajo del Grupo Hidrógeno de la UPNA, lo que incluye visitas de profesionales interesados en el hidrógeno y grupos de estudiantes de diferentes niveles (ESO, bachiller, FP y universitarios). Con el Volkswagen Polo adaptado he participado en varias jornadas de movilidad ecológica organizadas por el Ayuntamiento de Pamplona, Gobierno de Navarra, asociación de estudiantes de la UPNA (APERNA), etc. He sido invitado para dar charlas y cursos de formación al respecto en Institutos de formación profesional, rama Automoción de Navarra y Galicia.



Fig.4 Electrolizador

Esta implicación en los trabajos, el éxito de los resultados obtenidos, los medios disponibles y, sobre todo, el ambiente de trabajo, generaron en mí, una vocación por estas líneas de investigación y por la investigación en general, que me llevaron a trabajar para optar al Grado de Doctor.

La nueva normativa que regula las enseñanzas oficiales de doctorado mediante el Real Decreto 99/2011, de 28 de enero de 2011, publicado en el BOE nº35 de 10/2/2011, y el acuerdo A10/2015 del comité de dirección de la Escuela de Doctorado de Navarra, de la UPNA, exige para poder realizar los estudios de doctorado mínimo de 300 créditos ECTS, de los cuales 60 han de ser de máster.

Mi trayectoria universitaria me ha permitido cumplir con dichos requisitos. Tras obtener la titulación de Ingeniero Técnico Industrial, especialidad Mecánica, en la Universidad de Navarra (1991), cursé estudios de Ingeniería Industrial a tiempo parcial en la UPNA desde el año 2003 al 2008, sin poder finalizarlos por la modificación del programa al incorporarse las nuevas titulaciones del Espacio Europeo de Educación Superior. Al adaptar mis estudios a los nuevos planes, cursé a tiempo parcial, el máster Universitario en Ingeniería de Materiales y Fabricación de la Universidad Pública de Navarra (2014) de 60 créditos ECTS.

Por todo lo dicho, presento esta investigación en la modalidad de compendio de publicaciones, para optar al Grado de Doctor de acuerdo con la normativa de doctorado de esta universidad (Acuerdo A3/2015 del comité de dirección de la Escuela de Doctorado de Navarra por el que se modifica la normativa para la elaboración de tesis como compendio de publicaciones).

1.2 Combustibles

1.2.1 Situación actual

Los vehículos, mayoritariamente propulsados por motores de combustión interna alimentados por combustibles de origen fósil, generan principalmente dióxido de carbono (CO₂), óxidos de nitrógeno (NO_x), hidrocarburos sin quemar (HC), partículas sólidas (hollín) y monóxido de carbono (CO). La emisión de NO_x se puede reducir, mediante sistemas del tipo EGR y mediante convertidores catalíticos colocados en los sistemas de escape (SCR). Las emisiones de partículas sólidas, sobre todo en vehículos equipados con motores de encendido por compresión (diésel), se ven reducidas con convertidores catalíticos específicos. Los hidrocarburos y el monóxido de carbono se reducen principalmente mejorando el proceso de combustión. Finalmente, las inevitables emisiones de CO₂ se pueden reducir disminuyendo el consumo de combustible, utilizando biocombustibles que den lugar a emisiones netas más bajas, hibridando con motores eléctricos, o utilizando vehículos eléctricos o alimentados con hidrógeno de origen renovable.

La Unión Europea lleva muchos años apostando por políticas de optimización de los recursos energéticos, así como de la reducción de la contaminación. Con el horizonte puesto en el año 2050 se han establecido unos objetivos, para lograr la reducción del 80-95 % (en relación al año 1990) en las emisiones de gases de efecto invernadero [5]. Esta directriz pretende mitigar el calentamiento global y mejorar la calidad del aire.

Se estima que el sector del transporte es responsable de aproximadamente el 25 % de las emisiones de gases de efecto invernadero. La Comisión Europea ha adoptado un plan con cuarenta iniciativas para la próxima década tendentes a desarrollar un sistema de transporte más eficiente. Asimismo, cabe esperar que las propuestas reducirán drásticamente la dependencia de Europa del petróleo importado, así como las emisiones de carbono en el transporte en un 60 % [6].

En 2015, la Agencia de Protección del Medio Ambiente de los EE.UU. (EPA), denunciaba formalmente a Volkswagen por alterar el comportamiento del motor y del sistema de postcombustión de gases de escape en algunos modelos equipados con motores de encendido por compresión (diésel), durante la ejecución del ciclo de certificación de emisiones. Resultó que las emisiones de NO_x durante el ciclo fueron entre 15 y 35 veces inferiores que en condiciones normales de funcionamiento [7]. El alcance y las consecuencias de este episodio están siendo muy costosas para los fabricantes. La Comisión Europea era consciente desde

hace años que el ciclo de homologación europeo, llamado NEDC y creado en 1988, con pequeñas modificaciones realizadas en 1991 y 2000, era anticuado. Se introdujo a partir de septiembre de 2017 un nuevo ciclo más representativo de las condiciones de funcionamiento reales y de ámbito mundial, llamado WLTP. El 1 de enero del 2020 entro en vigor la norma Euro 6d, más restrictiva, dado que se compara con ensayos reales en carretera (RDE) [8].

Desde el pasado 1 de enero 2020, se establece para los turismos nuevos matriculados, una media de emisiones de CO₂ de 95 g/km [8], valor que cada fabricante debe cumplir según el número de vehículos y su peso de matriculados, con lo que se calculará la media de emisiones de cada marca. En 2025 se reducirá este valor un 15 %, hasta 81 g/km y en 2030, un 37,5 % hasta los 59 g/km, respecto a las cifras de 2020. Esta medida establece la media de emisiones de CO₂ más baja del mundo.

Aquellas marcas que no cumplan con su media de emisiones recibirán fuertes multas: 95 € por cada g/km de CO₂ y coche que supere ese límite. Se trata de posibles multas multimillonarias a los fabricantes de vehículos. Urge conseguir una disminución de las emisiones para la homologación de los vehículos actuales por parte de los fabricantes en la comunidad europea.

1.2.2 Tendencias: nuevos combustibles

La mayoría de los fabricantes de vehículos están considerando varias alternativas para conseguir una reducción de emisiones de gases de efecto invernadero que, en esencia, se reducen a dos líneas de desarrollo: vehículo eléctrico y nuevos combustibles.

Los combustibles, alternativos al binomio diésel-gasolina, que son ya una realidad en el mercado de la automoción son el gas natural y el gas licuado del petróleo (GLP, propano-butano). La mayoría de los fabricantes tienen en su oferta vehículos alimentados con dichos combustibles. Su utilización está siendo cada vez más extendida en Europa.

El gas natural cuyo principal componente es el metano CH₄, es capaz de producir más energía térmica por unidad de masa que cualquier otro hidrocarburo. Este combustible se puede utilizar en vehículos almacenado en botellas a presión entre 200 y 250 bar en forma de gas comprimido (GNC), o en depósitos criogénicos en estado líquido (GNL) a -162 °C. Su uso en motores de combustión puede ser en estado puro, siendo para ello necesario la activación de la mezcla con aire mediante un arco eléctrico (para MEP), o mezclado con gasoil (para MEC) donde una inyección piloto del sistema de alimentación diésel activa la combustión; este

último sistema se conoce como “dual fuel”. Los fabricantes de vehículos industriales están trabajando en este ámbito. Los vehículos que utilizan GNC como combustible único suelen ser bicomcombustible siendo la gasolina el combustible alternativo.

La procedencia más habitual del metano consiste en los yacimientos de gas natural cuya riqueza en metano varía entre un 83 y 97 %. También es muy interesante el biogás obtenido de la fermentación de materia orgánica que se encuentran en distintos desechos como pueden ser los estiércoles, lodos de depuradoras de aguas residuales o residuos sólidos urbanos y determinados residuos industriales ricos en materia orgánica biodegradable. Sin olvidar que se puede obtener de manera sintética, utilizando la reacción de Sabatier, que consiste en la hidrogenación catalítica del CO_2 .

El GLP es una mezcla de propano-butano en diferentes proporciones según el país de procedencia y la estación del año en que se reposte. Su almacenaje en el vehículo se lleva a cabo en depósitos a relativamente baja presión, unos 10 bar y en estado líquido. Se usa en los motores de manera similar al gas natural; también junto con gasolina en vehículos bicomcombustible. Su utilización está más extendida que la del gas natural, y por tanto se dispone de más puntos de repostaje.

El gas natural y el GLP son combustibles de gran potencial frente a otros, tal y como sugieren [9].

Dentro de los biocombustibles cabe destacar al biodiésel. Las primeras generaciones de este combustible se basaron en la transformación de aceites procedentes de cultivos como la palma y la soja, con el gran inconveniente de interferir en el mercado alimentario. Las nuevas generaciones de biodiésel conforme a la normativa europea no deben tener ese inconveniente, además de garantizar una reducción de la huella de carbono, y no contribuir a nuevos problemas medioambientales, como el cambio del uso del suelo. Para ello es preciso recurrir a fuentes de triglicéridos de carácter residual o de especies no comestibles. Actualmente se está investigando con biodiésel procedente de la transformación de aceites vegetales no destinados a la alimentación, con una gran capacidad de crecimiento rápido y potencial energético. Uno de los vegetales más prometedores son las microalgas por los elevados rendimientos que presentan. Por último, se encuentra en fase experimental el denominado biodiésel de cuarta generación cuya producción se basa en bacterias modificadas de forma genética que aprovechan más eficazmente el CO_2 , tal y como destacan [10].

El otro gran biocombustible consiste en el bioetanol, que se emplea en motores de encendido provocado. El bioetanol se obtiene a partir de la glucosa ($C_6H_{12}O_6$), por fermentación en disolución acuosa y posterior concentración. La glucosa se obtiene de ciertos cultivos ricos en azúcar (remolacha, caña de azúcar, sorgo dulce, etc.). Sin embargo, para no interferir en el mercado alimentario y reducir su huella de carbono se prefiere la biomasa consistente en residuos lignocelulósicos (paja de cereales o restos vegetales del maíz) como fuente de azúcar, aunque el proceso resulta mucho más costoso. También se está investigando sobre la producción de bioetanol a partir de un desecho industrial de algas [11].

Otra vía en desarrollo con gran proyección de futuro son los combustibles sintéticos [12]. Se pueden obtener por vía química sintética combustibles similares al gasoil, gasolinas y gas natural. Como ejemplo, la gasolina sintética producida mediante energías renovables gracias al hidrógeno conseguido por electrolisis del agua y la utilización de CO_2 de procesos industriales permiten un combustible de gran calidad y de emisiones neutras. Existen proyectos piloto en Polonia, Noruega y Alemania, para testear dichos combustibles como [13].

Dada la importancia del hidrógeno para el presente trabajo, a continuación, se dedica un apartado específico a este combustible.

1.2.3 Hidrógeno

1.2.3.1 Introducción

El hidrógeno es el elemento más abundante del Universo. En condiciones normales es un gas incoloro, inodoro e insípido. Representa el 15,4 % de los átomos de la corteza terrestre y los océanos y el cuarto elemento más abundante en la Tierra en peso. Fue en 1766 cuándo H. Cavendish observó que se formaba agua en las explosiones por reacción entre el hidrógeno y el oxígeno. También estableció las propiedades del hidrógeno demostrando que era más ligero que el aire (es catorce veces menos pesado que el aire). En 1783, A. L. Lavoisier le dio el nombre de hidrógeno del griego, origen del agua.

No es tóxico, pero es prácticamente imperceptible en el caso de fuga. Puede producir asfixia al sustituir la presencia de oxígeno en el aire por lo que las medidas de seguridad tienen que ser muy estrictas. Su molécula está formada por dos átomos de hidrógeno unidos por un enlace covalente. Es un gas muy inflamable en el aire en un amplio intervalo de concentraciones. Se quema en presencia del aire formando, en ausencia de impurezas, una llama azul pálido casi invisible a la luz del día.

Su número atómico es 1, está presente en las estrellas la mayor parte de su vida, formadas principalmente por este elemento en estado de plasma. Sin embargo, en estado libre sólo se encuentra en muy pequeñas cantidades dentro de la atmósfera (1 ppm en volumen). Combinado con el oxígeno aparece en el agua, su compuesto más importante y abundante, y combinado al carbono, oxígeno y nitrógeno, en compuestos orgánicos como los hidrocarburos y proteínas, por ejemplo.

El hidrógeno se puede producir de manera “limpia” o renovable mediante electrolisis y aprovechando fuentes de electricidad renovable. En el panorama español, se va a proceder a la construcción por parte de la empresa Iberdrola de una planta de producción de hidrógeno “limpio” en Puertollano siendo uno de los proyectos más importantes de Europa con una inversión cercana a 150 millones de euros [14]. No obstante, a corto y medio plazo, se espera que la producción de hidrógeno va a seguir siendo mayoritariamente a partir de recursos fósiles (principalmente gas natural) [15].

1.2.3.2 Características: combustión

Las características más importantes del hidrógeno como combustible, así como del metano para su comparación, se presentan en la *Tabla 1*.

La alta reactividad química es lo que caracteriza a los combustibles gaseosos. La combustión como tal, ocurre cuando las moléculas de combustible se combinan con las del oxígeno (presente en el aire) creando así nuevas moléculas más estables. En consecuencia, la reacción química viene acompañada de una liberación de energía, que progresa a medida que las moléculas reaccionan. En el caso de la combustión del hidrógeno, la reacción química es muy rápida, y en función de la relación aire/combustible (λ), se tiene una velocidad del frente de llama más elevada que para la gasolina, lo que mejora la combustión.

Cada combustible, en el proceso de combustión, libera una cantidad dada y característica de energía denominada poder calorífico. Como podemos observar en la *Tabla 1*, el hidrógeno posee un valor elevado, cuando hablamos de poder calorífico por unidad de masa, que otros combustibles como el metano o la gasolina, a los que supera en más de 2,5 veces. Sin embargo, el hidrógeno posee una densidad muy baja, y esto hace que el poder calorífico por unidad de volumen también sea muy bajo. La baja densidad del hidrógeno es un gran inconveniente a la hora de quemarlo, ya que necesitamos un gran volumen para igualar la energía liberada en comparación, por ejemplo, con la gasolina.

	H ₂	CH ₄
Densidad:	0,0838 kg/Nm³ (gas) 0,0708 kg/l (líquido)	0,7174 kg/Nm³ (gas) 0,4226 kg/l (líquido)
Poder calorífico	10,783 MJ/m³	36,1 MJ/m³
Poder calorífico inferior	120 MJ/kg	53 MJ/kg
Poder calorífico superior	141,86 MJ/kg	55,5 MJ/kg
Intervalo de inflamabilidad (en aire)	4,0 – 75 %	5,3– 15 %
Intervalo de detonación (en aire)	18,3 – 59 %	5 – 15 %
Temperatura de autoignición	858 K	813 K
Mínima energía para la ignición	0,02 mJ	0,29 mJ
Velocidad laminar de llama	1,9 m/s	0,38 m/s
Capacidad calorífica específica:	C_p = 14,199 kJ/(kg·K) C_v = 10,074 kJ (kg·K)	C_p = 2,232 kJ/(kg·K) C_v = 1,706 kJ (kg·K)
Coeficiente de difusión:	0,61 cm²/s	0,16 cm²/s

Tabla 1 Características del H₂ y CH₄ en las condiciones más habituales

Unas de las propiedades que más importancia tiene es el intervalo de inflamabilidad. Se define en términos de los límites de inflamabilidad inferior y superior. El límite inferior es la concentración mínima de combustible que podrá mantener la propagación del proceso de combustión (de la llama); por debajo de ese límite no hay suficiente combustible para la combustión, la mezcla es demasiado pobre. El límite superior es la máxima concentración de combustible que podrá mantener la propagación de la llama; por encima de este límite no hay suficiente oxígeno para mantener la combustión, la mezcla es demasiado rica.

El hidrógeno es inflamable en aire en un amplio intervalo de concentraciones. Si comparamos los límites de inflamabilidad del hidrógeno con los de otros combustibles comunes se puede afirmar que el hidrógeno posee el intervalo más amplio. Esto es una ventaja ya que se pueden usar mezclas muy pobres en la combustión. Sin embargo, también presenta el inconveniente de posibilitar una combustión incontrolada cuando no es conveniente.

Durante el proceso de combustión normal en un motor de encendido provocado, el frente de llama avanza desde su origen que es el arco eléctrico generado en la bujía, hasta el final de la cámara de combustión, con una velocidad de propagación que es del orden de la velocidad lineal media del pistón. Durante su avance, los gases de combustión se dilatan y comprimen los gases sin quemar aumentando la presión y temperatura de la cámara. Esto provoca, si los

valores de presión y temperatura son suficientemente altos, el autoencendido o autoinflamación de la mezcla sin quemar. De todas formas, se necesita cierto tiempo, llamado de retraso, para que aún con las condiciones de presión y temperatura para autoencendido presentes, este se produzca.

De acuerdo con una teoría ampliamente aceptada [16], la combustión detonante (en inglés *knock*) se produce cuando el tiempo de retraso es menor que el propio proceso de combustión normal. La detonación da lugar a gradientes y ondas de presión muy intensas que se transmiten a través de los elementos mecánicos del motor dando origen al ruido metálico característico que se conoce como picado de biela. Los factores que más afectan a la disminución del tiempo de retraso y, en consecuencia, que provocan la detonación, son por un lado la naturaleza química del combustible, que se traduce en su octanaje. Por otro lado, intervienen factores de funcionamiento como el régimen del motor, el grado de carga, y la presión y temperatura exteriores. Los factores de reglaje del motor son el avance al encendido, la relación aire/combustible, la temperatura del refrigerante del motor. Por último, los factores de diseño son la relación de compresión, las turbulencias generadas dentro de la cámara de combustión y el recorrido del frente de llama que dependen de la posición de la bujía y de la geometría de la cámara de combustión.

Es bien conocida la alta tendencia a presentar fenómenos de combustión anómala de los motores de combustión interna alternativos alimentados con hidrógeno debido a la naturaleza de este combustible, con una baja energía ignición y alta velocidad del frente de llama. Con relaciones aire/combustible cercanas a valores estequiométricos, la tendencia a la detonación aumenta claramente debido a las altas presiones y temperaturas que se alcanzan durante la combustión y que provocan una reducción del tiempo de retraso. El empobrecimiento de la mezcla reduce claramente la tendencia a la detonación, pero como contrapartida empeoran las prestaciones.

Por otra parte, el retroceso de llama (en inglés *backfiring*, o *flash-back*) es otro fenómeno de combustión anómala producido por la presencia de hidrógeno en el colector de admisión. Cuando se inyecta combustible de manera indirecta, se pueden originar puntos calientes o de autoignición debido a las altas presiones y temperaturas de la cámara de combustión. Así, durante la apertura de la válvula de admisión, y dada la presencia de restos de hidrógeno, se desencadena la combustión del hidrógeno en el colector de admisión, con la consiguiente pérdida de potencia y par, y el riesgo de daños severos en el sistema de admisión.

Al objeto de evitar estos fenómenos, es habitual que los motores que consumen hidrógeno quemem mezclas pobres. Si bien esta estrategia es positiva en cuanto a la reducción de emisiones de NOx y el aumento del rendimiento, la disminución de potencia es la indeseada consecuencia. Las combustiones anómalas, especialmente la detonación por sus dañinos efectos para la vida del motor, constituyen la principal limitación de la potencia de los motores de combustión interna alimentados por hidrógeno. De ahí la atención que se ha prestado en este trabajo a estos fenómenos.

1.2.3.3 Aplicaciones: antecedentes

Muchas empresas del sector energético ven el hidrógeno no sólo como un producto energético de uso final, sino preferentemente como un producto intermedio que sirve para la integración y gestión del excedente de generación eléctrica renovable y, por tanto, como un medio de almacenamiento de energía. Además, el hidrógeno puede jugar un papel clave en la interconexión de las redes de gas y electricidad, así como en el desarrollo de una red de gas renovable tanto por su inyección directa a red como por la producción de metano renovable preferentemente mediante hidrogenación completa de CO₂ capturado [17], [18].

Existen dos tecnologías principales para el empleo del hidrógeno en automoción: los motores de combustión interna alimentados por hidrógeno o H₂ICEs (del inglés *Hydrogen-fueled Internal Combustion Engines*) y las pilas de combustible de hidrógeno o H₂FCs (del inglés *Hydrogen-fueled Fuel Cells*). Las pilas de combustible convierten por vía electroquímica directamente la energía interna del hidrógeno en energía eléctrica, mientras que los motores de combustión aprovechan la energía liberada en la oxidación del hidrógeno produciendo energía mecánica.

Los H₂ICEs, han sido estudiados por diversos grupos de investigación; algunos de los trabajos de revisión del estado del arte más notables corresponden a Escalante Soberanis y Fernandez [19] y Verhelst [20]. Destacan los avances en H₂ICEs realizados por fabricantes de automóviles como Ford [21], BMW [22], [23], y por universidades y centros de investigación como Tokyo City University [24], University of Melbourne [25], y UPNA [1]–[3].

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

2 OBJETIVOS

El principal objetivo de este trabajo es el aumento de potencia de un motor comercial de encendido provocado alimentado con hidrógeno. La extremadamente baja densidad del hidrógeno conlleva una menor potencia, frente a otros combustibles como la gasolina, por unidad de cilindrada del motor. Con el objetivo de paliar esta deficiencia, en el presente estudio se centra en dos líneas de trabajo.

En primer lugar, se estudia el empleo como combustible de mezclas de H_2-CH_4 , aprovechando el alto contenido energético por unidad de volumen del metano. Para ello es necesario trabajar sobre todos los parámetros de control del funcionamiento del motor y, en especial por ser determinante, la relación aire/combustible (λ). La limitación en la potencia del motor se corresponde con la aparición de fenómenos de combustión anómalos, conforme se enriquece la mezcla (valores de λ más bajos) y es por ello por lo que es preciso profundizar en sus causas y trabajar sobre su detección temprana. Si bien estos problemas se encuentran con cualquier combustible, resulta crítica para el hidrógeno debido a su elevada reactividad química.

En este último aspecto se centra el segundo gran objetivo de este trabajo, el desarrollo de nuevos métodos de detección de combustiones anómalas (en concreto detonación y retroceso de llama).

Esta propuesta, aborda la mejora de las condiciones de la combustión, determinando los límites y considerando los fenómenos de combustión anómala. Los avances permitirán mejoras en las prestaciones, par y potencia de los motores de combustión interna alternativos que utilizan el hidrógeno o mezclas H_2-CH_4 como combustibles.

Con la utilización de estos combustibles gaseosos, menos contaminantes, se espera contribuir a alargar la vida a una tecnología muy madura como son los motores de combustión interna alternativos que han permitido alcanzar unas cotas de desarrollo extraordinarias a nuestra sociedad.

Se pretende con este trabajo visibilizar y poner en valor nuevos combustibles que se pueden obtener empleando fuentes renovables de energía y a un precio cada vez más competitivo para motores de combustión interna, más eficientes y menos contaminantes.

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

3 INSTALACIONES

Todo el trabajo experimental de esta tesis doctoral se ha realizado en el laboratorio de motores térmicos “Carlos Sopena” ubicado en el edificio de talleres de la Universidad Pública de Navarra. Más concretamente, el motor utilizado fue instalado en la celda de ensayos que está disponible en este laboratorio. Se trata de una celda insonorizada que cuenta con un banco de ensayos para motores con la adecuada renovación de aire y extracción de humos, así como de una instalación para el suministro de gases y los sistemas de seguridad (Figura 5). La puesta a punto inicial se realizó durante el desarrollo de la tesis doctoral de David Sainz [4].

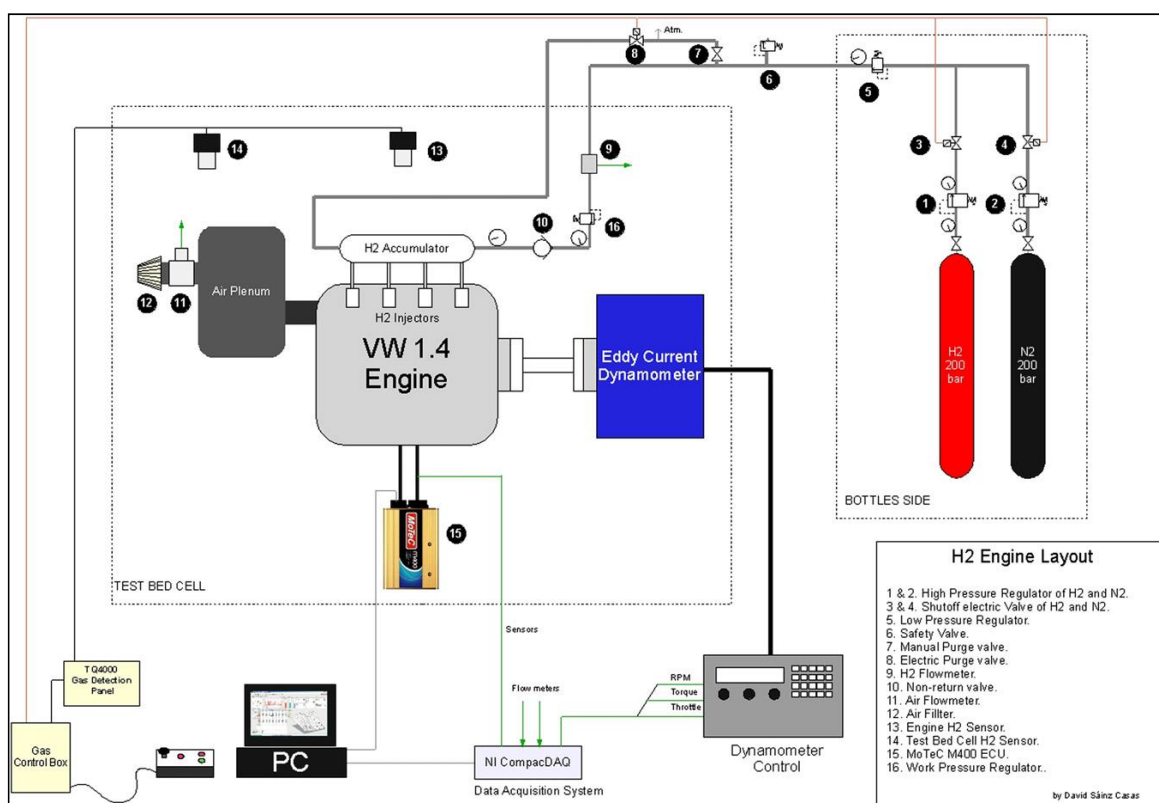


Fig.5 Esquema banco de ensayo de motores

3.1 Banco de ensayos

La celda de ensayo de motores cuenta con un freno electromagnético de corrientes parásitas AVL 80 (precisión: par $\pm 0,2 \%$, rpm ± 1 rpm) capaz de medir potencias de hasta 80 kW y con un sistema de control BME-300 que permite manejar el freno con cuatro modos de control: par motor efectivo-posición del acelerador, par motor efectivo-régimen de giro, régimen de giro-posición del acelerador y régimen de giro-par motor efectivo.

El freno electromagnético mide el par motor efectivo por medio de una célula de carga. También mide el régimen de giro del motor mediante un sensor inductivo, y permite variar la

posición del acelerador mediante un motor paso a paso conectado al acelerador del vehículo. Además, permite conectar el equipo al sistema de adquisición de datos para registrar todas las mediciones.

3.2 Motor

Se dispone de un motor de combustión interna de encendido provocado Volkswagen Polo de 1,4 L y 59 kW donado por Volkswagen Navarra, adaptado y perfectamente equipado para su control que funciona con combustibles gaseosos (*Figura 6*) y cuyas características más importantes quedan detalladas en la *Tabla 2*.

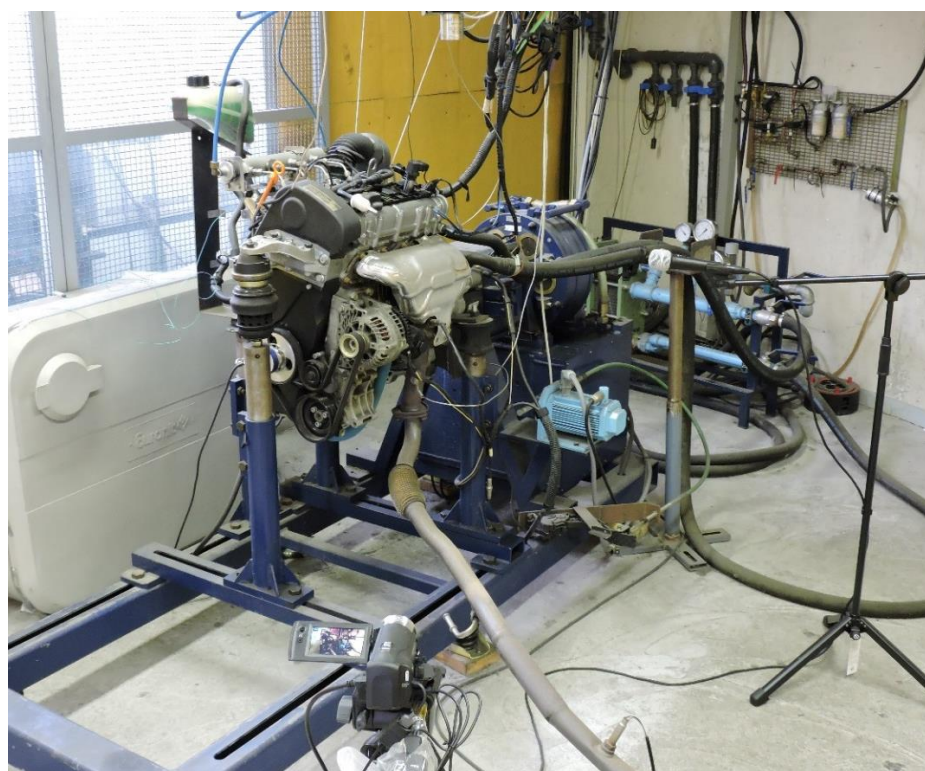


Fig.6 Motor utilizado en la celda de ensayos

MOTOR 1,4 L, 16V, 59 kW	
Combustible	gasolina
Potencia máxima CV - kW / rpm	80 - 59 / 5000
Par máximo Nm / rpm	126 / 3800
Situación	delantero transversal
Número de cilindros	4 en línea
Material del bloque / culata	aluminio / aluminio
Diámetro x carrera (mm)	76,5 x 75,6

Cilindrada (cm³)	1390
Relación de compresión	10,5
Distribución	4 válvulas por cilindro. Dos árboles de levas en la culata.
Alimentación	Inyección indirecta multipunto

Tabla 2 Características del motor VW utilizado

Para adaptar el motor al funcionamiento con combustibles gaseosos en la celda de ensayos fueron necesarias modificaciones mecánicas en el motor. Las principales modificaciones se realizaron en el sistema de inyección. Se eliminó la rampa de inyección de gasolina existente y se incorporó una rampa con inyectores de gas en el colector de admisión. Se incorporó también un intercambiador de calor aceite-agua junto al filtro de aceite para evitar posibles sobrecalentamientos del lubricante, refrigerándolo mediante el circuito de anticongelante. También fue necesario instalar una unidad electrónica de control programable (ECU) en lugar de la unidad de serie, que junto con los sensores de serie del motor y los nuevos inyectores permitirían la programación y control del motor.

El motor está gestionado por una unidad electrónica de control MoTeC M400, que dispone de su propio software, como de un Data Logger que permite registrar los parámetros de funcionamiento del motor: tiempos de inyección, avance al encendido, temperaturas, relación aire/combustible, etc.

3.3 Sistema de adquisición de datos, equipamiento

Para la monitorización y adquisición de datos de los ensayos realizados se instaló un equipo CompactDAQ de National Instruments (*Figura 7*). El banco de ensayos está conectado al sistema de adquisición para el registro de los parámetros de funcionamiento del motor: par motor y régimen de funcionamiento.

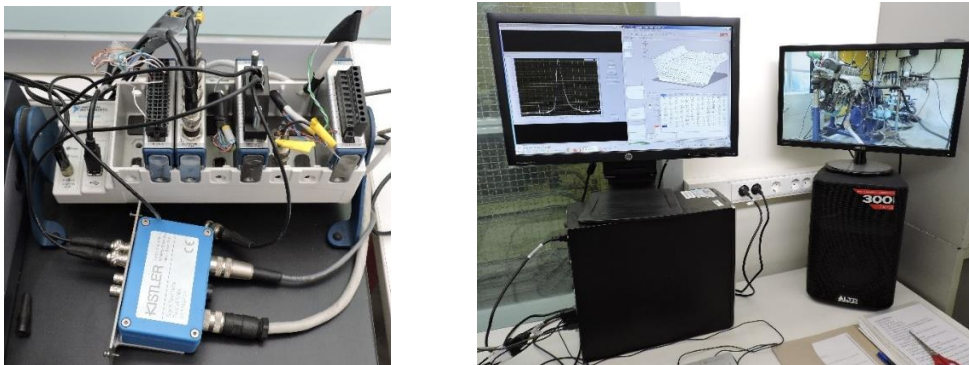


Fig.7 Sistema de adquisición CompacDAQ (izquierda) y control del motor (derecha)

Para la medición del caudal del aire de admisión se colocó una cámara de remanso y un medidor de caudal másico de aire Bronkhorst (precisión $\pm 0,5 \%$). Para medir el caudal de gases combustibles se instaló en la línea de alimentación del motor otro medidor de caudal másico Bronkhorst (precisión $\pm 0,5 \%$). Ambos dispositivos están conectados al sistema de adquisición de datos para su monitorización y registro.

Para el análisis de los gases contaminantes se cuenta con un analizador de la marca Bosch ETT 008.31. Para la medición de NO_x se instaló en el escape del motor un analizador HORIBA MEXA 720NO_x, (precisión ± 2 ppm) que utiliza un sensor de oxígeno UEGO, y que se conecta también al sistema de adquisición de datos.

Se instaló y puso a punto un sistema de medición de presión en el interior del cilindro. El sistema consta de una bujía instrumentada Kistler 6117B ($\pm 0,6 \%$) y un encoder Kistler 2613B1 ($\pm 0,02^\circ$). La bujía lleva incorporado un sensor de presión piezoeléctrico, y el encoder es capaz de dar una señal con resolución de $0,2^\circ$ de giro del cigüeñal (*Figura 8*). Ambos se conectan al sistema de adquisición de datos NI CompacDAQ.

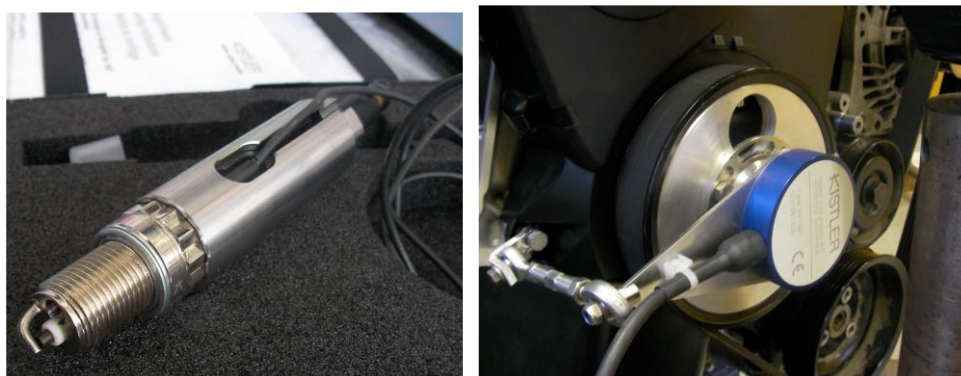


Fig.8 Bujía instrumentada Kistler (izquierda) y encoder de cigüeñal Kistler (derecha)

Para el análisis de vibraciones y ruido se ha utilizado equipamiento perteneciente a la Unidad de Física del departamento de Ciencias. Se trata de un acelerómetro CCLD piezoeléctrico triaxial Bruel & Kjaer 4504 (intervalo: 1–10000 Hz; sensibilidad: $10 \pm 20 \%$ mV/g) y un micrófono G.R.A.S. 40AC (hasta 40 kHz con una sensibilidad de 12,5 mV/Pa) como se muestra en la *Figura 9*.

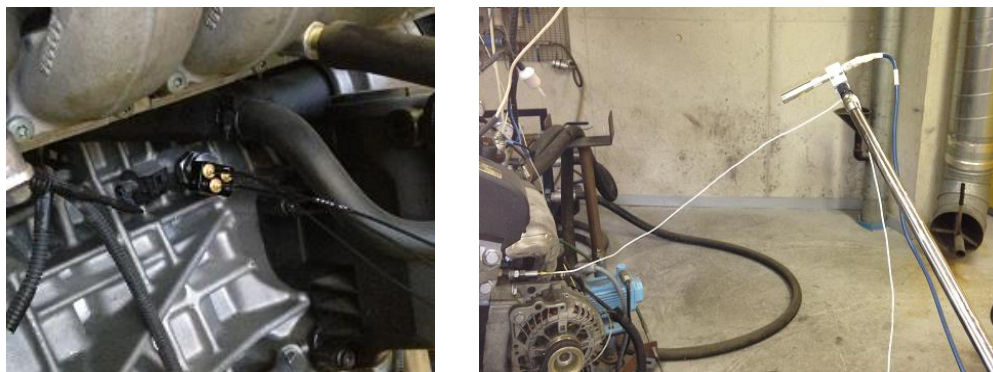


Fig.9 Acelerómetro Bruel & Kjaer 4504 (izquierda) y micrófono G.R.A.S. 40AC (derecha)

La captura de los valores de todos los parámetros indicados es necesaria de cara a la correcta caracterización del comportamiento del motor. A través de estos ensayos es posible estudiar el consumo y las emisiones del motor en un determinado punto de operación para poder así optimizar su funcionamiento. La adquisición y tratamiento de estas señales se hace a través del software LabView versión 12.Of3. Para ello se desarrolló un programa que se encarga de la adquisición de las diferentes señales, su conversión a magnitudes reales y su registro en tiempo real. Los datos proporcionados por el sensor de presión y el encoder permiten, a través de un programa creado en LabView (Figura 10), la obtención de la variación de presión con el giro del cigüeñal, pudiendo obtener el ciclo indicado del motor.

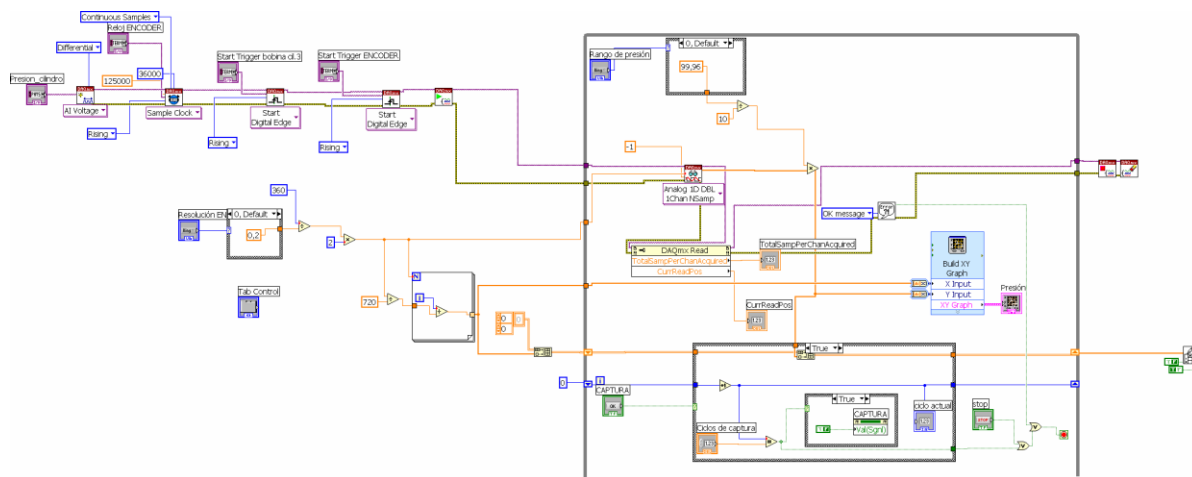


Fig.10 Programación en Labview del sistema de monitorización de la presión en el cilindro

De este modo se pueden registrar hasta 1800 valores de presión por cada giro del eje del cigüeñal (una señal cada $0,2^\circ$), lo que supone unas 150000 muestras por segundo a 5000 rpm. Tal frecuencia de muestreo es fundamental para el estudio de la detonación. Además, se desarrolló una rutina de cálculo en MATLAB R2019b para elaborar la gráfica del ciclo indicado medio para distintos avances al encendido, tal y como se ilustra en la Figura 11.

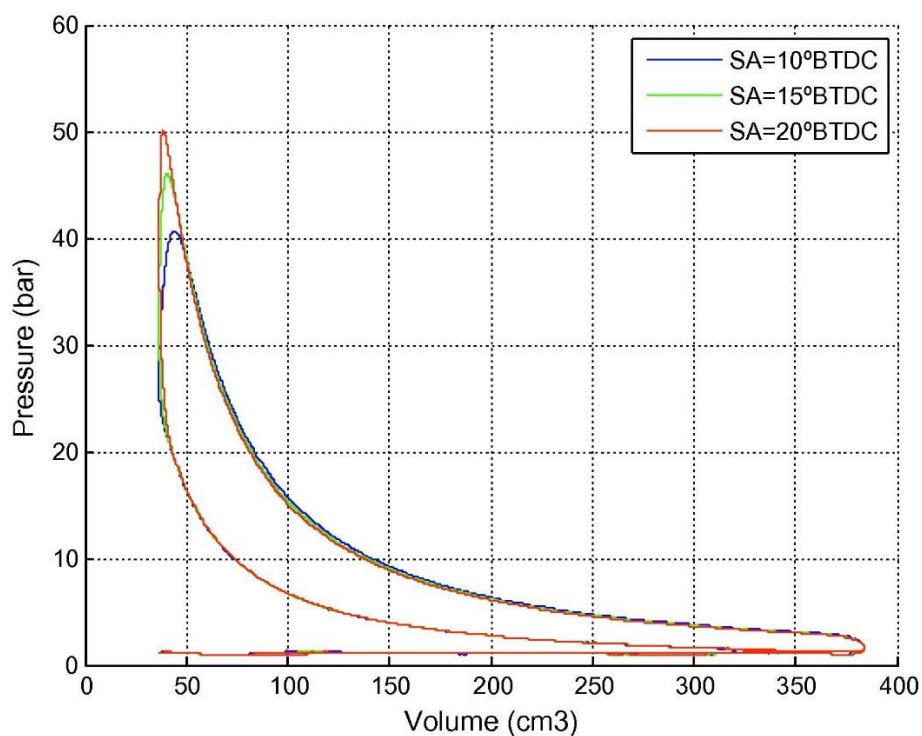


Fig.11 Ciclo medio indicado con SA 10 °, 15 ° y 20 ° a 2000 rpm, con H₂ puro y $\lambda=1,6$

Como resumen de lo expuesto, en la *Tabla 3* se relaciona el equipamiento utilizado junto con sus características más importantes.

Característica	Equipo	Precisión
Caudal combustible (LN/min)	Bronkhorst F-113AC-M50-AAD-33-V	$\pm (0,5 \% \text{ RD} + 0,1 \% \text{ FS})$;
NO _x (ppm)	HORIBA MEXA-720 NO _x	0-1000 ppm: ± 30 ppm
HC (ppm)	Bosch CompacTest	± 2 ppm
CO (%)	Bosch CompacTest	$\pm 0,001$ %
CO ₂ (%)	Bosch CompacTest	$\pm 0,1$ %
O ₂ (%)	Bosch CompacTest	$\pm 0,1$ %
Par (N·m)	AVL alpha 80	$\pm 0,2$ % FS
Revoluciones (rpm)	AVL alpha 80	± 1 rpm
Presión en el cilindro (bar)	Kistler 6117B	$\pm 0,6$ %
Amplificador (V)	Kistler 5073B	$\pm 0,5$ %
Giro cigüeñal (°)	Kistler 2613B1	$\pm 0,02$ °
Aceleración (g)	Bruel & Kjaer 4504	10 \pm 20 % mV/g
Sonido (Pa)	G.R.A.S. 40AC	12,5 mV/Pa

Tabla 3 Equipamiento utilizado

3.4 Sistema de suministro de gases combustibles

La instalación de gases combustibles destinada al funcionamiento del motor se ha diseñado conforme a los siguientes requisitos:

- Caudal de combustible suficiente para llevar el motor a su plena potencia.
- Nitrógeno como inerte para purgas en caso necesario.
- Capacidad de detección de fugas de gases combustibles mediante sensores.
- Sistema de control de la alimentación con purga automática.

La instalación de gases combustibles, llevada a cabo por Air Liquide, consiste en la alimentación de los gases combustibles y el nitrógeno mediante botellas de 50 litros a 200 bar, ubicadas fuera de la celda de motores. Desde allí, a través de los diferentes manorreductores y electroválvulas se canaliza el combustible gaseoso a través de tubos de acero inoxidable hasta la celda de motores.



Fig.12 Instalación de gases fuera de la celda

A la celda de motores llegan dos líneas de acero inoxidable: una línea es de alimentación y otra de purga. Las botellas alojan una presión inicial de unos 200 bar, que a través de los manorreductores principales se reduce a unos 10 bar. Tanto la línea combustible como la de nitrógeno tiene su propia electroválvula, y a su salida se unen en una línea común, a fin de poder suministrar combustible o purgar con nitrógeno, en función de la consigna del sistema de seguridad. A continuación, se dispone otro manorreductor que reduce la presión a unos 8 bar quedando estabilizada en ese valor. Existe otra electroválvula de purga, que permite barrer todo el combustible acumulado en la línea que va hasta el motor, descargando el contenido al exterior.

La línea de alimentación, una vez dentro de la celda de motores, lleva incorporados un caudalímetro de gases fijado a la pared, y al final de la línea, un manorreductor y una válvula antirretorno. Este manorreductor reduce la presión hasta la presión de trabajo del acumulador de gas combustible del motor, que es de unos 3 bar. La válvula antirretorno está presente por si accidentalmente se produjera un retorno de llama. En paralelo a la línea de alimentación del combustible va otra línea de retorno que va conectada al acumulador del motor. Esta línea de retorno permite la purga del sistema y va conectada a la electroválvula de purga. En la *Figura 5* se puede ver con más detalle un esquema de la instalación con todos sus elementos.

3.5 Electrolizador

El Grupo Hidrógeno de la UPNA dispone de un electrolizador alcalino H₂ IGen® 300/1/25 de 5 kW capaz de producir hasta 90 g/h de hidrógeno a una presión máxima de unos 20 bar. El hidrógeno producido que se usa para alimentar los motores se almacena a baja presión (máximo 10 bar) en un depósito de 880 litros y posteriormente se comprime en botellas a 200 bar (*Figura 13*). Para comprimir el hidrógeno se utiliza un compresor de buceo COLTRI MCH/EM por su simplicidad y, sobre todo, por su bajo coste.

El compresor COLTRI MCH/EM disponible no sólo está pensado para comprimir aire para buceo, sino también gases industriales como nitrógeno, helio, metano o gas natural. Dispone de cuatro etapas de compresión, entre las cuales se disponen unos intercambiadores de calor fabricados en acero inoxidable que refrigeran el gas comprimido en cada etapa. Para el almacenamiento del hidrógeno se tiene botellas de 18 litros de buceo, ya que están diseñadas para soportar ambientes muy agresivos como son los ambientes salinos, estando fabricadas en acero inoxidable austenítico de gran calidad; además, su coste no es elevado.



Fig.13 Electrolizador y depósito

3.6 Seguridad

La celda de ensayos de motores con la instalación de suministro de gases comprimidos dispone de dos sensores de detección de posibles fugas en el aire. Uno de ellos está situado justo encima del motor y el otro en una pared de la celda en una posición más elevada, cerca del caudalímetro de gas.

Para poder usar el combustible con seguridad se ha instalado un panel de control con un par de pulsadores, una luz indicadora y una seta de emergencia, que al pulsar realiza una purga con nitrógeno al exterior de toda la línea de combustible (*Figura 14*).

En la zona de manejo de la celda se dispone de un panel que muestra el contenido de combustible del ambiente en porcentaje con respecto al límite inferior de inflamabilidad (LEL, Lower Explosive Level) medido por los sensores. Es capaz de activar dos alarmas a diferentes porcentajes predefinidos de combustible. Al alcanzar el 22 % del LEL se activa la alarma como aviso y si se supera el 47 % del LEL automáticamente se cierra la electroválvula de combustible y se abre la de nitrógeno, purgando toda la línea de combustible al exterior.



Fig.14 Sensores de combustible (arriba), panel y mando de control (abajo)

Como medida de seguridad adicional se ha instalado un extractor en el techo de la sala que renueva por completo el aire de la sala cada minuto. También existe un extractor de humos que expulsa los gases calientes procedentes del escape del motor.

Cabe destacar como medida de seguridad suplementaria el uso de un sensor portátil Dräger arle-0168 y de utilización individual para la detección de CO, al introducirse dentro de la celda o en la manipulación de las botellas de combustible mientras se realizan los ensayos programados (*Figura 15*).



Fig.15 Sensor portátil CO

Por último, la celda dispone de un extintor de nieve carbónica y una máscara anti humos como precaución en caso de que se produjera un incendio.

4 PUBLICACIONES CIENTÍFICAS

4.1 Contenido y estructura de la memoria de tesis doctoral

Esta memoria de tesis se presenta de acuerdo con la normativa de doctorado de esta universidad (Acuerdo A3/2015 del Comité de Dirección de la Escuela de Doctorado de Navarra, de la Universidad Pública de Navarra adoptado en sesión celebrada el 11 de febrero de 2015 por el que se modifica la normativa para la elaboración de tesis como compendio de publicaciones) que permite la presentación de la tesis en un formato consistente en un compendio de artículos.

La investigación llevada a cabo ha dado lugar por el momento a tres publicaciones científicas (artículos) en las revistas *Applied Energy* (Factor de impacto 8,426), *Energy Conversion and Management* (Factor de impacto 7,181) e *International Journal of Hydrogen Energy* (Factor de impacto 4,084). Los factores de impacto indicados corresponden a los datos más recientes disponibles, es decir, la edición de 2018 del *Journal Citation Reports* de Clarivate Analytics.

El artículo publicado en *International Journal of Hydrogen Energy*, del que son autores R. Ortiz-Imedio, A. Ortiz, J.C. Urroz, P.M. Diéguez, D. Gorri, L.M. Gandía e I. Ortiz [26], se ha llevado a cabo en colaboración con investigadores del Departamento de Ingeniería Química y Biomolecular de la Universidad de Cantabria. El trabajo se ha financiado a través del proyecto HYLANTIC: Atlantic Network for Renewable Generation and Supply of Hydrogen to promote High Energy Efficiency (EAPA_204/2016). Dicho artículo no es utilizado en esta tesis doctoral en formato por compendio de publicaciones por ser de titularidad compartida, pero es importante señalar que se enmarca dentro de los objetivos generales de la misma.

Los artículos incluidos en esta tesis por compendio son dos. El primer artículo, por Diéguez et al. [27] publicado en la revista *Applied Energy* tiene por título: “*Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures*”. Ver *Anexo I*.

Mi contribución personal a este trabajo consistió en:

- Revisión bibliográfica y participación en la planificación del programa experimental
- Puesta a punto y operación de la celda de ensayos y líneas de suministro de gases
- Generación de mapas de inyección y encendido para cada mezcla ensayada y para cada relación aire/combustible, optimizando cada punto de ensayo

- Recogida de datos de baja frecuencia como el consumo de combustible, prestaciones del motor, así como las emisiones de gases escape
- Recogida de datos de alta frecuencia como la presión en el interior de un cilindro y análisis del proceso de combustión
- Análisis e interpretación de los resultados
- Elaboración de conclusiones
- Participación en la redacción de la publicación y elaboración de gráficas y tablas

El segundo artículo, por Diéguez et al. [28] tiene por título: “*Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block- engine vibration, and acoustic measurements*”. Ver Anexo II.

Mi contribución personal a este trabajo fue:

- Revisión bibliográfica y participación en la planificación de los ensayos a realizar
- Puesta a punto y operación de la celda de ensayos y líneas de suministro de gases
- Generación de mapas de inyección y encendido para cada mezcla ensayada y para cada relación aire/combustible, optimizando cada punto de ensayo
- Modificación de la relación aire/combustible para la generación de detonación de manera controlada
- Recogida de datos de baja frecuencia, régimen del motor, relación aire/combustible, temperatura y presión del colector de admisión, ancho de pulso de inyección, así como las emisiones de NOx
- Recogida de datos de alta frecuencia como la presión en el cilindro, acelerómetro y señales de micrófono
- Sincronización de registros
- Análisis e interpretación de los resultados
- Elaboración de conclusiones
- Participación en la redacción de la publicación y elaboración de gráficas y tablas

4.2 Indicios de calidad

Los dos artículos presentados se han publicado en las revistas *Applied Energy* y *Energy Conversion and Management*, y su calidad se analiza a continuación.

Entre los indicios de calidad más frecuentemente considerados se encuentran el factor de impacto de la revista y el número de citas que recibe un artículo dado.

El factor de impacto consiste en el cociente entre el número de veces que los artículos publicados en los dos últimos años son citados y el número de artículos publicados en la revista en ese mismo periodo. Por otro lado, se tiene el índice de impacto para cinco años que difiere con el de dos años en el intervalo de tiempo empleado para el cálculo. También se analizará el orden que ocupa cada revista con respecto a las que le acompañan en cada una de las categorías en las que se encuentra indexada.

4.2.1 Applied Energy

En la siguiente *Figura 16* se presenta la evolución del factor de impacto (a 2 años) de la revista *Applied Energy* [29] durante los años que el artículo lleva publicados. En el 2018 el factor impacto fue de 8,426. Se observa una tendencia creciente continuada desde el año 2014 para el que el factor de impacto alcanzó 5,613.

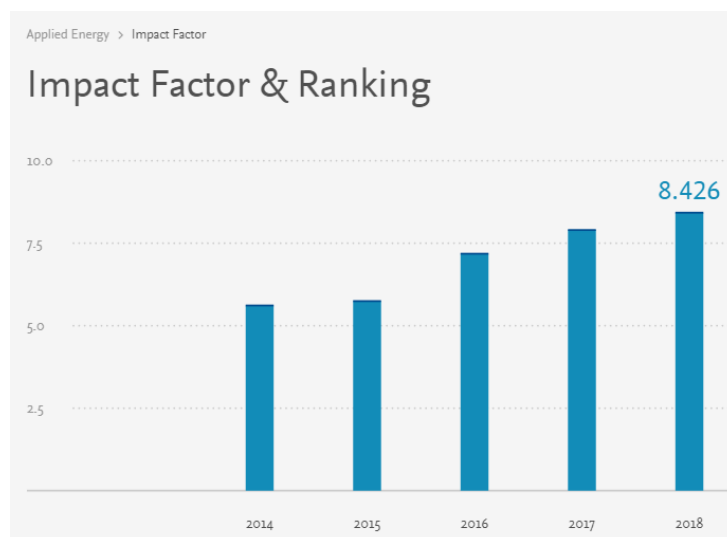


Fig.16 Índice de impacto 2 años Applied Energy

En la *Figura 17* se presenta la tendencia del factor de impacto (a 5 años) de la revista *Applied Energy* [30] durante los años que el artículo lleva publicados. En el 2018 el factor impacto fue de 8,558. En este caso el crecimiento es más suave, a partir de un valor de 6,330 en 2014.

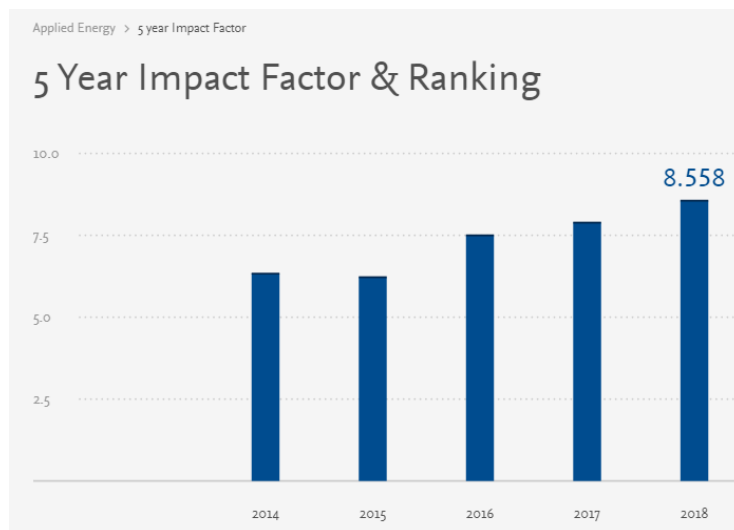


Fig.17 Índice de impacto 5 años Applied Energy

En la *Figura 18* se muestra el orden de la revista *Applied Energy* en las categorías Energy&Fuels y Engineering&Chemical del *Journal Citation Reports* de Clarivate Analytics. [29]. Como se puede apreciar en los últimos 5 años se mantiene en el 1^{er} cuartil en ambas categorías. Es más, durante el periodo considerado, se encuentra en el primer decil de hasta 138 revistas indexadas en la categoría Engineering&Chemical. Dentro de la categoría Energy&Fuel, *Applied Energy* se encuentra desde 2016 dentro del primer decil, implicando hasta 103 revistas en 2018.

METRICS

YEAR	I.F.	ENERGY & FUELS	ENGINEERING, CHEMICAL
2018	8.426	8/103	5/138
2017		8/97	4/137
2016		6/92	4/135
2015		10/88	6/135
2014		9/88	6/134

Fig.18 Orden áreas temáticas Applied Energy

Por lo que se refiere al número de citas recibidas hasta el momento (4 de junio de 2020), asciende a 41 según la base de datos Scopus, y a 38 según la base de datos Web of Science.

4.2.2 Energy Conversion and Management

En la *Figura 19* se presenta la evolución del factor de impacto (a 2 años) de la revista *Energy Conversion and Management* [31] desde 2014. En el 2018 el factor impacto fue de 7,181. Se

observa una tendencia creciente notable y sostenida desde el año 2014 para el que el factor de impacto alcanzó 4,380.

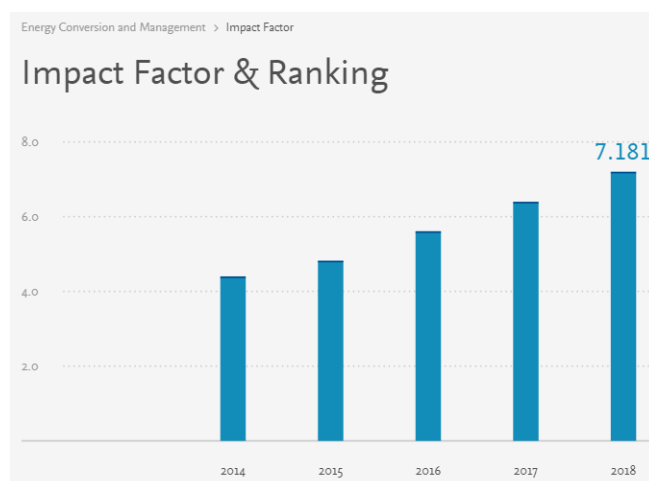


Fig.19 Índice de impacto 2 años Energy Conversion and Management

En la Figura 20 se presenta la tendencia del factor de impacto (a 5 años) de la revista *Energy Conversion and Management* [32] desde 2014. En el 2018 el factor impacto fue de 6,722. En este caso el crecimiento es más suave, a partir de un valor de 4,512 en 2014.

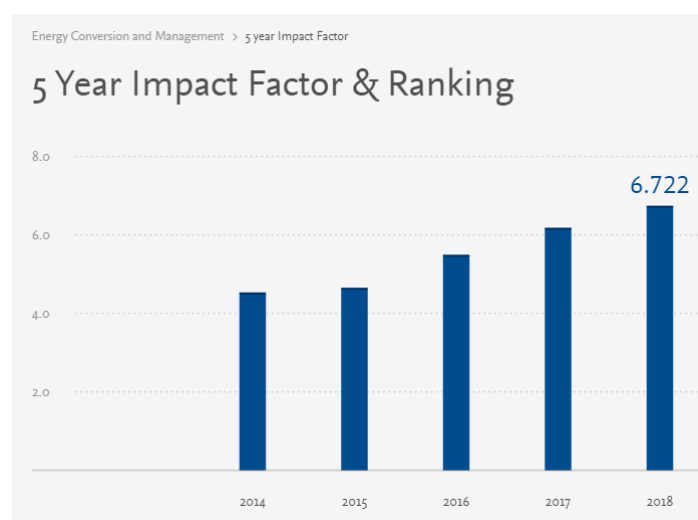


Fig.20 Índice de impacto 5 años Energy Conversion and Management

En la Figura 21 se muestra el orden de la revista *Energy Conversion and Management* en las categorías Energy&Fuels, Mechanics y Thermodynamics del *Journal Citation Reports* de Clarivate Analytics [31]. Como se puede observar la revista se encuentra dentro del primer cuartil de la categoría Energy&Fuels durante los últimos 5 años de los que se dispone de registro. Son muy destacadas las posiciones, 3ª o 4ª y 2ª o 3ª dentro de las categorías Mechanics y Thermodynamics, respectivamente.

METRICS

YEAR	I.F.	ENERGY & FUELS	MECHANICS	PHYSICS, NUCLEAR	THERMODYNAMICS
2018	7.181	12/103	3/134	-	2/60
2017		11/97	3/134	-	2/59
2016		10/92	4/133	0/20	2/58
2015		12/88	3/135	3/21	2/57
2014		14/88	3/137	3/21	3/55

Fig.21 Orden áreas temáticas Energy Conversion and Management

Por lo que se refiere al número de citas recibidas hasta el momento (4 de junio de 2020), asciende a 5 según la base de datos Scopus, y a 4 según la base de datos Web of Science.

ARTÍCULO 1:

“Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures”. *Applied Energy. Volume 113, January 2014, Pages 1068-1076*

Por: P.M. Diéguez, J.C. Urroz, S. Marcelino-Sádaba, A. Pérez-Ezcurdia, M. Benito-Amurrio, D. Sáinz, L.M. Gandía.

<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.08.063>

ARTÍCULO 2:

“Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block-engine vibration, and acoustic measurements”. *Energy Conversion and Management. Volume 172, 15 September 2018, Pages 67-80*

Por: P.M. Diéguez, J.C. Urroz, D. Sáinz, J. Machin, M. Arana, L.M. Gandía.

<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.06.115>

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

5 RESULTADOS

5.1 Introducción

A continuación, se describen los dos artículos que constituyen la presente memoria de tesis doctoral.

En el primero de ellos se analizan las prestaciones del motor, los correspondientes mapas de inyección y encendido, así como las emisiones contaminantes producidas al emplear como combustible diferentes mezclas hidrógeno-metano.

En el segundo se analizan los fenómenos de combustión anómala mediante ensayos en el banco del motor. Es un estudio empírico que pretende analizar los límites de operación del motor en ausencia de detonación o retroceso de llama. Dada la importancia que supone la detección temprana de estos fenómenos se ha desarrollado un método de detección basado en el sonido producido por el motor. Este método se ha comparado con los resultados de la detección a través del registro de la presión en el interior del cilindro, y de la vibración del bloque motor. Asimismo, un estudio realizado mediante CFD ha permitido plantear una interpretación de los fenómenos de retroceso de llama registrados lo que supone aportar una nueva guía de diseño de los motores para tratar de reducir la incidencia de este fenómeno.

5.2 Estudio experimental de las prestaciones y emisiones de un MEP comercial, para funcionar con H₂, CH₄ y sus mezclas

“Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures”. *Applied Energy. Volume 113, January 2014, Pages 1068-1076.*

5.2.1 Introducción

Las composiciones de los combustibles gaseosos utilizados en este estudio se incluyen en la *Tabla 4*. Las propiedades como combustibles de los componentes puros se encuentran en la *Tabla 1*. La posibilidad de una preparación en nuestro laboratorio de las mezclas combustibles fue tomada en consideración. Sin embargo, la variabilidad en la composición química del gas natural de la red de suministro unida a la dificultad de un preciso análisis de la misma llevó a la decisión de encargar la preparación de las mezclas a un proveedor.

Las mezclas fueron suministradas por la empresa Air Liquide España. Se decidió ensayar diversas mezclas, en concreto, de las siguientes composiciones volumétricas: 5 % CH₄ y 95 % H₂, 10 % CH₄ y 90 % H₂, 20 % CH₄ y 80 % H₂ y finalmente 80 % CH₄ y 20 % H₂. Se recogieron también datos para 100 % H₂ y para 100 % CH₄, a fin de disponer de los componentes puros como referencias.

Se escogieron varias mezclas pobres, y sólo una rica de CH₄ en volumen, ya que la gran diferencia entre las densidades de ambos combustibles (0,7174 g/l CH₄ frente a 0,0838 g/l H₂, en condiciones normales) hace que, por ejemplo, una concentración de tan solo 5 % en volumen de CH₄ suponga hasta un 29,52 % en masa (*Tabla 4*).

Porcentaje volumétrico		Porcentaje másico	
CH ₄	H ₂	CH ₄	H ₂
0	100	0,00	100,00
5	95	29,52	70,48
10	90	46,92	53,08
20	80	66,54	33,46
80	20	96,95	3,05
100	0	100,00	0,00

Tabla 4 Composiciones de las mezclas combustibles consideradas

5.2.2 Motor, equipamiento y métodos experimentales

Las características del motor y el equipamiento utilizados se ha descrito en detalle en el capítulo 3. En el presente apartado se especifican los ensayos realizados.

Las relaciones aire/combustible (λ) consideradas para las diversas mezclas han tenido que ser diferentes debido al también diferente intervalo de inflamabilidad de las mismas. Se han realizado ensayos a diferentes regímenes del motor comprendidos entre las 1800 rpm y 5000 rpm. Se ha encontrado que cuanto mayor concentración de metano (η), la relación aire/combustible debe aproximarse a 1, es decir, al dosado estequiométrico, para que el motor pudiese proporcionar unas prestaciones aceptables, junto con una combustión estable, libre de fenómenos anómalos y emisiones contaminantes contenidas.

En la *Tabla 5* se presenta la composición de las mezclas, y los valores de λ y grados de carga ensayados.

Concentración de CH ₄ (%)	Lambda (λ)	Apertura de mariposa (%)
0	2,5	100
	1,6	100
5	2,5	100
	2	50
		100
	1,6	50
10		100
	2	50
		100
	1,6	50
20		100
	2	50
		100
	1,6	50
80	1	50
		100
	1,4	50
		100
100	1	50
	1,2	50

Tabla 5 Parámetros de las mezclas combustibles ensayadas

Se realizaron un total de 606 ensayos, cifra que da una idea de la cantidad de datos tratados. En este capítulo se presentan los más representativos. Como variables independientes se consideraron: fracción volumétrica de metano (η), régimen del motor (rpm), relación aire/combustible (λ) y grado de carga (%). Como variables dependientes: avance al encendido óptimo ($^{\circ}$ BTDC), par motor efectivo (en inglés *Brake Torque*), rendimiento efectivo (en inglés *Thermal Efficiency*) y emisiones contaminantes (óxidos de nitrógeno, hidrocarburos no quemados, monóxido de carbono y dióxido de carbono). Para cada ensayo se han realizado cien ciclos completos y se han obtenido los valores medios de los mismos, siendo estos valores medios los representativos del ensayo.

Para cada mezcla hidrógeno-metano y valor de λ considerados, se realizaron ensayos a diferentes regímenes y grados de carga (50 % y 100 %). Asimismo, se han ensayado varios avances al encendido en busca del máximo rendimiento efectivo y se han tomado datos de emisiones contaminantes con el fin de establecer el punto de funcionamiento óptimo correspondiente a un compromiso entre la máxima potencia, el mínimo consumo y las mínimas emisiones de contaminantes a la atmósfera.

Los datos que proporciona el banco de ensayos de interés para el presente estudio son:

- Par motor, régimen motor, relación aire/combustible, caudal de combustible, avance al encendido, presión y temperatura en el colector de admisión.
- Presión absoluta en la cámara de combustión del primer cilindro en función del ángulo de cigüeñal, durante 200 giros. Se toman medidas cada $0,2^{\circ}$ de ángulo de giro.
- Emisiones: NO_x, HC, CO, y CO₂. Hay que tener en cuenta que se trata de mediciones sin catalizador.

En este capítulo se presentan exclusivamente los ensayos a plena carga (en inglés *full load*).

5.2.3 Resultados

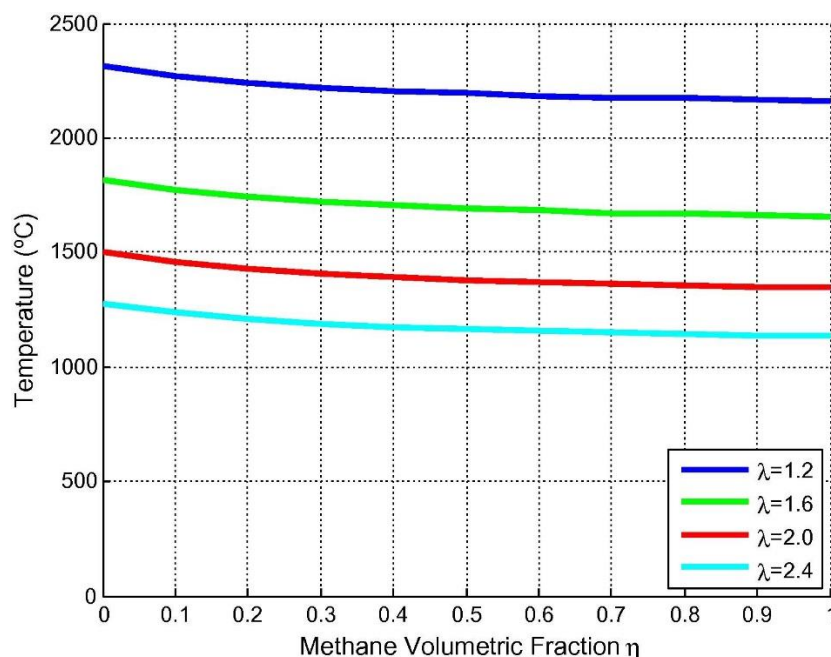


Fig.22 Evolución de la temperatura adiabática de la llama en función de λ y η

La Figura 22 muestra la evolución de la temperatura adiabática de llama como una función de la fracción molar de metano (η) y la relación aire/combustible (λ) como resultado de la expresión Ec.1, siendo $T_{ref} = 298$ K y tomando los valores de las entalpías de formación h_f^0 y los coeficientes de los calores específicos α descritos en la literatura [33]. Como puede verse, la temperatura de llama adiabática depende en gran medida de la relación aire/combustible (λ). La temperatura disminuye a medida que aumenta la relación aire/combustible debido al empobrecimiento en combustible de la mezcla que se produce. En cuanto al efecto de la composición del combustible, la temperatura adiabática de la llama disminuye conforme aumenta la fracción molar o volumétrica de metano, en particular a bajos contenidos de metano. Aunque el poder calorífico superior (HHV) del metano en base molar (888 kJ/mol) es aproximadamente tres veces mayor que el de hidrógeno (283,6 kJ/mol), este hecho se ve compensado porque la combustión de 1 mol de metano requiere cuatro veces más oxígeno, o aire, que la de 1 mol de hidrógeno, con el consiguiente aumento de la capacidad térmica del sistema al aumentar η .

$$T = T_{ref} + \frac{\eta h_{f,CH_4}^0 - [\eta h_{f,CO_2}^0 + (1+\eta)h_{f,H_2O}^0]}{R \left[\eta \alpha_{CO_2} + (1+\eta) \alpha_{H_2O} + \frac{\lambda-1}{2} (1+3\eta) \alpha_{O_2} + \frac{\lambda}{2} \frac{79}{21} (1+3\eta) \alpha_{N_2} \right]}$$

Ec.1 Temperatura adiabática de la llama teórica (K).

En la práctica, las temperaturas de combustión serán obviamente menores que los valores de la *Figura 22* debido principalmente a la potencia suministrada por el motor y las pérdidas de calor. Por otro lado, la temperatura y la presión en el cilindro dependen en gran medida del avance al encendido. Como se mencionó en la sección 5.2.2, en este trabajo, se escogió el avance al encendido óptimo conducente al mayor rendimiento térmico efectivo.

5.2.4 Prestaciones del motor

El par motor efectivo está obviamente relacionado con el proceso de combustión en el cilindro, que a su vez depende del régimen del motor, carga, avance al encendido y la naturaleza del combustible. Se muestra un ejemplo representativo en la *Figura 23*, donde se muestra el par motor efectivo como una función de λ y de la fracción volumétrica de metano en el combustible a plena carga, 3400 rpm y avance al encendido óptimo.

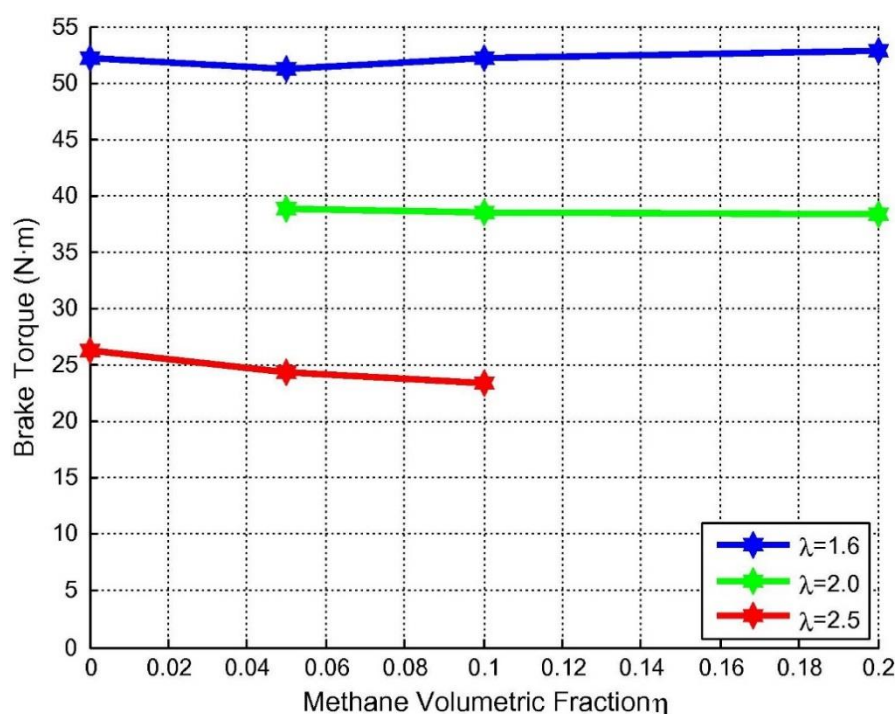


Fig.23 Par motor efectivo en función de λ y η , WOT, 3400 rpm y SA óptimo

Se observa que el par motor cambia solo muy ligeramente con la composición del combustible, mientras que disminuye acusadamente al aumentar la proporción aire/combustible. Este comportamiento está relacionado con la temperatura de combustión; de hecho, la evolución es similar a la de la temperatura adiabática de la llama mostrada en la *Figura 22*. Dados los riesgos de retroceso de llama y detonación, no es posible operar con hidrógeno a bajos valores de λ . En cambio, no hay ningún problema en la combustión del metano en condiciones estequiométricas ($\lambda = 1$). Por lo tanto, desde el punto de vista del rendimiento del motor, la adición de metano al hidrógeno tiene el efecto positivo de poder

trabajar con mezclas más ricas, lo que produce un aumento del par motor efectivo. En contrapartida también aumentarían las emisiones contaminantes, como es obvio.

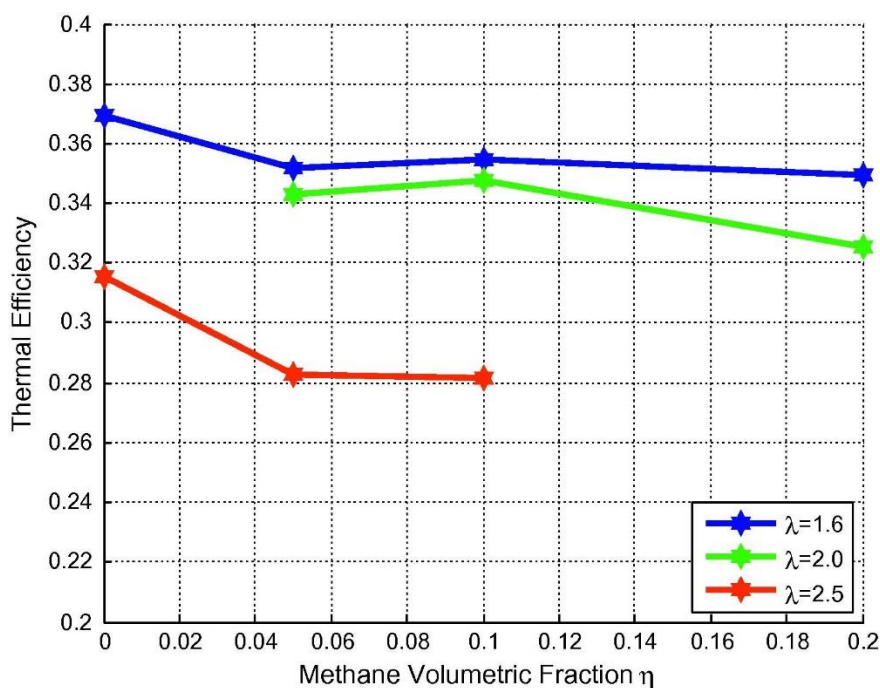


Fig.24 Rendimiento térmico efectivo en función de λ y η , WOT, 4200 rpm y SA óptimo

En cuanto a la presión media efectiva (BMEP), sus valores en las condiciones de los resultados que se muestran en la *Figura 24* esencialmente dependen de la relación aire/combustible (λ). Como era de esperar, la BMEP disminuye a medida que λ aumenta, en este caso de 4,7 bar para $\lambda = 1,6$, a 3,5 bar para $\lambda = 2,0$ y finalmente, alrededor de 2,3 bar para $\lambda = 2,5$.

La *Figura 24* muestra los resultados correspondientes al rendimiento térmico efectivo, es decir, la relación entre la potencia efectiva y la energía por unidad de tiempo aportada por el combustible. Los ensayos se realizaron a plena carga, avance al encendido óptimo y 4200 rpm. Se puede observar que el rendimiento cae a 34-35 % para valores de λ que crecen de 1,6 a 2,0 y hasta 28-30 % cuando la relación aire/combustible aumenta adicionalmente hasta 2,5. Se obtuvieron resultados similares para otros regímenes del motor. Los resultados muestran una tendencia hacia un menor rendimiento con el aumento de la proporción del metano en la mezcla. De hecho, como se ha explicado antes, la temperatura de combustión disminuye a medida que aumenta la proporción del metano en la mezcla. Como consecuencia, los mayores rendimientos se obtienen cuando se utiliza hidrógeno puro. Del mismo modo, la temperatura de combustión disminuye a medida que la mezcla de combustible se empobrece (*Figura 22*) lo que explica la disminución del rendimiento térmico efectivo conforme λ aumenta. La combustión con hidrógeno puro provoca velocidades del frente de llama mayores resultando una combustión más rápida y cercana al punto muerto superior. Esta circunstancia se

corresponde con una combustión más próxima a isocora, lo que proporciona un mejor rendimiento.

5.2.5 Emisiones contaminantes

5.2.5.1 Óxidos de nitrógeno (NOx)

Las emisiones de NOx ($[NO_x]$, g/kWh) han sido calculadas a partir de la concentración de óxidos de nitrógeno (C_{NO_x} en ppm) medida en los gases de escape del motor de acuerdo con la siguiente expresión (Ec.2):

$$[NO_x] = \frac{60 \cdot 10^{-6} \cdot \dot{V}_f \cdot N_e \cdot M_{NO_x} \cdot C_{NO_x}}{22.4 \cdot P}$$

Ec.2 Concentración específica de NOx (g/kWh)

donde \dot{V}_f (LN/min) es el caudal de combustible, medido en condiciones normales. N_e son los moles de los gases de escape formados a partir de 1 mol de combustible asumiendo una combustión completa (que depende de η y λ). P (kW) es la potencia efectiva. M_{NO_x} (g/mol) es el peso molecular de NOx que se ha tomado como 30 g/mol [34].

La velocidad de las reacciones químicas que producen óxidos de nitrógeno de acuerdo con el modelo Zeldovitch se ve favorecida por el aumento de la temperatura y la concentración de los reactivos (N_2 y O_2). Obviamente, las mezclas ricas en combustible (valores bajos de λ) favorecerán la formación de NOx debido al efecto dominante de la temperatura de combustión. Sin embargo, es posible controlar la presión máxima y, por consiguiente, la temperatura máxima en los cilindros mediante el ajuste del avance al encendido, (SA).

Avance encendido (° BTDC)	\dot{V}_f (LN/min)	Potencia efectiva (kW)	Presión máxima (bar)	C_{NO_x} (ppm)
10	155,4	10,6	40,7	113
15	155,4	10,7	46,0	159
20	155,6	10,6	50,1	214

Tabla 6 Influencia del avance al encendido en la presión máxima y concentración de NOx, utilizando H₂ puro, con $\lambda=1,6$, WOT y 2000 rpm

En nuestro caso, los resultados incluidos en la *Tabla 6* corresponden al empleo de hidrógeno puro con ($\lambda = 1,6$), plena carga y 2.000 rpm. Como se puede ver, con el aumento del avance al encendido y manteniendo constante el consumo de combustible, tanto la presión máxima como la concentración de NOx aumentan mientras que la potencia efectiva se mantiene prácticamente sin cambios. Reducir el avance al encendido de 20 a 10 ° BTDC (antes del punto muerto superior) conduce a una disminución de la concentración de NOx en el escape de 214 a 113 ppm.

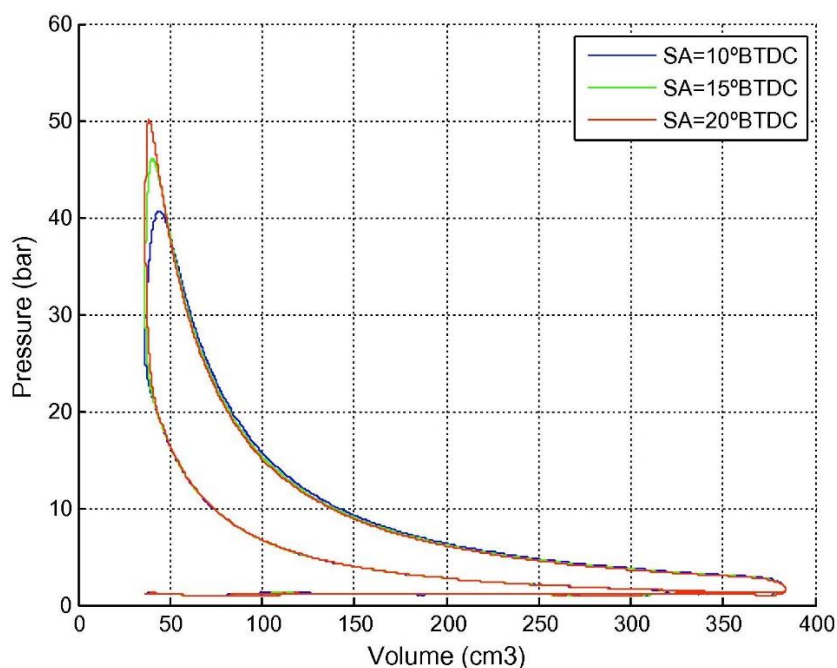


Fig.25 Diagramas Presión-Volumen (Ciclos indicados) según las condiciones de la *Tabla 5*

La *Figura 25* muestra los ciclos indicados, es decir, los diagramas de presión-volumen desarrollados bajo las condiciones de funcionamiento de la *Tabla 6*. Estos resultados concuerdan con [35] al encontrar que la presión máxima del cilindro se incrementa a medida que aumenta el avance al encendido.

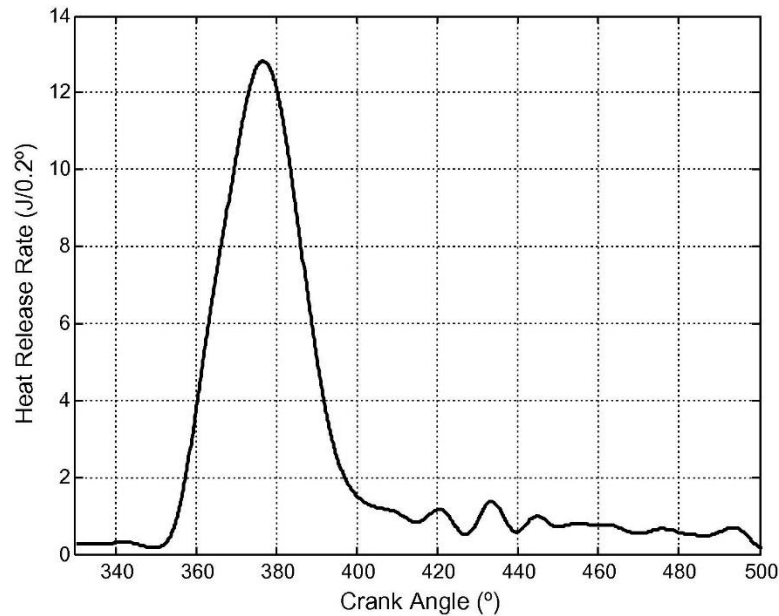


Fig.26 Velocidad de calor liberado frente a CA para las condiciones de la Tabla 5 y 10 ° BTCD

La Figura 26, muestra el diagrama de la tasa de calor liberado en función del ángulo de giro del cigüeñal correspondiente al ciclo termodinámico desarrollado bajo las condiciones de funcionamiento incluidos en la Tabla 6 con un avance al encendido de 10 ° BTCD. Como puede observarse, el salto de chispa se produce al final de la carrera de compresión, con un ángulo del cigüeñal de 350 ° para un avance al encendido de 10 ° BTDC. También puede apreciarse que la tasa de liberación de calor máximo se alcanza en la fase inicial de la carrera de trabajo, a 375 ° en este caso. Después, la velocidad de liberación de calor comienza a disminuir con la combustión del combustible restante hasta un ángulo de cigüeñal de aproximadamente 415 °.

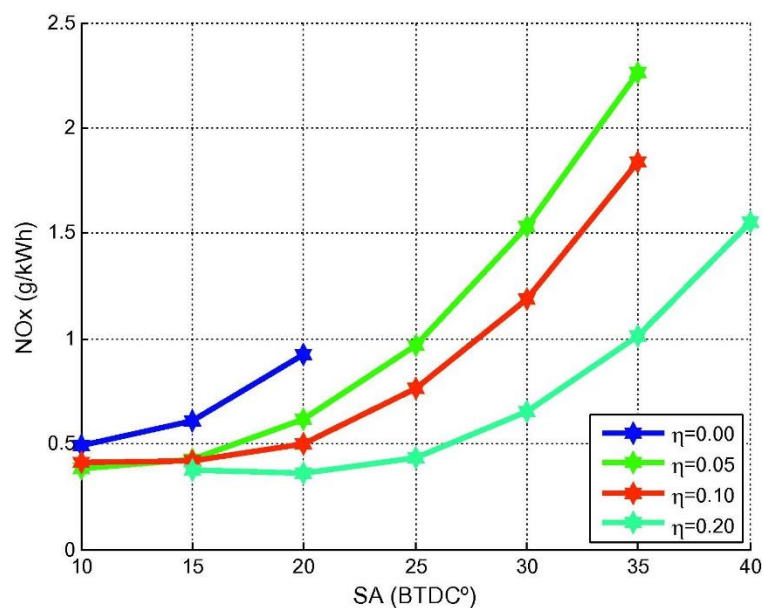


Fig.27 Emisiones de NOx (g/kWh) frente η y SA para, $\lambda=1,6$, WOT y 3400 rpm

La *Figura 27* muestra la evolución de las emisiones específicas de NO_x (g/kWh) como una función del avance al encendido y la fracción molar de metano (η) en la mezcla, a plena carga, $\lambda = 1,6$ y 3400 rpm. Como se explicó anteriormente, las emisiones de NO_x específicas aumentan con el avance al encendido, sin embargo, disminuyen fuertemente con el contenido de metano debido a la disminución de la temperatura de combustión. Es éste un claro efecto positivo de la adición de metano para la combustión del hidrógeno.

Cuando se expresan como concentraciones volumétricas C_{NO_x} , los valores correspondientes a un avance al encendido de 10 ° BTDC disminuyen de 93 ppm con hidrógeno puro a 62 ppm para una mezcla con $\eta = 0,2$. Sin embargo, debido a la disminución de la velocidad del frente de llama en presencia de metano en comparación con hidrógeno puro, la combustión con metano es más lenta, y el avance al encendido debe de aumentar con el contenido de metano para compensar este efecto y mantener un alto rendimiento del motor.

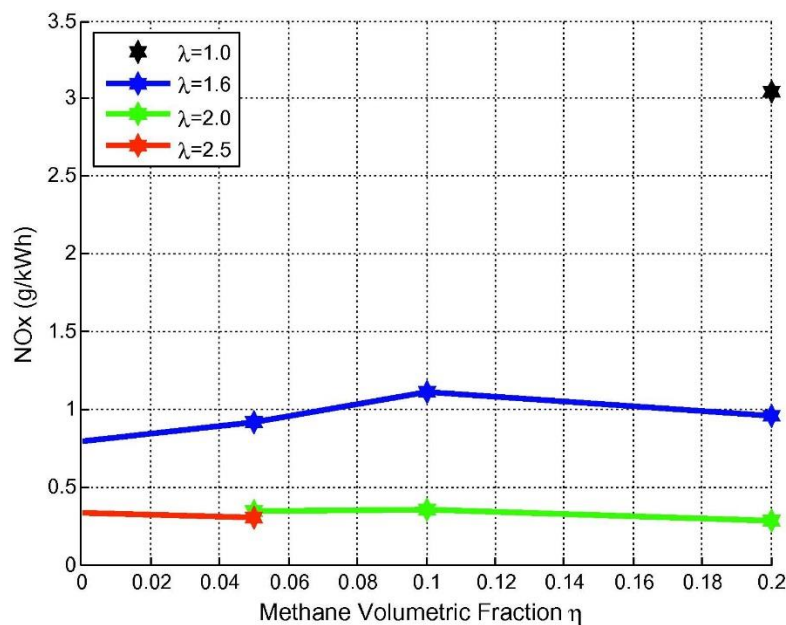


Fig.28 Emisiones de NO_x (g/kWh) frente λ y η para WOT, 2000 rpm y SA óptimo

De hecho, como se muestra en la *Figura 28* las emisiones NO_x (g/kWh), con el avance óptimo dependen principalmente de la relación aire/combustible (λ), viéndose poco afectadas por la composición del combustible (η) dentro de los límites de λ considerados en este estudio. Sólo la mezcla de combustible con el más alto contenido de metano ($\eta = 0,2$) pudo quemarse en condiciones estequiométricas ($\lambda = 1$). El resto de las mezclas combustibles, incluido el hidrógeno puro, presentaron una tendencia a la detonación que impidió utilizar valores de λ menores que 1,6. Las emisiones de NO_x en condiciones estequiométricas son muy altas, llegando hasta los 3,05 g/kWh a pesar del poco oxígeno disponible. Al emplear $\lambda = 1,6$ las emisiones se redujeron a cerca de 1 g/kWh y a 0,3-0,4 g/kWh para λ 2-2,5. También se ha

observado que las emisiones de NOx aumentan con el incremento del régimen del motor. Por ejemplo, con $\lambda = 2$, a plena carga, $\eta = 0,2$ y avance al encendido óptimo, las emisiones aumentan de 0,32 g/kWh a 0,39 g/kWh y 0,47 g/kWh cuando el régimen del motor aumenta de 3400 a 4200 y 5000 rpm, respectivamente. A medida que aumenta el régimen del motor el efecto de la turbulencia dentro del cilindro se intensifica y ello permite un mejor mezclado, temperaturas de combustión más altas y, como consecuencia, mayores emisiones de NOx. Sin embargo, la influencia del régimen del motor en las emisiones de óxidos de nitrógeno es mucho menos importante que la de la relación de aire/combustible o el avance al encendido.

5.2.5.2 Monóxido de carbono (CO)

La evolución de las emisiones de CO en función del avance al encendido y de la composición del combustible para $\lambda = 1,6$ se muestra en la *Figura 29*. En la gráfica, las líneas continuas corresponden a un régimen del motor de 4200 rpm, mientras que las líneas de trazos y puntos corresponden a una velocidad menor, 3400 rpm.

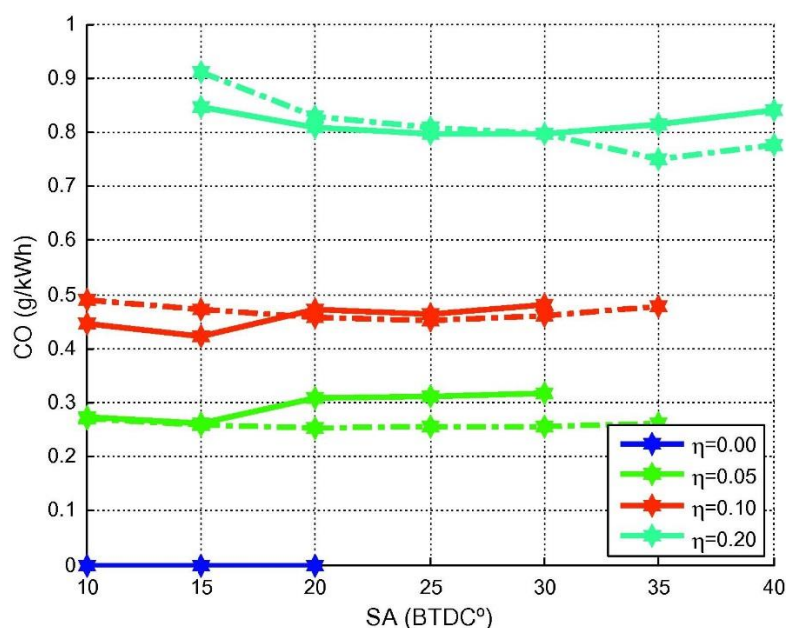


Fig.29 Emisiones de CO (g/kWh) frente SA y η a WOT, $\lambda=1,6$, línea continua 4200 rpm y trazos 3400 rpm

Obviamente, el principal factor es la composición de combustible. Al aumentar el contenido de metano aumenta la concentración de carbono y, por consiguiente, la de CO. Se puede ver un incremento de las emisiones desde virtualmente 0 con H₂ puro a aproximadamente 0,3, 0,45 y 0,8 g/kWh para las mezclas de combustible que contienen fracciones volumétricas de metano de 0,05, 0,1 y 0,2, respectivamente. Por otro lado, la influencia del avance al encendido y el régimen del motor en las emisiones de este contaminante es poco relevante.

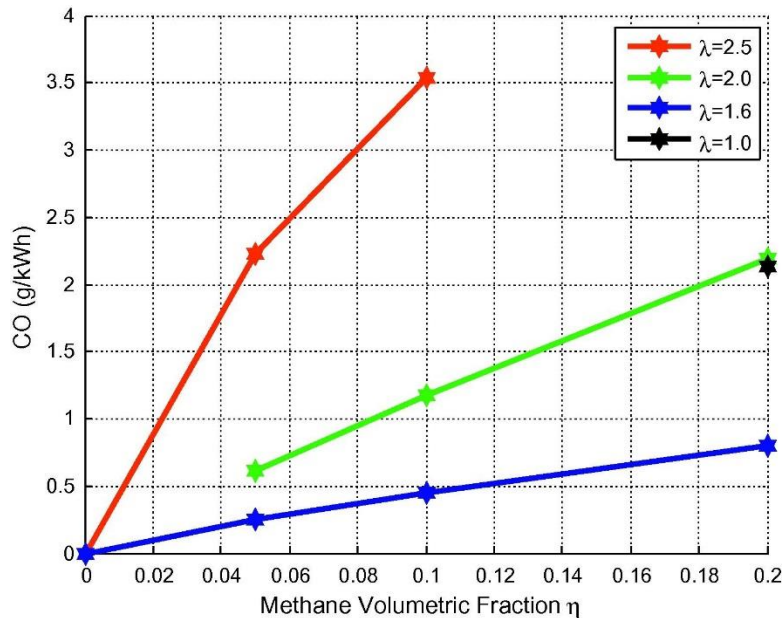


Fig.30 Emisiones de CO (g/kWh) frente λ y η a WOT, 3400 rpm y SA óptimo

En cuanto al efecto de la relación aire/combustible, la *Figura 30* muestra los resultados obtenidos a plena carga, avance al encendido óptimo y el régimen del motor de 3400 rpm. Se puede observar que las emisiones de CO aumentan fuertemente con λ . Por ejemplo, para $\eta = 0,1$, las emisiones de CO a $\lambda = 2,5$ (3,6 g/kWh) son casi 7 veces mayores que para $\lambda = 1,6$ (0,5 g/kWh). Una posible explicación de este resultado inesperado es que, a pesar del menor contenido de carbono con mezclas más pobres (mayor λ), también es proporcional la reducción de potencia, lo que conduce a un aumento de las emisiones específicas CO (g/kWh). Esta explicación está de acuerdo con [36], trabajo en el que se encontró una tendencia similar de las emisiones específicas de CO₂ de un motor bicilíndrico de aspiración natural alimentado con mezclas de hidrógeno y metano a plena carga.

Las emisiones específicas de CO, para $\eta = 0,20$ en condiciones estequiométricas y con $\lambda = 2$ son casi coincidentes (unos 2,2 g/kWh) y unas 3 veces mayores que para $\lambda = 1,6$ (0,8 g/kWh). Esto sugiere que acercarse a las condiciones estequiométricas tampoco permite alcanzar una formación mínima de CO, probablemente debido a una falta de disponibilidad de oxígeno que dificulta la evolución del CO a CO₂. Por esta razón, las emisiones de CO son considerablemente menores para un valor intermedio de λ (1,6).

5.2.5.3 Hidrocarburos sin quemar (HC)

Las emisiones específicas de HC se muestran en la *Figura 31* en función del avance al encendido, la composición del combustible y el régimen del motor para $\lambda = 1,6$. Cabe asumir que las emisiones de HC corresponden a metano no quemado, así que, como era de esperar,

las emisiones aumentan con el contenido de metano del combustible, aunque las emisiones son bajas en comparación con las de CO. Las emisiones para los combustibles con $\eta = 0,05$ y $0,10$ son similares, alrededor de $0,020$ y $0,025$ g/kWh, respectivamente, y aumentan significativamente con $\eta = 0,2$. Además, para esta composición de combustible la influencia del régimen del motor en las emisiones de HC se hace evidente. De hecho, las emisiones aumentan de $0,035$ g/kWh a 4200 rpm a $0,06-0,07$ g/kWh al descender el régimen a 1800 rpm.

El efecto positivo del aumento del régimen en la reducción de las emisiones de HC puede ser explicado por una mejora del proceso de combustión debido a la mayor turbulencia en los cilindros que favorece la mezcla de los reactivos. La influencia del avance al encendido en las emisiones de HC es muy leve. Se puede apreciar una ligera tendencia hacia un aumento en las emisiones de hidrocarburos a medida que disminuye el avance al encendido.

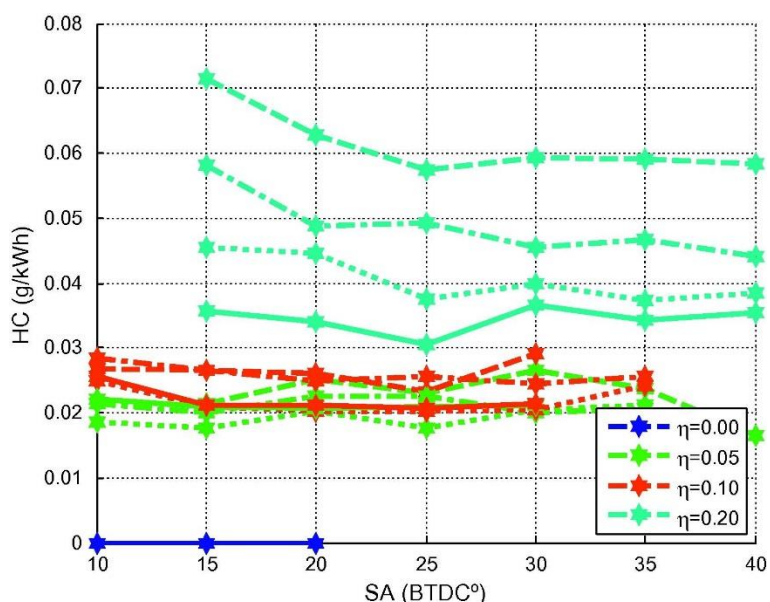


Fig.31 Emisiones de HC (g/kWh) frente SA y η a WOT, $\lambda=1,6$. Las líneas continuas, de puntos, trazos-puntos y de trazos corresponden a 4200 , 3400 , 2600 y 1800 rpm, respectivamente

En cuanto al efecto de la relación de aire/combustible, la Figura 32 muestra los resultados obtenidos a plena carga, avance óptimo y diferentes regimenes de motor. Como en el caso de las emisiones de CO (Figura 30), las emisiones de HC aumentan fuertemente con λ y a medida que disminuye el régimen del motor. Como se discutió anteriormente para el CO, estos resultados pueden interpretarse en términos de reducción de la potencia del motor a medida que aumenta λ y por ello un aumento de las emisiones específicas. Sin embargo, en este caso, los hidrocarburos sin quemar disminuyen a medida que λ disminuye para una misma composición de la mezcla. De hecho, para $\eta = 0,20$ y régimen del motor de 4200 rpm (líneas

continuas en la *Figura 32*) las emisiones de HC disminuyen de 0,085 g/kWh con $\lambda = 2$ a 0,03 g/kWh con $\lambda = 1,6$ y 0,02 g/kWh con $\lambda = 1$.

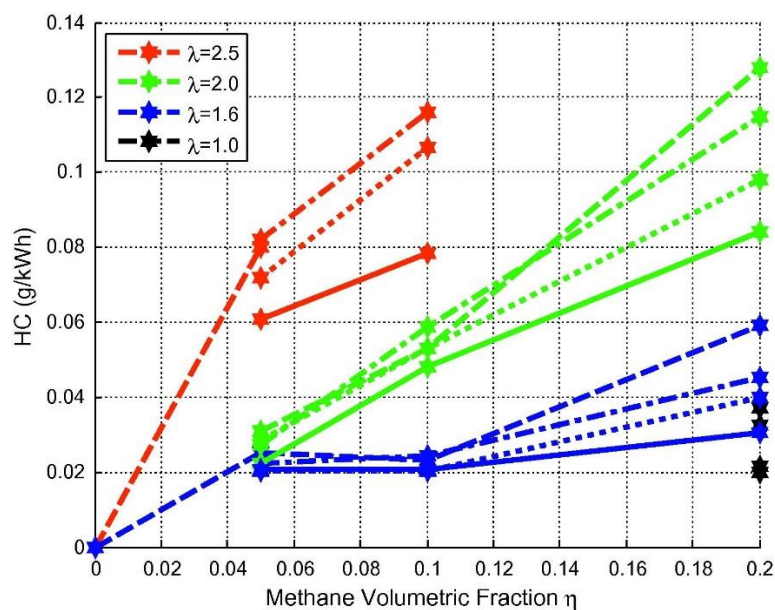


Fig.32 Emisiones de HC (g/kWh) frente λ y η a WOT y SA óptimo. Las líneas continuas, de puntos, trazos-puntos y de trazos corresponden a 4200, 3400, 2600 y 1800 rpm, respectivamente

5.2.6 Conclusiones

Este estudio se ha realizado en un motor comercial Volkswagen de 1,4 L y 59 kW de gasolina alimentado con mezclas hidrógeno-metano y adaptado previamente para utilizar hidrógeno puro. Como novedad, y a diferencia de la mayoría de los estudios publicados en la literatura, se ha prestado especial atención a las mezclas con bajo contenido de metano (5-20 % en volumen, 29,6-66,7 % en peso). La principal motivación de la adición de cantidades relativamente pequeñas de metano al hidrógeno es extender las relaciones aire/combustible (λ) a valores más próximos a las condiciones estequiométricas con un riesgo reducido de anomalías de combustión.

Se ha encontrado que λ es la variable de operación más influyente en el rendimiento del motor debido a su marcado efecto en la temperatura de combustión. Para evitar combustiones anómalas se tiende a operar con valores altos de λ que proporcionan mayor seguridad. La consecuencia directa es una disminución en las prestaciones del motor como el rendimiento efectivo y el par motor efectivo.

Desde el punto de vista de las emisiones, el uso de mezclas de hidrógeno-metano sobre los óxidos de nitrógeno ([NOx], g/kWh) tiene efectos positivos en comparación con el hidrógeno puro. Por una parte, se pueden usar mezclas aire/combustible más ricas en combustible, es

decir, valores de λ más bajos, y por otra, se produce una disminución de la temperatura de combustión con el aumento de contenido de metano que provoca una reducción de la formación de NO_x térmico. Además, las emisiones se pueden reducir adicionalmente utilizando valores óptimos del avance al encendido, aunque las características de la combustión del metano impiden el uso de valores excesivamente bajos de este parámetro.

Con respecto a las emisiones específicas de CO y de HC, hay un efecto negativo evidente por la presencia de metano en la mezcla de combustible. Las emisiones de CO específicas son similares a las de NO_x, y un orden de magnitud mayores que las de HC. A diferencia de los óxidos de nitrógeno, el aumento de λ tiene efectos negativos sobre las emisiones específicas de CO y HC que se pueden atribuir a una reducción proporcional de la potencia. Por otro lado, el aumento del régimen del motor reduce las emisiones de estos contaminantes debido a la mejora del proceso de combustión por un incremento del fenómeno de turbulencia en el interior de los cilindros.

5.3 Caracterización de anomalías de combustión en un MEP comercial, alimentado con H₂ mediante medidas de presión, vibración y acústicas

“Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block-engine vibration, and acoustic measurements”. Energy Conversion and Management. Volume 172, 15 September 2018, Pages 67-80.

5.3.1 Introducción

A pesar de que el hidrógeno cuenta con propiedades positivas como combustible para su uso en ICE, como el amplio intervalo existente entre sus límites de inflamabilidad en aire (4–75 % en volumen de H₂) que permite su utilización en las más diversas condiciones, también presenta inconvenientes como ya se ha destacado en apartados precedentes de esta memoria. Destacan en este sentido su baja densidad, el aumento de la generación de NO_x debido a las altas temperaturas de combustión y su elevada propensión a producir fenómenos de combustión anómala para λ cercanas al valor estequiométrico. Estos últimos son factores que contribuyen a reducir el par y potencia de los H₂ICEs.

Los fenómenos de combustión anómala, no son exclusivos de los H₂ICEs sino que son problemas típicos que hay que sortear para la mejora de rendimiento térmico de los motores convencionales que funcionan con combustibles líquidos, [16], [37], [38]. Las anomalías de combustión se pueden clasificar en tres categorías principales: preencendido, retroceso de llama y detonación [39]. Aunque la situación real es mucho más compleja debido a la interacción entre estos fenómenos [27]. Por ejemplo, el preencendido aumenta la probabilidad de sufrir un retroceso de llama y/o detonación en los próximos ciclos de combustión.

Los sistemas de inyección y refrigeración del motor son muy importantes en este sentido. El hecho de que la combustión del H₂ no genera partículas es una ventaja importante ya que se reduce la incidencia de fenómenos asociados a puntos calientes como el preencendido. Sin embargo, a diferencia del preencendido y el retroceso de llama, la detonación ocurre en los motores SI después del salto del arco eléctrico en la bujía y una vez ya se ha formado un frente de llama en el interior del cilindro. Se produce dentro de la llamada ventana de detonación que va desde los últimos valores del ángulo del cigüeñal (CA) durante la carrera de compresión, cuando el pistón está cerca del punto muerto superior (TDC), hasta varios grados después de comenzada la carrera de expansión [40]. Las condiciones de la última fracción de mezcla que

queda sin quemar cambian rápidamente con la propagación de la llama. En particular, la temperatura y la presión aumentan notablemente como resultado del calor generado por el frente de llama y la compresión debido al movimiento del pistón y la expansión de los productos calientes de la combustión, lo que lleva a una aceleración de la velocidad de combustión.

Si las condiciones son tales que la concentración de especies químicas en forma de radicales libres alcanza valores críticos [41], puede producirse una autoignición espontánea de los gases no quemados sin la participación de ninguna fuente de ignición. Esto ocurre en uno o más puntos dentro de la última fracción de mezcla sin quemar (normalmente cerca de las paredes del cilindro), [16], [42] dando lugar a la detonación. El aumento de presión producido puede alcanzar valores máximos de varios miles de kPa en el caso de detonaciones graves. Además, se generan ondas de presión de alta frecuencia que consisten en modos de vibración acústica característicos de la geometría de la cámara de combustión.

Estas ondas se transmiten a través del conjunto motor, bloque y culata, provocando un ruido muy característico, de tipo metálico, comúnmente conocido como picado de biela. En caso de detonaciones graves y prolongadas, pueden provocar un aumento del estrés térmico y las tensiones mecánicas de los componentes en la cámara de combustión que puede causar daños importantes al motor (rotura de los segmentos del pistón, junta de culata, pérdida de material en puntos de la culata, zonas de fusión en el pistón, etc.) [16]. Obviamente la severidad de la detonación será mayor al funcionar con altas cargas de motor y bajo cualquier condición de operación que permita la autoignición de una masa importante de mezcla aire/combustible.

Debido a su origen, el avance al encendido (SA) se convierte en un parámetro clave a optimizar para obtener el máximo par motor efectivo (MBT) posible sin detonación [43]. La recirculación de los gases de escape también se ha demostrado como una estrategia eficaz para suprimir la detonación [44].

La detonación también depende en buena medida de las propiedades del combustible y del proceso de combustión [45]. En este sentido, es interesante considerar el tiempo de retraso, que se define como el tiempo necesario para que determinadas especies químicas críticas alcancen una concentración tal que permita iniciar las reacciones de combustión en cadena mediante autoignición [16]. Está ampliamente aceptado que cuando la temperatura y presión de la fracción de mezcla que queda por quemar son tales que el tiempo de retraso pasa a ser

menor que el tiempo requerido para una combustión normal, es probable que se produzca el fenómeno de la detonación [46].

Dado que los fenómenos de combustión anómala suponen un obstáculo importante para el desarrollo de los H₂ICEs, esta parte del trabajo se ha centrado en su estudio con el fin de contribuir a desarrollar herramientas de detección temprana. Con tal fin, se han empleado tres técnicas basadas en medidas de la presión del cilindro, la vibración del bloque motor y de señales acústicas producidas por el motor. Este último método resulta ser totalmente original. Los datos obtenidos han sido analizados para detectar y caracterizar eventos anómalos de combustión bajo un amplio intervalo de regímenes del motor.

De forma complementaria, se han realizado simulaciones CFD para evaluar en qué medida las características del motor comercial utilizado pueden influir en algunos de los fenómenos de combustión anómalos detectados, particularmente en el retroceso de llama.

5.3.2 Características del motor, configuración experimental y métodos

Las características del motor y el equipamiento utilizados se han descrito en detalle en el capítulo 3. Cabe señalar algunos aspectos respecto a los tres métodos utilizados para la caracterización de las combustiones anómalas.

En cuanto a las vibraciones del bloque motor producidas por eventos de combustión anómalos, los acelerómetros vienen utilizándose en los vehículos de forma tradicional y constituyen el estado del arte. Este tipo de sensores se montan típicamente en los motores comerciales fabricados en serie. Por otro lado, las mediciones de presión en el cilindro son típicas a escala de laboratorio, esta técnica es demasiado costosa para ser implementada en vehículos comerciales [47].

En este trabajo, se colocó un acelerómetro triaxial cerca de la cámara de combustión para el registro de las anomalías. Las señales más intensas se obtuvieron en la dirección paralela al eje de los cilindros. Solo se han utilizado los datos constituidos por esa componente.

Una de las principales novedades de este trabajo es la realización de mediciones de sonido ambiental en las proximidades del motor para caracterizar eventos de combustión anómalos. Las mediciones acústicas se realizaron en la celda de ensayos del motor que se comportó como una sala casi semi-anecoica. La presión acústica se registró utilizando un micrófono de condensador de alta frecuencia G.R.A.S. 40AC (hasta 40 kHz con una sensibilidad de 12,5 mV/Pa) colocado a 1 m de distancia del motor.

El protocolo para la realización de los ensayos consistió en el arranque, calentamiento y estabilización del motor con una λ inicial de 1,7. A continuación los experimentos se desarrollaron enriqueciendo en combustible la mezcla alimentada (pasando a valores decrecientes de λ) mediante el aumento progresivo del ancho de pulso de inyección hasta que se produjeran las anomalías de combustión. Para evitar que el motor sufriese daños graves, en la mayoría de los experimentos solo se enriqueció uno de los cuatro cilindros. El proceso se repitió a regímenes del motor que fueron desde 1000 rpm hasta 5000 rpm y a plena carga (WOT). El SA fue fijado a 10° BTDC mientras que las válvulas de escape se cerraron a un CA de 3° después del punto muerto superior (ATDC). Por su parte, la inyección de H_2 se inició en un CA de 22° ATDC durante la etapa de admisión. El valor de SA se seleccionó de acuerdo con la experiencia previa con el uso del motor que mostró que 10° BTDC constituye un buen punto de partida para obtener un rendimiento satisfactorio del motor libre de combustiones anómalas [1], [3], [27]. Con el procedimiento indicado fue posible detectar combustiones anómalas caracterizadas por un sonido metálico característico seguido de un fuerte ruido de baja frecuencia acompañado por una gran disminución del par de frenado. Una vez que se llegó a ese punto se interrumpió el ensayo y se apagó el motor.

Para lograr una correcta caracterización libre de señales no deseadas, los datos utilizados para la detección de los fenómenos de combustión anómala (presión en el cilindro, acelerómetro y señales de micrófono) se registraron con una frecuencia de muestreo suficientemente alta de 100 kHz. Por otro lado, los parámetros relacionados con el funcionamiento del motor (régimen, λ , temperatura y presión del colector de admisión, ancho de pulso de inyección y emisiones de NOx) se registraron con una frecuencia de 10 Hz.

Otro aspecto importante es el número de ciclos de motor analizados. En [48] se recomienda una muestra de al menos 1000 ciclos para una determinación adecuada de la intensidad de los eventos de combustión en un Motor Ford Zetec 2,0 L de 4 cilindros alimentado con gasolina. En nuestro caso las muestras van desde 1224 ciclos a un régimen del motor de 1000 rpm hasta 3275 ciclos a 3000 rpm y 2725 ciclos a 5000 rpm. De este modo, la duración de los experimentos varió desde 147,2 s a 1000 rpm hasta 65,6 s a 5000 rpm.

5.3.3 Resultados

5.3.3.1 Caracterización de combustiones anómalas

A diferencia de las mediciones de vibración en el bloque motor y sonido, los valores de presión en el interior del cilindro dan una medida directa de la dinámica del proceso de combustión.

La *Figura 33* muestra un caso representativo en el que comparan ciclos de combustión normales y anómalos registrados con el régimen del motor más alto (5000 rpm) y $\lambda = 1,52$. La gráfica muestra la evolución con CA de la presión en el cilindro número 1. Hay que destacar que el origen del eje CA se encuentra en el momento del encendido, es decir, cuando salta de la chispa en la bujía ($350^\circ = 10^\circ$ BTDC). Se proporcionan datos a lo largo de un período de CA de 50° caracterizado por las presiones más altas en el cilindro. Esta ventana de valores de CA es ligeramente más amplia que el intervalo de 40° desde el TDC recomendado por [42]. Durante el ciclo de combustión normal la presión en el cilindro aumenta gradualmente después del salto de la chispa hasta alcanzar un valor máximo de alrededor 53 bar en el TDC.

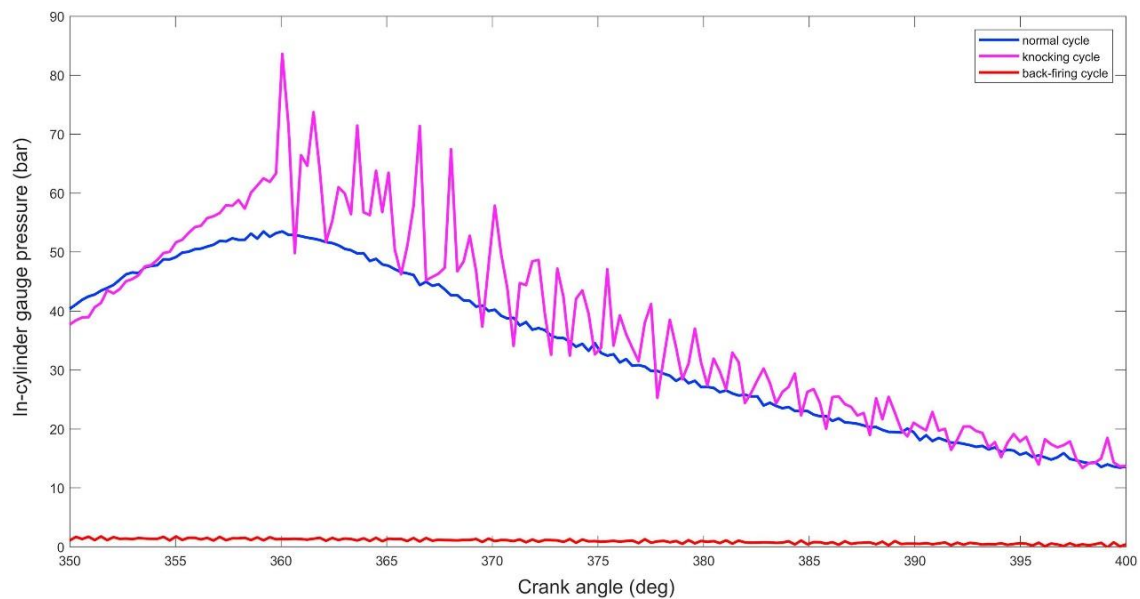


Fig.33 Evolución de la presión en el cilindro con CA a 5000 rpm para ciclos: normal, detonante y con retroceso de llama

El ciclo que muestra detonación se caracteriza por oscilaciones de presión de alta frecuencia con una amplitud máxima de aproximadamente 20 bar que conduce a una presión máxima cercana a 84 bar también en el TDC. Esto casi duplica la velocidad de aumento de la presión de 1.0 MPa/CA considerada como el límite inferior para detonaciones fuertes o graves [38]. La amplitud de las oscilaciones de presión disminuye progresivamente después del TDC aunque las oscilaciones aún están presente a un CA de 40° ATDC durante la carrera de expansión. Se puede observar que durante el ciclo con detonación la presión en el cilindro aumenta más rápidamente tras el encendido que durante el ciclo de combustión normal, lo que está de acuerdo con [37]. Esta circunstancia presumiblemente reduce el tiempo de retraso que lleva a la aparición de un autoencendido espontáneo de la fracción no quemada dando como resultado la detonación observada [38].

La dispersión cíclica de la combustión, la inestabilidad de la llama y la falta de homogeneidad térmica pueden provocar un aumento de la temperatura que facilita que se den las condiciones críticas que provocan la detonación [38], [49]. Según [50] la densidad de energía y la velocidad de liberación de calor de los puntos calientes desempeña un papel crítico en la intensidad de la detonación. En el caso del retroceso de llama (*Figura 33*), la presión en el cilindro es muy baja y muestra una disminución muy suave durante la carrera de expansión. Esto es debido a que el combustible ya ha sido quemado durante la carrera de admisión.

En la *Figura 34* se muestra una caracterización más completa del fenómeno de combustión anómala, obtenido a una velocidad intermedia del motor de 2000 rpm. Se muestra la evolución a lo largo del tiempo de la presión en el cilindro, la señal del acelerómetro y la del micrófono, así como la temperatura en el colector de admisión. Por otro lado, en la *Figura 35* se muestra la evolución de los parámetros que caracterizan el rendimiento del motor para los mismos experimentos de la *Figura 34*. Se incrementó el ancho del pulso de inyección de hidrógeno lo que supone una disminución progresiva de λ . El ancho del pulso aumentó desde su valor inicial de 6,2 ms ($\lambda = 1,7$) hasta 6,9 ms ($\lambda = 1,45$) después de 100 s y el par motor efectivo alcanzó un valor casi constante de 57 N·m. La concentración de NOx y la presión en el cilindro también aumentaron hasta alcanzar 430 ppm y 60 bar, respectivamente. Por otro lado, el acelerómetro y el micrófono registraron señales normales de ± 15 g y ± 5 Pa, respectivamente.

Como se puede ver en la *Figura 34*, el primer fenómeno de detonación se produjo a los 107 s, cuando se registraron fuertes señales del acelerómetro y el sensor de presión de ± 160 g y 75 bar, respectivamente. Este evento fue audible y se decidió mantener constante la inyección de hidrógeno. Sin embargo, el micrófono no registró ninguna señal clara distinguible del ruido de fondo. En este punto el motor entró en un período de 40 s caracterizado por fuertes vibraciones que alcanzan una amplitud de hasta + 300 g, y picos de presión de hasta 80 bar; y un ruido metálico característico correspondiente al picado de biela.

Durante este período, el par motor efectivo mostró una tendencia muy leve a disminuir, mientras que las emisiones de NOx permanecieron esencialmente sin cambios (*Figura 35*). Después de 155 s se produjo un fuerte ruido ronco que podía ser grabado por el micrófono (amplitud de +10 Pa). Esto fue seguido por una abrupta disminución de la presión en el cilindro, del par motor y erráticas lecturas de la concentración de NOx en el escape. Este último evento consistió en un retroceso de llama, como se deduce del intenso aumento registrado de la temperatura del aire de admisión.

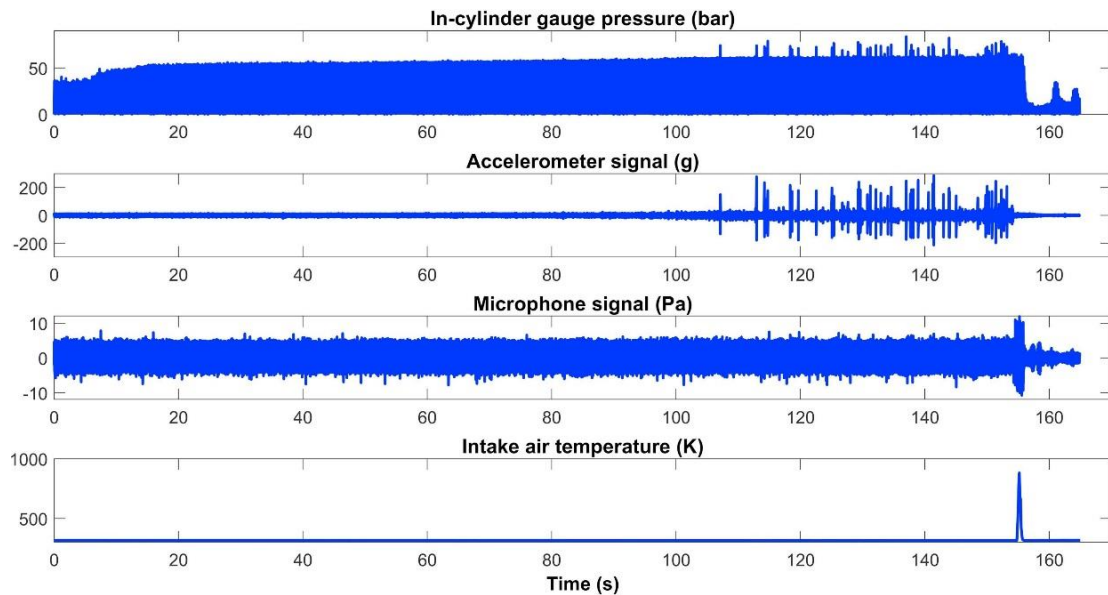


Fig.34 De arriba abajo, evolución con el tiempo a 2000 rpm de: presión del cilindro, señal del acelerómetro, señal del micrófono y T° aire de admisión

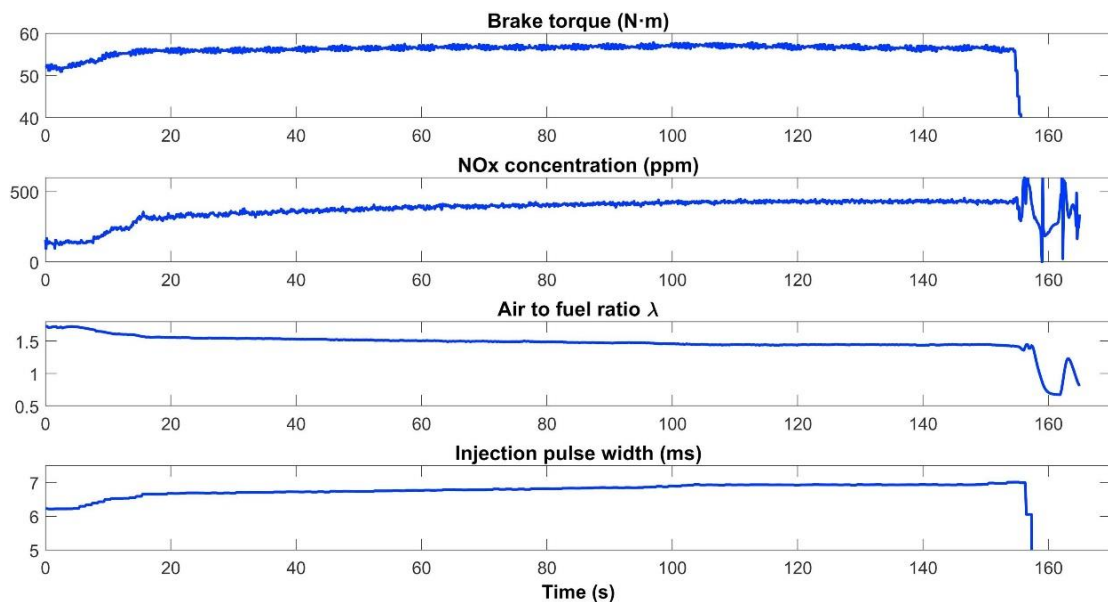


Fig.35 Evolución de parámetros del motor a 2000 rpm. Par motor (M_e), NO_x , (λ) y pulso inyección de H_2

Se observaron resultados similares en eventos registrados a 1000, 4000 y 5000 rpm, mientras que a 3000 rpm no se detectó en los sensores ningún evento detonante y el motor pasó directamente de funcionamiento normal a retroceso de llama. Sin embargo, al aumentar el avance al encendido de 10° BTDC, a 20° y 30° BTDC se detectó detonación antes del retroceso de llama también a 3000 rpm. Se debe tener en cuenta que, si la ignición se inicia más lejos del TDC, esto es, un mayor avance al encendido, se producen oscilaciones de presión más intensas, y existe una mayor probabilidad de sufrir detonación [37]. Además, el avance al encendido resulta crítico durante el funcionamiento del motor en condiciones de combustión pobre debido a variaciones más pronunciadas de la combustión de un ciclo a otro. Este

aumento de la dispersión cíclica también contribuye a aumentar la probabilidad de que se produzca detonación [51].

5.3.3.2 Ciclos de combustión con detonación: análisis de la presión en el cilindro y vibración

Como se muestra en la sección anterior, la detonación podría ser identificada por medio de las variaciones bruscas de las lecturas registradas por el sensor de presión en el cilindro y el acelerómetro del bloque motor. Ahora se analiza la correlación entre estas dos señales.

Los sistemas elásticos muestran frecuencias de vibración naturales, de modo que, para una frecuencia dada, el sistema vibra de acuerdo con la amplitud y fase características, lo que se conoce como modo de vibración. Solo algunas de las frecuencias de orden más bajo son de interés práctico porque las de orden superior están amortiguadas. En el caso de los ICEs, la combustión (tanto normal como anómala) da lugar al movimiento de los componentes del motor que causa vibraciones que se transmiten a través de la estructura del motor. Así, las intensas oscilaciones de presión en el cilindro asociadas a la detonación provocan vibraciones más fuertes que pueden detectarse con un acelerómetro. Esta es la razón por la cual los motores comerciales llevan estos sensores, simples y fiables, para la detección de detonaciones en lugar de transductores de la presión en cilindro y sensores ópticos, que resultan más caros y complejos [52], [53].

En este trabajo, la distinción entre frecuencias altas y bajas se ha hecho tomando como referencia los valores por encima y por debajo de 20 veces el régimen del motor, respectivamente. Según este criterio, las *Figuras 36 y 37* muestran las lecturas típicas del transductor de presión en el cilindro y el acelerómetro, respectivamente, para ciclos de combustión normales y de detonación. Las señales se descompusieron en sus componentes de baja y alta frecuencia mediante análisis de la transformada de Fourier (FT). En ambos casos el régimen del motor fue de 2000 rpm y las señales correspondieron a los valores registrados dentro del intervalo de tiempo que va del encendido (10° BTDC) a 40° ATDC.

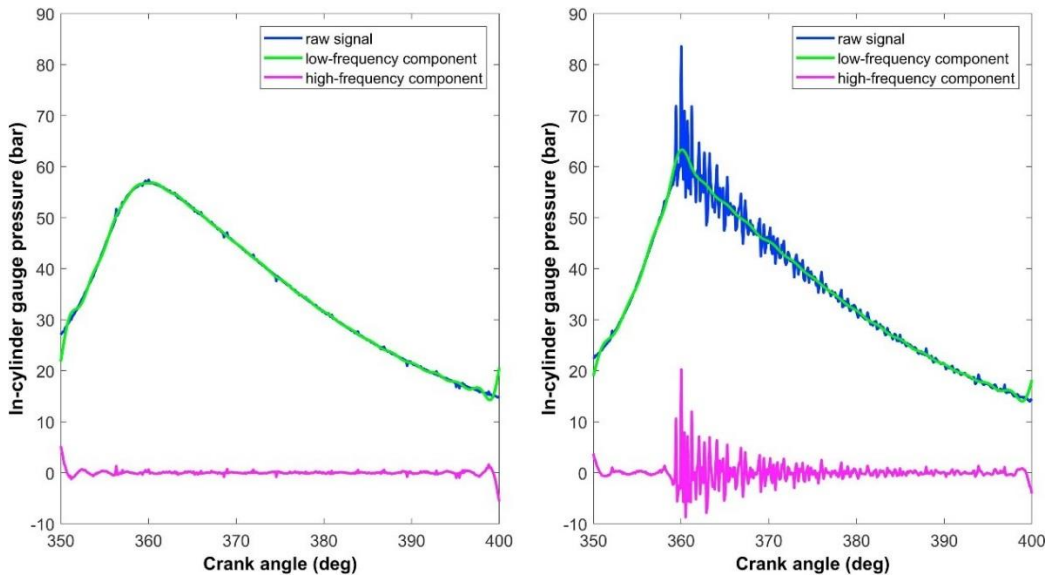


Fig.36 Evolución de la presión en cilindro con CA a 2000 rpm para ciclos normales (izquierda) y detonantes (derecha). Se muestra la señal de presión sin procesar y sus componentes de baja y alta frecuencia

Como se puede ver, para los ciclos de combustión normales la señal de presión coincide con la componente de baja frecuencia mientras que la señal del acelerómetro es muy débil e indistinguible de los componentes de baja y alta frecuencia. En el caso de los ciclos con detonación, la señal de presión es dominada por la componente de baja frecuencia mientras que las oscilaciones están bien representadas por el componente de alta frecuencia. En contraste, la señal del acelerómetro está dominada por la componente de alta frecuencia como se puede ver en la *Figura 37*. Se puede entonces concluir que la componente de alta frecuencia de la presión en el cilindro y de las señales de aceleración del bloque motor obtenidas después de un análisis de FT se puede utilizar para lograr una detección muy sensible de los fenómenos de detonación.

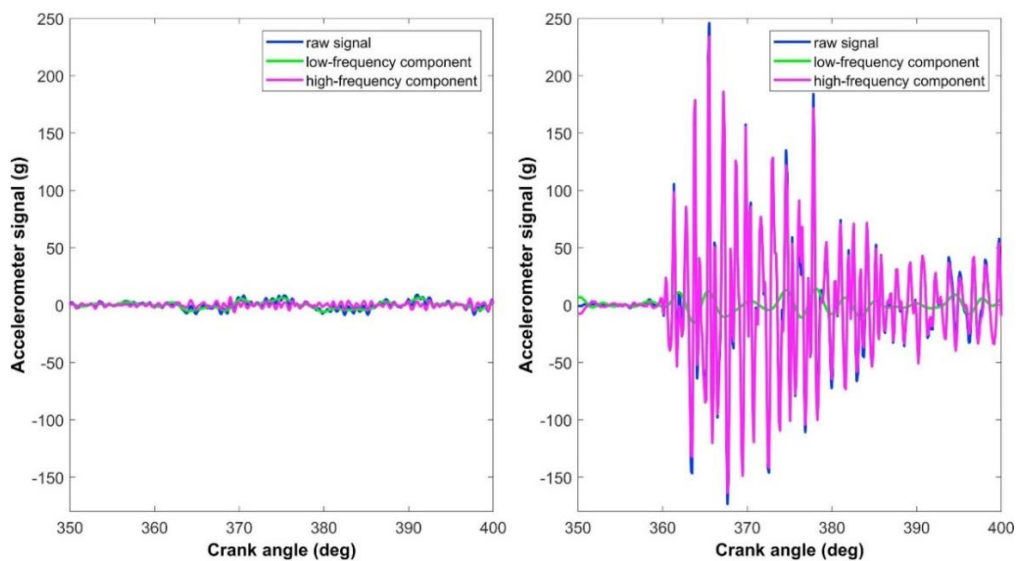


Fig.37 Evolución de la señal del acelerómetro con CA a 2000 rpm para ciclos normales (izquierda) y detonantes (derecha). Se muestra la señal del acelerómetro y sus componentes de baja y alta frecuencia

Hay que tener en cuenta que el parámetro empleado para distinguir entre baja y alta frecuencia tiene en cuenta el posible efecto asociado al régimen del motor, que como es lógico influye en la aparición de fenómenos de combustión anómala. Se eligió un valor de 20 veces el régimen del motor después de una selección preliminar. El valor exacto de esta referencia no es muy crítico siempre que esté relativamente cerca del régimen del motor, lo que parece razonable.

También se ha realizado un análisis del promedio integral del módulo de las componentes alta frecuencia. Los resultados se muestran en las *Figuras 38 y 39* para las lecturas del acelerómetro montado en el bloque motor y el transductor de presión en el cilindro, respectivamente. Para cada régimen del motor considerado, la posible correlación lineal entre el acelerómetro y las señales del transductor de presión se han evaluado a través de los valores del coeficiente de correlación de Pearson (PCC).

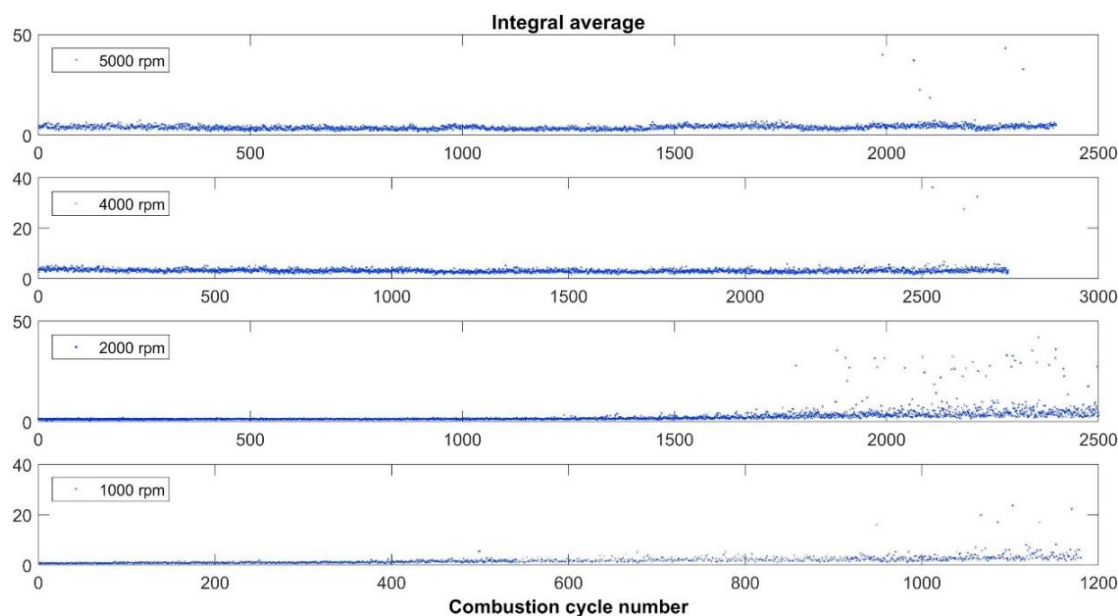


Fig.38 Datos del promedio integral del módulo de las componentes de alta frecuencia de la señal del acelerómetro para cada uno de los ciclos a 1000, 2000, 4000 y 5000 rpm

En estos experimentos, la relación aire/combustible (λ) de la mezcla disminuye de un ciclo a otro debido a un incremento gradual del ancho de pulso de inyección de H_2 . Los altos valores de los promedios integrales observados después de aproximadamente 2000 ciclos indicaron la aparición de ciclos con detonación. Cuando se consideran los conjuntos de datos completos, los valores de PCC obtenidos a 2000, 4000 y 5000 rpm son 0,701, 0,613 y 0,699, respectivamente, que, dado el gran tamaño de las muestras, indican un alto grado de correlación. No se detectaron ciclos de detonación a 3000 rpm, por lo que no se consideraron los datos correspondientes a ese régimen del motor.

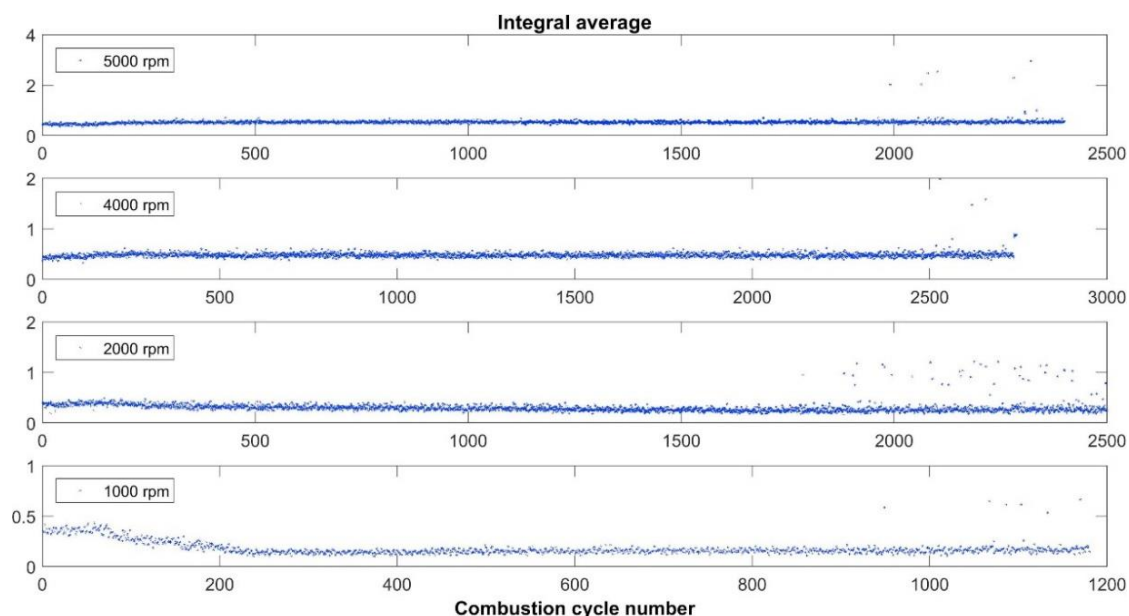


Fig.39 Datos del promedio integral del módulo de las componentes de alta frecuencia de la señal de presión en cilindro para cada uno de los ciclos a 1000, 2000, 4000 y 5000 rpm

Por el contrario, el PCC a un régimen del motor de 1000 rpm fue de solo 0,200, lo que revela una falta de correlación lineal entre las señales. Este es un régimen a una velocidad baja para el tamaño de motor ensayado, cercano al ralentí. Este es un régimen fluctuante que muestra oscilaciones de velocidad alrededor del punto de ajuste que provocan inestabilidades de presión en el cilindro. Esto se puede apreciar en la *Figura 39*, donde a 1000 rpm la presión dentro del cilindro cambia gradualmente durante los primeros ciclos de combustión hasta que la lectura se estabiliza. Estos cambios de presión relativamente suaves no se traducen en la señal de aceleración debido a su carácter inercial que resulta notablemente amortiguada.

Si se descartan los ciclos que preceden al 220 a 1000 rpm, el PCC aumenta de 0,200 a 0,819, mostrando una fuerte correlación también a esta velocidad. Una observación más detallada de la *Figura 39* sugiere que los ciclos de combustión con detonación se caracterizan por valores de la media integral del módulo de componentes de alta frecuencia de la señal de presión en el cilindro por encima de 0,5. De los 2500 ciclos de combustión mostrados en *Figura 39* a un régimen de 2000 rpm sólo 39 ciclos cumplen este criterio. El PCC para el componente de alta frecuencia del acelerómetro y la señal de presión durante estos ciclos es 0,584, lo que indica una correlación prácticamente lineal. Por otro lado, a un régimen del motor de 5000 rpm sólo 9 ciclos parecían presentar eventos de detonación, pero en este caso el PCC fue de - 0,294, lo que indica que la correlación entre las señales pierde relevancia a altos regímenes del motor. La razón podría ser la naturaleza inercial de las vibraciones que lleva a que la señal capturada por el acelerómetro requiere tiempo para ser completamente amortiguada, especialmente los modos de vibración de baja frecuencia.

Por lo tanto, los ciclos normales de combustión pueden ser identificados erróneamente como detonantes si uno o varios de los ciclos precedentes sufrieron eventos anómalos de combustión. A medida que aumenta el régimen del motor, esta situación se hace más probable porque disminuye el intervalo de tiempo disponible para la amortiguación de vibraciones entre ciclos de combustión consecutivos.

A este respecto, la correlación entre los valores del promedio integral del módulo de las componentes de alta frecuencia de la señal de presión en el cilindro de los 9 ciclos de detonación y los de la señal del acelerómetro para los ciclos que siguen a los de la detonación, [41], el PCC alcanza un valor mucho mayor de 0,537.

Los *silentblocks* o antivibradores incorporados en los motores comerciales para absorber las vibraciones y reducir el ruido introducen no linealidad entre la presión dentro del cilindro y la aceleración del bloque del motor, lo que complica la rápida identificación de la detonación. Como resultado, los criterios utilizados para identificar la detonación con acelerómetros montados en el bloque motor deberían ser más restrictivos y capaces de adaptarse al régimen del motor. A partir de los resultados mostrados en la *Figura 38*, se puede sugerir que para regímenes del motor por debajo de 2000 rpm se puede establecer un valor límite de 15 para el promedio integral del módulo de las componentes de alta frecuencia de la señal del acelerómetro, por encima del cual el ciclo es detonante. Este valor límite aumenta hasta 30 para regímenes más altos.

5.3.3.3 Análisis del ruido

Como ya se ha indicado, una de las principales novedades de este trabajo es el uso de mediciones de ruido ambiental para tratar de detectar combustiones anómalas. Es bien sabido que la detonación presenta un sonido metálico característico, por lo que es interesante explorar la posibilidad de utilizar medidas acústicas para la detección de estos fenómenos. No obstante, el quemado del combustible produce el llamado ruido de combustión, que es la fuente más importante de ruido en un ICE.

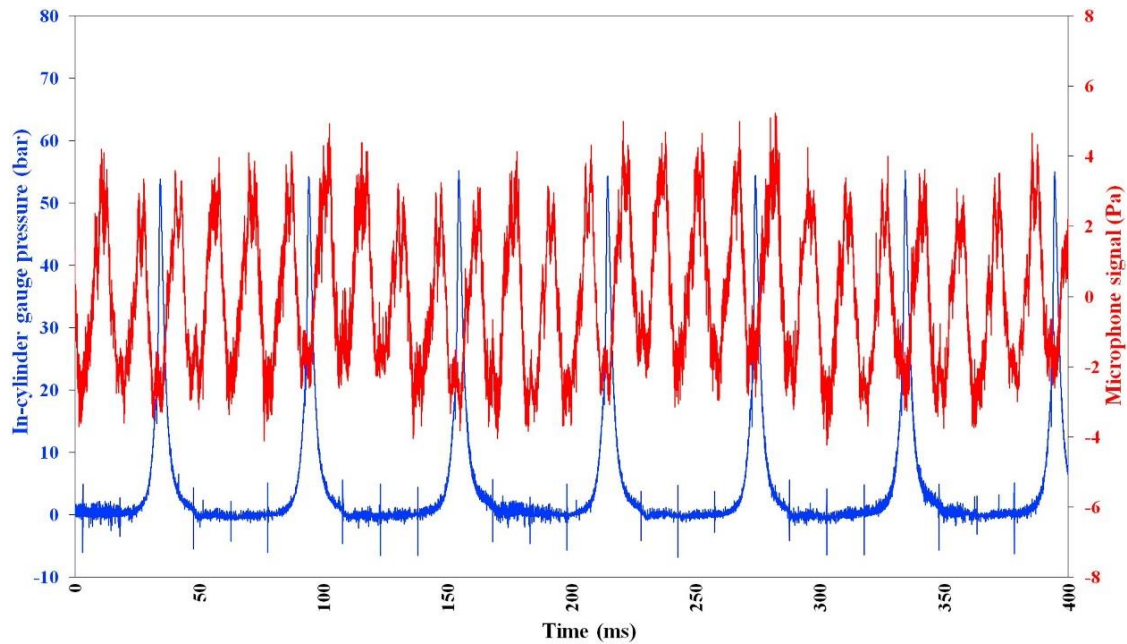


Fig.40 Evolución con el tiempo de las presiones en el cilindro (señal azul) y acústica (señal roja) para una serie de ciclos de combustión normales a 2000 rpm

El ruido de la combustión es un fenómeno complejo que se ve afectado por las características del combustible, así como por las del motor y sus condiciones de funcionamiento [54]. Volviendo a los resultados mostrados en la *Figura 34*, correspondientes a un régimen del motor de 2000 rpm, las *Figuras 40 y 41* muestran los valores instantáneos de las presiones en cilindro y acústicas para una serie de ciclos de combustión normales y detonantes, respectivamente. Se puede ver que los ciclos de combustión normales muestran presiones máximas en el cilindro de aproximadamente 55 bar y presiones acústicas que oscilan dentro de $\pm 3,5$ Pa. En la *Figura 41*, se pueden identificar claramente tres ciclos de combustión con detonación mediante presiones máximas en el cilindro por encima de 70 bar. (ciclos 1º, 3º y 7º). La presión acústica para estos ciclos anómalos muestra amplitudes ligeramente más altas (dentro de ± 5 Pa) en comparación con los de los ciclos de combustión normales.

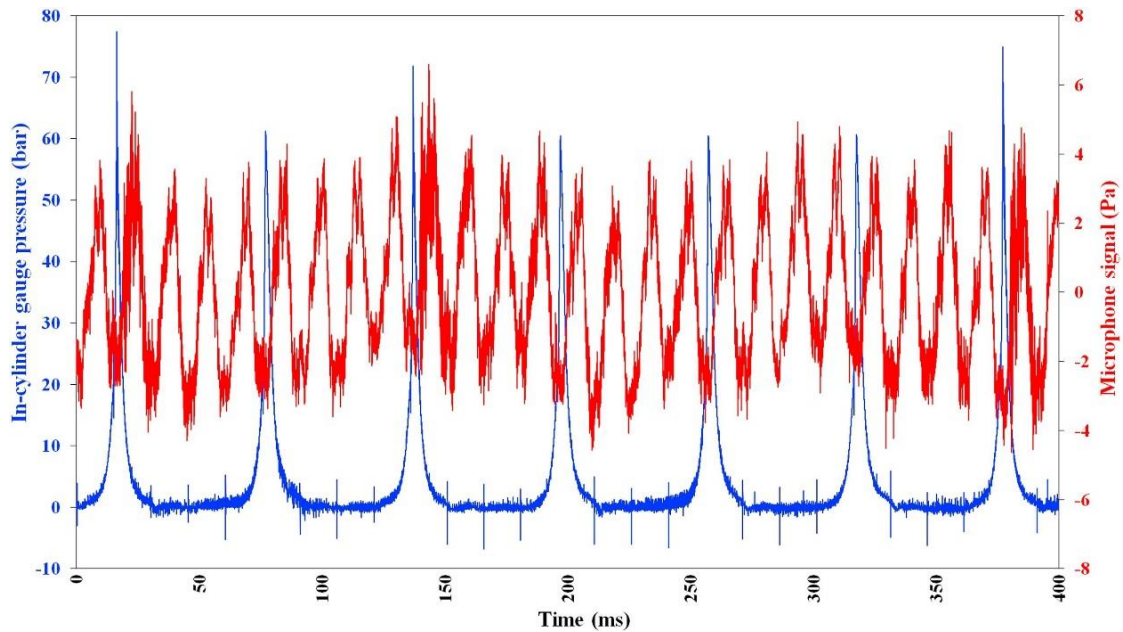


Fig.41 Evolución con el tiempo de las presiones en el cilindro (señal azul) y acústica (señal roja) para una serie de ciclos de combustión normales y anómalos a 2000 rpm

En la *Figura 42* se muestra una caracterización más a fondo de las propiedades acústicas de un par de ciclos de combustión normales y de detonación, mediante un análisis espectral en términos de bandas de tercera octava. El análisis de banda de octava se incorpora mediante los métodos más habituales con respecto a la evaluación de la percepción del sonido [41]. Se puede ver que ambos ciclos se pueden distinguir mediante las bandas de frecuencia más altas (entre 8 kHz y 20 kHz), que son alrededor de 8-10 dB más intensas en el caso del ciclo con detonación que para la combustión normal.

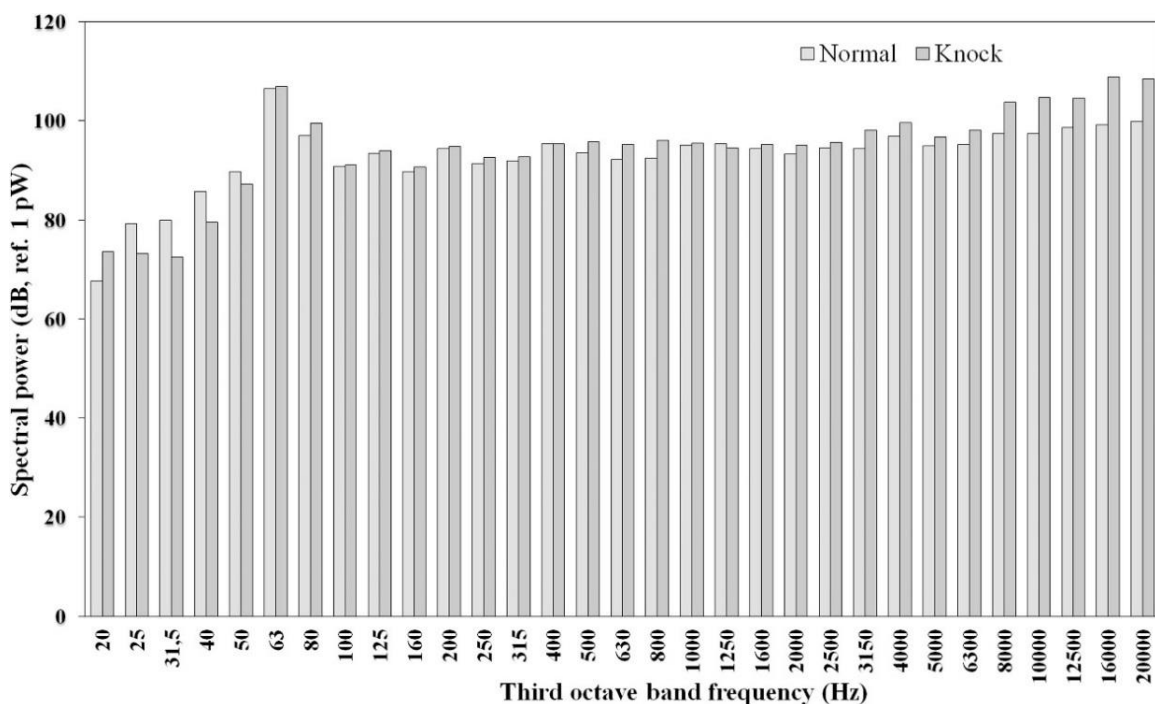


Fig.42 Análisis espectral de ciclos normales y con detonación a 2000 rpm

Además, el análisis espectral también es útil para identificar otros fenómenos de combustión anómalos como el retroceso de llama. Como se menciona en la Sección 5.3.3.1. el retroceso de llama se caracteriza por un aumento brusco de la temperatura del aire en el colector de admisión acompañado de un fuerte ruido ronco. La *Figura 43* muestra el análisis de un ciclo de combustión normal y dos ciclos anómalos que consisten en detonaciones y retroceso de llama, respectivamente. El número sobre las barras indica el cambio de potencia (en dB) con respecto al ciclo de combustión normal. Se puede ver que el efecto de retroceso de llama muestra bandas de octava sensiblemente más intensas (7–16 dB) en el intervalo de frecuencias comprendidas entre 250 Hz y 4 kHz en comparación con el resto de ciclos.

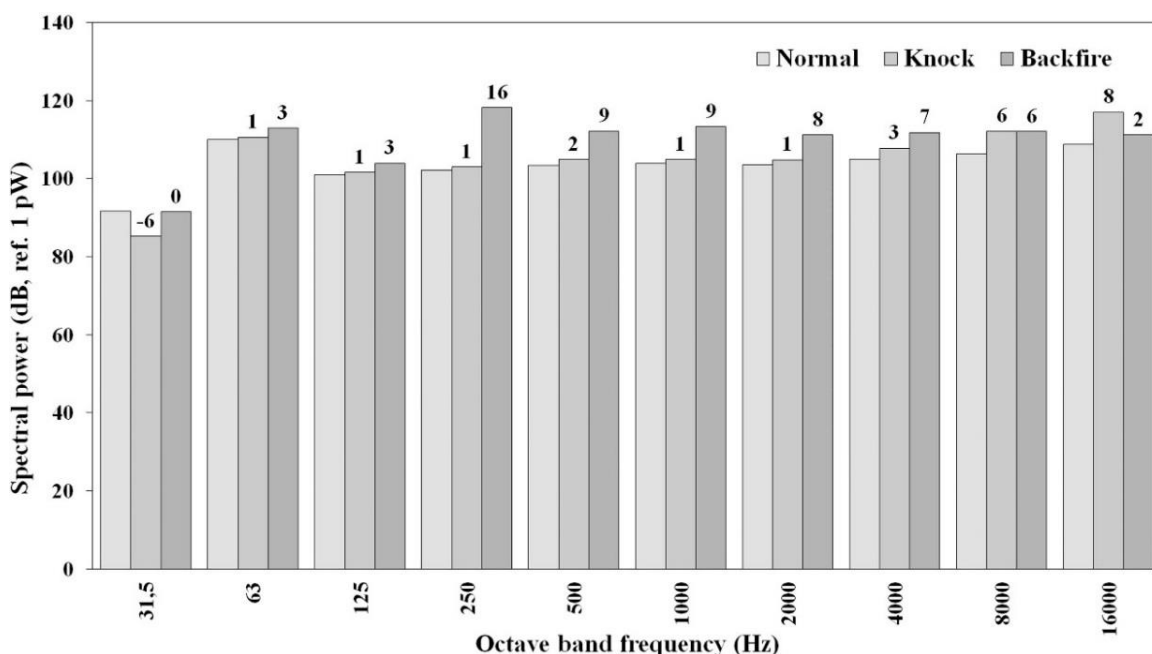


Fig.43 Análisis espectral de ciclos normales, con detonación y retroceso de llama a 2000 rpm

5.3.4 Simulación mediante dinámica de fluidos computacional (CFD)

5.3.4.1 Objetivo y alcance

El motor utilizado en este estudio fue diseñado originalmente para ser alimentado con gasolina y adaptado para funcionar con hidrógeno. Una de las modificaciones más importantes realizadas consistió en la implementación del sistema de alimentación de hidrógeno. Para ello, el colector de entrada original fue reemplazado por otro fabricado en aluminio para mayor seguridad en caso de retroceso de llama. Además, los inyectores de gasolina fueron reemplazados por inyectores de gas que se fijaron al colector de entrada por medio de un soporte metálico y se conectaron a un acumulador de hidrógeno a través de tubos de acero inoxidable. El acumulador es necesario para garantizar que los inyectores recibieran

hidrógeno a una presión más baja y constante en comparación con las botellas de gas que almacenaban el combustible (200 bar).

La configuración del sistema de inyección y sus parámetros operativos, como el comienzo de la inyección y la duración del ancho de pulso, tienen una influencia crítica en la composición de la mezcla aire/combustible dentro del colector de admisión y el cilindro.

Durante el estudio experimental se observó que la detonación no aparecía inmediatamente tras incrementar la duración del ancho del pulso de inyección, sino unos instantes más tarde, lo que sugirió la posibilidad de que se acumulase hidrógeno dentro del colector. Para analizar esta posibilidad, se realizó un estudio de dinámica de fluidos computacional (CFD) para simular el rendimiento del sistema de admisión con la inyección de hidrógeno utilizada. Las simulaciones se realizaron con el software ANSYS-CFX® 15.0.

El modelo físico consistía en el colector de admisión, la culata y los inyectores de hidrógeno tal y como se muestra en la *Figura 44*.

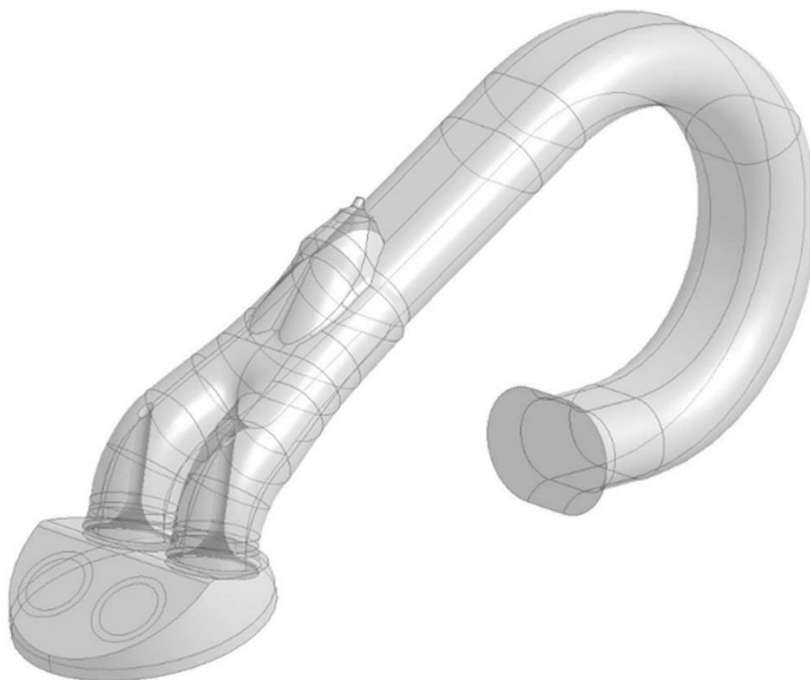


Fig.44 Modelo CFD del colector de admisión, inyector, cámara de combustión y cilindro

5.3.4.2 Condiciones de simulación

Las simulaciones se realizaron bajo régimen transitorio. Como hipótesis simplificadoras se ha considerado que la inyección de hidrógeno era isotérmica a 25 °C y que los efectos gravitacionales eran despreciables frente a los inerciales. Además, el lado del colector de admisión opuesto al cilindro se modeló como una superficie abierta a una presión de aire del

colector (MAP) constante, que permite la entrada de aire debido a la succión asociada al movimiento del pistón. El valor de MAP se estableció en 0,92 bar de acuerdo con los valores registrados por la ECU durante los experimentos realizados a WOT. En cuanto al fenómeno de turbulencia, se adoptó el modelo k-ε.

Se diseñó una malla móvil con aproximadamente 250000 elementos de volumen para describir el movimiento del pistón y las válvulas. Los inyectores de gas utilizados proporcionaron hidrógeno con un flujo másico constante de 0,31 mg/ms durante el pulso, siendo 1,2 ms y 0,2 ms el tiempo requerido para la apertura y cierre del inyector, respectivamente.

El comienzo de la inyección se estableció inicialmente en CA de 22 ° ATDC. Cabe señalar que el tiempo de cierre de la válvula de escape (EVC) se estableció en CA de 15,3 ° para permitir un enfriamiento adecuado de la válvula y reducir la probabilidad de retroceso de llama. En lo que respecta al posicionamiento del pistón, se asignó un valor de 0 a TDC, mientras que el desplazamiento del pistón adoptó valores negativos dados por la siguiente expresión obtenida después de considerar la geometría del mecanismo biela-manivela del motor *Ec.3*:

$$Z_p = -0.00402 + 0.0378 \cdot \cos \left[\left(\frac{2\pi}{60} \cdot n \right) \cdot t \right] + 0.0024 \cdot \cos \left[\left(\frac{4\pi}{60} \cdot n \right) \cdot t \right]$$

Ec.3 Desplazamiento pistón (m)

donde Z_p (m) es el posicionamiento del pistón, n (rpm) es el régimen del motor y t (s) es el tiempo transcurrido desde el posicionamiento del pistón en TDC. Por otro lado, el posicionamiento de la válvula de admisión (Z_{iv}) fue de -1,56 mm en TDC y vino dado (m) por *Ec.4*:

$$Z_{iv} = -0.0037 \cdot \left\{ \cos \left[\left(\frac{2\pi}{60} \cdot n \right) \cdot \frac{360}{214} \cdot t_0 \right] - \cos \left[\left(\frac{4\pi}{60} \cdot n \right) \cdot \frac{360}{214} \cdot (t + t_0) \right] \right\}$$

Ec.4 Desplazamiento de la válvula de admisión (m)

donde t_0 (s) es el tiempo transcurrido entre el inicio de la apertura de la válvula de admisión y el instante en que el pistón alcanza el TDC; es decir, el tiempo requerido para girar los 19 ° del ángulo del cigüeñal correspondiente al avance de la apertura de la válvula de admisión.

5.3.4.3 Resultados de las simulaciones

La *Figura 45 A - D* incluye una secuencia de imágenes que muestran los mapas de llenado con la fracción molar de hidrógeno en el colector de admisión y el cilindro durante la carrera de admisión obtenida de las simulaciones de CFD del motor a 2000 rpm. La inyección de hidrógeno comenzó a 22° ATDC y el ancho del pulso de inyección fue de 6 ms. La *Figura 45A* muestra que después de 3,3 ms (40° ATDC), cuando la inyección está cerca de terminar, el hidrógeno se concentra cerca del inyector. Después de 7,5 ms (*Figura 45 B*, 90° ATDC) la inyección ha finalizado y se puede ver que el hidrógeno se ha extendido dentro del colector de admisión, mientras que casi no hay hidrógeno en el cilindro.

La *Figura 45 C* muestra que después de 12,5 ms, a 150° ATDC, la gran mayoría del hidrógeno ha entrado al cilindro por la succión asociada al desplazamiento del pistón. Finalmente, cuando la válvula de admisión se cierra a 195° ATDC (16,25 ms), queda algo de hidrógeno dentro del colector de admisión como se muestra en la *Figura 45 D*. Dependiendo de la evolución de la situación durante los ciclos de combustión posteriores, es posible que tenga lugar una acumulación de hidrógeno dentro del colector de admisión. En ese caso, la mezcla que entra al cilindro será más rica de lo esperado, por lo que la probabilidad de que se produzca la detonación aumentará incluso manteniendo constante el ancho del pulso del inyector. Como el hidrógeno está presente en el colector de admisión, el riesgo de sufrir un retroceso de llama durante el funcionamiento del motor es evidente.

De hecho, los retrocesos de llama detectados en este trabajo fueron precedidos por ciclos de combustión con detonación como se explica en la sección 5.3.3.1. Los resultados sugieren que el aumento de temperatura provocado por la detonación, junto con la presencia de hidrógeno en el colector de admisión, conduce a la combustión mientras la válvula de admisión está abierta, provocando el retroceso de llama.

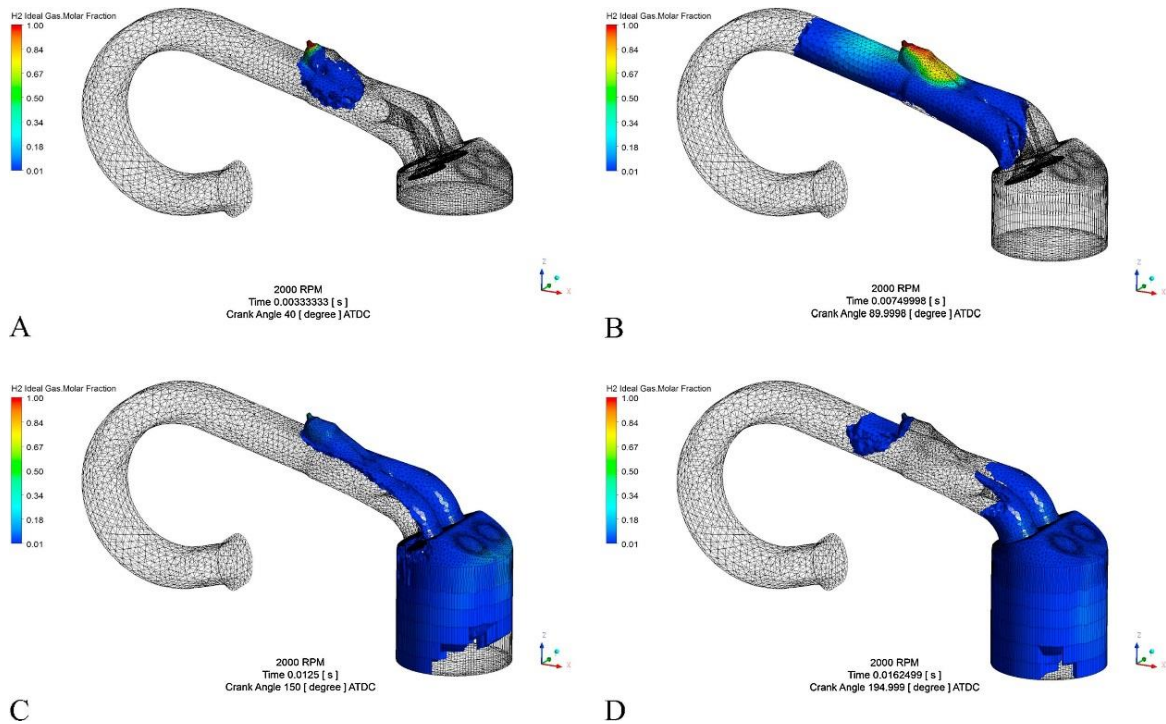


Fig.45 Fracción molar de H₂ en el colector de admisión y el cilindro a valores de CA (ATDC) de: (A) 40 °; (B) 90 °; (C) 150 ° y (D) 195 ° (2000 rpm)

El problema de la acumulación de hidrógeno podría deberse al hecho de que el motor fue diseñado para funcionar con gasolina, es decir, un combustible líquido con una densidad mucho mayor que la del hidrógeno. Por esa razón, las dimensiones de las válvulas, que son adecuadas para inyección de gasolina, no parecen ser lo suficientemente amplias como para garantizar un caudal volumétrico de hidrógeno suficientemente alto. A este respecto, la *Figura 46* muestra la evolución de las cantidades de hidrógeno y aire que han entrado al cilindro durante la carrera de admisión de acuerdo con las simulaciones de CFD.

Se puede ver que la masa de aire dentro del cilindro aumenta gradualmente hasta alcanzar el punto muerto inferior (BDC) en CA de 180 °. Sin embargo, la masa de hidrógeno dentro del cilindro aumenta bruscamente dentro de un intervalo relativamente estrecho de valores de CA entre aproximadamente 100 ° y 140 ° ATDC; luego, la cantidad de hidrógeno permanece casi constante. Esto se debe a que la inyección de hidrógeno se retrasa significativamente (22 ° ATDC) para permitir el enfriamiento de la válvula de escape después del cierre.

La disminución muy pequeña de la cantidad de gases observados después de alcanzar el punto muerto inferior puede deberse al aumento de presión asociado al comienzo de la carrera de compresión y/o al efecto de arrastre asociado al cierre de la válvula de admisión.

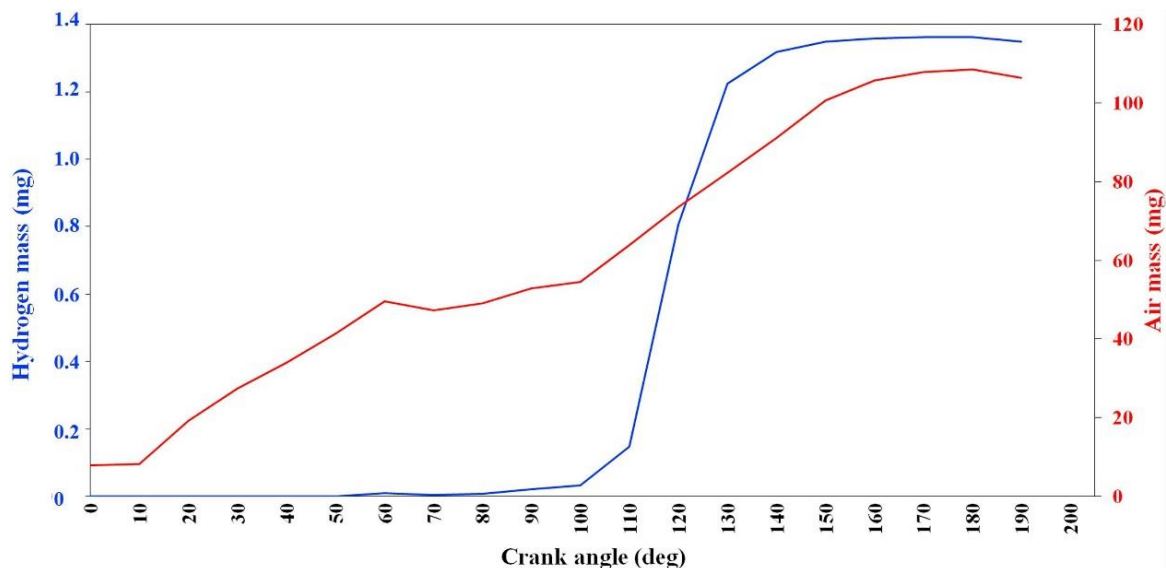


Fig.46 Resultados de simulación de CFD, H₂ (línea azul) y aire (línea roja) en el cilindro en la carrera de admisión (2000 rpm)

Los resultados anteriores sugieren que una posible solución sería avanzar el comienzo de la inyección, aunque existe el riesgo de que la válvula de escape todavía esté excesivamente caliente. Sin embargo, teniendo en cuenta que las simulaciones se realizaron a una velocidad intermedia del motor de 2000 rpm y que el funcionamiento a velocidades más altas tiene que ser factible, avanzar el comienzo de la inyección debe considerarse como una opción realista para cumplir con los requisitos de operación del motor en condiciones más exigentes.

Para investigar el efecto del comienzo de la inyección, se realizaron una serie de simulaciones de CFD a tiempos de inyección de 1 ° y 22 ° BTDC, anchos de pulso de inyección de 4 ms y 6 ms y regímenes del motor de 2000 y 4000 rpm.

La *Tabla 7* muestra la fracción de la masa del hidrógeno inyectado que permanece en el colector de admisión ($\omega_{H_2}^{im}$ %) después del cierre de la válvula de admisión. Como se esperaba, avanzar el comienzo de la inyección tiene un efecto positivo en la introducción de hidrógeno en el cilindro, sin embargo, el fenómeno está dominado en gran medida por el régimen del motor. Esto se debe a que la ventana de tiempo disponible para la inyección disminuye a medida que aumenta el régimen del motor. Incluso avanzando mucho el comienzo de la inyección (1 ° BTDC) y reduciendo el ancho del pulso de inyección (4 ms), la fracción de hidrógeno que no puede entrar al cilindro a 4000 rpm es muy alta, 30 %. De hecho, la mayoría del hidrógeno (62 %) permaneció en el colector de admisión a 4000 rpm si el tiempo de inyección se mantiene a 22 ° BTDC.

Además, si el ancho del pulso de inyección es relativamente grande, se inyectaría hidrógeno en ángulos de cigüeñal muy por encima de 160 ° BTDC cuando la capacidad de succión del cilindro es muy limitada. Si esta situación se mantiene de ciclo a ciclo, se establece una situación transitoria que conduce a una acumulación de hidrógeno que puede provocar eventos de combustión anómalos.

Por lo tanto, además de un dimensionamiento adecuado de las válvulas, el diseño de los inyectores de hidrógeno es otro factor clave. De hecho, como ya se mencionó, los inyectores montados suministran hidrógeno a una velocidad de flujo másico de 0,31 mg/ms, lo que parece ser insuficiente para garantizar un funcionamiento del motor libre de retroceso de llama a altos regímenes del motor.

Régimen motor (rpm)	Pulso de inyección (ms)	Comienzo inyección (° BTDC)	$\omega_{H_2}^{im}$ (%)
2000	4	1	5
2000	4	22	6
2000	6	1	5
2000	6	22	9
4000	4	1	30
4000	4	22	48
4000	6	1	50
4000	6	22	62

Tabla 7 Resultados de las simulaciones de CFD realizadas para distintas inyecciones de H₂

Finalmente, para el diseño de un colector adecuado se debe tener en cuenta las ondas de presión y la apertura del inyector junto con la velocidad del sonido para mejorar el llenado mediante la sobrealimentación por resonancia. Esa velocidad, que también pueden contribuir a la acumulación de hidrógeno es diferente para las mezclas de hidrógeno y aire que, para las mezclas de gasolina y aire.

5.3.5 Prestaciones óptimas del motor

Teniendo en cuenta los límites del motor, se llevaron a cabo algunos experimentos finales para determinar su mejor respuesta posible en condiciones libres de combustiones anómalas. Con ese fin, después de un período de calentamiento inicial, la mezcla de hidrógeno y aire que

alimenta a los cuatro cilindros se enriqueció progresivamente aumentando el ancho del pulso de inyección de H₂.

El motor funcionaba a diferentes velocidades y se determinaron en cada caso los valores más altos del par motor efectivo y potencia que podrían lograrse en ausencia de combustiones anómalas. Los resultados se recogen en la *Tabla 8*, donde también se han incluido los valores de ancho de pulso de inyección y λ .

Régimen motor (rpm)	Pulso de inyección (ms)	Aire/combustible (λ)	Par motor M_e (Nm)	Potencia N_e (kW)
1000	7,59	1,3	50,3	5,27
2000	7,85	1,35	63,5	13,3
3000	7,92	1,42	65,4	20,5
4000	8,42	1,49	67,2	28,1
5000	8,76	1,52	64	33,5

Tabla 8 Las mejores prestaciones del motor a las velocidades indicadas y condiciones normales de combustión

Se puede ver que la mezcla de aire/hidrógeno que proporciona las mejores prestaciones del motor se vuelve más pobre (mayor λ) a medida que aumenta el régimen del motor. Esto podría deberse al hecho de que, a velocidades más altas del motor, la cantidad de hidrógeno inyectado también aumenta, así como la fracción de hidrógeno que permanece en el colector de admisión, lo que aumenta la probabilidad de provocar eventos de combustión anómalos.

Mientras que el valor más alto de la potencia efectiva (33,5 kW) se obtuvo a la velocidad máxima del motor considerada (5000 rpm), el par motor efectivo más alto (67,2 Nm) resultó a 4000 rpm. Al comparar estos valores con el mejor rendimiento del motor alcanzado cuando se usa gasolina como combustible (59 kW a 5000 rpm y 132 Nm a 3800 rpm), [1], está claro que se produce una pérdida en las prestaciones del motor de aproximadamente el 50 % al reemplazar la gasolina por hidrógeno. Esto se debe en gran medida a la propensión del hidrógeno a sufrir fenómenos de combustión anómalos, que obliga a trabajar con mezclas más pobres que la estequiométrica, típica de los motores de gasolina. De ahí, la importancia de su detección temprana y precisa.

5.3.6 Conclusiones

Se ha encontrado que existe una buena correlación entre la presión en el cilindro y las mediciones de aceleración en el bloque motor con respecto a la detección de ciclos de combustión con detonación en un motor comercial de combustión interna de encendido provocado de inyección indirecta alimentado con mezclas de hidrógeno y aire. Para mejorar la precisión, las señales se descompusieron en sus componentes de baja y alta frecuencia por medio del análisis de la transformada de Fourier convencional. Las frecuencias altas y bajas se distinguieron como los valores superiores e inferiores a 20 veces el régimen del motor, respectivamente.

Los casos con detonación fueron muy bien descritos por las componentes de alta frecuencia de las señales de presión y aceleración, que llegaron a alcanzar variaciones de hasta aproximadamente 20 bar y 250 g, respectivamente. El criterio adoptado, basado en el régimen del motor, tiene la ventaja de tener en cuenta los importantes efectos introducidos por el régimen del motor para condicionar la probabilidad de sufrir combustiones anómalas.

Por primera vez, las mediciones de presión en el cilindro y vibración en el bloque motor se han simultaneado con el registro de sonido ambiente. La señal directa grabada por el micrófono permitió detectar un fuerte ruido ronco asociado con el retroceso de llama, pero no permitió distinguir la detonación de la señal de fondo a pesar del característico ruido metálico que se podía escuchar durante algunos ciclos de combustión. Sin embargo, un análisis espectral de la señal mediante bandas de tercera octava mejoró enormemente la sensibilidad.

A este respecto, un ciclo de detonación típico podría distinguirse de un ciclo de combustión normal a través de las bandas de frecuencia más altas (entre 8 kHz y 20 kHz) que fueron 8-10 dB más intensas que en el caso de los ciclos normales de combustión.

En cuanto al retroceso de llama, esta anomalía podría estar asociada a bandas de octava más intensas en las frecuencias más bajas (entre 250 Hz y 4 kHz). Estos resultados indican que la detección e identificación de combustiones anómalas es posible a través de mediciones acústicas.

Mediante una optimización de las condiciones experimentales, particularmente la ubicación del micrófono, probablemente se podrán obtener resultados mucho más precisos. Por lo tanto, existe un gran potencial para el desarrollo de sensores acústicos para la detección de

combustiones anómalas en motores de automoción, que pueden resultar de especial utilidad para la mejora de las prestaciones al emplear hidrógeno como combustible.

Las simulaciones de CFD realizadas con un modelo físico que reproducía los sistemas para la formación de mezclas y la inyección de combustible revelaron que pueden surgir anomalías de combustión como resultado del hecho que el motor fue diseñado originalmente para funcionar con gasolina, un combustible mucho más denso que el hidrógeno.

Se ha encontrado que una fracción del hidrógeno inyectado aún permanece en el colector de admisión después de que la válvula de admisión hubiera cerrado. Esta fracción aumenta con el ancho del pulso de inyección para obtener mezclas más ricas y especialmente cuando los regímenes del motor aumentan (por ejemplo, de 5 a 9 % a 2000 rpm y de 30 a 62 % a 4000 rpm) debido a la reducción de la ventana de tiempo disponible para la inyección de combustible que se produce al aumentar el régimen de giro.

La acumulación de hidrógeno que tiene lugar aumenta el riesgo de retroceso de llama, lo que a su vez aumenta la probabilidad de sufrir detonación en los ciclos de combustión posteriores. Los resultados de la simulación indicaron que la dimensión de las válvulas y el caudal de hidrógeno suministrado por los inyectores no son lo suficientemente grandes como para asegurar que todo el hidrógeno inyectado entre a los cilindros.

La conclusión es que, aunque la adaptación de los motores de gasolina para funcionar con hidrógeno es obviamente factible, se recomienda un diseño específico de los componentes clave cuando el motor se alimenta con hidrógeno para evitar los problemas asociados con los fenómenos de combustiones anómalas.

6 CONCLUSIONES GENERALES

La tecnología de motores de combustión interna cuenta con casi siglo y medio de experiencia y evolución. Durante este dilatado periodo de tiempo se ha producido un enorme desarrollo tecnológico que ha dado como resultado un alto grado de fiabilidad. El paso que supone pasar del empleo de combustibles líquidos convencionales a gaseosos como el hidrógeno está plenamente justificado para aprovechar las ventajas que ofrece una tecnología madura, segura robusta y fiable ante un escenario a medio plazo en el que será necesario evitar las emisiones de gases con efecto invernadero en el sector del transporte y automoción. El hidrógeno se integra fácilmente con la energía eléctrica en general, y con la de origen renovable en particular, dado que permite almacenar la energía durante los periodos en los que existe un excedente del recurso renovable. Además, el hidrógeno presenta algunas ventajas interesantes como combustible para motores de combustión interna como es el amplio intervalo comprendido entre los límites de inflamabilidad inferior y superior, así como una muy elevada velocidad de combustión. Sin embargo, también son destacables sus inconvenientes, que se traducen en la práctica en una pérdida de prestaciones del motor en comparación con otros combustibles, en especial los líquidos, y una menor autonomía. Estos inconvenientes surgen esencialmente de la muy baja densidad del hidrógeno y su tendencia a producir combustiones anómalas, que lleva a emplear mezclas con aire pobres en combustible, con la consiguiente penalización en cuanto a prestaciones.

En la presente tesis doctoral ha abordado los problemas mencionados: menores de prestaciones del motor y propensión a las combustiones anómalas. El estudio se ha realizado en un motor comercial Volkswagen de 1,4 L y 59 kW de gasolina alimentado con mezclas hidrógeno-metano y adaptado previamente para utilizar hidrógeno puro.

Con el uso de mezclas hidrógeno-metano se consigue un aumento de autonomía, con respecto a la utilización de hidrogeno puro. La mezcla con metano permite almacenar más energía por unidad de volumen y además obtenemos mejores prestaciones del vehículo aunque a costa de unas mayores emisiones contaminantes. Se ha prestado especial atención a las mezclas con bajo contenido de metano (5-20 % vol., 29,6-66,7 % peso). La principal motivación de la adición de cantidades relativamente pequeñas de metano al hidrógeno es extender las relaciones aire/combustible (λ) a valores más cercanos a las condiciones estequiométricas con un riesgo reducido de producir combustiones anómalas.

Se ha encontrado que λ es la variable de operación más influyente en el rendimiento del motor debido a su marcado efecto en la temperatura de combustión. Se tiende a operar con valores elevados de λ para evitar anomalías de combustión como la detonación, sobre todo, pero también el retroceso de llama. El resultado es una reducción del rendimiento efectivo y el par motor debido al reducido contenido energético de la mezcla y una temperatura de combustión más baja.

Desde el punto de vista de las emisiones contaminantes, el uso de mezclas de hidrógeno-metano tiene efectos positivos sobre la generación de óxidos de nitrógeno ($[\text{NO}_x]$, g/kWh). Esto es debido, por una parte, a que se pueden usar mezclas aire/combustible más ricas, λ más bajos, lo que deja una menor disponibilidad de oxígeno. Por otra parte, se produce una disminución de la temperatura de combustión con el aumento de contenido de metano que provoca una reducción de la formación de NO_x térmico. Además, las emisiones se pueden reducir adicionalmente optimizando el avance al encendido, aunque por las características de la combustión del metano no es posible usar valores excesivamente bajos de este parámetro.

Con respecto a las emisiones específicas de CO y HC, hay un efecto negativo evidente de la presencia de metano en la mezcla de combustible. Las emisiones de CO específicas son similares a las de NO_x , pero un orden de magnitud mayores que las de HC. En contraste con el caso de los óxidos de nitrógeno, el aumento de λ tiene efectos negativos sobre las emisiones específicas de CO y HC que se pueden atribuir a una reducción proporcional de la potencia. Por otro lado, el aumento del régimen del motor reduce las emisiones de estos contaminantes debido a la mejora del proceso de combustión por un incremento del fenómeno de turbulencia en el interior de los cilindros.

En cuanto al análisis de los fenómenos de combustiones anómalas al emplear hidrogeno como combustible, el trabajo se ha centrado en su detección e identificación. Se ha trabajado con instrumentación de laboratorio, como la presión en el cilindro, además de un acelerómetro como sistema de referencia al ser el sensor montado de serie en los vehículos. Como novedad, se ha incorporado por primera vez la detección a través de medidas del sonido ambiente.

Se ha encontrado que existe una buena correlación entre la presión en el cilindro y las mediciones de aceleración en el bloque motor con respecto a la detección de ciclos de combustión con detonación. Para mejorar la precisión, las señales se descompusieron en sus componentes de baja y alta frecuencia por medio del análisis de transformada de Fourier convencional. Las frecuencias altas y bajas se distinguieron tomando como referencia los

valores superiores e inferiores a 20 veces el régimen del motor, respectivamente. Los casos con detonación fueron muy bien descritos por los componentes de alta frecuencia de las señales de presión y aceleración que mostraron grandes cambios asociados de hasta aproximadamente 20 bar y 250 g, respectivamente. El criterio adoptado para distinguir señales de alta y baja frecuencia tiene la ventaja de adaptarse al régimen del motor lo que permite tener en cuenta los efectos del régimen de giro al influir en la probabilidad de aparición de combustiones anómalas.

Por lo que se refiere al sonido, la señal directa registrada por el micrófono permitió detectar el fuerte ruido ronco asociado al retroceso de llama, pero no permitió distinguir la detonación de la señal de fondo a pesar del característico ruido metálico que se podía escuchar durante algunos ciclos detonantes. Sin embargo, una elaboración de los resultados mediante un análisis espectral de la señal en términos de bandas de tercera octava mejoró enormemente la sensibilidad.

A este respecto, un ciclo de detonación típico podría distinguirse de un ciclo de combustión normal a través de las bandas con frecuencias más altas (entre 8 kHz y 20 kHz), que resultan 8-10 dB más intensas. En lo que respecta al retroceso de llama, esta anomalía podría estar asociada a bandas de octava más intensas en las frecuencias más bajas (entre 250 Hz y 4 kHz). Estos resultados indican que la detección de combustiones anómalas es posible a través de mediciones acústicas. Una optimización de las condiciones experimentales, particularmente la ubicación del micrófono seguramente proporcionará resultados de detección mucho más precisos que los logrados en este trabajo. Por lo tanto, existe un gran potencial para el desarrollo de sensores acústicos para la detección de combustiones anómalas en motores de automoción.

Para completar el estudio se han realizado simulaciones de CFD con un modelo físico del sistema de alimentación empleado en los ensayos experimentales para la formación de las mezclas y la inyección de combustible. Los resultados indican que pueden surgir anomalías de combustión como resultado del hecho de que el motor fue diseñado originalmente para funcionar con gasolina, un combustible mucho más denso que el hidrógeno. Se ha encontrado que una fracción del hidrógeno inyectado aún permanece en el colector de admisión después de que la válvula de admisión se haya cerrado. La acumulación de hidrógeno que tiene lugar aumenta el riesgo de retroceso de llama, lo que a su vez aumenta la probabilidad de sufrir detonación en los ciclos de combustión posteriores. Los resultados de la simulación indicaron que la dimensión de las válvulas y el caudal de hidrógeno suministrado por los inyectores no

son lo suficientemente grandes como para asegurar que todo el hidrógeno inyectado alcance los cilindros.

La conclusión es que, aunque la adaptación de los motores de gasolina para funcionar con hidrógeno es obviamente factible, se recomienda un diseño específico cuando el motor se alimenta con hidrógeno para evitar los problemas como los asociados a los fenómenos de combustiones anómalas.

7 FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO

Como líneas de futuro dentro del Grupo Hidrógeno de la UPNA se está trabajando en dos ámbitos diferentes.

Por un lado, el estudio y comparación de los niveles de ruido en el habitáculo de un automóvil comercial alimentado con gasolina e hidrógeno (*Figura 47*). Se está a punto de publicar un artículo con ensayos realizado en la UPNA. Para ello se ha utilizado el VW Polo adaptado de que dispone el grupo y se han realizado ensayos con ambos combustibles en ruta y en estático.



Fig.47 Ensayos de ruido en el habitáculo de un vehículo

Por otra parte, como continuación de un trabajo de colaboración previo [26], en el que se empleó como combustible un gas residual de coquería, se han realizado ensayos con CO puro, mezclas CO-H₂, H₂, H₂-CH₄, para predecir el comportamiento las mismas en un motor comercial. En estos momento se esta elaborando una publicación al respecto (*Figura 48*).

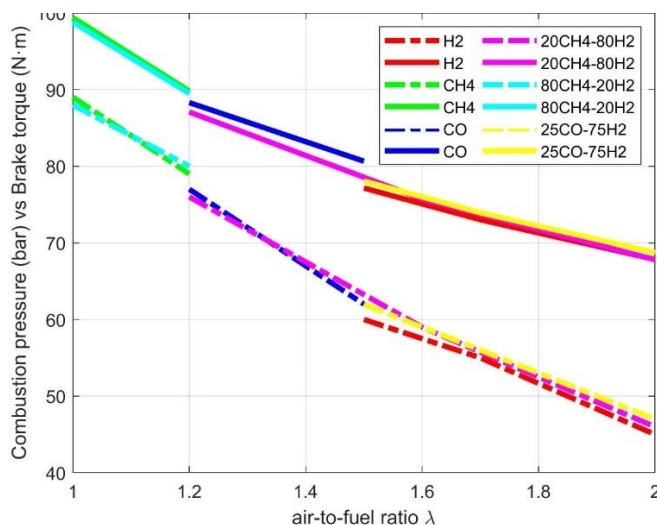


Fig.48 Modelo para la predicción del comportamiento de mezclas gaseosas combustibles

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

8 BIBLIOGRAFÍA

- [1] C. Sopena, P. M. Diéguez, D. Sáinz, J. C. Urroz, E. Guelbenzu, and L. M. Gandía, “Conversion of a commercial spark ignition engine to run on hydrogen: Performance comparison using hydrogen and gasoline,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 3, pp. 1420–1429, Feb. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2009.11.090.
- [2] D. Sáinz *et al.*, “Conversion of a gasoline engine-generator set to a bi-fuel (hydrogen/gasoline) electronic fuel-injected power unit,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 21, pp. 13781–13792, Oct. 2011, doi: 10.1016/j.ijhydene.2011.07.114.
- [3] D. Sáinz, P. M. Diéguez, C. Sopena, J. C. Urroz, and L. M. Gandía, “Conversion of a commercial gasoline vehicle to run bi-fuel (hydrogen-gasoline),” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 2, pp. 1781–1789, Jan. 2012, doi: 10.1016/j.ijhydene.2011.10.046.
- [4] D. Sáinz Casas, “Adaptación de un motor de combustión interna alternativo de gasolina para su funcionamiento con hidrógeno como combustible. Aplicaciones energética y de automoción. (PhD Thesis),” pp. 1–75, 2015.
- [5] European Commission, “Roadmap to a single European transport Area – towards a competitive and resource efficient transport system [White paper],” *Comm. Staff Work. Pap.*, 2011, doi: http://ec.europa.eu/transport/strategies/doc/2011_white_paper/white_paper_2011_ia_full_en.pdf.
- [6] European Commission, “COMMUNICATION FROM THE COMMISSION: A Roadmap for moving to a competitive low carbon economy in 2050,” *COM(2011) 112 Final*, vol. 34, no. March, pp. 1–34, 2011, doi: 10.1002/jsc.572.
- [7] Revista de la sociedad de técnicos de Automoción de España., “S.T.A.,” vol. nº199, 2016.
- [8] CE Comisión Europea, “REGLAMENTO (UE) 2016/646 DE LA COMISIÓN de 21 de abril de 2016 por el que se modifica el anexo VI del Reglamento (CE) n.o 1223/2009 d,” vol. 29, no. 10, pp. 42–68, 2016.
- [9] A. Ugurlu and S. Oztuna, “A comparative analysis study of alternative energy sources for automobiles,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 34, pp. 11178–11188, Sep. 2015, doi: 10.1016/j.ijhydene.2015.02.115.
- [10] D. Singh, D. Sharma, S. L. Soni, S. Sharma, P. Kumar Sharma, and A. Jhalani, “A review on feedstocks, production processes, and yield for different generations of biodiesel,” *Fuel*, vol. 262. Elsevier Ltd, 15-Feb-2020, doi: 10.1016/j.fuel.2019.116553.
- [11] R. Bibi *et al.*, “Algal bioethanol production technology: A trend towards sustainable

- development,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 71, pp. 976–985, 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.12.126>.
- [12] “Bosch: synthetic fuels can make combustion engines CO2-neutral | Sustainability | Energy Digital.” [Online]. Available: <https://www.energydigital.com/sustainability/bosch-synthetic-fuels-can-make-combustion-engines-co2-neutral>. [Accessed: 22-Apr-2020].
- [13] E. Palmer, “Audi creates green ‘e-diesel fuel of the future’ using just carbon dioxide and water,” *Int. Bus. Times*, 2015.
- [14] E. Press, “Iberdrola entra en el negocio del hidrógeno con una inversión de 150 millones en un proyecto en Puertollano.”
- [15] C. Agrafiotis, H. von Storch, M. Roeb, and C. Sattler, “Solar thermal reforming of methane feedstocks for hydrogen and syngas production—A review,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 29, pp. 656–682, 2014, doi: 10.1016/j.rser.2013.08.050.
- [16] Heywood JB., “Internal combustion engine fundamentals,” *McGraw-Hill*, 1988.
- [17] “Gas Natural.” [Online]. Available: http://www.aeh2.org/index.php?option=com_content&view=article&id=121%253Agas-natural&catid=36%253Asocios&Itemid=53&lang=es. [Accessed: 28-Apr-2020].
- [18] “E.ON inaugurates first 2 MW Power-to-Gas unit in Falkenhagen,” *Fuel Cells Bull.*, vol. 2013, no. 9, p. 9, Sep. 2013, doi: 10.1016/s1464-2859(13)70325-0.
- [19] M. A. Escalante Soberanis and A. M. Fernandez, “A review on the technical adaptations for internal combustion engines to operate with gas/hydrogen mixtures,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 21, pp. 12134–12140, Nov. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2009.09.070.
- [20] S. Verhelst, “Recent progress in the use of hydrogen as a fuel for internal combustion engines,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 2, pp. 1071–1085, 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.10.102.
- [21] S. J. Szwabowski *et al.*, “Ford Hydrogen Engine Powered P2000 Vehicle.” SAE International , 2002, doi: 10.4271/2002-01-0243.
- [22] T. Wallner *et al.*, “Fuel economy and emissions evaluation of BMW Hydrogen 7 Mono-Fuel demonstration vehicles,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 24, pp. 7607–7618, 2008, doi: 10.1016/j.ijhydene.2008.08.067.
- [23] Summary of an Integrated Project in the 6th Framework Programme of the European Commission, “HyICE Optimization of the Hydrogen Internal Combustion Engine,” no. February, 2007.
- [24] H. Iwasaki, H. Shirakura, and A. Ito, “A Study on Suppressing Abnormal Combustion

- and Improving the Output of Hydrogen Fueled Internal Combustion Engines for Commercial Vehicles.” SAE International , 2011, doi: 10.4271/2011-01-0674.
- [25] P. A. Dennis, R. J. Dingli, P. Abbasi Atibeh, H. C. Watson, M. J. Brear, and G. Voice, “Performance of a port fuel injected, spark ignition engine optimised for hydrogen fuel,” *SAE 2012 World Congr. Exhib.*, 2012, doi: 10.4271/2012-01-0654.
- [26] R. Ortiz-Imedio *et al.*, “Comparative performance of coke oven gas, hydrogen and methane in a spark ignition engine,” *Int. J. Hydrogen Energy*, 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.12.165.
- [27] P. M. Diéguez *et al.*, “Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures,” *Appl. Energy*, vol. 113, pp. 1068–1076, Jan. 2014, doi: 10.1016/j.apenergy.2013.08.063.
- [28] P. M. Diéguez, J. C. Urroz, D. Sáinz, J. Machin, M. Arana, and L. M. Gandía, “Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block-engine vibration, and acoustic measurements,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 172, pp. 67–80, Sep. 2018, doi: 10.1016/J.ENCONMAN.2018.06.115.
- [29] ELSEVIER, “Factor de impacto (cálculo de 2 años) de la revista Applied Energy.” [Online]. Available: https://journalinsights.elsevier.com/journals/0306-2619/impact_factor.
- [30] ELSEVIER, “Factor de impacto (cálculo 5 años) de la revista Applied Energy.” [Online]. Available: https://journalinsights.elsevier.com/journals/0306-2619/impact_factor_5_year.
- [31] ELSEVIER, “Factor de impacto (cálculo de 2 años) de la revista Energy Conversion and Management.” [Online]. Available: https://journalinsights.elsevier.com/journals/0196-8904/impact_factor.
- [32] ELSEVIER, “Factor de impacto (cálculo 5 años) de la revista Energy Conversion and Management.” [Online]. Available: https://journalinsights.elsevier.com/journals/0196-8904/impact_factor_5_year.
- [33] M. J. Moran and H. N. Shapiro, *Fundamentals of Engineering Thermodynamics, 5th Edition*. 2006.
- [34] V. Knop, A. Benkenida, S. Jay, and O. Colin, “Modelling of combustion and nitrogen oxide formation in hydrogen-fuelled internal combustion engines within a 3D CFD code,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, pp. 5083–5097, Aug. 2008, doi: 10.1016/j.ijhydene.2008.06.027.

- [35] J. Park, H. Cha, S. Song, and K. M. Chun, “A numerical study of a methane-fueled gas engine generator with addition of hydrogen using cycle simulation and DOE method,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 8, pp. 5153–5162, 2011, doi: 10.1016/j.ijhydene.2011.01.019.
- [36] F. Moreno, M. Muñoz, J. Arroyo, O. Magén, C. Monné, and I. Suelves, “Efficiency and emissions in a vehicle spark ignition engine fueled with hydrogen and methane blends,” *Int. J. Hydrogen Energy*, 2012, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.04.012.
- [37] X. Zhen *et al.*, “The engine knock analysis - An overview,” *Applied Energy*, vol. 92. Elsevier Ltd, pp. 628–636, 01-Apr-2012, doi: 10.1016/j.apenergy.2011.11.079.
- [38] Z. Wang, H. Liu, and R. D. Reitz, “Knocking combustion in spark-ignition engines,” *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 61, pp. 78–112, Jul. 2017, doi: 10.1016/J.PECS.2017.03.004.
- [39] X. Tang, D. M. Kabat, R. J. Natkin, W. F. Stockhausen, and J. Heffel, “Ford P2000 hydrogen engine dynamometer development,” in *SAE Technical Papers*, 2002, doi: 10.4271/2002-01-0242.
- [40] J. Fiolka, “Fractional fourier transform and its application to engine knock detection,” in *Proceedings of the 22nd International Conference Mixed Design of Integrated Circuits and Systems, MIXDES 2015*, 2015, doi: 10.1109/MIXDES.2015.7208593.
- [41] J. Pan and C. G. W. Sheppard, “A theoretical and experimental study of the modes of end gas autoignition leading to knock in S. I. engines,” in *SAE Technical Papers*, 1994, doi: 10.4271/942060.
- [42] J. Pan, G. Shu, and H. Wei, “Research on in-cylinder pressure oscillation characteristic during knocking combustion in spark-ignition engine,” *Fuel*, vol. 120, pp. 150–157, Mar. 2014, doi: 10.1016/j.fuel.2013.11.054.
- [43] T. Su, C. Ji, S. Wang, L. Shi, J. Yang, and X. Cong, “Effect of spark timing on performance of a hydrogen-gasoline rotary engine,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 148, pp. 120–127, Sep. 2017, doi: 10.1016/j.enconman.2017.05.064.
- [44] M. Božić, A. Vučetić, M. Sjerić, D. Kozarac, and Z. Lulić, “Experimental study on knock sources in spark ignition engine with exhaust gas recirculation,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 165, pp. 35–44, Jun. 2018, doi: 10.1016/j.enconman.2018.03.053.
- [45] H. Li and G. A. Karim, “Knock in spark ignition hydrogen engines,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 29, no. 8, pp. 859–865, Jul. 2004, doi: 10.1016/j.ijhydene.2003.09.013.
- [46] D. Bradley and G. T. Kalghatgi, “Influence of autoignition delay time characteristics of different fuels on pressure waves and knock in reciprocating engines,” *Combust.*

- Flame*, vol. 156, no. 12, pp. 2307–2318, Dec. 2009, doi: 10.1016/j.combustflame.2009.08.003.
- [47] S. Szwaja, K. R. Bhandary, and J. D. Naber, “Comparisons of hydrogen and gasoline combustion knock in a spark ignition engine,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 32, no. 18, pp. 5076–5087, Dec. 2007, doi: 10.1016/j.ijhydene.2007.07.063.
- [48] M. F. J. Brunt, C. R. Pond, and J. Biundo, “Gasoline engine knock analysis using cylinder pressure data,” in *SAE Technical Papers*, 1998, doi: 10.4271/980896.
- [49] Q. he Luo and B. gang Sun, “Inducing factors and frequency of combustion knock in hydrogen internal combustion engines,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 36, pp. 16296–16305, Sep. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.05.257.
- [50] T. Li, T. Yin, and B. Wang, “A phenomenological model of knock intensity in spark-ignition engines,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 148, pp. 1233–1247, Sep. 2017, doi: 10.1016/j.enconman.2017.06.078.
- [51] X. Shen, Y. Zhang, T. Shen, and C. Khajorntraidet, “Spark advance self-optimization with knock probability threshold for lean-burn operation mode of SI engine,” *Energy*, vol. 122, pp. 1–10, Mar. 2017, doi: 10.1016/j.energy.2017.01.065.
- [52] O. Boubai, “Knock detection in automobile engines,” *IEEE Instrum. Meas. Mag.*, vol. 3, no. 3, pp. 24–28, 2000, doi: 10.1109/5289.863907.
- [53] J. D. Naber, J. R. Blough, D. Frankowski, M. Goble, and J. E. Szpytman, “Analysis of combustion knock metrics in spark-ignition engines,” in *SAE Technical Papers*, 2006, doi: 10.4271/2006-01-0400.
- [54] M. D. Redel-Macías, C. Hervás-Martínez, P. A. Gutiérrez, S. Pinzi, A. J. Cubero-Atienza, and M. P. Dorado, “Computational models to predict noise emissions of a diesel engine fueled with saturated and monounsaturated fatty acid methyl esters,” *Energy*, vol. 144, pp. 110–119, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.energy.2017.11.143.

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

9 ANEXOS

upna

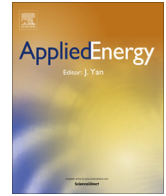
Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

9.1 ANEXO I

Artículo I: *“Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures”*

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa



Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures



P.M. Diéguez, J.C. Urroz, S. Marcelino-Sádaba, A. Pérez-Ezcurdia, M. Benito-Amurrio, D. Sáinz, L.M. Gandía*

Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y de Telecomunicación, Universidad Pública de Navarra, Campus de Arrosadía, E-31006 Pamplona, Spain

HIGHLIGHTS

- A modified four-cylinder 1.4 L SI engine was fueled with hydrogen/methane mixtures.
- Low methane concentrations, within the 0–20 vol.% range, have been considered.
- The air-to-fuel ratio (λ) is a critical variable due to its influence on temperature.
- High values of λ are detrimental to performance but reduce the specific NO_x emissions.
- Lowering the spark advance and increasing the methane content reduce NO_x emissions.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 29 April 2013
Received in revised form 24 July 2013
Accepted 21 August 2013
Available online 13 September 2013

Keywords:

Adapted SI engine
Hydrogen–methane mixtures
Hydrogen energy
Internal combustion engine
Emissions
Transportation sector

ABSTRACT

The use of hydrogen/methane mixtures with low methane contents as fuels for internal combustion engines (ICEs) may help to speed up the development of the hydrogen energy market and contribute to the decarbonization of the transportation sector. In this work, a commercial 1.4 L four-cylinder Volkswagen spark-ignition engine previously adapted to operate on pure hydrogen has been fueled with hydrogen/methane mixtures with 5–20 vol.% methane (29.6–66.7 wt.%). An experimental program has been executed by varying the fuel composition, air-to-fuel ratio (λ), spark advance and engine speed. A discussion of the results regarding the engine performance (brake torque, brake mean effective pressure, thermal efficiency) and emissions (nitrogen oxides, CO and unburned hydrocarbons) is presented. The results reveal that λ is the most influential variable on the engine behavior due to its marked effect on the combustion temperature. As far as relatively high values of λ have to be used to prevent knock, the effect on the engine performance is negative. In contrast, the specific emissions of nitrogen oxides decrease due to a reduced formation of thermal NO_x. A clear positive effect of reducing the spark advance on the specific NO_x emissions has been observed as well. As concerns CO and unburned hydrocarbons (HCs), their specific emissions increase with the methane content of the fuel mixture, as expected. However, they also increase as λ increases in spite of the lower fuel concentration due to a proportionally higher reduction of the power. Finally, the effect of the increase of the engine speed is positive on the CO and HCs emissions but negative on that of NO_x due to improved mixing and higher temperature associated to intensified turbulence in the cylinders.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

One of the most likely uses of hydrogen energy in the future is in the transportation sector. Whereas fuel cells, batteries and electric engines offer efficient solutions for the propulsion of vehicles, internal combustion engines (ICEs) have potential to speed up the development of a hydrogen energy market due to their availability,

versatility, reliability and relatively low cost. The lack of a distribution and delivery infrastructure and the very high economic cost of introducing one are recognized as key obstacles for the widespread use of hydrogen in the short term [1]. In contrast, natural gas has a well-established distribution network. Moreover, compressed natural gas (CNG) has been used for long time as fuel for ICEs, particularly spark-ignition (SI) engines in natural gas-fueled vehicles (NGVs) [2].

Natural gas has very good fuel properties mainly due to its high octane number (120–130) that allows for increased compression ratios without risk of detonation resulting in thermal efficiencies

* Corresponding author. Tel.: +34 948 169 605; fax: +34 948 169 606.

E-mail addresses: pmde@unavarra.es (P.M. Diéguez), lgandia@unavarra.es (L.M. Gandía).

Nomenclature

BTDC	before top dead center	\dot{Q}	power associated to the heat losses, W
BMEP	brake mean effective pressure	R	universal gas constant, 8.314 J/(mol K)
c_p	specific heat, J/(mol K)	SA	spark advance ($^{\circ}$ BTDC)
CNG	compressed natural gas	SI	spark-ignition
C_{NO_x}	NO_x concentration in the engine exhaust, ppm	T	temperature, K or $^{\circ}C$
CO	carbon monoxide	\dot{V}_f	fuel flow rate, normal L/min
EGR	exhaust gas recirculation	W	power delivered by the engine, W
h_f^0	specific enthalpy of formation at the standard state, J/mol		
Δh	specific enthalpy change, J/mol	<i>Subscripts</i>	
HCS	unburned hydrocarbons	e	exit
HHV	higher heating value	f	formation
H_2 ICE	hydrogen-fueled ICE	i	inlet
ICE	internal combustion engine	P	products
MBP	maximum brake power (kW)	ref	reference
MBT	maximum brake torque (N m)	R	reactants
M_{NO_x}	NO_x molecular weight, g/mol		
\dot{n}	molar flow rate, mol/s	<i>Greek letters</i>	
N_e	exhaust moles formed per mol of fuel	α	independent term for c_p/R in Eq. (4)
NGVs	natural gas-fueled vehicles	η	molar fraction of methane in the fuel mixture
NO_x	nitrogen oxides	λ	air-to-fuel ratio
$[NO_x]$	specific NO_x emissions, g/kW h		
P	engine effective power, kW		

comparable to that of gasoline-fueled ICEs. On the other hand, methane is characterized by lower volumetric efficiency but higher air-to-fuel ratio (λ) at stoichiometric conditions compared with gasoline [3]. The result of these factors is that the power output of a natural gas-fueled engine is typically 10–15% below that of a gasoline engine [4]. Of course, strategies such as direct-injection [5], turbocharging [6] and intercooling can improve the power output although operation under these conditions often leads to increased nitrogen oxides (NO_x) emissions [4]. Exhaust gas recirculation (EGR) is frequently used for reducing NO_x emissions from ICEs but in the case of natural gas-fueled engines, the cycle-by-cycle variations of the cylinder peak pressure and the maximum rate of pressure rise increase with the EGR ratio [7]. Nevertheless, fuel-lean operation is required to limit NO_x emissions. In this regard, methane shows some drawbacks associated to its relatively low flame propagation velocity that under lean-burn operation can lead to incomplete combustion, increased cycle-by-cycle variations and occasional flame failure [8]. Adding hydrogen to natural gas extends the lean limit of combustion; in this way, extremely low emissions can be achieved. More specifically, Sierens and Rosseel [9] showed that the best strategy is to adjust the fuel composition (hydrogen content) as a function of the engine load without throttling. So, at low loads, pure hydrogen could be used at high air-to-fuel ratios ($\lambda > 2$). At intermediate loads, a low-hydrogen mixture (e.g. hythane: 20 vol.% hydrogen, 80 vol.% methane) can be employed to maintain NO_x emissions at low level ($\lambda > 1.5$) but using exhaust aftertreatment for CO and unburned hydrocarbons. At full load nearly pure methane would have to be used for achieving high brake mean effective pressure. On the other hand, the very high flame speed of hydrogen allows shorter combustion duration, and leads to higher peak and total cycle heat fluxes and a smaller lag between ignition and heat flux peak compared with methane, as found by Demuyne et al. [10]. Moreover, hydrogen addition has a pronounced effect on reducing the cyclic variability of the indicated mean effective pressure [11]. From a complementary point of view, adding methane to hydrogen allows extending the rich-fuel operating region while reducing the risk of hydrogen combustion anomalies such as backfire and knock [12,13].

From the above discussion it is clear that hydrogen/natural gas mixtures have great interest as fuel for ICEs. As a matter of fact, there is a considerable literature on the subject. Several authors have reviewed the works published till the 1997–2003 period [3,9,14,15]; more recent papers by Kahraman et al. [16], Akansu and Bayrak [17] and Mariani et al. [18] include an update of the state-of-the-art. Very recently, Klell et al. [19] have performed a very interesting and thorough update of the advantages, synergies, potential and regulatory aspects of the use of hydrogen/methane mixtures in ICEs. Much of the published studies mainly deal with investigating how the addition of relatively low hydrogen amounts (below 30 vol.%) to natural gas/methane increases the thermal efficiency and improves the engine performance; great attention is also paid to the emissions [20,21]. In these studies, the influence of some individual variables such as γ , the injection timing and EGR ratio is investigated [5,7,15–18,22–25]. As natural gas is a fossil energy source, an increasing number of papers is appearing on the use of hydrogen/biogas mixtures. Used biogas comes from the anaerobic digestion of biomass or organic wastes [26–28], or is a model gas produced by mixing pure methane and carbon dioxide [29]. The use of gases obtained from the catalytic decomposition of biogas has been also reported [30]. In much of the published works, the results on the use of hydrogen/methane mixtures were obtained on single-cylinder dedicated ICEs which are very versatile research tools [31]. There are also studies with bigger commercial engines. Sierens and Rosseel [9] employed a Crusader T7400 eight-cylinder in V SI engine with a displacement volume of 7.4 L and compression ratio of 8.5:1. The engine, based on the GM 454 one, was adapted for use of gaseous fuels. Ma et al. [6,24,32] used an in-line six-cylinder Dongfeng Motor Co. Ltd. engine originally designed for city bus application. The CNG turbocharged SI engine had a displacement volume of 6.2 L and operated with a compression ratio of 10.5:1. Wang et al. [33] worked with an in-line six-cylinder Weifang diesel engine converted to run on CNG with a compression ratio of 16:1. Park et al. [34] used a heavy-duty turbocharged six-cylinder natural gas-fueled Doosan Infracore Inc. engine with a displacement volume of 11 L. Akansu and coworkers [15–17] carried out a series of studies with a four-cylinder 1.8 L SI Ford engine. Song and cowork-

ers [28,29] employed a turbocharged gas engine generator with a four-cylinder SI engine fueled with biogas/hydrogen mixtures. Thurnheer et al. [22] used a 2 L four-cylinder engine with a compression ratio of 13.5:1 and Wang et al. [35] a three-cylinder engine. Genovese et al. [36] reported on road experimental tests with buses equipped with Mercedes turbocharged six-cylinder engines of 6.9 L and 170 kW that were fed with fuel mixtures containing 5–25 vol.% hydrogen. Klell et al. [19] have developed a flex-fuel prototype vehicle capable of operating with any mixture of natural gas and hydrogen based on a 1.8 L four-cylinder supercharged engine. Mariani et al. [18] have recently reported on the performance of a Fiat Panda 1.2 NP equipped with a four-cylinder SI engine of 38 kW at 5000 rpm operated with a compression ratio of 9.8:1 and fueled with mixtures containing 15 and 30 vol.% hydrogen. Park et al. [37] used a heavy duty 11 L six-cylinder engine of a city bus.

In previous papers by our group we have reported on the modifications carried out to adapt the gasoline SI engine of a Volkswagen Polo 1.4 to be fueled with hydrogen [38]. A gasoline carbureted engine-generator set was also converted to an electronic fuel-injected power unit capable to operate bi-fuel (hydrogen–gasoline) [39]. Later on, a commercial Volkswagen Polo 1.4 A04 vehicle was adapted to run bi-fuel, that is, with gasoline or hydrogen as desired by the driver [40]. In the present work we have investigated the performance of the four-cylinder Volkswagen engine adapted to run on hydrogen [38] fed with hydrogen/methane mixtures. A collection of experimental data has been obtained by varying the hydrogen content of the fuel mixture, λ and the engine load and speed. This work has been carried out in the framework of a project devoted to the production and applications of renewable hydrogen obtained from water electrolysis and wind energy [41–44].

Main novelty of this work lies on the fact that, in contrast with most the previously published papers, fuel mixtures with relatively low methane contents, up to 20 vol.%, are considered. It should be noted that this apparently low content is in reality much higher when it is expressed as mass percentage (up to 66.7 wt.% methane) so we decided to restrict the study to this composition. While there is considerable information available on the performance of ICEs running on methane-rich mixtures, say above 70 vol.% methane (94.9 wt.%), which is an interesting use of hydrogen for improving the combustion characteristics of methane and accelerating the introduction of hydrogen in the energy system, there exists much less information on the performance of these engines running on fuels more convenient for contributing to the decarbonization of the transportation sector. So, using low-methane content mixtures has really the potential of reducing the environmental impact, provided that hydrogen is obtained from renewable sources. These mixtures are also interesting because pure hydrogen should be used at high values of λ in naturally aspirated port fuel injection spark ignition ICEs to prevent combustion anomalies such as pre-ignition and backfiring. Adding methane to hydrogen extends the rich-fuel limit of hydrogen combustion thus allowing engine operation with fuel–air mixtures closer to stoichiometric conditions due to the good knock resistant properties of methane resulting in higher brake torque and power [45]. Of course, direct-injection or turbocharging of pure hydrogen can be used to improve the power output but these solutions require a much more complex and expensive adaptation of our original ICE that is outside the scope of this study.

2. Engine and experimental equipment and methods

The Volkswagen engine and test bed cell used in this study were described in detail in a previous paper [38]. It is an in-line four-cylinder naturally aspirated port fuel injection spark ignition engine

with a displacement volume and compression ratio of 1.4 L and 10.5:1, respectively. Running on gasoline, the engine provided maximum brake torque (MBT) and maximum brake power (MBP) of 132 N m at 3800 rpm and 59 kW at 5000 rpm, respectively. The engine was adapted to run on hydrogen (H_2 ICE) modifying the fuel feeding and electronic management systems. The gasoline injectors were substituted by hydrogen injectors (Quantum Technologies), and a metallic gas accumulator was manufactured and connected to the injectors to maintain constant the pressure at the injectors' inlet. The original electronic control unit was replaced by a programmable MoTeC M400 unit. The original lambda sensor was replaced by a wideband lambda sensor (Bosch LSU 4.9) suitable for lean operation. The modified engine was tested in a bed cell consisting of an eddy current dynamometer AVL 80 that provided precisions for torque and engine speed of $\pm 0.2\%$ and ± 1 rpm, respectively. Running on pure hydrogen, it provided a MBT of 63 N m at 3800 rpm and MBP of 32 kW at 5000 rpm. These modest values were in part due to the conservative operation conditions adopted retarding the ignition advance to values far from producing knock. The brake thermal efficiency of the H_2 ICE was greater than that of the gasoline engine except for $\lambda > 1.8$. A significant effect of the spark advance on the NO_x emissions was found; operation at λ ratios higher than 1.8 produced low NO_x emissions of the order of 50–75 ppm.

Sensors and actuators were connected to the MoTeC M400 unit and calibrated. Flow meters (Bronkhorst) provided the hydrogen and air mass flow rates with a precision of $\pm 0.5\%$. Pressure and temperature in the intake manifold were recorded with a Bosch 03C.906.051 apparatus. The crankshaft angle and pressure in cylinder number 1 were measured by using a Kistler 6117BFD47 sensor with precisions of $\pm 0.02^\circ$ and $\pm 0.6\%$, respectively. A Bosch ETT 008.31 analyzer was attached to determine CO ($\pm 0.001\%$), CO_2 ($\pm 0.1\%$) and unburned hydrocarbons (HCs, ± 2 ppm) in the exhaust gases. A Horiba MEXA-720NOx analyzer was used to determine NO_x (precision of ± 2 ppm). There was no catalyst mounted on the exhaust.

In this work, pure hydrogen and hydrogen/methane mixtures with volumetric methane content of 5%, 10% and 20% have been considered. The mixtures were prepared and delivered by Air Liquide in gas cylinders of 50 L at 200 bar that were mounted in the experimental test bed cell described in a previous work [38]. The fuel feeding line includes two pressure reduction stages. The first one consists of a high-pressure regulator connected to the gas cylinders that reduces the pressure to 9 bar. In the second stage the pressure is further reduced to 3 bar means of a pressure regulator that gives access to a gas accumulator connected to the fuel injectors.

The flammability limits have critically conditioned the design of the experiments. As it is well-known, hydrogen has a very wide flammability range but combustion anomalies such as backfire and knock prevent for using low air-to-fuel ratios. For this reason, values of λ above 1.6 were typically used. The usual experimental procedure was to set the engine speed and change the throttle opening thus allowing the test bed cell to provide a resistance torque. Several engine speeds between 2000 and 5000 rpm were employed for each set of experimental conditions. Runs were typically conducted at full load. Optimum injection timing and spark advance maps were first obtained for maximum engine power or efficiency. As these maps were almost coincident, the criterion of maximum thermal efficiency was finally adopted.

3. Results and discussion

In what follows the results of the engine performance and emission characteristics will be presented and discussed. Due to the

strong influence of the combustion temperature on the engine performance and on the combustion process and other chemical reactions leading to the formation of pollutants such as NO_x, it is illustrative starting with an analysis of the maximum (adiabatic) flame temperature and its dependence on two relevant operating variables for this study: the fuel composition and λ.

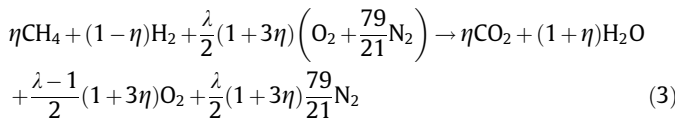
Application of the first law of thermodynamics to the combustion process leads to

$$\dot{Q} + \dot{W} = \sum_{e=1}^P \dot{n}_e (h_f^0 + \Delta h)_e - \sum_{i=1}^R \dot{n}_i (h_f^0 + \Delta h)_i \quad (1)$$

where \dot{Q} corresponds to the heat losses, \dot{W} is the power delivered by the engine, \dot{n}_e and \dot{n}_i the molar flow rates of the combustion products (P) and reactants (R), respectively, h_f^0 is the standard specific enthalpy of formation and Δh the specific enthalpy change of the exit (e) and inlet (i) states with respect to the conditions of the standard state (1 atm and 298.15 K). As we are interested in comparing the maximum temperatures, we set $\dot{Q} = 0$ and $\dot{W} = 0$, so the combustion gases result from the cylinder at the so-called adiabatic flame temperature. In such a case Eq. (1) becomes

$$\sum_{e=1}^P \dot{n}_e (h_f^0 + \Delta h)_e = \sum_{i=1}^R \dot{n}_i (h_f^0 + \Delta h)_i \quad (2)$$

Now we will consider the combustion of 1 mol of fuel composed of η moles of CH₄ and (1 - η) moles of H₂. Assuming complete combustion of the fuel in air with a given air-to-fuel ratio (λ)



Combining Eqs. (2) and (3) assuming that Δh can be taken as 0 for the reactants because they are at conditions close to the standard state, and that all the compounds are ideal gases with specific heat c_p given by:

$$c_p/R = \alpha + \beta T + \gamma T^2 + \dots \quad (4)$$

where T is the temperature and R the universal gas constant, and that Δh can be approximated by

$$\Delta h = \alpha R(T - T_{ref}) \quad (5)$$

where T_{ref} is a reference temperature, the adiabatic flame temperature becomes

$$T = T_{ref} + \frac{\eta h_{f, \text{CH}_4}^0 - [\eta h_{f, \text{CO}_2}^0 + (1 + \eta) h_{f, \text{H}_2\text{O}}^0]}{R[\eta \alpha_{\text{CO}_2} + (1 + \eta) \alpha_{\text{H}_2\text{O}} + \frac{\lambda - 1}{2} (1 + 3\eta) \alpha_{\text{O}_2} + \frac{\lambda}{2} \frac{79}{21} (1 + 3\eta) \alpha_{\text{N}_2}]} \quad (6)$$

Fig. 1 shows the evolution of the adiabatic flame temperature as a function of the fuel composition and the air-to-fuel ratio obtained solving Eq. (6) taking T_{ref} = 25 °C and the values of h_f⁰ and α found in [46]. As can be seen, the adiabatic flame temperature strongly depends on λ and decreases as the air-to-fuel ratio increases due to the lower fuel content of the mixture and the diluting effect of the oxygen and nitrogen in excess introduced with the air. As for the fuel composition, the adiabatic flame temperature decreases as the molar or volumetric fraction of methane increases, particularly at low methane contents. Although the higher heating value (HHV) of methane on a molar basis (888 kJ/mol) is about three times higher than that of hydrogen (283.6 kJ/mol), this is more than compensated by the fact that the combustion of 1 mol of methane requires four times more oxygen (or air) than 1 mol of hydrogen.

In practice, combustion temperatures will be obviously lower than the values in Fig. 1 mainly due to the power delivered by the engine and the heat losses. On the other hand, the temperature and pressure in the cylinder strongly depend on the ignition advance. As mentioned in Section 2, in this work, optimum spark advance maps for maximum thermal efficiency were established and adopted.

3.1. Engine performance

The brake torque is obviously linked to the power cycle of the gases in the cylinder which in turn depends on the engine speed, load, spark advance and fuel nature. Regarding the hydrogen–methane mixtures, as a representative example of our results, Fig. 2 shows the brake torque as a function of λ and the fuel composition at full load, 3400 rpm and optimum spark advance. It can be seen that the brake torque slightly changes with the fuel composition but it clearly decreases as the air-to-fuel ratio increases. This behavior can be interpreted in terms of the effect of the combustion temperature as it is very similar to the evolution of the adiabatic flame temperature, as illustrated in Fig. 1. It is well-known that hydrogen combustion presents the risks of backfire and knock that prevent from operating at low values of λ. On the

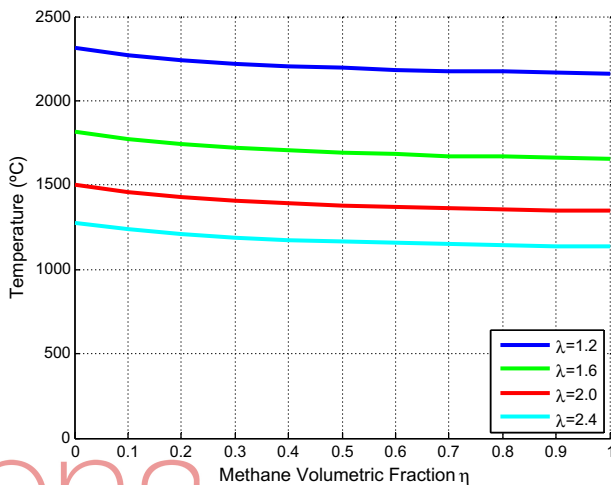


Fig. 1. Evolution of the adiabatic flame temperature as a function of the air-to-fuel ratio (λ) and the methane molar fraction (η) of the fuel.

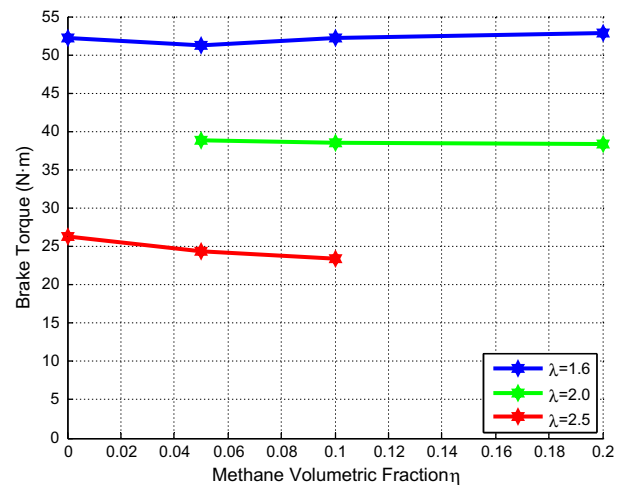


Fig. 2. Evolution of the engine brake torque as a function of λ and the fuel composition at full load, 3400 rpm and optimum spark advance.

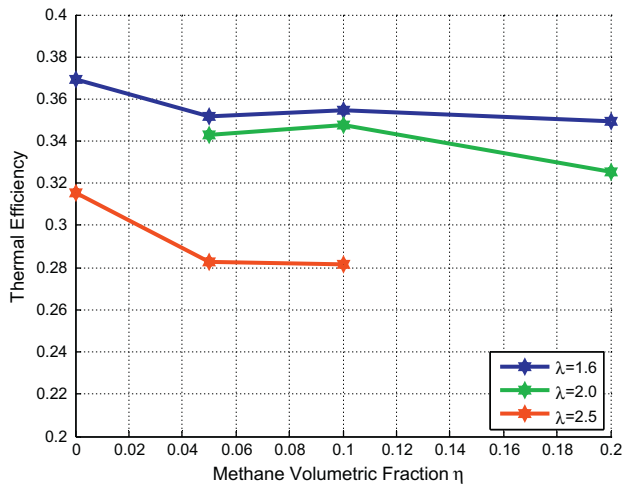


Fig. 3. Evolution of the thermal efficiency as a function of λ and the fuel composition at full load, 4200 rpm and optimum spark advance.

other hand, there is no problem on combusting methane at stoichiometric conditions ($\lambda = 1$). Therefore, from the point of view of the engine performance, the addition of methane to hydrogen has the positive effect of allowing fuel richer operation thus increasing the engine torque. As concerns the brake mean effective pressure (BMEP), its values at the conditions of the results shown in Fig. 3 essentially depend on the air-to-fuel ratio. As expected, the BMEP decreases as λ increases; in this case from 4.7 bar for $\lambda = 1.6$, to 3.5 bar for $\lambda = 2.0$ and finally, about 2.3 bar for $\lambda = 2.5$.

Fig. 3 shows the results corresponding to the thermal efficiency, that is, the ratio between the effective power and the fuel heating power. Tests were conducted at full load, optimum spark advance and 4200 rpm; similar results were obtained at other engine speeds. It can be seen that the efficiency drops from 34–35% for λ values of 1.6–2.0 to 28–30% when the air-to-fuel ratio increases up to 2.5. The results show a trend towards lower efficiencies as the methane content of the fuel increases. As for the engine torque, the influence of the operating conditions on the mechanical efficiency can be explained in terms of the influence of the combustion temperature. Indeed, as explained before, the combustion temperature decreases as the methane content of the fuel increases. As a result, the highest efficiencies are obtained when using pure hydrogen. Similarly, the combustion temperature decreases as the fuel mixture becomes leaner (see Fig. 1) thus explaining the decrease of the mechanical efficiency as λ increases.

3.2. Emission characteristics

3.2.1. Nitrogen oxides (NO_x)

In this work, the specific NO_x emissions ($[NO_x]$, g/kWh) have been calculated from the concentration of nitrogen oxides (C_{NO_x} in ppm) measured in the engine exhaust according to the following expression

$$[NO_x] = \frac{60 \cdot 10^{-6}}{22.4} \cdot \frac{\dot{V}_f \cdot N_e \cdot M_{NO_x} \cdot C_{NO_x}}{P} \quad (7)$$

where \dot{V}_f (normal L/min) is the fuel flow rate, N_e the exhaust moles formed from 1 mol of fuel assuming complete combustion (which depends on η and λ , see Eq. (3)), P (kW) the brake power and M_{NO_x} (g/mol) the NO_x molecular weight that has been taken as 30 assuming that the produced nitrogen oxides are mainly formed by NO [47].

As it is well-known, the rate of the chemical reactions producing nitrogen oxides according to the extended Zeldovitch model is favored by the increase of the temperature and the concentration of the reactants (N_2 and O_2). Obviously, fuel-rich mixtures (low values of λ) will favor NO_x formation due to the dominating effect of temperature [18,47–49]. Nevertheless, it is possible through the control of the spark advance (SA) to modify the pressure, and then the combustion temperature, reached in the cylinders. The effect of the ignition timing on lean combustion limit when using hydrogen/natural gas as fuel has been by Wang et al. [50]. In our case, the results included in Table 1 correspond to the operation of the modified engine with pure hydrogen at λ of 1.6 and 2000 rpm. As can be seen, as the spark advance increases maintaining constant the fuel flow rate, both the maximum pressure and NO_x concentration increase whereas the effective power remains virtually unchanged. Reducing the spark advance from 20 to 10° BTDC (before top dead center) leads to a decrease of the NO_x concentration in the exhaust from 214 to 113 ppm. Fig. 4 shows the experimental pressure–volume diagrams corresponding to the thermodynamic cycles developed under the operating conditions of Table 1. These results are in accordance with those of Park et al. [51] who found that peak cylinder pressures increased with advancing spark timing and increasing the fuel hydrogen content. The heat release rate diagram corresponding to the thermodynamic cycle developed under the operating conditions included in Table 1 at spark advance of 10° BTDC is shown in Fig. 5. As can be seen the ignition takes place at the end of the compression stroke, at crank angle of 350° in accordance with the spark advance used in this case. Maximum rate of heat release is reached early during the power stroke at 375°. After that, the heat release rate starts to decrease with the fuel burning being completed at crank angle of approximately 415°.

Regarding the influence of the fuel composition, Fig. 6 shows the evolution of the specific NO_x emissions as a function of the spark advance and molar fraction of methane (η) in the fuel mixture at full load, λ of 1.6 and 3400 rpm. As explained above, the specific NO_x emissions increase with the spark advance, however, they strongly decrease with the methane content due to the decrease of the combustion temperature. This is a positive effect of adding methane to hydrogen fuel. When expressed as volumetric concentrations, the values at spark advance of 10° BTDC decrease from 93 ppm for pure hydrogen to 62 ppm for a mixture with $\eta = 0.20$. However, due to the lower flame speed of methane compared with hydrogen, the spark advance for optimum engine efficiency increases with the methane content compensating for this effect. In fact, as shown in Fig. 7, the specific emissions at optimal spark advance become almost only governed by the air-to-fuel ratio being relatively unaffected by the fuel composition at a given value of λ within the limits considered in this study. Only the fuel mixture with the highest methane content ($\eta = 0.20$) could be combusted under stoichiometric conditions ($\lambda = 1$). The rest of the fuels, including pure hydrogen, presented tendency to knock that prevented from using values of λ lower than 1.6. NO_x emissions under stoichiometric conditions were very high, reaching up to 3.05 g/kWh in spite of the very low oxygen availability. When using $\lambda = 1.6$ the emissions were close to 1 g/kWh and dropped to 0.3–0.4 g/kWh when the air-to-fuel increased to 2–2.5.

Table 1

Influence of the spark advance on the peak pressure and NO_x concentration in the exhaust for engine operation on pure hydrogen at $\lambda = 1.6$ and 2000 rpm.

Spark advance (° BTDC)	\dot{V}_f (NI/min)	Brake power (kW)	Maximum pressure (bar)	C_{NO_x} (ppm)
10	155.4	10.6	40.7	113
15	155.4	10.7	46.0	159
20	155.6	10.6	50.1	214

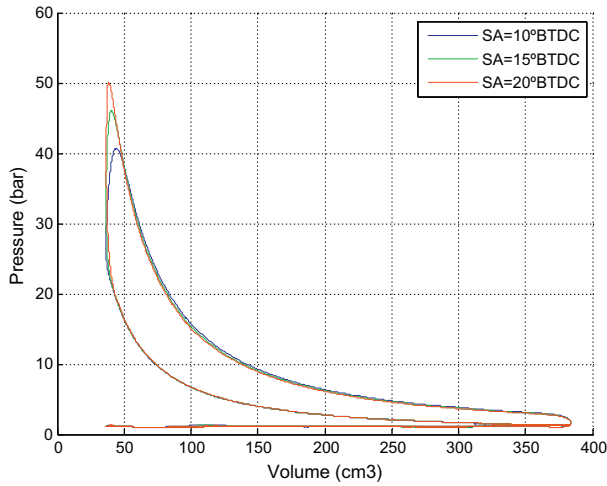


Fig. 4. Pressure-volume diagrams corresponding to the thermodynamic cycles developed under the operating conditions of Table 1.

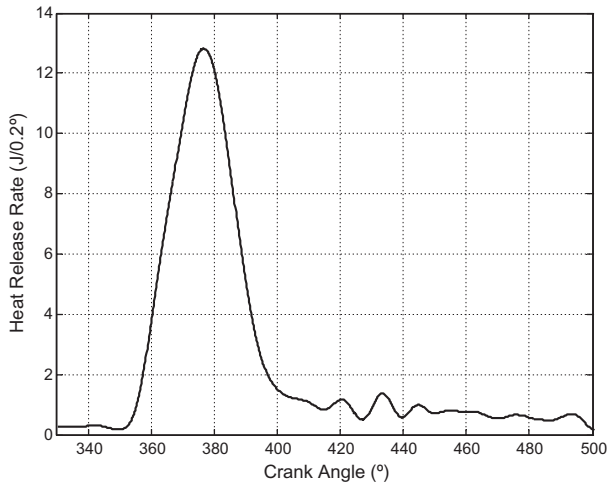


Fig. 5. Heat release rate diagram corresponding to the thermodynamic cycle developed under the operating conditions included in Table 1 at spark advance of 10° BTDC.

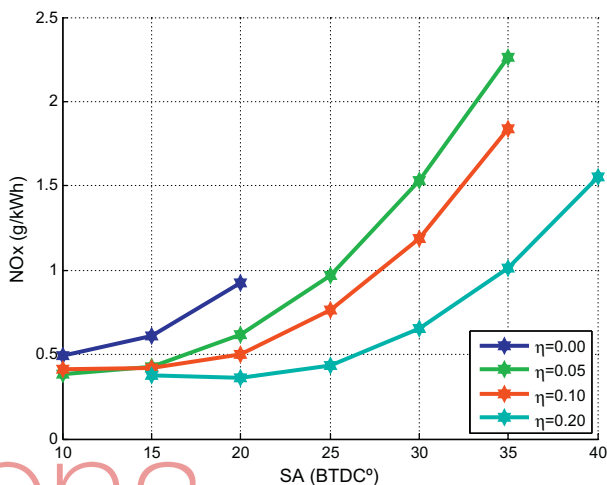


Fig. 6. Evolution of the specific NO_x emissions as a function of the spark advance and fuel composition at full load, λ = 1.6 and 3400 rpm.

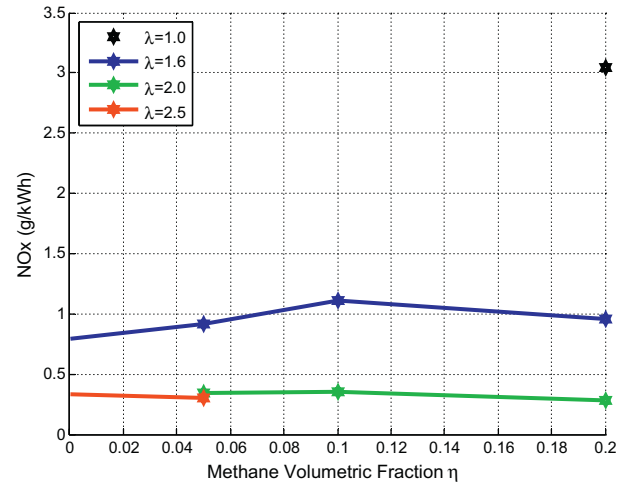


Fig. 7. Evolution of the specific NO_x emissions as a function of λ and fuel composition at full load, 2000 rpm and optimum spark advance.

As concerns the influence of the engine speed, it has been found (results not shown) that the specific NO_x emissions increase with the engine speed. For example, at λ = 2, full load, η = 0.2 and optimum spark advance, the emissions increase from 0.32 to 0.39 and finally 0.47 g/kW h when the engine speed increases from 3400 to 4200 and finally 5000 rpm. As the engine speed increases the turbulence becomes intensified leading to improved mixing, higher combustion temperatures and NO_x emissions. Nevertheless, the influence of the engine speed on the nitrogen oxides emissions is much less marked than that of the air-to-fuel ratio or the spark advance.

3.2.2. Carbon monoxide (CO)

The influence of the spark advance and fuel composition on the CO emissions at λ = 1.6 is shown in Fig. 8 where the solid lines correspond to data obtained at an engine speed of 4200 rpm whereas dash-dotted lines correspond to a lower speed of 3400 rpm. Obviously, the main effect is that of the fuel composition because as the carbon (methane) content of the fuel increases that of CO in the engine exhaust increases as well. It can be seen in Fig. 8 that the emissions increase from virtually 0 with pure hydrogen to about 0.3, 0.45 and 0.8 g/kW h for fuel mixtures containing 5, 10 and

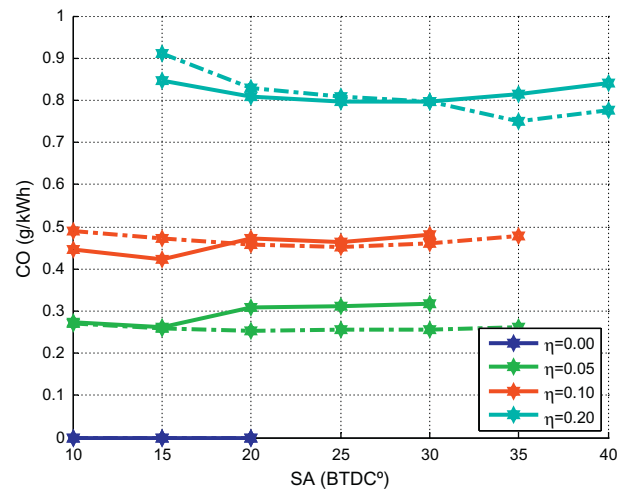


Fig. 8. Evolution of the specific CO emissions as a function of the spark advance and fuel composition at full load and λ = 1.6. Solid and dash-dotted lines correspond to engine speeds of 4200 and 3400 rpm, respectively.

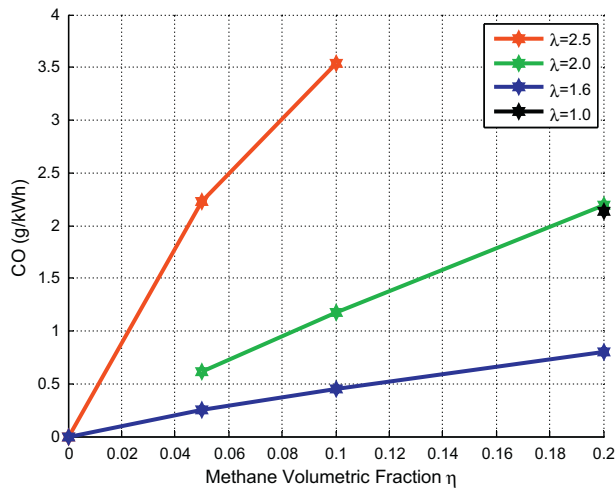


Fig. 9. Evolution of the specific CO emissions as a function of λ and fuel composition at full load, 3400 rpm and optimum spark advance.

20 vol.% of methane, respectively. On the other hand, the influence of the spark advance and the engine speed on the emissions of this pollutant is negligible.

As concerns the air-to-fuel ratio, Fig. 9 shows the results obtained at full load, optimum spark advance and engine speed of 3400 rpm. It can be seen that the CO emissions strongly increase with λ . For example for $\eta = 0.10$ (10 vol.% methane) the CO emissions at $\lambda = 2.5$ (3.6 g/kWh) are almost 7 times higher than when $\lambda = 1.6$ (0.5 g/kWh). A possible explanation of this somewhat unexpected result is that, in spite of the lower carbon content of the air/fuel mixture as λ increases, a proportionally greater reduction of the power is produced thus leading to increased specific emissions. This reasoning is in accordance with Moreno et al. [45], who found a similar trend regarding the specific CO₂ emissions of a naturally aspirated two-cylinder SI engine fueled with hydrogen and methane blends at full load.

Specific CO emissions for $\eta = 0.20$ under stoichiometric conditions and at $\lambda = 2$ are almost coincident (about 2.2 g/kWh) and 3 times higher than at $\lambda = 1.6$ (about 0.8 g/kWh). This suggests that stoichiometric conditions neither are favorable for minimum carbon monoxide emissions, probably in this case due to a lack of

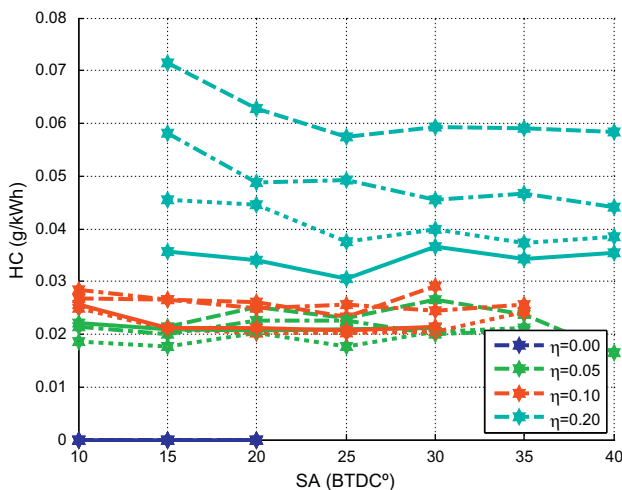


Fig. 10. Evolution of the specific unburned hydrocarbons emissions as a function of the spark advance and fuel composition at full load and $\lambda = 1.6$. Solid, dotted, dash-dotted and dashed lines correspond to engine speeds of 4200, 3400, 2600 and 1800 rpm, respectively.

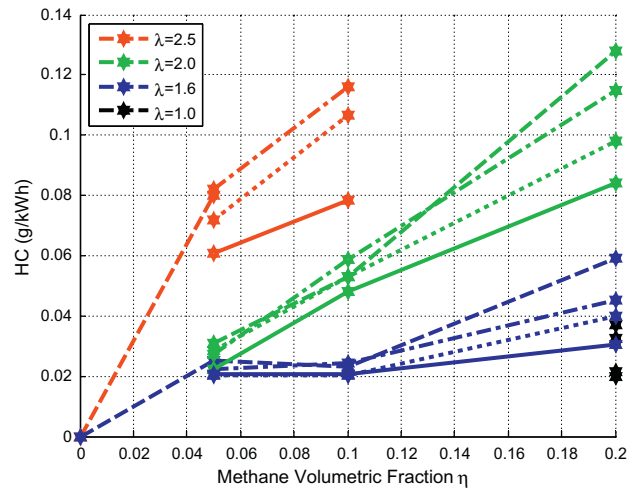


Fig. 11. Evolution of the specific unburned hydrocarbons emissions as a function of λ and fuel composition at full load and optimum spark advance. Solid, dotted, dash-dotted and dashed lines correspond to engine speeds of 4200, 3400, 2600 and 1800 rpm, respectively.

oxygen availability. For this reason, considerably lower CO emissions are produced at the intermediate λ value of 1.6 compared with $\lambda = 1$ or 2.

3.2.3. Unburned hydrocarbons (HCs)

The influence of the spark advance, fuel composition and engine speed on the specific HCs emissions at $\lambda = 1.6$ is shown in Fig. 10. In this figure, solid, dotted, dash-dotted and dashed lines correspond to engine speeds of 4200, 3400, 2600 and 1800 rpm, respectively. In principle, it can be assumed that the HCs emissions correspond to unburned methane, so, as expected, the specific emissions increase with the methane content of the fuel, although the emissions are low compared to that of CO. Whereas the emissions of the fuels with $\eta = 0.05$ and 0.10 are similar, about 0.02 and 0.025 g/kWh, respectively, they increase significantly for $\eta = 0.20$. Moreover, for this fuel composition the influence of the engine speed on the HCs emissions becomes apparent. Indeed, the emissions increase from about 0.035 g/kWh at 4200 rpm to 0.06–0.07 g/kWh at 1800 rpm. The positive effect of the engine speed reducing the HCs emissions can be explained as the result of improved fuel combustion due to the increased turbulence in the cylinders that should favor the mixing of the reactants. The influence of the spark advance on the HCs emissions is very slight; although a tendency can be appreciated towards increased hydrocarbons emissions as the spark advance decreases.

Regarding the air-to-fuel ratio, Fig. 11 shows the results obtained at full load and optimum spark advance. As in the case of the CO emissions (see Fig. 9), the specific HCs emissions strongly increase with λ and as the engine speed decreases. As discussed above for CO, these results can be interpreted in terms of a proportionally greater reduction of the engine power as λ increases leading to increased specific emissions. However, in this case, the unburned hydrocarbons monotonously decrease as the air-to-fuel increases. Indeed, for $\eta = 0.20$ and engine speed of 4200 rpm (solid lines in Fig. 11) the HCs emissions decrease from 0.085 g/kWh at $\lambda = 2.0$ –0.03 g/kWh at $\lambda = 1.6$ and 0.02 g/kWh at stoichiometric conditions.

4. Conclusions

An experimental study has been carried out feeding with hydrogen/methane mixtures a commercial 1.4 L Volkswagen four-cylinder spark-ignition engine previously adapted to run on

pure hydrogen. In contrast with most of the studies reported in the literature, special attention has been paid to fuel mixtures with low methane content (5–20 vol.%, 29.6–66.7 wt.%). The main motivation of adding relatively small amounts of methane to hydrogen is to extend the rich-fuel limit of hydrogen combustion thus allowing operating at air-to-fuel ratios (λ) closer to stoichiometric conditions with a reduced risk of combustion anomalies.

It has been found that λ is the most influential operating variable on the engine performance due to its marked effect on the combustion temperature. As far as λ has to be maintained relatively high to prevent combustion anomalies, mainly knock, but also backfire, the result is a negative effect on parameters such as the engine thermal efficiency and torque due to the lower combustion temperature. Replacing hydrogen by methane up to 20 vol.% does not improve this situation due to the increased amount of air required in a molar basis to combust methane compared to hydrogen.

From the point of view of the specific nitrogen oxides (NO_x) emissions, using hydrogen/methane mixtures has positive effects because the decrease of the combustion temperature as both λ and the methane content increase leads to lower thermal NO_x formation. Moreover, the emissions can be additionally reduced using suitably low values of the spark advance although the combustion characteristics of methane prevent from using excessively low values of this parameter.

Regarding the CO and hydrocarbons (HCs) specific emissions, there is an obvious negative effect of the presence of methane in the fuel mixture. The specific CO emissions are similar to that of NO_x but an order of magnitude higher than that of HCs. In contrast with the case of the nitrogen oxides, increasing λ has negative effects on both CO and HCs specific emissions that can be attributed to a proportionally higher reduction of the power than that of the CO and HCs production. On the other hand, increasing the engine speed reduces the emissions of these pollutants due to the improved mixing associated to the intensified turbulence in the engine cylinders.

Acknowledgements

We gratefully acknowledge Acciona Biocombustibles S.A. for its financial support under R&D contract to the Public University of Navarra OTRI 2006 13 118 (CENIT project: SPHERA) and Volkswagen Navarra S.A. for the Volkswagen Polo 1.4 engine donation. LMG and PMD also acknowledge financial support by Ministry of Science and Innovation of the Spanish Government (ENE2012-37431-C03-03).

References

- [1] Rand DAJ, Dell RM. Hydrogen energy. Challenges and prospects. Cambridge (UK): RSC Publishing; 2008. p. 6.
- [2] Das LM, Gulati R, Gupta PK. A comparative evaluation of the performance characteristics of a spark ignition engine using hydrogen and compressed natural gas as alternative fuels. *Int J Hydrogen Energy* 2000;25:783–93.
- [3] Bauer CG, Forest TW. Effect of hydrogen addition on the performance of methane-fueled vehicles. Part I: effect on S.I. engine performance. *Int J Hydrogen Energy* 2001;26:55–70.
- [4] Korakianitis T, Namasivayam AM, Crookes RJ. Natural-gas fueled spark-ignition (SI) and compression-ignition (CI) engine performance and emissions. *Prog Energy Combust Sci* 2011;37:89–112.
- [5] Huang Z, Wang J, Liu B, Zeng K, Yu J, Jiang D. Combustion characteristics of a direct-injection engine fuelled with natural gas–hydrogen blends under different ignition timings. *Fuel* 2007;86:381–7.
- [6] Ma F, Wang M, Jiang L, Chen R, Deng J, Naeve N, et al. Performance and emission characteristics of a turbocharged CNG engine fuelled by hydrogen-enriched compressed natural gas with high hydrogen ratio. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:6438–47.
- [7] Huang B, Hu E, Huang Z, Zheng J, Liu B, Jiang D. Cycle-by-cycle variations in a spark ignition engine fuelled with natural gas–hydrogen blends combined with EGR. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:8405–14.
- [8] Bade Shrestha SO, Karim GA. Hydrogen as an additive to methane for spark ignition engine applications. *Int J Hydrogen Energy* 1999;24:577–86.
- [9] Sierens R, Rosseel E. Variable composition hydrogen/natural gas mixtures for increased engine efficiency and decreased emissions. *J Eng Gas Turbines Power* 2000;122:135–40.
- [10] Demuyneck J, Raes N, Zuliani M, De Paeppe M, Sierens R, Verhelst S. Local heat flux measurements in a hydrogen and methane spark ignition engine with a thermopile sensor. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:9857–68.
- [11] Sen AK, Wang J, Huang Z. Investigating the effect of hydrogen addition on cyclic variability in a natural gas spark ignition engine: wavelet multiresolution analysis. *Appl Energy* 2011;88:4860–6.
- [12] Verhelst S, Wallner T. Hydrogen-fueled internal combustion engines. *Prog Energy Combust Sci* 2009;35:490–527.
- [13] Verhelst S, Wallner T, Eichlseder H, Naganuma K, Gerbig F, Boyer B, et al. Electricity powering combustion: hydrogen engines. *Proc IEEE* 2012;100:427–39.
- [14] Akansu SO, Dulger Z, Kahraman N, Veziroglu TN. Internal combustion engines fuelled by natural gas–hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2004;29:1527–39.
- [15] Akansu SO, Kahraman N, Çeper B. Experimental study on a spark ignition engine fuelled by methane–hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:4279–84.
- [16] Kahraman N, Çeper B, Akansu SO, Aydin K. Investigation of combustion characteristics and emissions in a spark-ignition engine fuelled with natural gas–hydrogen blends. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:1026–34.
- [17] Akansu SO, Bayrak M. Experimental study of a spark ignition engine fuelled by CH_4/H_2 (70/30) and LPG. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:9260–6.
- [18] Mariani A, Morrone B, Unich A. Numerical evaluation of internal combustion spark ignition engines performance fuelled with hydrogen – natural gas blends. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:2644–54.
- [19] Klell M, Eichlseder H, Sartory M. Mixtures of hydrogen and methane in the internal combustion engine – synergies, potential and regulations. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:11531–40.
- [20] Acikgoz B, Celik C. An experimental study on performance and emission characteristics of a methane–hydrogen fuelled gasoline engine. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:18492–7.
- [21] Navarro E, Leo TJ, Corral R. CO_2 emissions from a spark ignition engine operating on natural gas–hydrogen blends (HCNG). *Appl Energy* 2013;101:112–20.
- [22] Thurnheer T, Soltic P, Eggenschwiller PD. S.I. engine fuelled with gasoline, methane and methane/hydrogen blends: heat release and loss analysis. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:2494–503.
- [23] Çeper BA, Akansu SO, Kahraman N. Investigation of cylinder pressure for H_2/CH_4 mixtures at different loads. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:4855–61.
- [24] Ma F, Wang Y, Ding S, Jiang L. Twenty percent hydrogen-enriched natural gas transient performance research. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:6523–31.
- [25] Xu J, Zhang X, Liu J, Fan L. Experimental study of a single-cylinder engine fuelled with natural gas–hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:2909–14.
- [26] Porpatham E, Ramesh A, Nagalingam B. Effect of hydrogen addition on the performance of a biogas fuelled spark ignition engine. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:2057–65.
- [27] Porpatham E, Ramesh A, Nagalingam B. Investigation on the effect of concentration of methane in biogas when used as a fuel for a spark ignition engine. *Fuel* 2008;87:1651–9.
- [28] Jeong C, Kim T, Lee K, Song S, Chun KM. Generating efficiency and emissions of a spark-ignition gas engine generator fuelled with biogas–hydrogen blends. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:9620–7.
- [29] Lee K, Kim T, Cha H, Song S, Chun KM. Generating efficiency and NO_x emissions of a gas engine generator fuelled with a biogas–hydrogen blend and using an exhaust gas recirculation system. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:5723–30.
- [30] Arroyo J, Moreno F, Muñoz M, Monné C. Efficiency and emissions of a spark ignition engine fuelled with synthetic gases obtained from catalytic decomposition of biogas. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:3784–92.
- [31] Laget O, Richard S, Serrano D, Soleri D. Combining experimental and numerical investigations to explore the potential of downsized engines operating with methane/hydrogen blends. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:11514–30.
- [32] Ma F, Wang Y, Liu H, Li Y, Wang J, Zhao S. Experimental study on thermal efficiency and emission characteristics of a lean burn hydrogen enriched natural gas engine. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:5067–75.
- [33] Wang Y, Zhang X, Li C, Wu J. Experimental and modeling study of performance and emissions of SI engine fuelled by natural gas–hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:2680–3.
- [34] Park C, Kim C, Choi Y. Power output characteristics of hydrogen–natural gas blend fuel engine at different compression ratios. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:8681–7.
- [35] Wang J, Chen H, Liu B, Huang Z. Study of cycle-by-cycle variations of a spark ignition engine fuelled with natural gas–hydrogen blends. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33:4876–83.
- [36] Genovese A, Contrisciani N, Ortenzi F, Cazzola V. On road experimental tests of hydrogen/natural gas blends on transit buses. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:1775–83.
- [37] Park C, Kim C, Choi Y, Won S, Moriyoshi Y. The influences of hydrogen on the performance and emission characteristics of a heavy duty natural gas engine. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:3739–45.

- [38] Sopena C, Diéguez PM, Sáinz D, Urroz JC, Guelbenzu E, Gandía LM. Conversion of a commercial spark ignition engine to run on hydrogen: Performance comparison using hydrogen and gasoline. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:1420–9.
- [39] Sáinz D, Diéguez PM, Urroz JC, Sopena C, Guelbenzu E, Pérez-Ezcurdia A, et al. Conversion of a gasoline engine-generator set to a bi-fuel (hydrogen/gasoline) electronic fuel-injected power unit. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:13781–92.
- [40] Sáinz D, Diéguez PM, Sopena C, Urroz JC, Gandía LM. Conversion of a commercial gasoline vehicle to run bi-fuel (hydrogen–gasoline). *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:1781–9.
- [41] Gandía LM, Oroz R, Ursúa A, Sanchis P, Diéguez PM. Renewable hydrogen production: performance of an alkaline water electrolyzer working under emulated wind conditions. *Energy Fuels* 2007;21:1699–706.
- [42] Diéguez PM, Ursúa A, Sanchis P, Sopena C, Guelbenzu E, Gandía LM. Thermal performance of a commercial alkaline water electrolyzer: experimental study and mathematical modeling. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33:7338–54.
- [43] Ursúa A, Marroyo L, Gubía E, Gandía LM, Diéguez PM, Sanchis P. Influence of the power supply on the energy efficiency of an alkaline water electrolyser. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:3221–33.
- [44] Ursúa A, Gandía LM, Sanchis P. Hydrogen production from water electrolysis: current status and future trends. *Proc IEEE* 2012;100:410–26.
- [45] Moreno F, Muñoz M, Arroyo J, Magén O, Monné C, Suelves I. Efficiency and emissions in a vehicle spark ignition engine fueled with hydrogen and methane blends. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:11495–503.
- [46] Moran MJ, Shapiro HN. *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*. 5th ed. Chichester: John Wiley & Sons; 2006.
- [47] Knop V, Benkenida A, Jay S, Colin O. Modelling of combustion and nitrogen oxide formation in hydrogen-fuelled internal combustion engines within a 3D CFD code. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33:5083–97.
- [48] Moreno F, Arroyo J, Muñoz M, Monné C. Combustion analysis of a spark ignition engine fueled with gaseous blends containing hydrogen. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:13564–73.
- [49] Tinaut FV, Melgar A, Giménez B, Reyes M. Prediction of performance and emissions of an engine fuelled with natural gas/hydrogen blends. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:947–56.
- [50] Wang X, Zhang H, Yao B, Lei Y, Sun X, Wang D, et al. Experimental study on factors affecting lean combustion limit of S.I engine fueled with compressed natural gas and hydrogen blends. *Energy* 2012;38:58–65.
- [51] Park J, Cha H, Song S, Chun KM. A numerical study of a methane-fueled gas engine generator with addition of hydrogen using cycle simulation and DOE method. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:5153–62.

upna

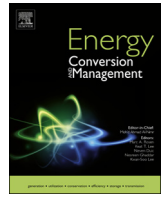
Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa

9.2 ANEXO II

Artículo II: “*Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block- engine vibration, and acoustic measurements*”

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa



Characterization of combustion anomalies in a hydrogen-fueled 1.4 L commercial spark-ignition engine by means of in-cylinder pressure, block-engine vibration, and acoustic measurements



P.M. Diéguez^a, J.C. Urroz^a, D. Sáinz^a, J. Machin^a, M. Arana^{a,b}, L.M. Gandía^{a,b,*}

^a School of Industrial & ICT Engineering, Public University of Navarre, Campus de Arrosadía, E-31006 Pamplona, Spain

^b Institute for Advanced Materials (InaMat), Public University of Navarre, 31006 Pamplona, Spain

ARTICLE INFO

Keywords:

Backfire
Hydrogen
Internal combustion engine
Knock
Noise
Pre-ignition

ABSTRACT

Abnormal combustion phenomena are among the main hurdles for the introduction of hydrogen in the transportation sector through the use of internal combustion engines (ICEs). For that reason the challenge is to guarantee operation free from combustion anomalies at conditions close to the ones giving the best engine output (maximum brake torque and power). To this end, an early and accurate detection of abnormal combustion events is decisive in order to allow the electronic control unit deciding suitable correcting actions. In this work, an automotive size 4-cylinder 1.4 L naturally aspirated port-fuel injection spark ignition Volkswagen engine adapted to run on hydrogen has been investigated. Three distinct methods (in-cylinder pressure, block-engine vibration and acoustic measurements) have been employed to detect abnormal combustion phenomena provoked through the enrichment of the hydrogen-air mixture fed to the cylinders under a wide range of engine speeds (1000–5000 rpm). It has been found that the high-frequency components of the in-cylinder pressure and block engine acceleration signals obtained after a Fourier transform analysis can be used for very sensitive detection of knocking combustion cycles. In the case of the ambient noise measurements, a spectral analysis in terms of third octave bands of the signal recorded by a microphone allowed an accurate characterization. Combustion anomalies could be detected through more intense octave bands at frequencies between 250 Hz and 4 kHz in the case of backfire and between 8 kHz and 20 kHz for knock. Computational fluid dynamics simulations performed indicated that some characteristics of the engine used such as the cylinder valves dimensions and the hydrogen flow rate delivered by the injectors play important roles conditioning the likelihood of suffering backfire events.

1. Introduction

Hydrogen of renewable origin has potential to play a relevant role in a more sustainable and environmental-friendly future transportation sector [1,2]. Whereas big R&D efforts are being directed toward vehicles mounting electric engines fueled by fuel cells or batteries, less attention is being paid to the internal combustion engines (ICEs) fueled with hydrogen or mixtures of hydrogen with other fuels such as methane (natural gas or biogas) [3,4]. In spite of their intrinsically low thermodynamic efficiency, ICEs fueled with hydrogen (H₂-ICEs) have the appealing advantages of being very robust and of requiring relatively easy and cheap modifications of the conventional gasoline-fueled ICEs [5–9]. H₂-ICEs would speed up, at least as a transitory technology, the incorporation of hydrogen into the transportation sector.

Even though hydrogen exhibits some properties making it a very

convenient fuel for use in ICEs such as wide range of flammability limits in air (4–75 vol% H₂) that facilitate both fuel-lean (in practice air-to-fuel ratios $\lambda < 4$) and fuel-rich operation, and very rapid combustion rates that improve the process efficiency (i.e. the indicated fuel conversion efficiency that can be determined from a thermodynamic analysis of the engine operating cycle [10]), other characteristics have less desirable effects [11,12]. In this regard, the low density of H₂, the increased NO_x emissions due to the high flame temperatures, and its propensity for producing abnormal combustion phenomena are key factors that limit the power output of H₂-ICEs. The limitations introduced by the low density of H₂ can be offset using suitable combustion mixture formation strategies such as supercharging and unthrottled operation at variable λ for spark-ignition (SI) port-fuel injection (PFI), SI direct-injection (DI) of H₂ in the cylinders, or even compression ignition DI. However, the strong influence of the

* Corresponding authors at: School of Industrial & ICT Engineering, Public University of Navarre, Campus de Arrosadía, E-31006 Pamplona, Spain (L.M. Gandía).
E-mail addresses: pmde@unavarra.es (P.M. Diéguez), lgandia@unavarra.es (L.M. Gandía).

<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.06.115>

Received 23 April 2018; Received in revised form 18 June 2018; Accepted 30 June 2018
0196-8904/© 2018 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Nomenclature

ABDC	after bottom dead centre
ATDC	after top dead centre
BDC	bottom dead centre
BTDC	before top dead centre
CA	crank angle (°)
CFD	Computational Fluid Dynamics
CR	compression ratio
DI	direct injection
EVC	exhaust valve closing
H ₂ -ICE	hydrogen-fueled ICE
ICE	internal combustion engine
MAP	manifold air pressure
MBP	maximum brake power (kW)
MBT	maximum brake torque (N·m)
<i>n</i>	engine speed (rpm)
NO _x	nitrogen oxides (ppm)
PCC	Pearson's correlation coefficient

PFI	port-fuel injection
RON	Research Octane Number
SA	spark advance (° BTDC)
SI	spark ignition
<i>t</i>	simulation time: time passed from the piston positioning at TDC (s)
<i>t</i> ₀	time passed between the intake valve opening and the piston reaching TDC (s)
TDC	top dead centre
WOT	wide open throttle
<i>Z</i> _{iv}	intake valve positioning (m)
<i>Z</i> _p	piston positioning (m)

Greek letters

λ	air-to-fuel ratio
$\omega_{H_2}^{im}$	fraction of hydrogen injected in the intake manifold remaining after intake valve closing, %

combustion mixture composition on the engine power output, NO_x emissions and combustion anomalies makes very challenging selecting the best H₂-ICE operating conditions [13,14]. Verhelst and Wallner have analyzed the possible control strategies that can be adopted for optimizing the trade-off existing between engine power output on the one hand, and NO_x emissions and combustion anomalies on the other, that hinders operating H₂-ICEs at or near stoichiometric fuel-air mixtures [15].

As concerns the abnormal combustion phenomena, they are, of course, not unique to H₂-ICEs as they are typical problems for the improvement of the thermal efficiency of conventional engines running on liquid fuels [10,16,17]. Combustion anomalies can be classified into three main categories: pre-ignition, backfire and knock [15], although the actual situation is much more complex due to the interaction between these phenomena [10]. For example, the occurrence of pre-ignition increases the likelihood of suffering backfire or knock in the next combustion cycles [18]. In any case, all of them consist in unscheduled combustion events that have negative effects on the engine performance. These effects can vary from a big loss of power output in the case of pre-ignition to the risk of severe damage of engine components in the case of backfire and knock. They can be distinguished by their origin and timing within the engine operating cycle. Pre-ignition and backfire are caused by hot spots inside the combustion chamber (spark plug electrodes, hot valves, oil ash, etc. [12]) that ignite the fuel-air mixture before the spark plug fires in SI engines. Pre-ignition takes place typically during the early stages of the compression stroke whereas backfire, also known as backflash, occurs during the intake stroke of engines with external fuel-air mixture formation systems. As the intake valves are still open, mixture combustion can extend to the intake manifold resulting that, in addition to the loss of torque output, backfire can cause strong damage of the mixture formation and fuel injection systems. The wide range of flammable H₂-air mixture compositions and the low energy required to ignite these mixtures that, as a matter of fact, reaches a minimum for the stoichiometric composition [12,15], are the main reasons for the tendency of H₂ to suffer from pre-ignition. Backfire problems can be reduced adopting fuel DI strategies; moreover, minimizing the possible causes of hot spots formation will obviously help to operate an engine reasonably free from pre-ignition and backfire. To this end, suitable design and maintenance of the fuel injection and engine cooling systems are very important. The fact that H₂ combustion does not generate particulates is an advantage in this regard.

In contrast to pre-ignition and backfire, knock occurs in SI engines after the spark plug has fired and a flame front has been formed inside

the cylinder. It takes place within the so-called knock window that goes from the late stages of the compression stroke when the piston is near the top dead centre (TDC) to several crank angle (CA) degrees at the beginning of the expansion stroke [19]. End-gas conditions change rapidly with flame propagation. Particularly, the temperature and pressure increase markedly as a result of the heat generated by the flame front and the compression due to the motion of the piston and the expansion of the hot combustion products thus leading to an acceleration of the combustion reactions rate. If the conditions are such that the concentration of free radical chemical species reaches critical values [18], spontaneous auto-ignition of the unburned gases can take place without the participation of any ignition source. This occurs at one or more points inside the end-gas region (typically near the cylinder walls [10,20]) giving rise to knock. This phenomenon has stochastic nature and the increase of pressure produced can reach peak values of several thousands of kPa in the case of heavy knock. Moreover, high-frequency oscillating pressure waves are generated that consist in acoustic vibration modes characteristic of the combustion chamber geometry. These waves are transmitted through the metallic structure causing engine vibration and a very characteristic sharp metallic (pinging) noise. In the event of prolonged heavy knock, the strong thermal and mechanical stresses suffered by the components of the combustion chamber may result in severe engine damage (piston ring sticking or breakage, cylinder head gasket failure, cylinder head erosion, piston melting, etc. [10]). Obviously the severity of knock will be higher at high engine loads and under any operating circumstance allowing the mass of auto-ignited end-gas to be a large fraction of the fresh charge. For that reason the spark advance (SA) becomes a key operating parameter to be optimized for obtaining the maximum brake torque (MBT) possible under knock-free conditions [21]. Exhaust gas recirculation has been also identified as an effective strategy to suppress knock [22].

Knock also depends greatly on the fuel properties and combustion chemistry [23]. In this regard, the induction time is defined as the time needed for some critical chemical species to reach a given concentration that allows initiating the combustion chain reactions by auto-ignition [10]. It is widely accepted that when the end-gas temperature and pressure are such that the induction time becomes lower than the time required to combust the whole fresh charge by flame propagation the knock phenomenon will likely take place [24]. On the other hand, the end-gas heterogeneities are key in determining the auto-ignition mode [18].

There is some controversy in the literature regarding the tendency of H₂ to originate knock. The very high auto-ignition temperature and

combustion rate of H_2 are factors that should contribute to an increased resistance to knock compared to the conventional liquid fuels. However, wide variations in flame propagation rates taking place during combustion when operating on pure H_2 have been considered to increase the risk of suffering from combustion anomalies [23]. The debate is due in part to the very different octane numbers reported for H_2 that in the case of the Research Octane Number (RON) range from 60 [25] to above 120 [12]. Verhelst and Wallner have discussed on these discrepancies pointing out that they are due to the experimental difficulties introduced by the high rate of H_2 combustion in air under stoichiometric conditions and the strong dependence of the reaction rate on mixture composition [15]. As pointed out by these authors, it is questionable using octane ratings to measure the knock resistance of H_2 because these standardized methods were developed for liquid fuels. Tang et al. [26] did not detect knock during an investigation carried out with an automotive-size 2.0 L PFI H_2 -ICE. It should be noted that this study was carried out with the engine running unthrottled on lean mixtures with λ values between 1.4 and 3. The only abnormal phenomenon noticed was pre-ignition that was observed when the engine was run on the richest H_2 -air mixture considered ($\lambda = 1.4$) at compression ratio (CR) of 14.5:1 and engine speed of 3000 rpm. However, several studies dedicated to investigate the onset mechanism, detection and characterization of knock reveal that this phenomenon is an important problem for H_2 -ICEs fueled with stoichiometric or near-stoichiometric H_2 -air mixtures [23,25–33]. As a result, key parameters such as CR, λ , and SA should be carefully selected in order to be able of giving the highest possible torque output at any time without knocking. Unfortunately these limitations give rise to a remarkable decrease of the peak power output compared to that of the operation with gasoline. In this regard, peak power values up to 35% lower at low and moderate engine speeds and up to 50% lower at the highest speeds (6000 rpm) have been reported [5].

Most studies on knock occurrence in H_2 -ICEs have been performed using single-cylinder research engines at moderate or low speeds [23,27–30]. On the other hand, investigations carried out on automotive-sized H_2 -ICEs did not observe knock [26,33] or focused on recording the in-cylinder pressure trace for detecting knock [25] or studying the distinctive characteristics of knock produced by H_2 auto-ignition [31,32]. In this context, a commercial SI Volkswagen engine adapted to run on hydrogen (PFI) has been employed in this work to investigate H_2 combustion anomalies. Three techniques based on the in-cylinder pressure, block engine vibration and ambient acoustic measurements have been employed. The data obtained have been analyzed to detect and characterize abnormal combustion events under a wide range of engine speeds. To our knowledge, there is no previous study similar to this one performed on automotive-size H_2 -ICEs, especially as concerns noise measurements. Finally, computational fluid dynamics (CFD) simulations have been performed in order to assess to what extent the characteristics of the adapted commercial engine used can influence on some of the abnormal combustion phenomena detected, particularly backfire.

2. Engine characteristics, experimental setup and methods

The engine and test facility used in this study were described in detail elsewhere [4,6]. Briefly, a Volkswagen 4-cylinder 1.4 L naturally aspirated PFI SI engine with a CR of 10.5:1 was employed. It gave maximum brake power (MBP) and MBT of 59 kW at 5000 rpm and 132 N·m at 3800 rpm, respectively, when fueled with gasoline. The engine was adapted to run on H_2 resulting in a significant performance reduction (MBP of 32 kW at 5000 rpm and MBT of 63 N·m at 3800 rpm) due in great part to the conservative operating conditions employed. As concerns the test bed cell, it consisted of an eddy current dynamometer AVL 80 [4,6]. Hydrogen and air flow rates were determined using mass-flow meters (Bronkhorst) with a precision of $\pm 0.5\%$. Pressure and temperature in the intake manifold were recorded with a Bosch

03C.906.051 apparatus. The CA and pressure in cylinder number 1 were measured with Kistler 2613B1 ($\pm 0.02^\circ$) and 6117B ($\pm 0.6\%$) sensors, respectively. The exhaust gases were analyzed with a Horiba MEXA-720NOx analyzer for NO_x determination with an accuracy of ± 30 ppm.

As for the block engine vibrations produced by abnormal combustion events they were measured using an accelerometer [34–36]. As a matter of fact this type of sensors are typically mounted on the commercial automotive engines fabricated in series. Whereas in-cylinder pressure measurements are typical at the laboratory scale, this technique is too costly to be implemented in commercial vehicles [27]. In this work, a Bruel & Kjaer 4504 tri-axial piezoelectric CCLD accelerometer (range: 1–10,000 Hz; sensitivity: $10 \pm 20\%$ mV/g) was used and placed near the head of the cylinder in which the combustion anomalies were recorded. Preliminary experiments showed an excellent agreement between the responses of the original accelerometer and the one mounted on the engine-block. The most intense signals were obtained in the direction parallel to the axis of the cylinders. Only the data recorded in that direction will be presented.

One of the main novelties of this work is that ambient sound measurements have been also performed to characterize abnormal combustion events. The acoustic measurements were conducted in the engine test bed cell that behaved as an almost semi-anechoic room. Sound pressure was recorded using a G.R.A.S. 40AC high-precision condenser microphone (up to 40 kHz with a sensitivity of 12.5 mV/Pa) placed 1 m from the engine.

After starting up the engine using an initial λ of 1.7, it was let idle for a few minutes for suitable warming. The experiments were performed in such a way that the H_2 -air mixture fed to cylinder number 1 was enriched in the fuel (decreasing values of λ) by increasing the H_2 injection pulse width stepwise until that combustion anomalies appeared. In most of the experiments, only one cylinder was fed with the enriched mixture in order to prevent the engine from suffering severe damage. The process was repeated at engine speeds ranging from 1000 rpm to 5000 rpm and full load (wide open throttle, WOT). SA was set at 10° BTDC whereas the exhaust valves closed at CA of 3° after top dead centre (ATDC) and the H_2 injection started at CA of 22° ATDC during the intake stroke. SA value was selected according to our previous experience with the engine that showed that 10° BTDC constitutes a trade-off between satisfactory engine performance and combustion anomalies [4,6,8]. Abnormal combustion occurrence could be detected by a characteristic pinging noise followed by a strong bass noise accompanied by a great decrease of the brake torque. Once that point was reached the engine was shut off.

To guarantee a correct characterization free from unwanted signals, data used for abnormal combustion events detection (in-cylinder pressure, accelerometer and microphone signals) were recorded with a sufficiently high frequency of 100 kHz. On the other hand, the parameters related with the engine operation (engine speed, λ , intake manifold temperature and pressure, injection pulse width and NO_x concentration in the exhaust gases) were registered with a frequency of 10 Hz. Another important aspect is the number of engine cycles analyzed. Brunt et al. recommended a sample of at least 1000 cycles for a suitable determination of the intensity of the combustion events on a Ford Zetec 2.0 L 4-cylinder engine fueled with gasoline [37]. In our case the samples ranged from 1224 cycles at engine speed of 1000 rpm to 3275 at 3000 rpm and 2725 cycles at engine speed of 5000 rpm. This resulted in experiments lengths ranging from 147.2 s at 1000 rpm to 65.6 s at 5000 rpm.

3. Results and discussion

3.1. Abnormal combustion characterization

In contrast to block-engine vibration and sound measurements, the in-cylinder pressure values give a direct measure of the dynamics of the

combustion process. Fig. 1 shows an example comparing the characteristics of normal and abnormal combustion cycles recorded at the highest engine speed (5000 rpm) and $\lambda = 1.52$. The graph shows the evolution with CA of the pressure (gauge) in cylinder number 1. Note that the origin of the CA axis is situated at spark time ($350^\circ = 10^\circ$ BTDC). Data along a CA period of 50° characterized by the highest in-cylinder pressures are provided. This CA window is slightly higher than the range of 40° from TDC recommended by Brunt et al. in a study performed with an automotive-sized engine [37]. As can be seen, during the normal combustion cycle the in-cylinder pressure increases gradually after the spark plug fires until reaching a maximum value of about 53 bar at TDC. The cycle showing knock is characterized by high-frequency pressure oscillations with a maximum amplitude of about 20 bar leading to a peak pressure close to 84 bar also at TDC. This almost doubles the pressure rise rate of 1.0 MPa/CA considered as the lower limit for heavy knock [24]. The amplitude of the pressure oscillations decreases progressively ATDC although the oscillations are still present at CA of 40° ATDC during the expansion stroke. It can be observed that during the knocking cycle the in-cylinder pressure rises more rapidly than during the normal combustion cycle in accordance with Li and Karim [23]. Presumably this lowers the induction or delay time leading to the occurrence of a spontaneous auto-ignition of the end-gas [24]. Cycle-to-cycle combustion variations and flame instabilities may also result in a temperature increase and thermal inhomogeneity that facilitate reaching the critical conditions that provoke knock [24,32]. According to Li et al. [38] the energy density and heat release rate in hot spots play critical roles in determining knock intensity. In the case of backfire the in-cylinder pressure is very low and shows a very smooth decrease during the expansion stroke. This is due to the fact that the fuel has been already burned during the previous intake stroke.

A more complete characterization of the abnormal combustion phenomena is given in what follows taking as base case the experiments performed at an intermediate engine speed of 2000 rpm. Fig. 2 shows the evolution along time of the in-cylinder pressure, accelerometer and microphone signals and the temperature in the intake manifold. On the other hand, Fig. 3 depicts the evolution of the parameters characterizing the engine performance for the same experiments. The width of

the hydrogen injection pulse was increased from its initial value of 6.2 ms ($\lambda = 1.7$) resulting in a progressive decrease of the λ value. After 100 s the pulse width was about 6.9 ms ($\lambda = 1.45$) and the brake torque reached an almost steady value of 57 N·m. The NO_x concentration and in-cylinder pressure also increased reaching 430 ppm and 60 bar, respectively. On the other hand, the accelerometer and microphone recorded normal signals of ± 15 g and ± 5 Pa, respectively.

As can be seen in Fig. 2, the first knock event was registered after 107 s, when strong signals of ± 160 g and 75 bar, were recorded by the accelerometer and the pressure sensor, respectively. This event was audible and it was decided to maintain constant the hydrogen injection pulse width; however, the microphone did not register any clear signal distinguishable from the background noise. At this point the engine entered a 40 s period characterized by strong vibrations reaching an amplitude of up to +300g, and pressure peaks of up to above 80 bar; a characteristic pinging noise could also be heard. During this period the brake torque showed a very slight tendency to decrease whereas the NO_x emissions remained essentially unchanged (see Fig. 3). After 155 s a strong hoarse noise was produced that could be recorded by the microphone (amplitude of up to +10 Pa). This was followed by an abrupt decrease of the in-cylinder pressure and the brake torque and erratic readings of the exhaust NO_x concentration. This last event consisted in backfire as deduced from the intense increase of the intake air temperature produced. At that moment the engine was switched off.

Similar results (not shown) were observed at 1000 rpm, 4000 rpm and 5000 rpm, whereas at 3000 rpm no knock was detected by the sensors and the engine passed directly from normal running to backfire. However, by increasing the spark advance from 10° BTDC to 20° and 30° BTDC knock was detected before backfire also at 3000 rpm. It should be noted that if ignition is started far from TDC there is a higher likelihood of suffering knock and of producing more intense pressure oscillations [23]. Moreover, spark advance becomes critical in the case of engine operation under lean-burn conditions due to more pronounced cycle-to-cycle combustion variations that also contribute to increase knock likelihood [39].

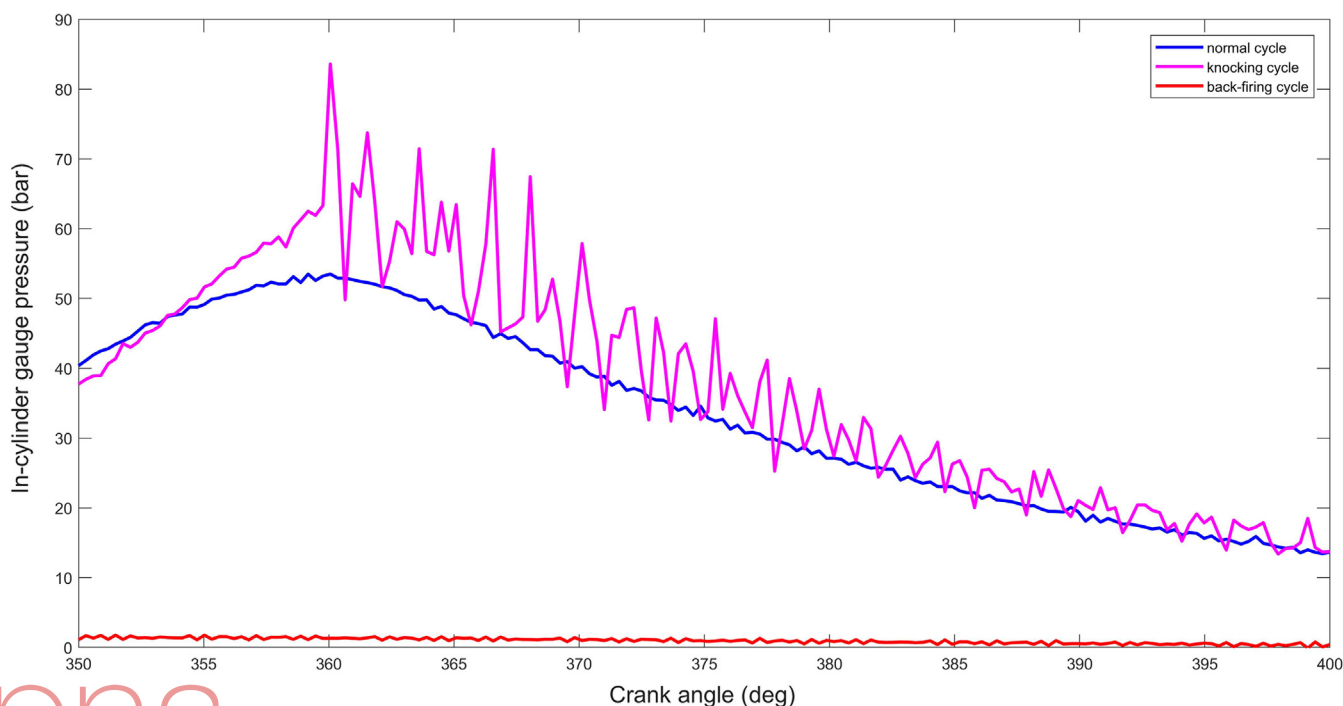


Fig. 1. Evolution of the in-cylinder pressure with CA at engine speed of 5000 rpm for the following cycles: normal cycle, knocking cycle, and backfiring cycle.

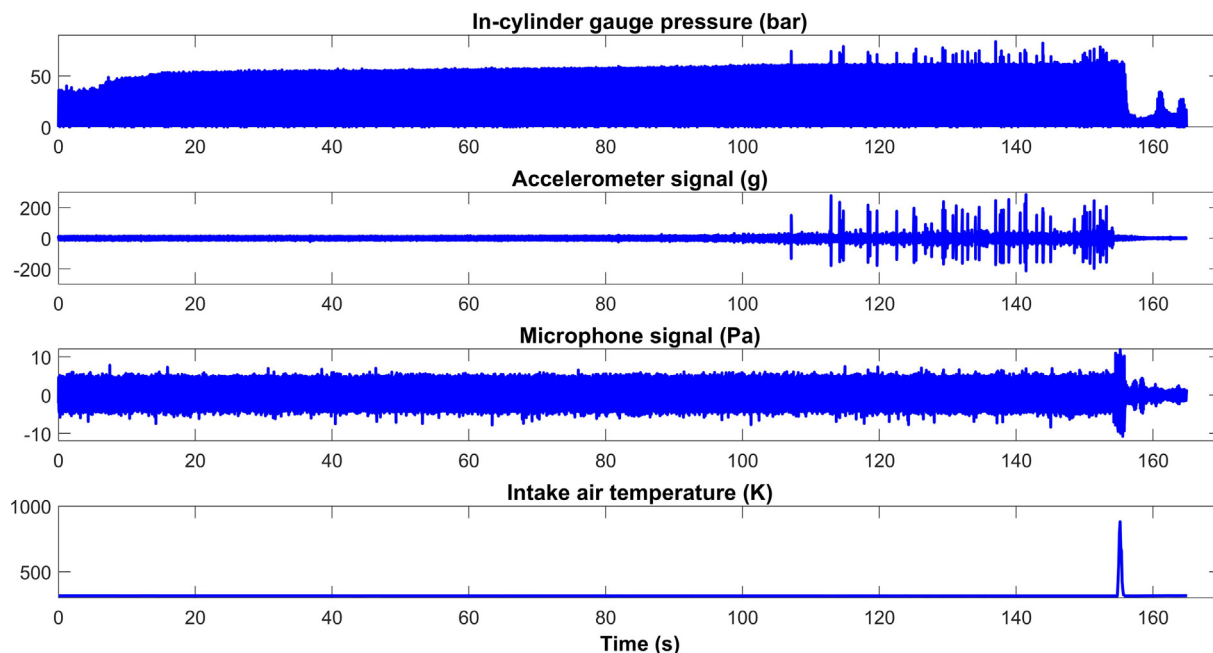


Fig. 2. Evolution with time of the parameters used for the characterization of abnormal combustion phenomena at engine speed of 2000 rpm. From top to bottom: in-cylinder pressure, accelerometer signal, microphone signal, and intake air temperature.

3.2. Knocking combustion cycles: analysis of the in-cylinder pressure and accelerometer signals

As shown in the previous section, knock could be identified by means of the abrupt variations of the readings recorded by the in-cylinder pressure transducer and the block engine accelerometer. Now the correlation between these two signals is analyzed.

Mass-elastic systems show natural vibration frequencies so that for a given frequency the system vibrates according to characteristic amplitude and phase which is known as a vibration mode. Only some of the lowest order frequencies are of practical interest because the high-order ones are generally significantly damped. In the case of ICEs, combustion

(both normal and abnormal) and motion of engine components cause vibrations that are transmitted through the engine structure. Of course, the intense in-cylinder pressure oscillations associated to knock provoke stronger vibrations that can be detected with an accelerometer. This is the reason why commercial engines mount these simple sensors for knock detection and engine operation control and management instead of the much more expensive and complex in-cylinder pressure transducers and optical sensors [35,36].

In this work, distinction between high and low frequencies has been made taking as reference the values above and below 20 times the engine speed, respectively. According to this criterion, Figs. 4 and 5 show typical readings of the in-cylinder pressure transducer and the

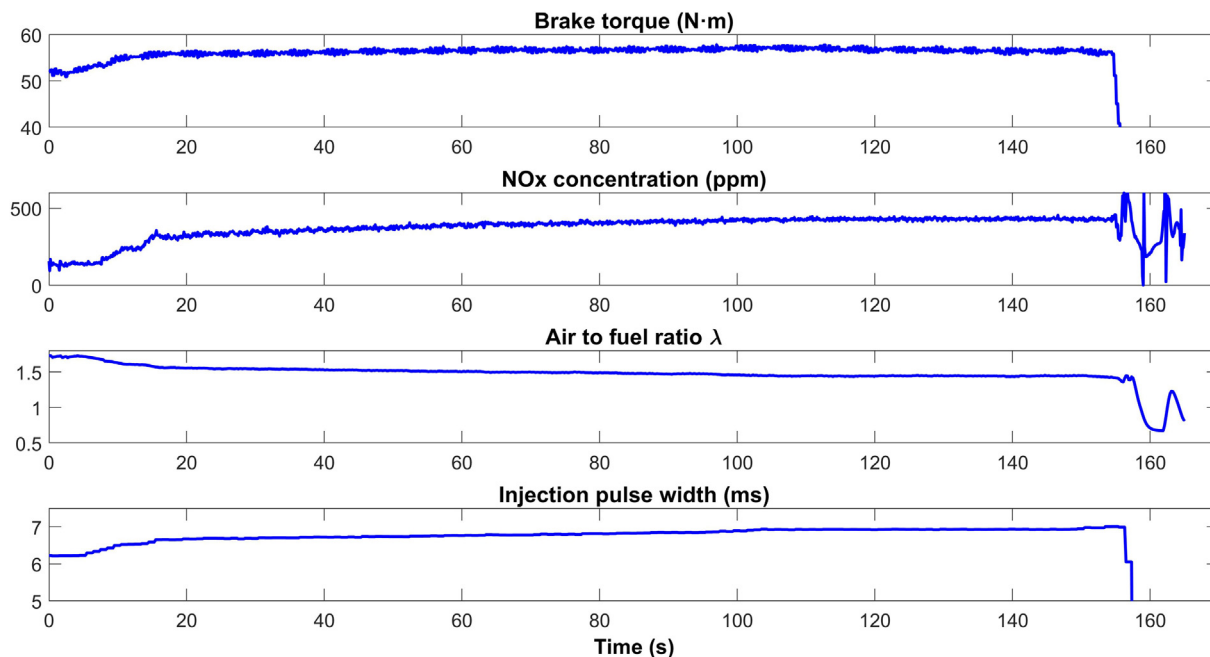


Fig. 3. Evolution with time of the performance parameters at engine speed of 2000 rpm. From top to bottom: brake torque, NO_x concentration in the exhaust gases, air-to-fuel ratio (λ) and H₂ injection pulse width.

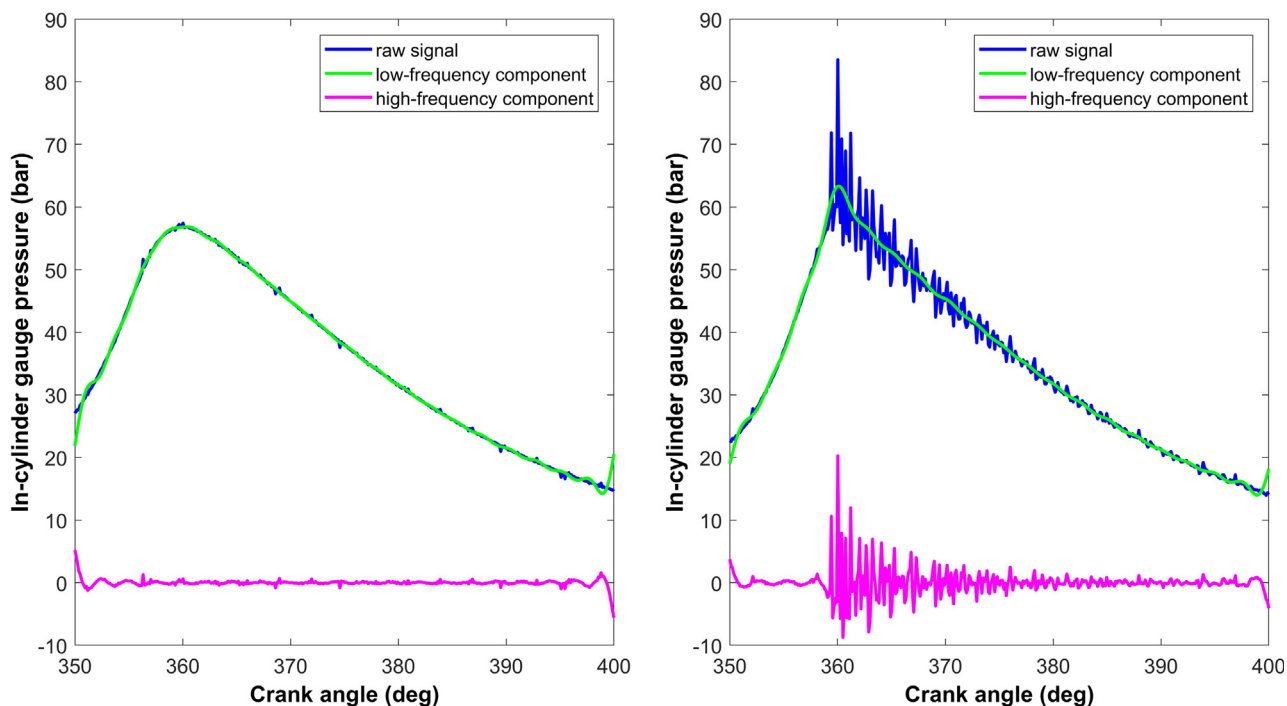


Fig. 4. Evolution of the in-cylinder pressure with CA at engine speed of 2000 rpm for typical normal (left) and knocking (right) combustion cycles showing the in-cylinder transducer raw signal and its low-frequency and high-frequency components.

accelerometer, respectively, for normal and knocking combustion cycles. Signals were decomposed into their low- and high-frequency components by means of Fourier transform (FT) analysis. In both cases the engine speed was 2000 rpm and the signals corresponded to the values recorded within spark time (10° BTDC) and 40° ATDC. It can be seen that for the normal combustion cycles the pressure signal coincides with the low-frequency component whereas the accelerometer signal is very weak and indistinguishable from the low- and high-frequency

components. In the case of the knocking cycles, the pressure signal is dominated by the low-frequency component whereas the oscillations are well represented by the high-frequency component. In contrast, the accelerometer signal is dominated by the high-frequency component as can be seen in Fig. 5.

It can be then concluded that the high-frequency component of the in-cylinder pressure and block engine acceleration signals obtained after a FT analysis can be used for very sensitive detection of knock

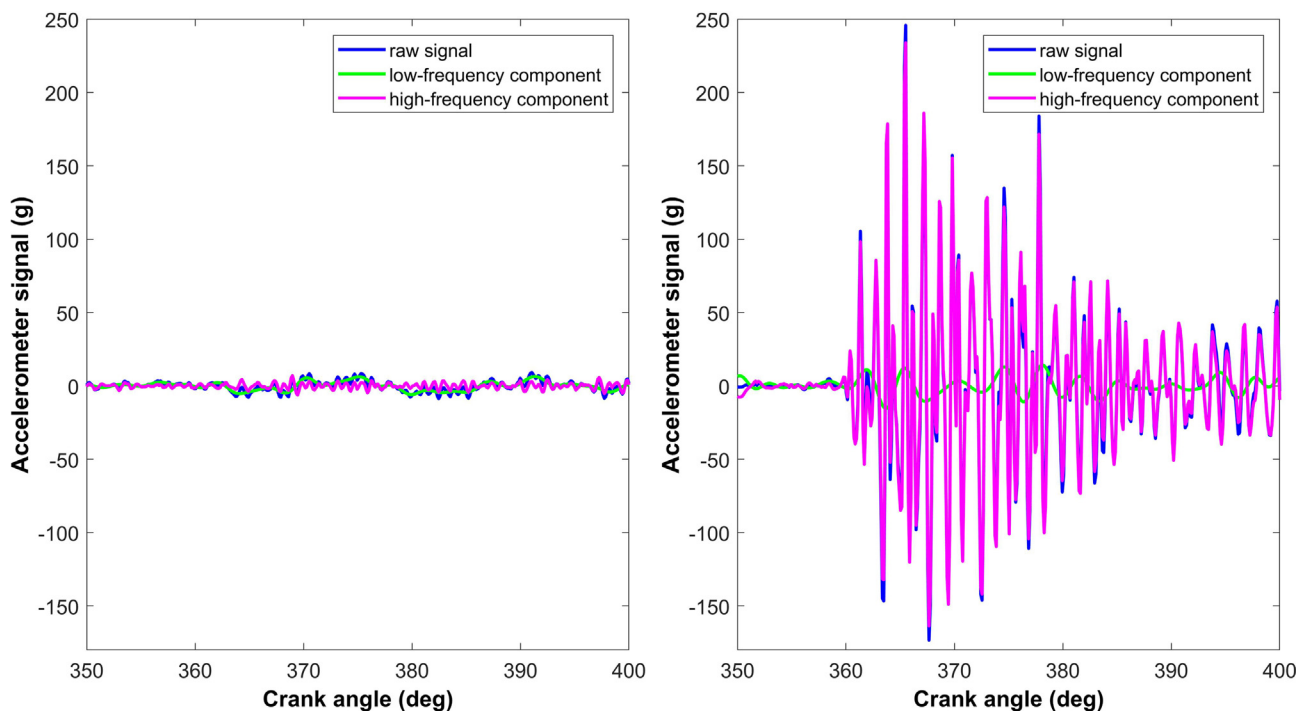


Fig. 5. Evolution of the acceleration with CA at engine speed of 2000 rpm for typical normal (left) and knocking (right) combustion cycles showing the accelerometer raw signal and its low-frequency and high-frequency components.

events in H₂-ICEs of automotive size. Making the distinction between low and high frequency on the basis of the engine speed is useful to take into account at every moment the influence of this key parameter on the engine vibration characteristics because other factors such as the engine geometry, the speed of sound, etc. will not change significantly. A value of 20 times the engine speed was adopted after a preliminary screening. The exact value of this reference is not very critical provided it is relatively close to the engine speed which seems reasonable.

A further analysis of the sensors signals has been performed through the study of the evolution of the integral average of the high-frequency components' modulus. This is shown in Figs. 6 and 7 for the readings from the accelerometer mounted on the block engine and the in-cylinder pressure transducer, respectively. For each engine speed considered, the possible linear correlation between the accelerometer and the pressure transducer signals has been assessed through the values of the Pearson's correlation coefficient (PCC). In these experiments, the air-to-fuel ratio (λ) of the mixture decreases from cycle to cycle due to a gradual increase of the H₂ injection pulse width. The high values of the integral averages observed after about 2000 cycles indicated the appearance of knock events. When the complete datasets are considered, the PCC values obtained at 2000 rpm, 4000 rpm and 5000 rpm are 0.701, 0.613 and 0.699, respectively, that, given the large size of the samples, indicate a high degree of linear correlation. It should be noted that no knocking cycles were detected at 3000 rpm so data corresponding to that engine speed were not considered. In contrast, the PCC at engine speed of 1000 rpm was only 0.200 thus revealing lack of linear correlation between the signals. This is a low speed regime for an automotive size engine, close to idling. This is a fluctuating regime showing speed oscillations around the set point that provoke in-cylinder pressure instabilities. This can be appreciated in Fig. 7 where at 1000 rpm the in-cylinder pressure changes gradually during the first combustion cycles until the reading is stabilized. These relatively smooth pressure changes do not translate to the acceleration signal due to its inertial character that results in remarkable damping. If the cycles preceding the 220 one at 1000 rpm are discarded the PCC increases from 0.200 to 0.819 showing strong linear correlation also at this speed.

A more detailed observation of Fig. 7 suggests that knocking combustion cycles are characterized by values of the integral average of the

high-frequency components' modulus of the in-cylinder pressure signal above 0.5. From the 2500 combustion cycles shown in Fig. 7 at engine speed of 2000 rpm only 39 cycles fulfill this criterion. The PCC for the high-frequency components of the accelerometer and the pressure transducer signals during these cycles is 0.584 thus indicating a practically linear correlation. On the other hand, at engine speed of 5000 rpm only 9 cycles seemed to present knocking events but in this case the PCC was -0.294 which indicates that the correlation between the signals losses relevance at high engine speeds. The reason could be the inertial nature of the vibrations leading to the signal captured by the accelerometer. Knock generates vibrations that require time to be completely damped, especially the low-frequency vibration modes. Therefore, normal combustion cycles can be mistakenly identified as knocking ones if one or several of the preceding cycles suffered from abnormal combustion events. As the engine speed increases this possibility is more likely because the time interval available for vibrations damping among consecutive combustion cycles decreases. In this regard, if the correlation investigated is among the integral average values of the high-frequency components' modulus of the in-cylinder pressure signal of the 9 knocking cycles and those of the accelerometer signal for the cycles just following the knocking ones [27], the PCC reaches a much higher value of 0.537. The silentblocks incorporated into the commercial engines for absorbing vibrations and reducing noise introduce non-linearity among the in-cylinder pressure and engine block acceleration thus complicating the rapid identification of knock. As a result, the criteria used to identify knock with accelerometers mounted on the block engine should be more restrictive and be adapted to the engine speed. From the results shown in Fig. 6 it can be suggested that whereas integral average values of the high-frequency components' modulus of the accelerometer signal above 15 can be used at engine speeds below 2000 rpm, this limit has to be increased to about 30 for higher speeds.

3.3. Engine noise analysis

As already mentioned, one of the main novelties of this work is the use of ambient noise measurements to identify abnormal combustion events. It is well known that phenomena such as knock is accompanied

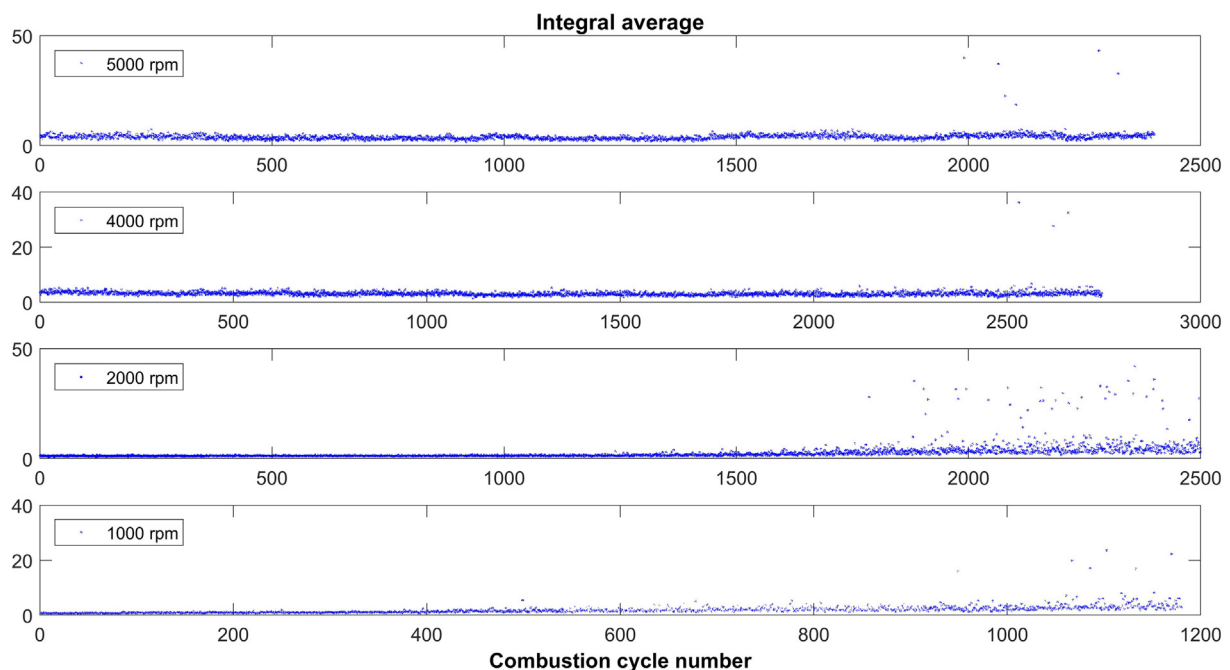


Fig. 6. Evolution of the integral average of the high-frequency components' modulus of the accelerometer signal for each of the combustion cycles indicated at engine speeds of (from bottom to top): 1000 rpm, 2000 rpm, 4000 rpm and 5000 rpm.

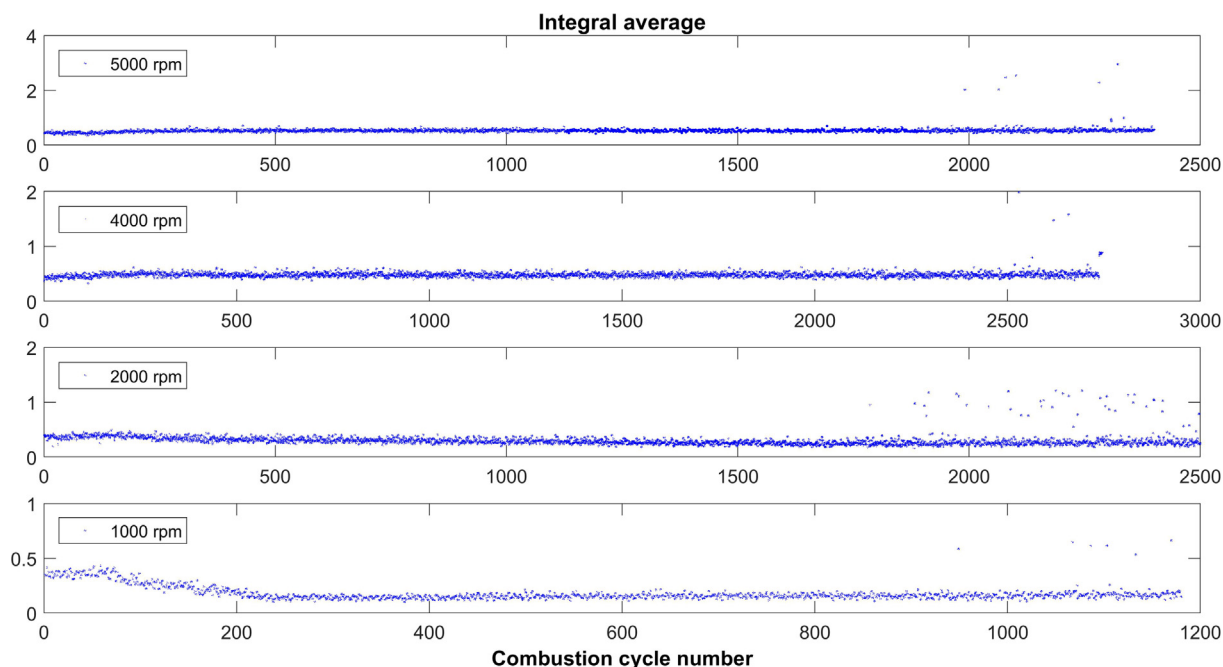


Fig. 7. Evolution of the integral average of the high-frequency components' modulus of the in-cylinder pressure signal for each of the combustion cycles indicated at engine speeds of (from bottom to top): 1000 rpm, 2000 rpm, 4000 rpm and 5000 rpm.

by a characteristic pinging noise so it is interesting to explore the possibility of using acoustic measurements for the detection of abnormal combustion. Fuel combustion produces the so-called combustion noise, which is the most important source of noise in an ICE. Combustion noise is a complex phenomenon affected by the characteristics of the fuel as well as that of the engine and its operating conditions [40].

Returning to the results shown in Fig. 2 and corresponding to an

engine speed of 2000 rpm, Figs. 8 and 9 show the instantaneous values of the in-cylinder and acoustic pressures for a series of normal and knocking combustion cycles, respectively.

It can be seen that normal combustion cycles show in-cylinder peak pressures of about 55 bar and acoustic pressures oscillating within ± 3.5 Pa. In Fig. 9, three knocking combustion cycles can be clearly identified by peak in-cylinder pressures above 70 bar the (1st, 3rd and 7th cycles). In contrast, the acoustic pressure for these

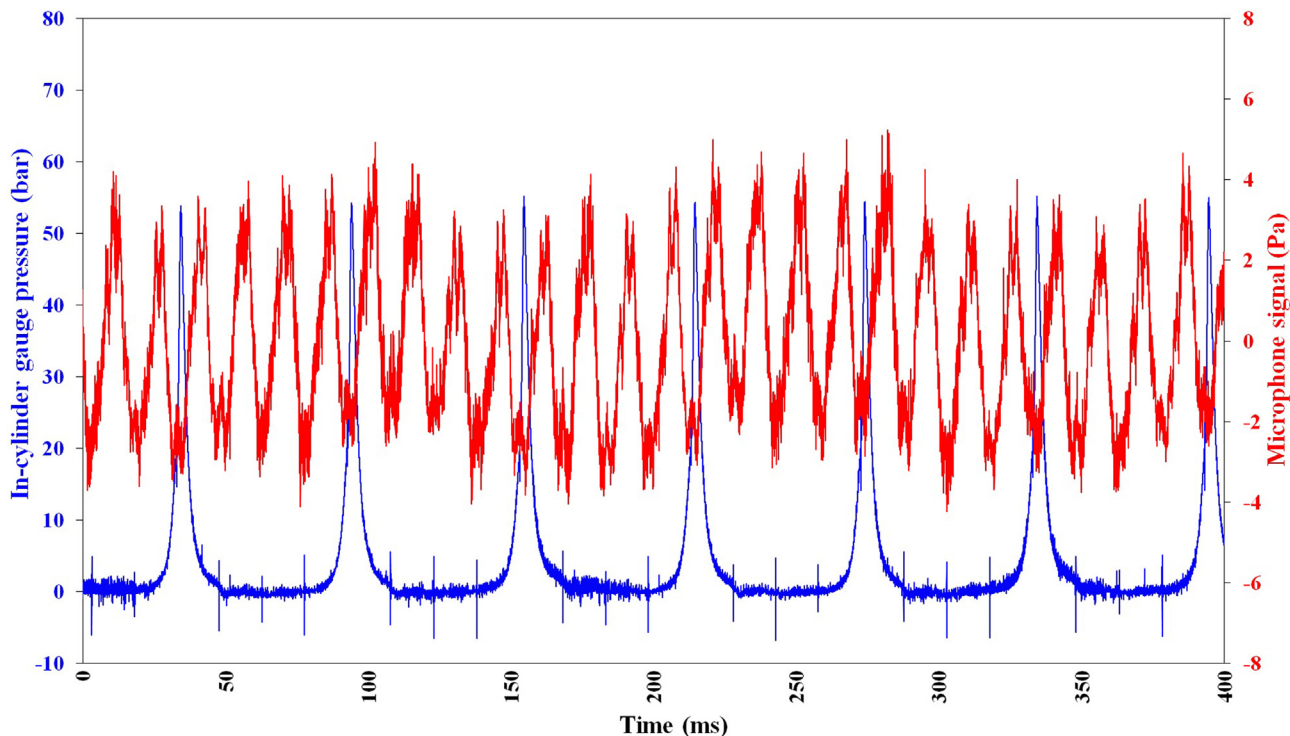


Fig. 8. Evolution with time of the in-cylinder (blue signal) and acoustic (red signal) pressures for a series of normal combustion cycles at engine speed of 2000 rpm. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

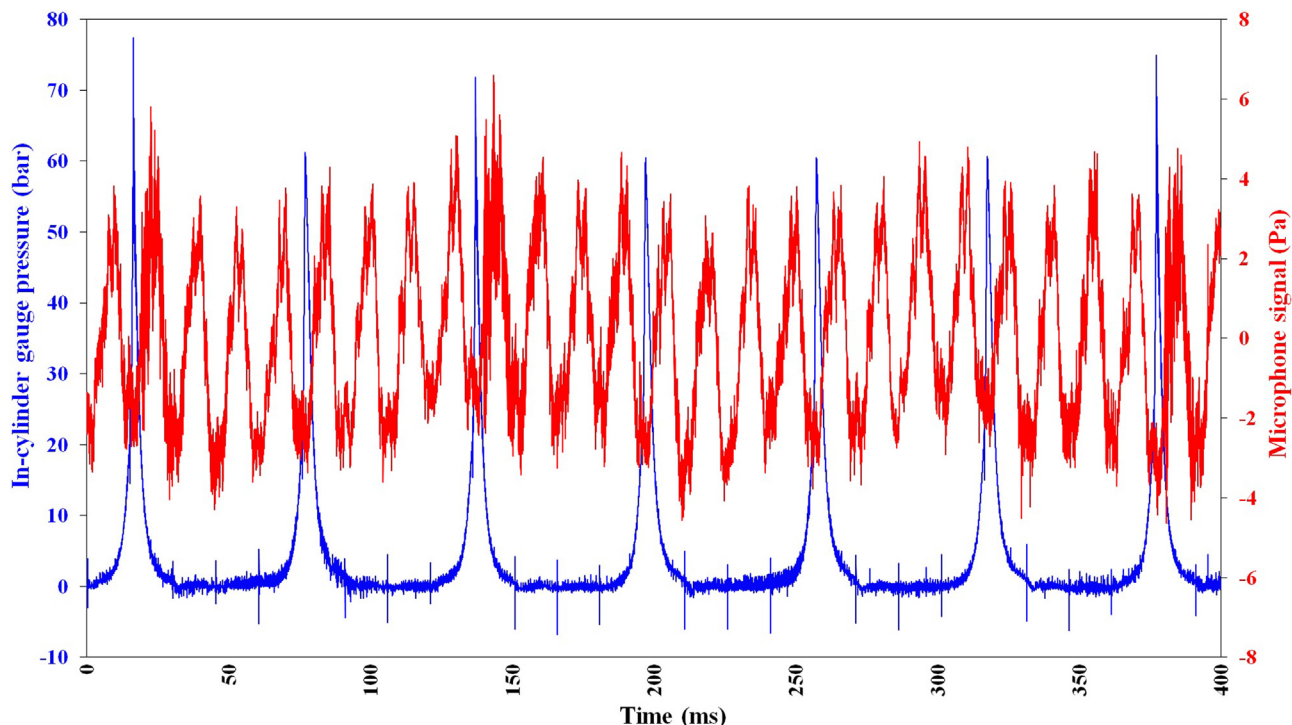


Fig. 9. Evolution with time of the in-cylinder (blue signal) and acoustic (red signal) pressures for a series of normal and abnormal combustion cycles at engine speed of 2000 rpm. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

abnormal cycles show only slightly higher amplitudes (within ± 5 Pa) compared to those of the normal combustion cycles.

A more in-depth characterization of the acoustic properties of a pair of normal and knocking combustion cycles is shown in Fig. 10 which presents a spectral analysis in terms of third octave bands. Octave-band

analysis is incorporated by the most usual methods regarding the assessment of sound perception [41].

It can be seen that both cycles can be distinguished by means of the highest frequency bands (between 8 kHz and 20 kHz) which are around 8–10 dB more intense in the case of the knocking cycle than for the

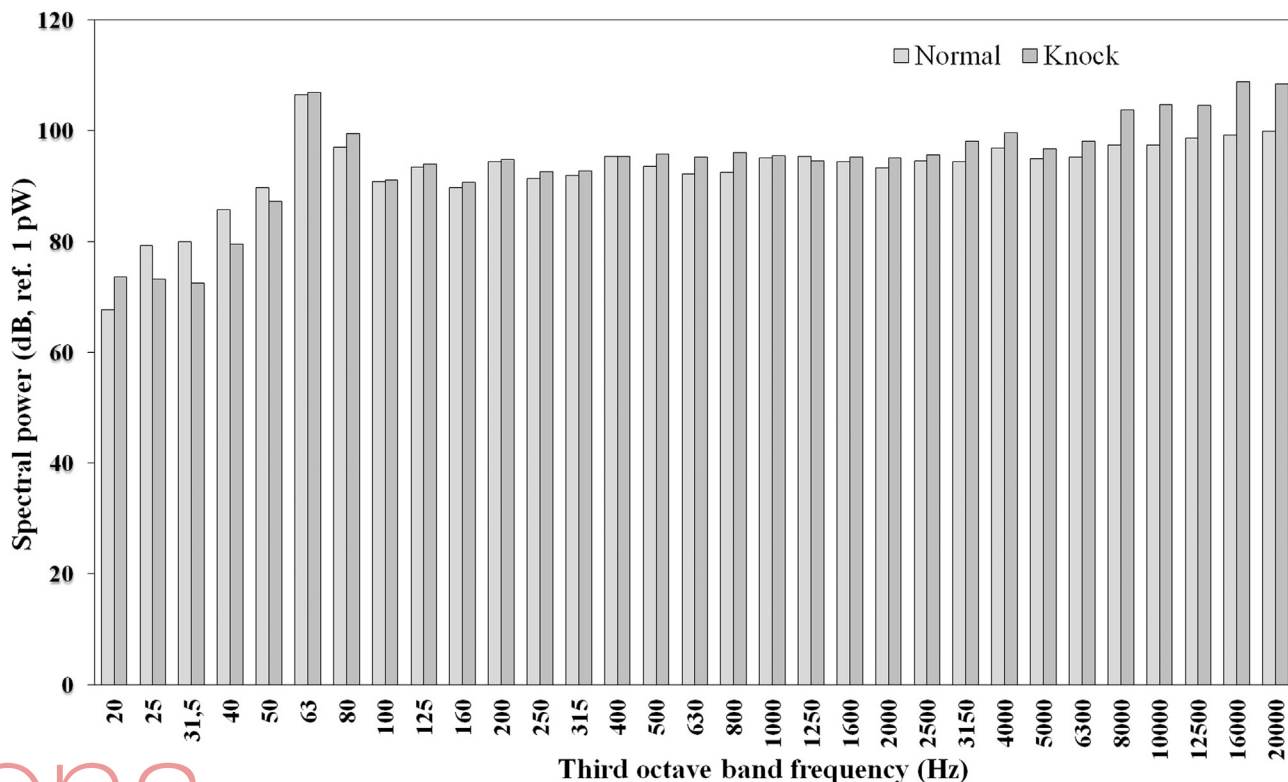


Fig. 10. Spectral analysis of typical normal and knocking cycles at engine speed of 2000 rpm.

normal combustion. Furthermore, the spectral analysis is also useful to identify abnormal combustion phenomena associated to backfire. As mentioned in Section 3.1, backfire was characterized by an abrupt increase of the intake air temperature accompanied by a strong hoarse noise. Fig. 11 shows the spectral power of a normal combustion cycle and two anomalous cycles consisting in knock and backfire, respectively. The number above the bars indicate the power change (in dB) with respect to the normal combustion cycle. It can be seen that backfire shows octave bands more intense by 7–16 dB in the range of frequencies comprised between 250 Hz and 4 kHz in comparison with the other combustion cycles.

4. Computational Fluid Dynamics (CFD) simulation of the engine performance

4.1. Aim and scope

In this work, a commercial Volkswagen 4-cylinder 1.4 L originally designed to be fed with gasoline and adapted to run on hydrogen has been used. One of the most important modifications performed consisted in the implementation of the hydrogen feeding system. In this regard, the original inlet manifold was replaced by another one made in metal for safer operation in the event of backfire. In addition, the gasoline injectors were replaced by gas injectors that were fixed to the inlet manifold by means of a metallic support and connected to a hydrogen accumulator through stainless steel tubing. The accumulator was necessary in order to guarantee that the injectors were supplied with hydrogen at a constant and suitably low pressure compared to the one in the gas cylinders that stored the fuel (200 bar).

Injection system configuration and its operating parameters such as injection timing and pulse width duration may have strong influence on the local fuel/air composition inside the intake manifold and cylinder. It was observed during the experiments that knock did not appear immediately after increasing the injection pulse width duration but it occurred some time after that, which suggested that hydrogen could be accumulating inside the manifold. To check this possibility, a computational fluid dynamics (CFD) study was conducted to simulate the

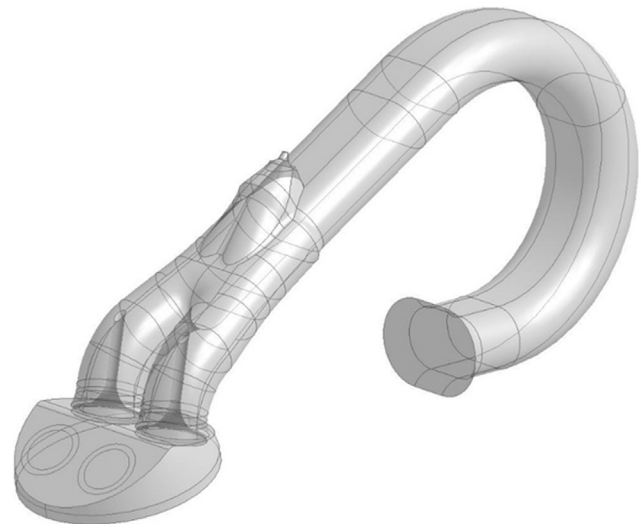


Fig. 12. Physical CFD model of the intake manifold, fuel injector and cylinder head.

performance of the hydrogen injection system used in this work. Simulations were accomplished using ANSYS-CFX® 15.0 software. The physical model consisted in the intake manifold, cylinder head and hydrogen injector geometries shown in Fig. 12.

4.2. Simulation conditions

Simulations were performed under transitory regime being TDC and the intake valve closing the initial and final instants, respectively. The following simplifying assumptions were adopted: hydrogen injection was considered isothermal at 25 °C and buoyancy phenomena were neglected as transport was dominated by convective effects. On the other hand, the side of the intake manifold opposite to the cylinder was modeled as an open surface at constant manifold air pressure (MAP)

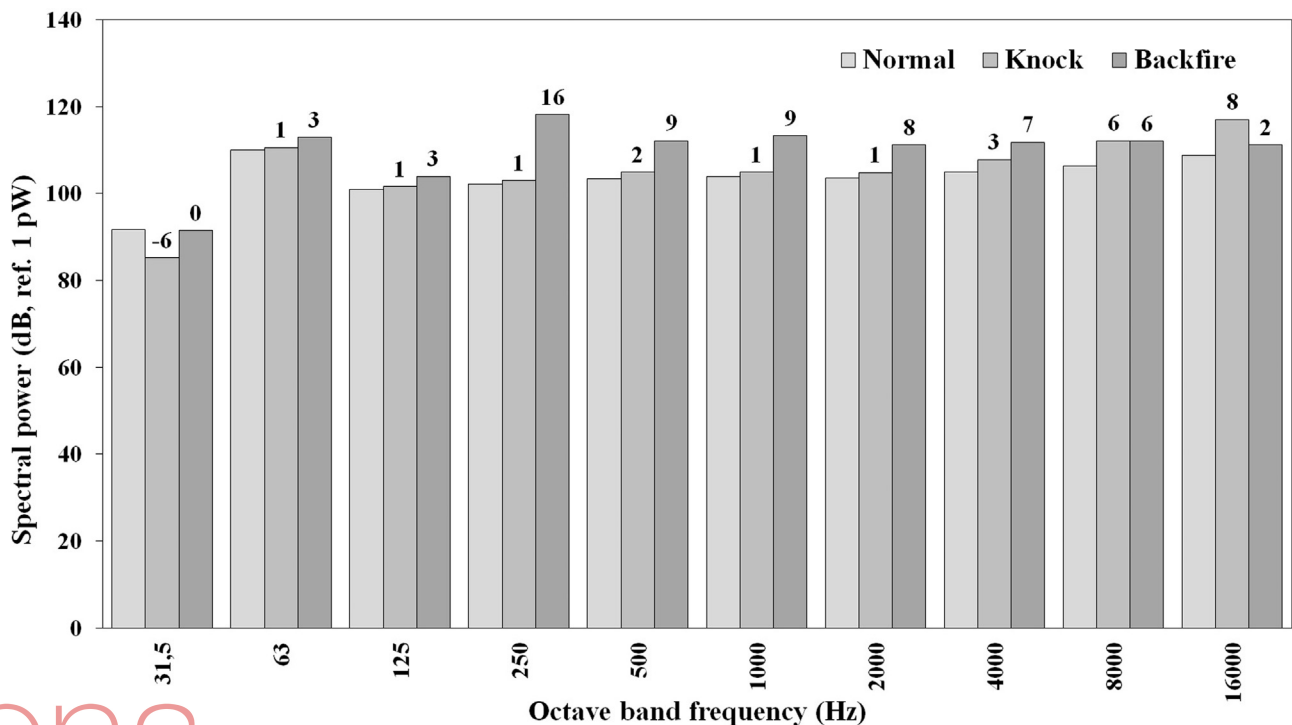


Fig. 11. Spectral analysis of typical normal, knocking and backfiring cycles at engine speed of 2000 rpm.

allowing the entry of air due to the suction associated to the piston motion. MAP value was set at 0.92 bar according to the values recorded by the electronic control unit during the experiments performed at WOT. As concerns turbulence the $k-\epsilon$ model was adopted. After a preliminary study on grid independence of the solution, a moving grid with *ca.* 250,000 volume elements was adopted to describe the piston and valves motion.

The gas injectors used provided hydrogen at constant mass flow rate of 0.31 mg/ms during the pulse, being 1.2 ms and 0.2 ms the time required for the injector opening and closing, respectively. Injection timing was initially set at CA of 22° ATDC. It should be noted that exhaust valve closing (EVC) timing was established at CA of 15.3° in order to allow suitable cooling to reduce the likelihood of backfire.

As concerns the piston positioning, a value of 0 was assigned to TDC whereas the piston displacement adopted negative values given by the following expression obtained after considering the slider-crank engine geometry:

$$Z_p = -0.00402 + 0.0378 \cdot \cos \left[\left(\frac{2\pi}{60} \cdot n \right) \cdot t \right] + 0.0024 \cdot \cos \left[\left(\frac{4\pi}{60} \cdot n \right) \cdot t \right] \quad (1)$$

where Z_p (m) is the piston positioning, n (rpm) is the engine speed and t (s) is the time passed from the piston positioning at TDC. On the other hand, the positioning of the intake valve (Z_{iv}) was -1.56 mm at TDC and was given (in m) by:

$$Z_{iv} = -0.0037 \cdot \left(\cos \left[\left(\frac{2\pi}{60} \cdot n \right) \cdot \frac{360}{214} \cdot t_0 \right] - \cos \left[\left(\frac{4\pi}{60} \cdot n \right) \cdot \frac{360}{214} \cdot (t + t_0) \right] \right) \quad (2)$$

where t_0 (s) is the time passed between the start of the intake valve opening and the instant when the piston reaches TDC (*i.e.* the time required to turn the 19° of crank angle corresponding to the intake valve opening advance).

4.3. Simulation results

Fig. 13A–D includes a sequence of images showing the contour maps of hydrogen molar fraction in the intake manifold and cylinder during the intake stroke obtained from the CFD simulations of the engine running at 2000 rpm. Hydrogen injection started at 22° ATDC and the injection pulse width was 6 ms. Fig. 13A shows that after 3.3 ms (40° ATDC) when the injection is close to ending, the hydrogen concentrates near the injector. After 7.5 ms (Fig. 13B, 90 ATDC) the injection has finished and it can be seen that hydrogen has spread within the intake manifold whereas there is almost no hydrogen in the cylinder. Fig. 13C shows that after 12.5 ms, at 150 ATDC the great majority of hydrogen has entered the cylinder by the suction caused by the piston displacement. Finally, when the intake valve closes at 195 ATDC (16.25 ms) some hydrogen still remains within the intake manifold as shown in Fig. 13D. Depending on the evolution of the situation during the subsequent combustion cycles it is possible that an accumulation of hydrogen within the intake manifold takes place. In that case the mixture entering the cylinder will be richer than expected so the likelihood of knock will increase even maintaining constant the injector pulse width. As hydrogen is present within the intake manifold the risk of suffering from backfire during engine operation is evident; as a matter of fact, the backfire events detected in this work were preceded by knocking combustion cycles as explained in Section 3.1. The results suggest that the temperature increase provoked by knock, together the presence of hydrogen in the intake manifold lead to combustion while the intake valve is open.

The problem of hydrogen accumulation could be due to the fact that the engine was designed to run on gasoline, that is, a liquid fuel with a density much higher than that of hydrogen. For that reason, the valves dimensions, which are suitable for gasoline PFI seem to be not so large as to guarantee a sufficiently high hydrogen volumetric flow rate. In this regard, Fig. 14 shows the evolution of the amounts of hydrogen and

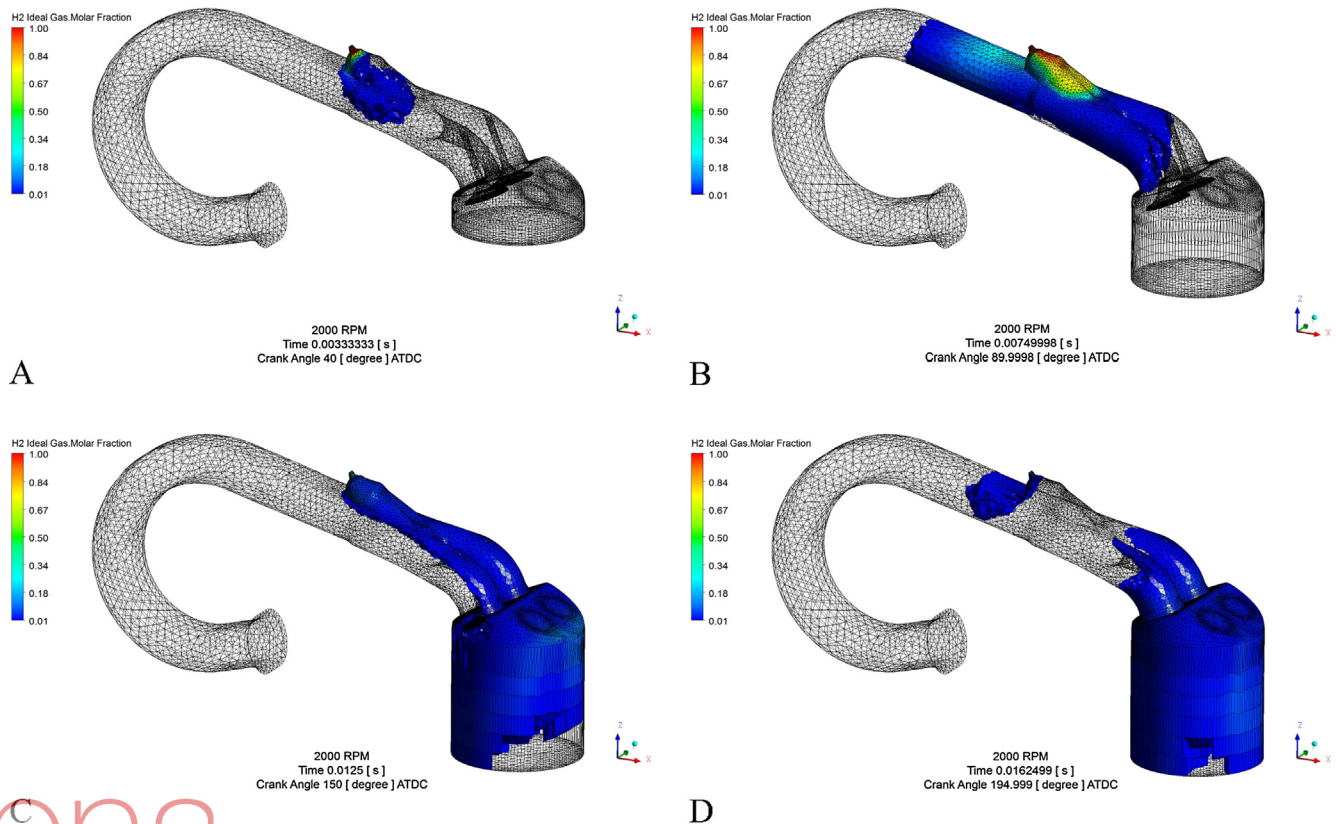


Fig. 13. Hydrogen molar fraction in the intake manifold and cylinder at CA values ATDC of: (A) 40°; (B) 90°; (C) 150° and (D) 195° (engine running at 2000 rpm).

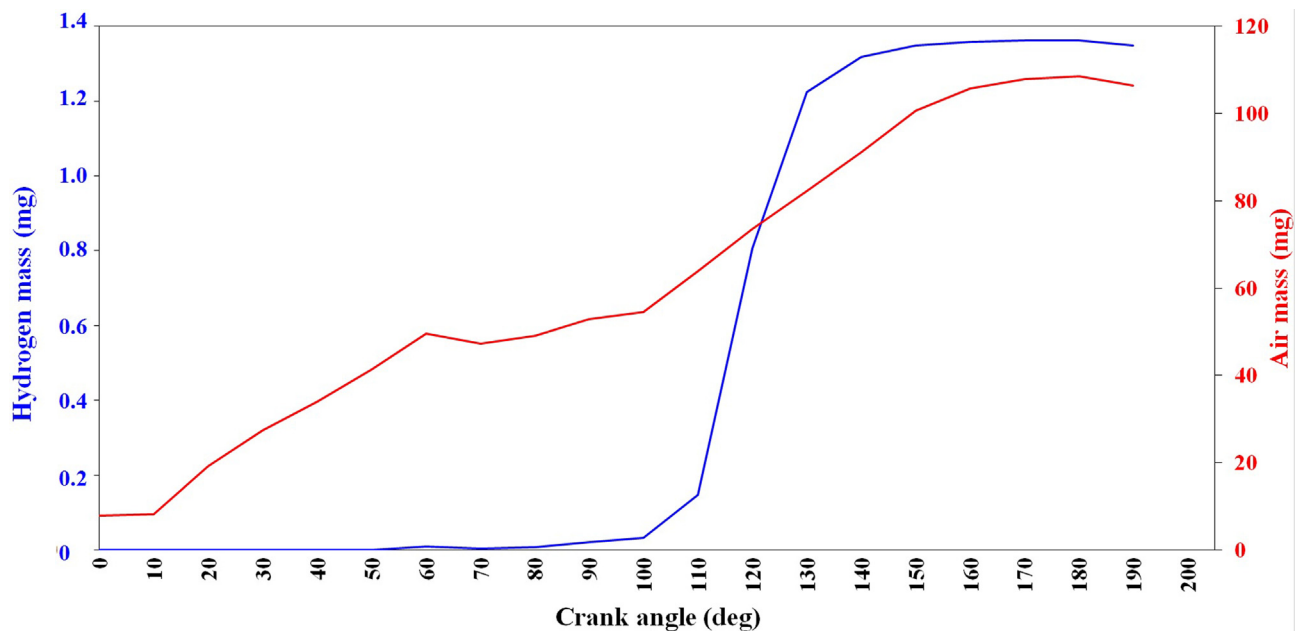


Fig. 14. CFD simulation results corresponding to the hydrogen (blue line) and air (red line) amounts in the cylinder during the intake stroke (engine running at 2000 rpm). (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

air that have entered the cylinder during the intake stroke according to the CFD simulations.

It can be seen that the mass of air within the cylinder increases gradually until reaching bottom dead centre (BDC) at CA of 180. In contrast, the mass of hydrogen inside the cylinder increases sharply within a relatively narrow range of CA values between about 100° and 140° ATDC; afterwards, the amount of hydrogen remains almost constant. This is because the hydrogen injection is significantly retarded (22° ATDC) in order to allow the cooling of the exhaust valve after closing. The very small decrease of the amount of gases observed ABDC may be due the pressure increase due to the beginning of the compression stroke and/or to a dragging effect associated to the intake valve closing.

The preceding results suggest that a possible solution would be advancing the injection time although the risk exists that the exhaust valve is still excessively hot. However, taking into account that the simulations were performed at an intermediate engine speed of 2000 rpm and that running at higher speeds has to be feasible, advancing the injection time should be considered as a realistic option in order to attend the requirements of engine operation at highly demanding conditions. To investigate the effect of advancing the injection timing a series of CFD simulations were performed at injection times of 1° and 22° BTDC, injection pulse widths of 4 ms and 6 ms and engine speeds of 2000 rpm and 4000 rpm.

Table 1 shows the mass fraction of the hydrogen injected that remained in the intake manifold ($\omega_{H_2}^{in}$) after the intake valve closing. As expected, advancing the injection time has a positive effect on the introduction of hydrogen into the cylinder; however, the phenomenon is largely dominated by the engine speed. This is because the timing window available for injection decreases as the engine speed increases. So even greatly advancing the injection time (1° BTDC) and reducing the injection pulse width (4 ms) the fraction of hydrogen that cannot enter the cylinder at 4000 rpm is as high as 30%. As a matter of fact, the majority of hydrogen (62%) remained in the intake manifold at 4000 rpm if the injection time is maintained at 22° BTDC. Moreover, if the injection pulse width is relatively large, hydrogen would be injected at crank angles well above 160° BTDC when the suction capacity of the cylinder is very limited. If this situation is maintained from cycle to cycle a non-steady situation is established leading to an accumulation of

hydrogen that can provoke abnormal combustion events. Therefore, in addition to a suitable dimensioning of the valves, the design of the hydrogen injectors is another key factor. Indeed, as already mentioned, the injectors mounted deliver hydrogen at a mass flow rate of 0.31 mg/ms which seems to be insufficient for guaranteeing an operation free from backfire at high engine speeds.

Finally, suitable manifold design should take into account the speed of sound for proper tuning of the pressure waves and injector opening (intake manifold resonance charging). That speed is different for hydrogen-air mixtures than for the gasoline-air ones, which can also contribute to the accumulation of hydrogen.

5. Best engine performance

Taking into account the engine limitations some final experiments were carried out in order to determine its best possible output at conditions free from abnormal combustion events. To that end, after an initial warming-up period the hydrogen-air mixture fed to the four cylinders was progressively fuel-enriched by increasing the injection pulse width. The engine was operated at different speeds and the highest values of the brake torque and power that could be achieved in the absence of abnormal combustion events were determined in each case. The results are compiled in Table 2 where the values of injection pulse width and the air-to-fuel ratio have been also included.

It can be seen that the hydrogen-air mixture providing the best output becomes leaner (higher λ) as the engine speed increases. This

Table 1
Results of the CFD simulations performed at various H₂ injection conditions.

Engine speed (rpm)	Injection pulse width (ms)	Injection advance (° BTDC)	$\omega_{H_2}^{in}$ (%)
2000	4	1	5
2000	4	22	6
2000	6	1	5
2000	6	22	9
4000	4	1	30
4000	4	22	48
4000	6	1	50
4000	6	22	62

Table 2
Best engine output at the speeds indicated and normal combustion conditions.

Engine speed (rpm)	Injection pulse width (ms)	Air-to-fuel ratio (λ)	Brake torque (N·m)	Brake power (kW)
1000	7.59	1.30	50.3	5.27
2000	7.85	1.35	63.5	13.3
3000	7.92	1.42	65.4	20.5
4000	8.42	1.49	67.2	28.1
5000	8.76	1.52	64.0	33.5

could be due to the fact that at higher engine speeds the amount of hydrogen injected also increases as well as the fraction of the hydrogen that remained in the intake manifold, thus increasing the likelihood of provoking abnormal combustion events.

Whereas the highest value of the brake power (33.5 kW) was obtained at the maximum engine speed considered (5000 rpm), the highest brake torque (67.2 N·m) resulted at 4000 rpm. On comparing these values with the best engine performance achieved when gasoline is used as fuel (59 kW at 5000 rpm and 132 N·m at 3800 rpm) [6], it is clear that an output loss of about 50% results when replacing gasoline by hydrogen. This is due to a great extent by the propensity of hydrogen to suffer from abnormal combustion phenomena which remarks the importance of their early and accurate detection.

6. Conclusions

A good correlation between in-cylinder pressure and block-engine acceleration measurements has been found regarding the detection of knocking combustion cycles in a port-fuel injection spark ignition internal combustion engine of automotive size fueled with hydrogen-air mixtures. To improve the accuracy, signals were decomposed into their low- and high-frequency components by means of conventional Fourier transform analysis. High and low frequencies were distinguished as the values above and below 20 times the engine speed, respectively. Knock events were very well described by the high-frequency components of the pressure and acceleration signals which showed changes associated to the abnormal combustion event of up to about 20 bar and 250g, respectively. The adopted criterion, based on the engine speed, has the advantage of taking into account the important effects introduced by the engine speed in conditioning the likelihood of suffering abnormal combustion events.

To the best of our knowledge, in this work the in-cylinder pressure and block-engine vibration measurements are carried out simultaneously together with ambient noise recording for the first time. The raw signal recorded by the microphone allowed to detect the strong hoarse noise associated to backfire but it did not allow distinguishing knock from the background signal in spite of the characteristic ping noise that could be heard during some combustion cycles. However, a spectral analysis of the raw signal in terms of third octave bands greatly improved the sensitivity. In this regard, a typical knocking cycle could be distinguished from a normal combustion cycle through the highest frequency bands (between 8 kHz and 20 kHz) which were ca. 8–10 dB more intense. As concerns backfire, this anomaly could be associated to more intense octave bands at the lowest frequencies (between 250 Hz and 4 kHz). These results indicate that detection of abnormal combustion events is possible through acoustic measurements. An optimization of the experimental conditions, particularly microphone location, will surely provide a much more accurate detection results that the ones achieved in this work. Therefore there is great potential for the development of acoustic sensors for abnormal combustion detection in automotive engines.

CFD simulations performed with a physical model that reproduced the engine systems for mixture formation and fuel injection revealed that combustion anomalies can arise as a result of the fact that the engine was originally designed to run on gasoline, a fuel much more

dense than hydrogen. It has been found that a fraction of the hydrogen injected still remains in the intake manifold after the intake valve has closed. This fraction increases with the increase of the injection pulse width to obtain richer mixtures and especially when the engine speed rises (e.g. from 5–9% at 2000 rpm to 30–62% at 4000 rpm) due to the reduced time window available for fuel injection. The accumulation of hydrogen that takes place increases the risk of backfire which in turn increases the likelihood of suffering from knock events in the subsequent combustion cycles. The simulation results indicated that the dimension of the valves and the hydrogen flow rate delivered by the injectors were not sufficiently large as to assure that all the injected hydrogen enters the cylinders. The conclusion is that although the adaptation of gasoline engines to run on hydrogen is obviously feasible, a dedicated design is highly recommended when the engine will be fueled with hydrogen in order to avoid the problems associated to abnormal combustion phenomena.

Acknowledgements

We gratefully acknowledge Volkswagen Navarra S.A. for the Volkswagen Polo 1.4 engine donation. LMG and PMD thank the Spanish Ministerio de Economía, Industria y Competitividad (MINECO) and the European Regional Development Fund (ERDF/FEDER) for the financial support under project ENE2015-66975-C3-1-R.

References

- [1] Gandía LM, Arzamendi G, Diéguez PM. Renewable hydrogen energy: an overview. In: Gandía LM, Arzamendi G, Diéguez PM, editors. *Renewable hydrogen technologies*. Amsterdam: Elsevier; 2013. p. 1–17.
- [2] Verhelst S. Recent progress in the use of hydrogen as a fuel for internal combustion engines. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:1071–85.
- [3] Helmut E, Klaus S, Daniel L, Manfred K, Markus S. Potential of synergies in a vehicle for variable mixtures of CNG and hydrogen. SAE Technical Paper 2009-01-1420; 2009. p. 19–28.
- [4] Diéguez PM, Urroz JC, Marcelino-Sádaba S, Pérez-Ezcurdia A, Benito-Amurrio M, Sáinz D, et al. Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen–methane mixtures. *Appl Energy* 2014;113:1068–76.
- [5] Stockhausen WF, Natkin RJ, Kabat DM, Reams L, Tang X, Hashemi S, et al. Ford P2000 hydrogen engine design and vehicle development program. SAE Technical Paper 2002-01-0240; 2002. p. 63–71.
- [6] Sopena C, Diéguez PM, Sáinz D, Urroz JC, Guelbenzu E, Gandía LM. Conversion of a commercial spark ignition engine to run on hydrogen: performance comparison using hydrogen and gasoline. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:1420–9.
- [7] Escalante Soberanis MA, Fernandez AM. A review on the technical adaptations for internal combustion engines to operate with gas/hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:12134–40.
- [8] Sáinz D, Diéguez PM, Sopena C, Urroz JC, Gandía LM. Conversion of a commercial gasoline vehicle to run bi-fuel (hydrogen-gasoline). *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:1781–9.
- [9] Verhelst S, Demuyneck J, Sierens R, Scarcelli R, Matthias NS, Wallner T. Update on the progress of hydrogen-fueled internal combustion engines. In: Gandía LM, Arzamendi G, Diéguez PM, editors. *Renewable hydrogen technologies*. Amsterdam: Elsevier; 2013. p. 381–400.
- [10] Heywood JB. *Internal combustion engine fundamentals*. New York: McGraw-Hill Inc.; 1988.
- [11] Verhelst S, Wallner T, Eichlseder H, Naganuma K, Gerbig F, Boyer B, et al. Electricity powering combustion: hydrogen engines. *Proc IEEE* 2012;100:427–39.
- [12] White CM, Steeper RR, Lutz AE. The hydrogen-fueled internal combustion engine: a technical review. *Int J Hydrogen Energy* 2006;31:1292–305.
- [13] Q-h Luo, B-g Sun. Experiments on the effect of engine speed, load, equivalence ratio, spark timing and coolant temperature on the energy balance of a turbo-charged hydrogen engine. *Energy Convers Manage* 2018;162:1–12.
- [14] Marseglia G, Costa M, Catapano F, Sementa P, Vaglieco BM. Study about the link between injection strategy and knock onset in an optically accessible multi-cylinder GDI engine. *Energy Convers Manage* 2017;134:1–19.
- [15] Verhelst S, Wallner T. Hydrogen-fueled internal combustion engines. *Prog Energy Combust Sci* 2009;35:490–527.
- [16] Zhen X, Wang Y, Xu S, Zhu Y, Tao C, Song M. The engine knock analysis – an overview. *Appl Energy* 2012;92:628–36.
- [17] Wang Z, Liu H, Reitz RD. Knocking combustion in spark-ignition engines. *Prog Energy Combust Sci* 2017;61:78–112.
- [18] Pan J, Sheppard CGW. A theoretical and experimental study of the modes of end gas autoignition leading to knock in S.I. engines. SAE Technical Paper 942060; 1994. p. 1925–47.
- [19] Fiolka J. Fractional Fourier transform and its application to engine knock detection.

- In: Proceedings of the 22nd international conference “mixed design of integrated circuits and systems”, June 25–27, 2015, Toruń, Poland, p. 595–8.
- [20] Pan J, Shu G, Wei H. Research on in-cylinder pressure oscillation characteristic during knocking combustion in spark-ignition engine. *Fuel* 2014;120:150–7.
- [21] Su T, Ji C, Wang S, Shi L, Yang J, Cong X. Effect of spark timing on performance of a hydrogen-gasoline rotary engine. *Energy Convers Manage* 2017;148:120–7.
- [22] Božić M, Vučetić A, Sjerić M, Kozarac D, Lulić Z. Experimental study on knock sources in spark ignition engine with exhaust gas recirculation. *Energy Convers Manage* 2018;165:35–44.
- [23] Li H, Karim GA. Knock in spark ignition hydrogen engines. *Int J Hydrogen Energy* 2004;29:859–65.
- [24] Bradley D, Kalghati GT. Influence of autoignition delay time characteristics of different fuels on pressure waves and knock in reciprocating engines. *Combust Flame* 2009;156:2307–18.
- [25] Rosseel E, Sierens R. Knock Detection in a hydrogen engine. SAE Technical Paper 970039; 1997. p. 37–47.
- [26] Tang X, Kabat DM, Natkin RJ, Stockhausen WF, Heffel J. P2000 Hydrogen engine dynamometer development. SAE Technical Paper 2002-01-0242; 2002. p. 81–92.
- [27] Szwaja S, Bhandary KR, Naber JD. Comparison of hydrogen and gasoline combustion knock in a spark ignition engine. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:5076–87.
- [28] Kawahara N, Tomita E. Visualization of auto-ignition and pressure wave during knocking in a hydrogen spark-ignition engine. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:3156–63.
- [29] Szwaja S, Naber JD. Dual nature of hydrogen combustion knock. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:12489–96.
- [30] Yang F, Zhang H, Chen Z, Kong W. Interaction of pressure wave and propagating flame during knock. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:15510–9.
- [31] Sun B, Tian H, Liu F. The distinctive characteristics of combustion duration in hydrogen internal combustion engine. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:14472–8.
- [32] Luo Q, Sun B. Inducing factors and frequency of combustion knock in hydrogen internal combustion engines. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:16296–305.
- [33] Kiesgen G, Klütting M, Bock C, Fischer H. The new 12-cylinder hydrogen engine in the 7 series: the H2 ICE age has begun. SAE Technical Paper 2006-01-0431; 2006. p. 13–21.
- [34] Scholl D, Barash T, Russ S, Stockhausen W. Spectrogram analysis of accelerometer-based spark knock detection waveforms. SAE Technical Paper 972020; 1997. p. 1183–90.
- [35] Boubai O. Knock detection in automobile engines. *IEEE Instrum Meas Mag* September; 2000: 25–8.
- [36] Naber JD, Blough JR, Frankowski D, Goble M, Szpytman JE. Analysis of combustion knock metrics in spark-ignition engines. SAE Technical Paper 2006-01-0400; 2006. p. 111–32.
- [37] Brunt MFJ, Pond CR, Biundo J. Gasoline engine knock analysis using cylinder pressure data. SAE Technical Paper 980896; 1998. p. 1399–412.
- [38] Li T, Yin T, Wang B. A phenomenological model of knock intensity in spark-ignition engines. *Energy Convers Manage* 2017;148:1233–47.
- [39] Shen X, Zhang Y, Shen T, Khajornstraidet C. Spark-advance self-optimization with knock probability threshold for lean-burn operation mode of SI engine. *Energy* 2017;122:1–10.
- [40] Redel-Macías MD, Hervás-Martínez C, Gutiérrez PA, Pinzi S, Cubero-Atienza AJ, Dorado MP. Computational models to predict noise emissions of a diesel engine fueled with saturated and monounsaturated fatty acid methyl esters. *Energy* 2018;144:110–9.
- [41] Redel-Macías MD, Pinzi S, Leiva D, Cubero-Atienza AJ, Dorado MP. Air and noise pollution of a diesel engine fueled with olive pomace oil methyl ester and petrodiesel blends. *Fuel* 2012;95:615–21.

upna

Universidad Pública de Navarra
Nafarroako Unibertsitate Publikoa