Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea

BILBOKO INGENIARITZA ESKOLA
ESCUELA DE INGENIERÍA DE BILBAO

INDUSTRIA TEKNOLOGIAKO INGENIARITZA UNIBERTSITATE MASTERRA

MASTER AMAIERAKO LANA

HIDROGENOAREN ERABILERA ITSASOKO DIESEL MOTORRETAN. ITSAS-MOTOR BATEAN BALIDATUTAKO CFD SIMULAZIOA

Ikaslea: *del Olmo Sanz, Julen*

Zuzendaria: *Peña Bandrés, Alberto*

Zuzendarikidea: *Uriondo Arrue, Zigor*

Ikasturtea: 2023-2024

Data: Bilbon, 2024ko ekainaren 5ean

Aurkibidea

0 Laburpen eleanitza 7
1 Sarrera 8
2 Testuingurua 11
2.1 Gas natural likidotua (GNL) eta Bioerregaiak 11
2.2 Biltegiratze elektrikoak 14
2.3 Amoniako eta Hidrogenoa 16
2.4 Ohiko erregai eta berrien arteko dualtasuna 20
3 Lanaren helburuak eta irismena 22
4 Lanak dakartzan onurak 24
4.1 Abantaila sozialak 24
4.2 Abantaila ekonomikoak 24
4.3 Abantailak ikerkuntzan 24
5 Marko teorikoa 25
5.1 Oinarrizko funtzionamendua 25
5.2 BEAM-en parametro nagusiak 26
5.3 Ziklo termodinamiko baliokidea 28
5.4 Karga berritze prozesua 30
5.4.1 Errendimendu bolumetrikoa (ν) 30
5.5 Errekuntza 30
5.5.1 Errekuntza fase desberdinak 30
5.5.2 Hidrogenoaren propietateak eta abantail/desabantailak 34
5.5.3 Errekuntzan eragina duten parametroak 36
5.6 Emisioak 40
5.6.1 Karbono dioxidoa 40
5.6.2 Nitrogeno oxidoak (NO_x) 41
5.6.3 Karbono monoxidoa (CO) 43
5.6.4 Kea eta partikulak 44
5.6.5 Erregai-aire erlazio erlatiboaren araberako emisioak 44
5.6.6 Hidrogenoaren eragina emisio mailetan 44
6 Metodologia 47
6.1 Motorraren ezaugarriak 47
6.2 Funtzionamendu baldintzak 51
6.2.1 Presioak 51

6.2.2 Tenperaturak 52
6.2.3 Biraketa abiadura 53
6.2.4 Emariak (hidrogeno barik) 53
6.3 Mugimendua 58
6.3.1 Pistoia 58
6.3.2 Balbulen mugimendua 59
6.4 STAR CCM+ (In-Cylinder adds on) 60
6.4.1 Geometria 62
6.4.2 Mailatua 64
6.4.3 Modelo fisikoak 74
6.4.4 Erregioak 88
6.4.5 Emaitzak 91
6.4.6 Emaitzen interpretazio orokorra eta etorkizunerako urratsak 110
7 Azken ondorioak 112
8 Gantt Diagrama 113
9 Aurrekontua 114
ERANSKINA I 115
ERANSKINA II 116
10 Bibliography 158

Irudi eta taulen aurkibidea

Irudia 1. Itsas karga orokorra mundu mailan, mila tonatan 8
Irudia 2. Europako energia sorrera (ezkerra) eta inportazioa (eskuma) 10
Irudia 3. BBGko planta Bilboko Portuan 12
Irudia 4. Ibaizabal Quince 12
Irudia 5. Oizmendi itsasontzia Bilboko portuan 13
Irudia 6. Olio erregaiarekin hornitutako ontzia, CEPSA 14
Irudia 7. Yara Birkeland Zero Emissions ontzia 14
Irudia 8. E-Ferry Ellen ontzia 15
Irudia 9. Kawasaki E-5 Ontzi tanga 15
Irudia 10. Erregaien Behe Bero Ahalmenak (BBA) 16
Irudia 11. Fraunhofer erregai zelula 17
Irudia 12. Kriti Future ontzia 17
Irudia 13. Wärtsilä 25 motorra 18
Irudia 14. Viking Energy ontzia 18
Irudia 15. REM Energy ontzia 19
Irudia 16. Energy Observer 2 ontzia 20
Irudia 17. MAN D2862 LE448 motorra CMB Tech hidrogeno injekzio sistemarekin 21
Irudia 18. Proiektuan aurrera eramango diren urratsak 22
Irudia 19. BIE Energetiko Sailak planteatutako motor dualaren eskema 23
Irudia 20. 4 aldiko motor baten faseak 25
Irudia 21. Zilindroaren parametro esanguratsuak 27
Irudia 22. KPMaren aire ziklo baliokidea 29
Irudia 23. Errekuntzan ematen diren faseak angelu tartetan desberdinduta 31
Irudia 24. Errekuntza faseak 32
Irudia 25. Atzerapen denboraren faseak 32
Irudia 26. Hidrogeno eta dieselaren errekuntza prozesua 34
Irudia 27. Efizientzia termikoa hidrogeno ordezkapenen menpe konpresio erlazio desberdinentzat 38
Irudia 28. Kontsumo espezifiko, efizientzia termiko eta potentzia mekanikoak abiadura angeluarraren menpe hidrogeno frakzio desberdinentzat. 38
Irudia 29. Diesel motorren emisioak 40
Irudia 30. NOx emisioak motorraren zikloan 43
Irudia 31. NOx, HC eta CO emsioak erregai-aire erlazioren arabera 44
Irudia 32. CO2, CO, UHC (Unburnt hydrocarbon), NOx eta Smoke emisioak hidrogeno ordezkapen energetikoaren menpe 45
Irudia 33. CO2, CO, NOx H2, THC eta kedar emisioak imep eta H2 frakzioen menpe 46
Irudia 34. Laborategiko motorraren irudia 47
Irudia 35. Motorraren fitxa teknikoa 48
Irudia 36. Pistoiaren planoa 49
Irudia 37. Pistoi eta zilindro buruan arteko xehetasunak 49
Irudia 38.Modeloaren geometria (cranck angelua 0º denean) 50
Irudia 39. Modeloaren geometria azalpenekin (adierazi ez diren atalak: sarrera portua eta irteera balbula) 50

Irudia 40. Saiakuntza monodimentsionaletik lortutako presio distribuzioa....51
Irudia 41. Injekzio prozesurako faseak....54
Irudia 42. Injekzio deskarga frakzia cranck angeluaren menpe....54
Irudia 43. Injektorearen emaria crank angeluaren menpe....55
Irudia 44. 400 kWko kasuarentzako injekzio emari masikoa ziklo batean....56
Irudia 45. Errendimendu bolumetrikoa helize kurba jarraitzen duen kasuan....57
Irudia 46. Pistoiaren hiru posizio esanguratsuak....58
Irudia 47. Pistoiaren posizio orokorra biraketa angeluaren menpe....59
Irudia 48. Balbulen altxamendua biraketa angeluaren menpe.....59
Irudia 49. CFD simulazioarako jarraitutako fluxu diagrama....61
Irudia 50. Modeloaren erreferntzia ardatzak eta jatorrizko puntua....62
Irudia 51. Lineraren distantzia....63
Irudia 52.Pistoi eta balbularen distantzia esanguratsuak....63
Irudia 53. Pistoia eta balbulen mugimendua grafikatuta....63
Irudia 54. Errekuntza ganbararen mailatua momentu zehatz batean....64
Irudia 55. Mailaren deformazioa....64
Irudia 56. STAR CCM+ko mailatu hexaedriko, tetraedriko eta poligonala (ezkerretik eskumara)....65
Irudia 57. Port Volume Control (goian), Cylinder Chamfer Control (erdian) eta Cylinder Piston Crevice (behean)....67
Irudia 58. Valve Port Volume Control (ezkerrean) eta Valve Face Volume Control (eskuman)....67
Irudia 59. Valve Curtain Interface (ezkerra) eta Inlet/Outlet Extrusion (eskuma)....68
Irudia 60. Mailatuaren argazkiak....68
Irudia 61. "Remesh"-eatzean gelaxka berrien hasierako datuak extrapolatzeko modua....69
Irudia 62. Gelaxka kopurua birabarkiaren angelu bakoitzean....74
Irudia 63. ECFM-3Z modeloaren zonalde desberdinak....82
Irudia 64. ECFM-CLEH modeloaren lau zonaldeak....83
Irudia 65. Reacting Species Transport modeloaren planteamendua....84
Irudia 66. Injektore zuloen kokapena....89
Irudia 67. Injekzio sistema simulazioan....89
Irudia 68. Simulazioko bataz besteko presioa zilindroan, laborategiko saikuntzarekin alderatuta. .92
Irudia 69. Birabarkia 1º, 2º,3º, 5º eta 13º duenean zilindroren presioa....92
Irudia 70. Birabarkiak 37º, 83º eta 137º duenean zilindroaren presioa....93
Irudia 71. Birabarkiak 198º, 237º, 344º duenean zilindroaren presioa....93
Irudia 72. Birabarkiak 348º, 363º eta 429º duenean zilindroaren presioa....94
Irudia 73. Simulazioaren PV diagramal logaritmikoa....94
Irudia 74. Zilindroko bataz besteko tenperatura.....95
Irudia 75. Birabarkiak 1º, 2º, 3º, 4º eta 8º duenean zilindroaren barneko tenperatura....96
Irudia 76. Birabarkiak 13º, 40º eta 137º duenean tenperatura zilindroan....96
Irudia 77. Birabarkiak 181º, 237º eta 344º duenean tenperatura zilindroan....97
Irudia 78. Birabarkiak 386º eta 440º duenean tenepratura zilindroan....97
Irudia 79. Simulazioaren presio kurba eta arrastre presio kurba....98
Irudia 80. Errekuntza fase desberdinak: atzerapen denbora (1), errekuntza azkarra (2), difusiozko errekuntza (3)....98
Irudia 81. Injekzioa atzerapen denboran eta nahastutako aire/erregai erlazioa eta erreagai partikulen hedapena....99
Irudia 82. Injektatutako erregai masa totala, lurruna eta likidoa....99

Irudia 83. Tenperatura zilindroan atzerapen denboran 100
Irudia 84. Nahaste gaseosoaren erregai-aire erlazioa 101
Irudia 85. OH masa frakzioa errekuntza azkarrean 101
Irudia 86. Tenperaturaren bilakaera errekuntza azkarrean 102
Irudia 87. Erregai-aire erlazioa eta partikulen hedapena errekuntza difusoaren hasieran 102
Irudia 88. OH erradikalen masa frakzioa errekuntza difusoan 103
Irudia 89. Tenperaturaren bilakaera errekuntza difusoan 103
Irudia 90. Birabarkiak 1º, 2º, 3º, 5º eta 8º duenean abiaduraren bilakaera 104
Irudia 91. Birabarkiak 28º, 75º, 132º duenean abiaduraren bilakaera 105
Irudia 92. Birabarkiak 200º, 273º eta 344º duenean abiaduraren bilakaera 105
Irudia 93. Errekuntza fasean zehar abiaduraren bilakaera 106
Irudia 94. Difusiozko errekuntza eta hedapen fasean zehar abiaduraren bilakaera 106
Irudia 95. CO eta CO2 emisioak (gelaxketan neurtutako frazkio maximoak) 107
Irudia 96. NOx emisioak (gelaxkaetan neurtutako frakzio maximoak) 108
Irudia 97. Errekuntza azkar eta difusiozkoan NO-aren bilakaera 108
Irudia 98. Simulazioaren errorea ("Residuals") birabarkiaren angeluaren menpe 109

Taula 1. Hidrogenoaren propietate kimikoak gaur eguneko erregaiekin alderatuta 34
Taula 2. Laborategiko motorraren informazio gehigarria 48
Taula 3. Karga eta potentziak motorrean 51
Taula 4. Airearen sarrera presio diesel soilarekin 52
Taula 5. Airearen sarrera tenperatura diesel soilarekin 52
Taula 6. Irteerako gasen tenperatura diesel soilarekin 52
Taula 7. Motorraren karga egoera desberdinentzako abiadura angeluarra 53
Taula 8. Erregai emari masikoa diesel soilarekin 53
Taula 9. Airea emaria kalkulatzeko datuak 56
Taula 10. Errendimendu bolumetrikoa helize kurba jarraitzen duen kasuan 56
Taula 11. Aztergai den potentzia kasuetarako errendimendu bolumetrikoa 57
Taula 12. Aztergai den potentzia kasuetarako aire emari masikoa 57
Taula 13. Mailatuaren oinarrizko parametroak 66
Taula 14. Birmailatzeko kriterioak 70
Taula 15. Balbulek eta injektoreak baldintzatu urrats-denborak 90
Taula 16. Hasierako gasen egoera potentzia desberdinentzat (f=0) 91
Taula 17. 440º-tan neurtutako emisio mailak 107
Taula 18. Aurrekontua 114

0 Laburpen eleanitza

Diesel motorretan, hidrogenoak izan dezakeen aplikagarritasuna aztertzea du xede proiektu honek. Zehazki, itsas ibilgailuetara bideratuko da, hain zuzen ere, mundu mailan garraio zerbitzu handiena eskaintzen duena eta zoritxarrez, ikuspuntu ekologiko batetik, berotegi efektuko gas emisio handia suposatzen duena ere. Gaur egunean, Bilboko Ingeniaritza Eskolan, eskuragarri dagoen itsas motorrak diesel bitartez bakarrik funtzionatzen du, nahiz eta haren asmoa hidrogenoa sartzea den epe laburrean; hortaz, hasiera pausu gisa, CFD bitartez, orain arteko funtzionamendua aztertu nahi da, hau da, diesel bitartekoa. Behin ohiko funtzionamendua ezaugarrituta eta simulazio konputazionalean esperotako datuak lortzerakoan, hurrengo urrats gisa, hidrogenoa gehituko litzaioke CFD simulazioan, nahiz eta lan honetan, ez den burutuko. Hala ere, hidrogenoa gehitzeak suposatuko lituzkeen aldaketak eta fenomenoak aztertuko dira; baita simulazioan kontuan hartu beharko direnak ere. Bestalde, hainbat ikerketa burutu dira orain arte, baina laborategiko modelora gehien moldatzen dena aukeratu beharko da eta elikatze sistema zein operazio baldintzak zehaztuta.

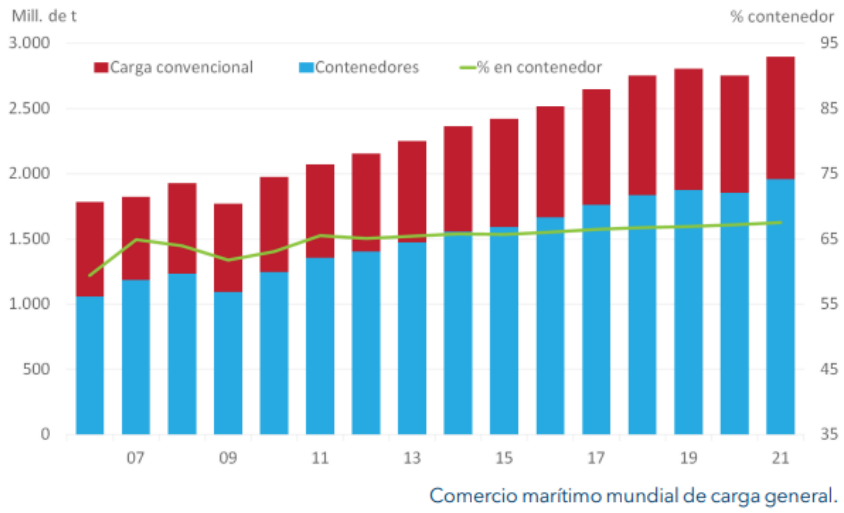
El objetivo de este proyecto es analizar la aplicabilidad del hidrógeno en los motores diésel. En concreto, se estudiarán los vehículos marinos, precisamente el que ofrece un mayor servicio de transporte a nivel mundial y que desgraciadamente, desde un punto de vista ecológico, también supone una gran emisión de gases de efecto invernadero. En la actualidad, en la Escuela de Ingeniería de Bilbao, el motor de mar disponible sólo funciona mediante diésel, aunque su intención es introducir hidrógeno a corto plazo, por lo que, como paso inicial, a través de CFD, se pretende analizar el funcionamiento convencional, es decir, mediante diésel únicamente. Una vez caracterizado su funcionamiento normal y a la hora de obtener los datos esperados en la simulación computacional, como paso siguiente, se le añadiría hidrógeno en la simulación CFD, aunque en este trabajo no se llevará a cabo. No obstante, se analizarán los cambios y fenómenos que supondría la adición de hidrógeno; así como los que habrá que tener en cuenta en la simulación. Por otro lado, se han llevado a cabo varios estudios, pero habrá que elegir el que más se adapte al modelo de laboratorio y definir tanto el sistema de alimentación como las condiciones de operación.

The objective of this project is to analyze the applicability of hydrogen in diesel engines. Specifically, marine vehicles will be studied, precisely the one that offers the greatest transportation service worldwide and which unfortunately, from an ecological point of view, involves a large emission of greenhouse gases. Currently, at the Bilbao School of Engineering, the available engine only works using diesel, although its intention is to introduce hydrogen in the short term, so, as an initial step, through CFD, it is intended to analyze the operation conventional that is, using diesel only. Once its normal operation has been characterized and at the time of obtaining the expected data in the computational simulation, as a next step, hydrogen would be added in the CFD simulation, although it will not be carried out in this work. However, the changes and phenomena that the addition of hydrogen would entail will be analyzed; as well as those that must be taken into account in the simulation. On the other hand, several studies have been carried out, but it will be necessary to choose the one that best adapts to the laboratory model and define both the feeding system and the operating conditions.

1 Sarrera

Gaur eguneko testuinguru sozio-politiko eta ekonomikoan, merkatalgaien zein pertsonen garraioa ezinbestekotzat hartzen da. Globalismoa erabat finkatuta dagoen gizarte honetan, mundu osoa ibilgailuz josita dago, merkatu dibertsifikatu baten beharrak asetzeko asmoz. Horrek suposatzen duen inpaktu ekologikoa kontuan hartu gabe.

Garraio-bideak lau ildotan sakabana daitezke erabiltzen duten medioaren arabera: aire, itsas, errepide eta tren bidezkoak. Kasuaren arabera, bata edo besteak erabiltzen dira. Hala ere, garraiatzen duten bolumenaren arabera, garrantzitsuena itsas garraioak lirateke, mundu osoko merkataritzaren %90a suposatzen baitu, hain zuzen ere (IMO, International Maritime Organization-en esanetan). Azken finean, eskari oso handia duten produktuek, gariak kasu, ez lirateke posible izango beste garraio-bide batekin. Gutxi balitz, urteak pasa ahala, itsasontziz garraiatuko produktu kantitatea gorako bidea jarraitzen du kontainer zein karga konbentzionala izan (ikusi irudia 1). 2006tik 2021era %35eko gorakada izan du, tonatan, eta iaz gutxi geratu zitzaion 3 mila milioi tonako langa gainditzeko.



Irudia 1. Itsas karga orokorra mundu mailan, mila tonatan [1]

Itsasontzi kopuruaren ikuspuntutik, VesselsValue-ren txosten baten arabera, 2022rako 58.067 merkantzia-ontzi aurreikusten ziren ontziteria mundialean, 2018an 51.651 izanik (%12 handiagoa). Ekonomiari erreparatuz, 2018an ontziteriak 774 bilioi USD batu zuten bitartean, gaur egunean 1.589 bilioi USD suposatzen dute; hau da, %100 gehiago. [2]

Hala ere, ontziek emisio kutsakorrak askatzen dituzte, airea zein ura kaltetzen dituztenak; era berean, berotegia efektua bultzaraziz. Gainera, itsas garraioa zarata iturritzat har daiteke, bai atmosfera zein itsasoa kutsatzen baitute. Espezie kolonizatzaileen agerpenen arrazoia nagusienetarikoa da baita, eta energia eta lehengai askoren beharrean egoten dira ontzioletan. Ontzien bizitzaren amaiera ere kalte nabarmena izan daiteke, material horren birziklapena ez baita ematen herrialde askotan.

Lan honen ardatzetako bat emisioak murriztea den heinean, Berotegi Efektuko Gasetan (BEG) oinarrituko da batez ere; azken finean, mundu mailako ontziteriaren gorakadarekin erlazio zuzena

baitu. Zorionez, nahiz eta, 2015eko Parisko Hitzarmen Klimatikoan esplizituko aipatu ez, garraio mota hau garbiago eta jasangarriago bilakatzeko pausuak eman dira geroztik.

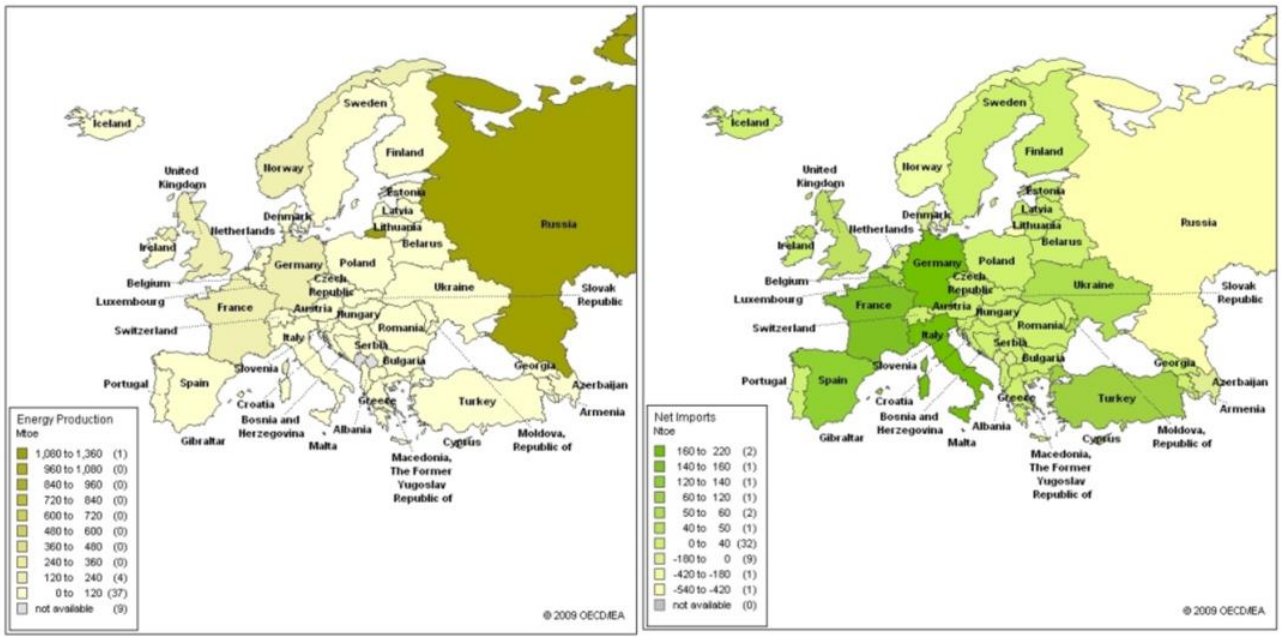
International Maritime Organization (IMO) erakundeak hainbat betebehar hitzartu ditu ontzien emisio kutsakorrak mugatzeko airean. Haien artean, murriztatzaileena, 2020ko urtarrilak 1ean sartu zen indarrean, erregaien sufrea, neurri handi batean, mugatzea duena hizpide; baina gaurkoz ez dena guztiz ebaluatu. Hala ere, aurrerapausoak eman dira emisioak zein erregai kontsumoa neurtzeko jarraibideetan, beharrezkoak direnak mugak zein normak ezartzeko; bai epe luze zein ertain edota laburrera.

IMOren Berotegi Efektuko Gasen (BEG) Laugarren Azterketan, [3] 2021an argitaratu zen. Bertan, 2012an, itsas garraio internazionala, munduko CO_2 emisio antropogenikoen %2,76 zela kalkulatu zuten eta 2018ra arte %9,6 igo zirela %2,89 izatera bilakatuz. Horrez gain etorkizuneko agertokia aurreikusi zuten, latza oso. 2008tik 2050era arteko epean, ontzietatik eratorritako karbono dioxido %130 igotzea espero da, itsas merkataritzaren bilakaeraren ondorioz.

2050eko panoramari aurre egiteko asmoz, IMOren partaideek, 2008ko egoerarekin alderatuta, BGEren emisioak %50 murriztea erabaki zuten eta **"Ontzien BGE emisioen murrizpenen inguruan hartutako IMOren hasierako estrategia"** [4] artikuluan bildu zen. Horrez aparte, BGEren emisioen intentsitatearen inguruan, emisioak garraiatuko masa eta distantzia barneratuta, mugak ezarri ziren. 2030erako %40ean jaitsi nahi zireneta 2050erako %70, berriro ere, 2008ko datua jo-puntutzat hartuta. Zoritxarrez, "Getting Zero Coalition" eragile pribatuz sortutako erakundearen esanetan, helmuga horiek betetzeko 2030erako lehenengo zero emisiodun ontziak komertzializatuta egon beharko lirateke.

Europar Batasuna, IMOen erabakietatik harago doa. **Europako Itun Berdean** [5]**,** 2050erako itsas garraiotik sortutako emisioen %90 desagertu behar zirela hitzartu zuten, jarraitu beharreko pasuak ere erabakita. Lehenengo urratsak 2020erako onartu ziren, nahiz eta oraindik txostena guztiz amaitzearen zain dagoen. Bertan, arau internazionalaz eta EBkoaz gain, haren aplikazioak ere azaltzen dira eta nolako eragina izan dezaketen epe laburrera. Horrela, irtenbide posibleak aztertzen dira hidrogenoaren erabilpen duala esaterako. Azken finean, erregaiari dagozkien mugak ezin dira pausu bakarrean eman, aldizkako aldaketen bitartez baizik. Hala ere, epe luzera deskarbonizazio osoa izan behar dute helburu.

Laburbilduz, Munduko itsas merkataritza zail eta asmo handiko ekimen baten aurrean dago. Orain arte hartutako erabakien arabera, 2050erako, 2008ko datuekin alderatua, sufre dioxidoaren %55, dinitrogeno oxidoaren %38 eta partikula kutsakorren %36 murriztu beharko litzateke gutxienez jota. Intentsitateari dagokionez, aurretik esan bezala, 2008ko egoerarekin alderatuta, 2030erako %40 eta 2050erako %70ko murrizpena bermatu beharko litzateke. Bestalde, urte berarekin alderatuta, 2050erako BGEen emisioak %50ra jaitsi beharko lirateke ere.



Irudia 2. Europako energia sorrera (ezkerra) eta inportazioa (eskuma) [6]

Azkenik, Europaren gaur egungo atzerri erregaiarekiko menpekotasuna %50ean dago eta 2030erako %70era hel daiteke. Europar Batasunak ezinbestekotzat hartzen du beste herrialdenganako erregai menpekotasuna haustea. Argi eta garbi ikus daiteke Irudia 2 hogeita seietatik ez dela bat bera ere ez salbu geratzen. Irtenbideen artean hidrogeno berdea legoke, nahiz eta oraingoz ez litzateke posible munduko ontziteria guztia asetzea, sistema dualetan oinarritu daiteke, gasolioaren erabilpena murrizten dutena eta eraginkortasun handiagoa ematen diote BEAMei.

2 Testuingurua

1903 urteaz geroztik, motor dieselak nabarmendu dira itsas munduan [7], gasolinarekin alderatuta abantaila asko aurkezten ditu-eta. Alde batetik, segurtasuna, pizketa sistema baten beharra ez duelako; hortaz, bujiak, banatzaileak, bobinak, etab ez daudenez ezingo dira itsas inguruneagatik hezetu ezta herdoildu ere. Bestetik, helizeen ohiko abiaduretara moldatzeko gaitasuna; diesel motorrak askoz ere motelagoak dira (2.000-3.000 bira/min artean, 6000koa izan ordez) eta helize eta motorraren arteko akoplamendua ez dute erreduktorerik behar, kasu askotan [8]. Zenbat eta elementu gutxiago erabili, orduan eta marruskadura gutxiago sortuko da piezen artean, motorraren bizitza erabilgarrirako onuragarria izanik. Azkenik, propietate aldetik, diesela energia gaitasun handiagodun erregaia da (%15 gehiago pisuan) eta gasolinarekin konparatuz, haren errendimendua %30 eraginkorragoa da [8].

Gaur egunean, Rudolf Dieselek planteatuko diseinutik nahiko hurbil mantentzen dira itsasontzien eragingailu sistemak. Egia da, ingeniaritza eta ikerketa lan handia eman dela geroztik eraginkortasun handiena bilatzeko asmoz, hori dela eta, balbulen eta injekzio sistemen doiketak, kontrolagailu elektronikoak edota turbo-konpresoreen eta SCR bezalako sistemek asko hobetu dutela XX. mende hasierako modeloa, baina BEAM kontzeptuab oinarritzen dira oraindik.

Zoritxarrez, dieselak ez ditu beteko IMOren eskakizunak. BEGen iturri izaten jarraitzen duen heinean, haren etorkizuna mugatuta egongo da. Izan ere, azken hamarkadetan, itsasontzien propultsioaren inguruan ikerketa asko burutu dira, kotxe baten deskarbonizaziorekin alderatuta zailtasun mordo aurkezten dituena; batez ere potentzia izugarria eta aukera berri batek gehitu dezakeen pisuak eraginda.

Egunean gaurkoz, 2008tik itsas garraioak %21-%29 artean murriztu ditu BEGen emisioak [9].Emaitza itxaropentsuak eta hurbildu egiten direnak IMOk adostutako langara. Hala ere, bide luzea dago aurretik. Azkenaldian, garraiobide mota honek jasandako hazkundeak ez dio eragin positiborik egin itsas ibilgailuen eraginkortasun energetikoaren erronkari. Horren ondorioz, erregai fosilenganako menpekotasuna murriztu behar da erabat, horretarako hamaika irtenbide posibletan lanean daude jada.

2.1 Gas natural likidotua (GNL) eta Bioerregaiak

Gas Naturala hidrokarburoa izan arren, CO2ren isuriak %20-%30 artean murriztu ditzake, absorbatzaileekin gainera, NO_x eta SO_2 desagerrarazteko aukera emanaz [9]. Sea-LNG, gas naturala itsas ibilgailuen erregai gisa sustatzen duen, erakundearen esanetan, 2021ean, itsas sektoreak gas erabiltzeko izugarrizko ekimena bideratu zuen. 2022an emandako kontratuen %30 erregai honekin funtzionatuko zutela hitzartu zen, horrela, mundu mailan erabilgarri dauden 229 unitateei, egikaritze prozesuan dauden beste 404 itsasontzi gehituko zitzaien [10]. Igoera nabarmenena kontainer-ontzietan gertatu zen. Haiengan jausten da munduko merkataritzaren zati handiena, sorta bakar batean 20.000 kontainer baino gehiago garraiatzeko gaitasuna dute-eta. Gutxi balitz, mundu osoko 600 metano garraiatzaileek gaitasuna daukate dieselaz gain haren salgaiarekin funtzionatzeko; hortaz GNL diesela ordezkatzeko irtenbide sendoenen artean dagoela adierazi daiteke [10].

Erregaiaz aldatzeko, motorren diseinuaz gain GNLren horniketa ahalbidetzeko egiturak behar dira. Horren adibide da Bilboko Portuan aurrera eramandako proiektuak:

- **BBG (Bahía Bizkaia Gas) planta**: Mundu osotik ekarritako GNLa bertan deskargatu egiten da. 450.000 m^3 gas metatzeko gaitasuna du, eta laugarren tanke bat eraikuntza prozesuan dago. Isurketa gaitasun aldetik, 800.000 Nm^3/h-ra arte hel daiteke eta haren pantalanak 270.000 m^3-dun metaneroak artatu ditzake [11]. Bestalde, Espainiako beste lau terminalekin batera, itsasontzien motorrei erregaia hornitzeko eskala txikiko azpiegiturak moldatzen ari dira.

Irudia 3. BBGko planta Bilboko Portuan [10]

- **Ibaizabal Quince:** Gas erregaidun atoiontzia da. Ibaizabal eta Murueta ontziolak bideratuko proiektua da, EEEren (Euskal Energiaren Erakundea) laguntza jasotakoa. Bilboko Portuaren jabetzakoa da. Wartsila 9L20DF TIER III (1.665 kW) bi motor erabiltzen du eta geldirik 57 tona bultzatzeko gai da [12].

Irudia 4. Ibaizabal Quince [13]

- **Oizmendi**: 2018ean, Ibaizabal eta Murueta ontziolek, EEEren laguntzarekin, eraikitako "Bunkering tanker"-a da. GNL hornitzeko azpiegitura falta duten portuetan, horniketa

ahalbidetzen du, itsasontzi batetik bestera transferi dezakeelako erregaia. 300 m^3-dun bi depositu ditu, gasa naturala -161ºC-tan mantentzeko gai direnak [14]

Irudia 5. Oizmendi itsasontzia Bilboko portuan [13]

Argi dago, Euskadi mailan GNLrekiko egindako apustua nabarmengarria izaten ari dela oso. 2030erako 790.000 tep-tan (gaur egungo %23) murriztu nahi da petrolioaren erabilera [14], gas naturala sustatzen duten proiektuekin adibidez. Europar Batasunak Core LNGas Hive proiektuaren baitan, 5 milioi euro inbertitu ditu dagoeneko [13] Dena dela, "zubi" erremintatzat har daiteke soilik, erregai fosila izaten jarraitzen baitu eta etorkizunerako CO_2 emisioak guztiz ekiditen dituen irtenbideak planteatzen dira.

Ohiko gas naturalaz gain, badaude iturri ez berriztagarrietatik eratorritako bioerregaiak ere, partzial edo osoki ordezkatu dezaketena diesela. %30eko ordezkapenarekin, karbono dioxidoaren isuriak %15-20 artean murriztu daiteke [9]. Gainera, GNLarentzako azpiegitura bera erabil dezakete. Iturriak ugariak dira: olio begetalak, findegitik, industriatik zein hondakindegietatik eratorritako biogasak, etab.

Espainia mailan, aurrerapauso handienen artean, Gobernu zentralak Maersk enpresa danimarkarrarekin hartutako akordioa da. Enpresak 2 milioi tona e-metanol sortzeko akordioa sinatu du 2023 eta 2030 bitartean, 2040rako iturri ez berriztagarrien menpekotasuna deuseztatzeko hautuaren baitan. 10.000 milioi euroko inbertsioa suposatuko du. Maersk taldeak 19 itsasontzi e-metanolez elikatzeko asmoa du, horretarako hurrengo bi urteetan, 750.000 tona erregaiaz baliatu beharko da [15].

Espainiako enpresei dagokionez, Cepsa nabarmentzen da gehienbat. 2022ko urrian, oliotatik eratorritako sufre gutxidun erregaia erabili zuen itsasontzietan lehen aldiz estatuan. Saiakera bat izanda ere, arrakastatsutzat hartu zuen konpainiak, funtzionamendu optimoa eta errendimendu altua erakutsi baitzuten motorrek. Modu honetan, ohiko erregai fosilekin alderatuta %85eko CO_2 aurrezteko aukera ematen du, ekoizpen gunetik motorrek erabiltzen duten arte.Gainera, SO_x –ak erabat ekiditen ditu, motorraren egituran aldaketa nabarmenik egin gabe. Enpresak erabaki garrantzitsuak hartu ditu deskarbonazioaren bidean eta horren isla, 2030ean 2,5 milioi tona urteko ekoizteko ekimena dago, Espainia eta Portugal jarriko dituela munduko erakusleihoan [16].

Irudia 6. Olio erregaiarekin hornitutako ontzia, CEPSA [15]

2.2 Biltegiratze elektrikoak

Motor elektrikoak BEAMen alternatiba bilakatzen ari da zenbat garraiobidetan, automobiletan kasu. Iturri berriztagarrietatik lortutako energia, elektrizitatea sortzeko erabili eta ondoren hainbat baliabide bitartez garraiatu eta metatzeko aukera ematen du. Hala ere, biltegiratze sisteman dago koska. Itsas garraioan, ibilbide oso luzeak gauzatzen dituzte, non gizarte gabeko eremuak zeharkatzen dituzten. Hortaz, pilak edo bateriak kargatzeko aukeren faltan, izugarrizko metaketa sistemak behar izaten dituzte. Hala ere, distantzia laburrak burutzeko lehenengo prototipoak erabiltzen hasi dira:

- **Yara Birkeland (Norvegia):** Munduko lehen kontainer ontzi elektriko gisa ezagutzen da. 2021 urteaz geroztik, Porsgrunn herritik Lavik eta Brevik herrietara ongarriak garraiotzen ditu, 57 km egiten dituelarik, 9 MWh bateria bati esker [17]. Itsasontziak berak, 80 metro luze eta 3.200 tona eraman ditzake. Berrikuntza honek, 40.000 kamioi bidai ekidingo ditu urtero, horrek suposatzen BEG emisio aurrezpenarekin.

Irudia 7. Yara Birkeland Zero Emissions ontzia [16]

- **E-Ferry Ellen (Danimarka):** Bi urte eta erdi pasa da Soby eta Fynsshav portuak lotzen hasi zenetik. 30 auto eta 200 bat bidaiari garraiatzeko gaitasuna du, 4,3 MWh-ko bateriari esker. 15,5 korapiloko abiadurara maximoarekin burutzen du 40 km-ko ibilbidea. Alternatiba honen ezarpenak 2.000 tona CO_2 aurreztuko ditu urtero [17].

Irudia 8. E-Ferry Ellen ontzia [16]

- **E-5 Ontzi-tanga (Japonia):** Kawasaki Heavy Industries (KHI) egikaritzen hasi den propultsio sistemaz baliatuko da. 3,8 MWh bateriek elikatuko dute itsasontzia, hau da, 46 Teslen adina ahalmena. 62 metro luze eta 4,5 metro zingodun ontziak, 1.300 m^3 erregai metatzeko gaitasuna izango du, paradoxikoki, gasolindegi flotagarri gisa funtzionatuko baitu eta bere jarduna Tokioko portuan bideratuko du. [18]

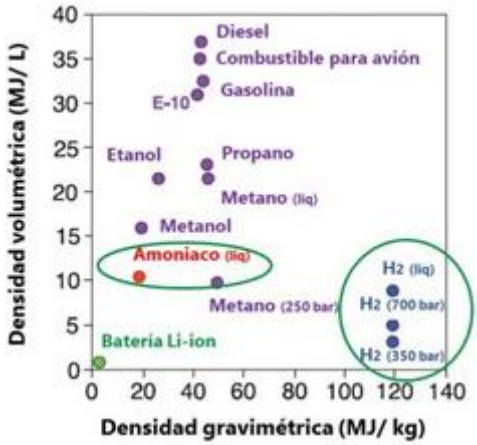
Irudia 9. Kawasaki E-5 Ontzi tanga [17]

Aitzitik, propultsio sistema elektriko batek ez du zertan emisio gabeko sistema bat izan, elektrizitatearen gehiengo iturri ez berriztagarrietatik dator-eta oraindik. Gainera, autonomia gutxikoak dira; hortaz, ibilbide laburrak eta elektrizitate hornidura berma daitekeen ingurunetatik ibili daiteke bakarrik.

2.3 Amoniako eta Hidrogenoa

Ontzi kontainerrek ibilbide luzeak gauzatu ditzaten, energia metaketa eraginkor eta iraunkor bat behar dute. Bateria edo pila elektrikoek orain arte, ez dute 9 MWh-tik gorako ahalmena erakutsi; hortaz, nahiz eta distantzia motzetarako erabilgarria suertatu, beste bilketa sistema garatzen ari dira ikerketa taldeek. Irtenbide posibleen artean, amoniakoa eta hidrogeno berdea nabarmentzen dira.

Amoniakoaren ahalmen energetikoa adierazgarria da (ikusi Irudia 10). Presiopeko hidrogenoaren dentsitate energetikoa bikoizten du (700 bar-etan), gutxi gorabehera; hortaz bolumen gutxiagorekin energia kantitate bera lortzeko aukera ematen du. Baldintza normaletan, gas egoeran topa daiteke; nahiz eta presio baxuak aplikatuta likido egoerara transformatu eta -33ºC-tan likidotzen baita presio atmosferikoan [19].



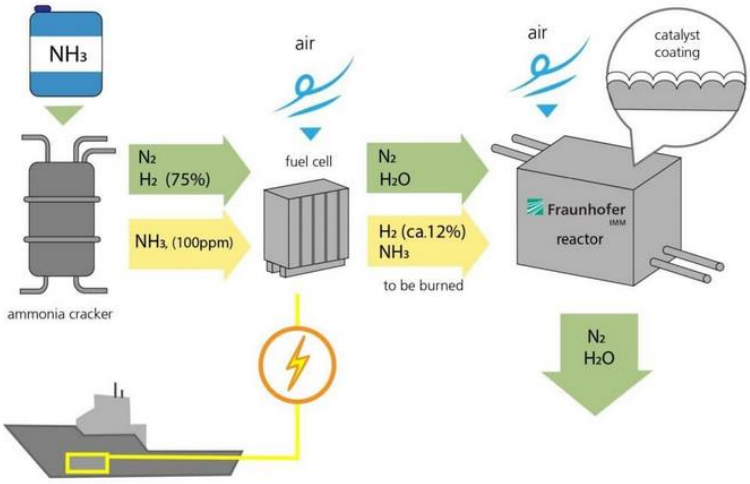
Irudia 10. Erregaien Behe Bero Ahalmenak (BBA)

Zoritxarrez, amoniakoa elementu toxikotzat hartzen da eta teknologia espezifikoa eskatzen du haren manipulazioak; hala ere, usain sendoa izanik, ihesak erraz identifika daitezke. Gainera, munduan 200 milioi tona garraiatzen direnez urtero, itsasontziz batez ere, ez litzateke oso zaila teknologia itsas garraioan aplikatzea [20].

Ez da berria amoniako erregaiaren kontua, Bigarren Mundu Gerratik erabili izan da, baina NO_x-ak sortzeko arriskua du, nahiz eta CO_2-rik ez sortu. Aitzitik, %95 amoniako eta %5 gasolioarekin [21], BEG ia erabat ekidin daiteke, beti ere konbustio perfektua bada, bestela, N_2O-ak (BEG gas oso indartsua etatoxikoa) sortzeko arriskua du. Hori dela eta, ikerketa taldeek piletan erabiltzea lehenesten dute. Elektrolisi-katalizatzaile sistemen bitartez, nitrogenoa eta ura bakarrik sortzen da-eta, izugarrizko inbertsioa suposatuko lukeena itsas sektorearentzat.

NH3 iturriei dagokionez, %75a ongarrietara bideratzen da eta gainerakoa industria kimikora batez ere [22]. Ekoizpen gaitasunari, erregai berrien hornikuntza aplikatuz gero, bikoiztu edo hirukoiztu egin beharko litzateke. Hortaz, denbora beharko luke itsasontzien zati handiek suposatuko luketen eskaria asetzea. Are gehiago, merkatuan "amoniako berdearen" kontzeptua oso berria eta CO2-ren isurketak erabat murrizteko asmoz, bektore energetiko berriztagarriak handitu beharko lirateke, momentu honetako parke eoliko eta fotovoltaikoek itsas merkatu osoaren %20 bakarrik elika zezaketen. [22].

Irudia 11, Fraunhofer Instituzioak [23] planteatutako maketa agertzen da. Erregai-zelulak dituen itsasontzi batek amoniakoa biltegiratzeko andelak izan ditzake, amoniakoa deskonposatuko litzatekeen erreaktore batekin batera eta nitrogenoa eta hidrogenoa sortu. Ondoren, hidrogenoa erregai-zelulara garraiatuko litzateke, eta bertan oxigenoarekin konbinatuz ura sortu eta itsasontzia bultzatzeko zelulan metatu beharko luke elektrizitatea.



Irudia 11. Fraunhofer erregai zelula [23]

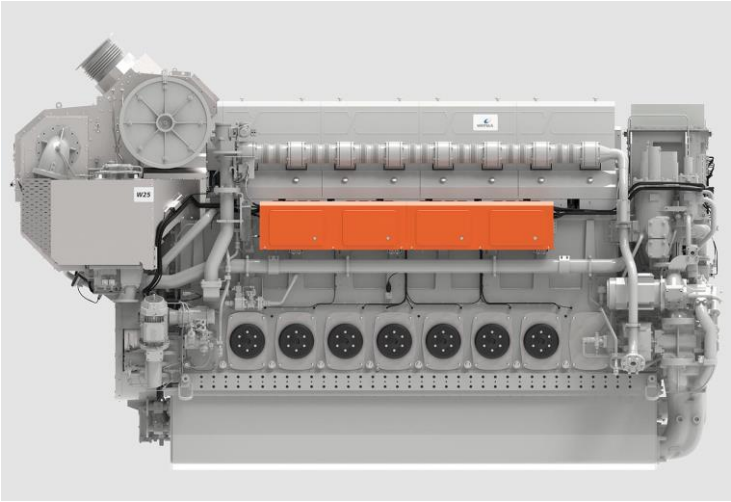
Aurrera eramaten ari diren proiektuak erregai pila zein amoniako partzial edo osoz elikatutako motorretan oinarritzen dira. Nabarmentzen direnen artean, hurrengoak ditugu ezagunenak:

- **Kriti Future (Grezia)** [24]**:** New Times Shipbuilding ontziolak, Avin enpresa grekoarentzat, 274 metro luzeradun Suezmax petrolio-ontziari amoniakoz funtzionatzeko birmoldaketa burutu zuen 2022 urtearen hasieran. 15,1 MW-ko potentzia du eta 14,5 korapilotan ibili daiteke. Munduan NH3 erabiltzeko prestatuta dagoen lehen ontzia da. Hasiera batean, bere MAN motorrak itsas dieselarekin elikatuko badira ere, ontziak American Bureau of Shipping (ABS) erakundearen Ammonia Ready Level 1 baldintzak betetzen ditu, beraz, etorkizunean erregai gisa amoniakoa erabiltzeko egokitu daiteke. Gainera, ontziak gas natural likidotua (GNL) erabiltzeko LNG Fuel Ready Level 1 eskakizunak ere betetzen ditu.

Irudia 12. Kriti Future ontzia [24]

- **Wärtsilä 25 (Finlandia)** [25]**:** Wärtsilä enpresa finlandiarrak amoniakoz funtziona

dezakeen lau aldiko eta abiadura ertaineko BEAM motorra atera zuen 2022ko irailean. Mantentze-lanik gabeko operazio-aldi luzeetarako diseinatuta dago. Wärtsilä 25 amoniakoarekin funtzionatzen duen lehen Wärtsilä motorra da. Egia da tamaina txikiko motorra dela, baina oso ahaltsua. Modu dualean, 1,9 eta 3,1 MW arteko potentzia du (dieselean baino zertxobait baxuago) eta 6,7,8 edo 9 zilindro izateko aukera du. Gainera, turbokonpresore-sistema sendoa eta oso eraginkorra du, eta presio-erlazio handia baita.



Irudia 13. Wärtsilä 25 motorra [25]

- **Viking Energy (Alemania)** [26]**:** Amoniako berdea (iturri erabat berriztagarrietatik) erabiltzen duen munduko lehen erregai-piladun itsasontzia 2023an itsasoratuko da, Eidesvik enpresaren eskutik. Erregai zelulak 2 MW-ko potentzia du, 3.000 ordu urtean BEG emisiorik gabe funtzionatzen ahalbidetuko duena. Fraunfofer Instituzioarekin laguntzarekin aurrera eraman da proiektua. ShipFC proiektuaren barruan (EBtik 10 milioi euro jaso ditu), Fraunhofer Institutua Europako partzuergoko 13 bazkiderekin lankidetzan ari da, itsas garraiorako munduko amoniakoaren bidezko lehen erregai-zelulak garatzeko.

Irudia 14. Viking Energy ontzia

Orokorrean amoniakoak hidrogenoak baino abantaila gehiago dituela ikusi da, batez ere likidoa mantentzeko errazagoa delako eta sukoitasun maila baxua izateagatik. Hala ere, hidrogenorekin lan eginda, elementu toxikoen erabilpena (amoniako) ekiditen da ere. Gainera, bi erregaietan helburua bera da, erregai pila gisa erabiltzea eta hidrogenoaren elektrolisi-katalizatzaile sistema baten bitartez, elektrizitatea sortu. Aldatzen den gauza bakarra biltegiratze sistema da.

Hidrogenoz osatutako erregai pilen inguruan, proiektu garrantzitsuenen artean hurrengoak goraipa daitezke:

- **REM Energy (Alemania)** [27] Green Yard Kleven ontziola norvegiarrak, Siemens Gamesarentzat eraikitako ontzia. Bere helburua Global Tech 1 eta Trianel Borkum West parke eolikoen mantenu lanak egiteko erabiltzen da. 90 metro luzera eta 20 metro errundun ontzia da. 12 MWh-ko bateriak ditu eta hidrogeno berdez funtzionatzeko bakarrik gai, ere da, haren erregai pilei esker; nahiz eta orainaldian, diesel sorgailua erabili beharko du, hidrogeno eskariaren faltan.

Irudia 15. REM Energy ontzia [27]

- **Energy Observer 2 (Frantzia)** [28] [29]**:** H2mobile enpresak, 2017ean Energy Observer ontzia laborategi gisa erabili ostean, itsas merkataritzan hidrogenoz bultzatutako lehen ontzian ari da lanean. 120 metro luze eta 22 metro zabalera izango du eta 5.000 tona garraiatzeko gaitasuna izango du (250 kontainer-ontzi), 2,5 MW-ko potentziadun pilek 4 MW-ko motorra eragiteko. 12 korapilotan (22 km/h) ibiliko da eta 70 tonadun hidrogeno biltegiei esker, 7.500 kilometro egingo ditu, geldialdirik egin gabe. Gainera, bere lau belek erregairik erabili gabe higitzea ahalbidetuko dute ontzia, haizea bolada handiak ematen direnean noski.

Irudia 16. Energy Observer 2 ontzia

Bi erregai hauek aurkezten duten problema merkatuan duten eskuragarritasuna litzateke. Egia da, hidrogenoaren ekoizpena hazte prozesuan dabilela, baina oraindik ez dutela itsasontzien zati handien depositua betetzeko nahiko erregairik, are gehiago %100 jatorri berriztagarririk dutenik. Oraingoz, hidrogenera edo amoniako horniketen estazioetan asko dago inbertitzeko.

2.4 Ohiko erregai eta berrien arteko dualtasuna

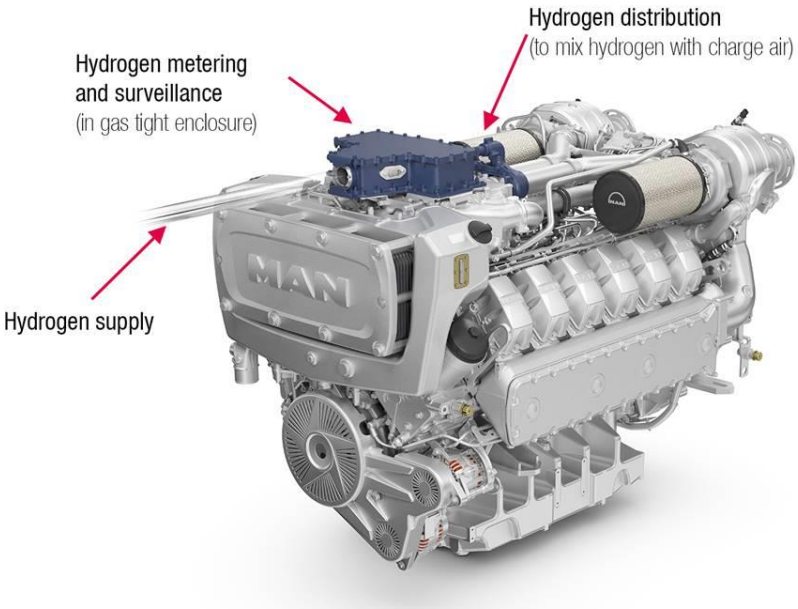
Zero emisiodun erregaien faltan, ohiko erregaiak hidrogenoa bezalako elementuekin konbinatuz, hainbat ikerketa taldeek CO_2 emisioak zati handi batean murriztu daitekeela egiaztatu dute, gainera diesel gutxiagoa erabiltzen dutenez, iturritik diesela birmoldatzeko bidean sortutako kutsadura ekiditen dute. Eguneko motorren konfigurazioak ez luke aldaketa handirik jasoko, hidrogeno sarrera gehitzeaz gain, beti ere zer nolako injekzio/adizio sistema egokitzen zaion.

Trantsizio ekologikoaren bidean aukera aproposa dirudi. Alde batetik dualtasun funtzionamendu moduak ez duelako diesela erabat baztertzen eta munduko edozein lekutan depositua betetzen ahalbidetzen jarraitzen duelako. Mendebaldeko herrietan hidrogeno hornidurak prototipo edo eraikitze faseetan baldin badaude, garatze bidean dauden herrialdeetan, hamarkada anitz itxaron beharko dituzte teknologia sakonki garatuta izan dezaten. Bestetik, ontzigintzaren sektorean egin beharreko inbertsioa zati handian murrizten duelako. Oraindik, ez dago guztiz erabakita zein izango den etorkizuneko erregaia, hortaz garraio ontziek begi onez hartuko luketen aukera izan daiteke.

Hala ere, ez dute behin betiko proposamen gisa hartzen zientzialariek, aintzat hartzen baitituzte erregai fosilak erabat baztertzea, baina hasiera pausu garrantzitsua da berotegi efektuari aurre egiteko nahian.

Ikerkuntza-taldeak ez dira proba fasean aurkitzen diren bakarrak. Dagoeneko hainbat enpresa handik haien motorretan erabiltzen hasi dira teknologia berritzaile hau. Kasuan kasu, ezagunetarikoa MAN Heavy Industries-en eskutik dator. "Hydrocoat 48" ontziko, offshore parke eolikoen mantenuaz arduratzen den itsasontziko, MAN D2862 LE448 modelodun bi motorrei CMB.TECHek diseinatutako hidrogenozko injekzio sistema gehitu zitzaion. 749 kW-ko potentzia du bakoitzak eta IMO Tier III agiria du. SCR (Selective Catalitic Reactor) sistema du baita, irteerako gasak tratatzen dituena. Motorra ez da besteko gauza. Merkatuan dagoeneko erabiltzen den V12ko

(hamabi zilindro) itsas motorrari, hidrogenoa injektatzeko egokigailu bat dauka, konbustio ziklora gehitu ahal izateko. Errekuntza-prozesua diesel printzipioaren araberakoa da; dieselaren %5 inguruko injekzio energetikoa eskatzen du aire oinarrian, eredu honetarako optimizatua izan dena hain zuzen ere. Hidrogenoa gehituz, CO_2 isurketak %50 murriztu dira, eta kasu batzuetan % 80raino ere iritsi dela [30]



Irudia 17. MAN D2862 LE448 motorra CMB Tech hidrogeno injekzio sistemarekin [30]

2022ko urrian, South New Wales University-ko ingeniaritza taldea gai izan da %90 hidrogenoa frakzioa (bestea diesel) gehitzea diesel motor batean, %85ean jaitsiz CO_2 emisioak eta haien esanetan "urte bakar edo bitan" mekanismoa merkatura daitekeelakoan daude. Gainera, NO_x isurketak ohiko motorraren azpitik daudela ere egiaztatu dute. Proiektuan nabarmendu dute, NO_x-ak konbustio dualetan garrantzia handia hartzen dutela; hortaz, haren sorrera ahalik eta gehien murrizteko diesel-hidrogeno nahasketa estratifikatuz gero, nitrogenotik eratorritako BGE motor diesel puruetan baino gutxiago direla goraipatzen dute [31].

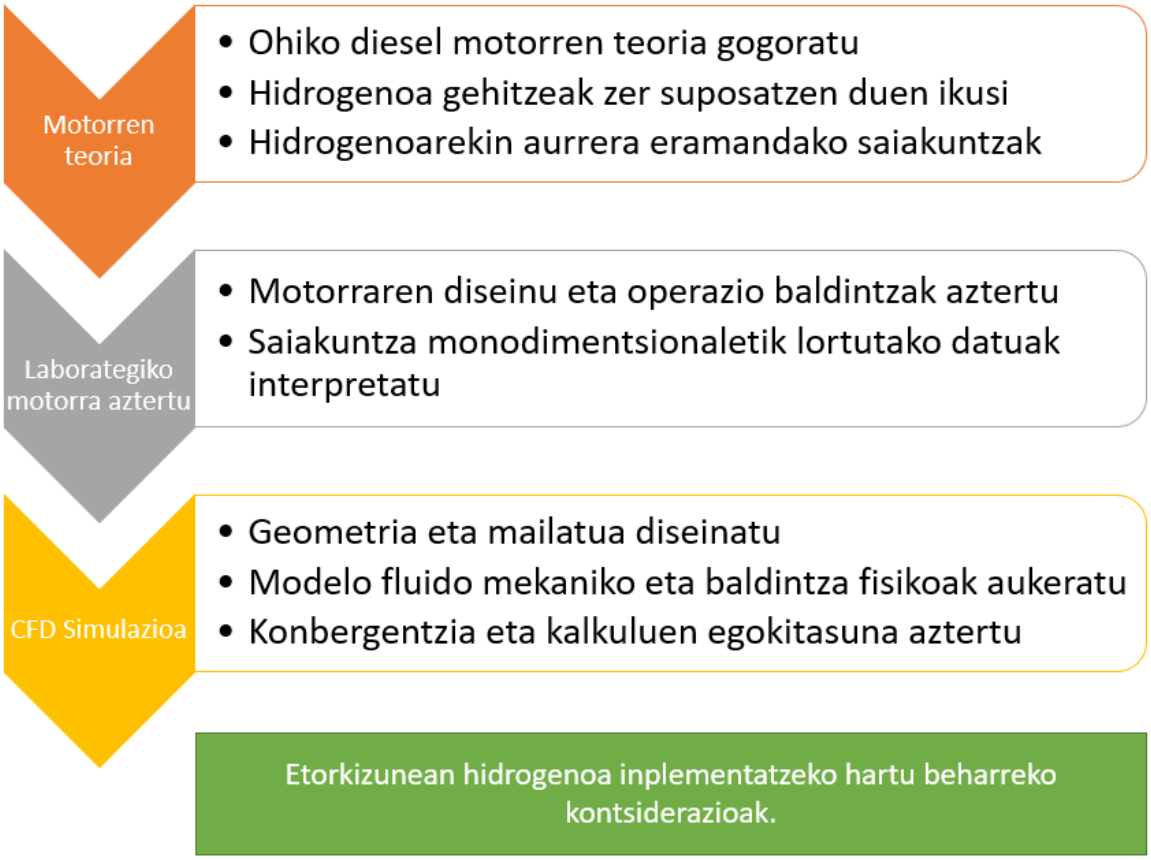
Azken ideia honetan oinarrituko da proiektua, **hidrogenoa eta diesela konbinatzen duten motor dualetan**, hain zuzen. Azken finean, Bilboko Ingeniaritza Eskolan eskura dagoen motor bati aldaketak planteatzeko aukera emango baitu, etorkizunean proiektu honetan planteatuko diren simulazioak, errealitatean egiaztatzeko aukera emanaz.

3 Lanaren helburuak eta irismena

Barne errekuntza motorrek izugarrizko aldaketa jasango dutela argi dago, BEG emisioen murrizketek bultzatuta. Oraingoz zaila da identifikatzea zein izango den etorkizuneko BEAM edo inkluso motor elektrikoek ordezkatuko duten haien lekua; baina hori gertatzeko itsas erabileretan gutxineez hamarkadak igaro behar dira. Hala ere, proiektu honetan BEAM motorrekin jardungo da, haien azterketa hizpide izanda.

Bilboko Ingeniaritzako instalakuntzetako motorrarekin saiakuntzak egiten egon dira azken urteotan. Funtzionamendu egoera desberdinekin neurketak hartu dira eta ondoren simulazio monodimentsionalak burutu, balidatu direnak. Orain, simulazio tridimentsionalekin hasiko da, lan honen koska, hain zuzen ere. Etorkizunean, lan honetatik atera diren ondorioak baliogarriak izango dira hidrogenoaren inplementazioan lehen pausuak emateko, arlo fluido mekanikoan, batez ere.

Hidrogenoaren aukeraketa justifikatzeko asmoz, atal guztietan hidrogenoa gehitzeak suposatuko lituzkeen abantaila/desabantailak argituko dira. Hasiera batean, hidrogeno frakzioak gehitu nahi zitzaizkion simulazio tridimentsionalari ere, baina aurrerago azalduko den bezala, STAR CCM+ programak zailtasunak eman ditu; hortaz, simulaziotan diesel soila erabiliko da. Hala ere, orain arte lortutako emaitzekin eredu edo diseinu fluido mekanikoa aztertuko dira bertan, etorkizunean hidrogenoa sartu ahalko zaiona.



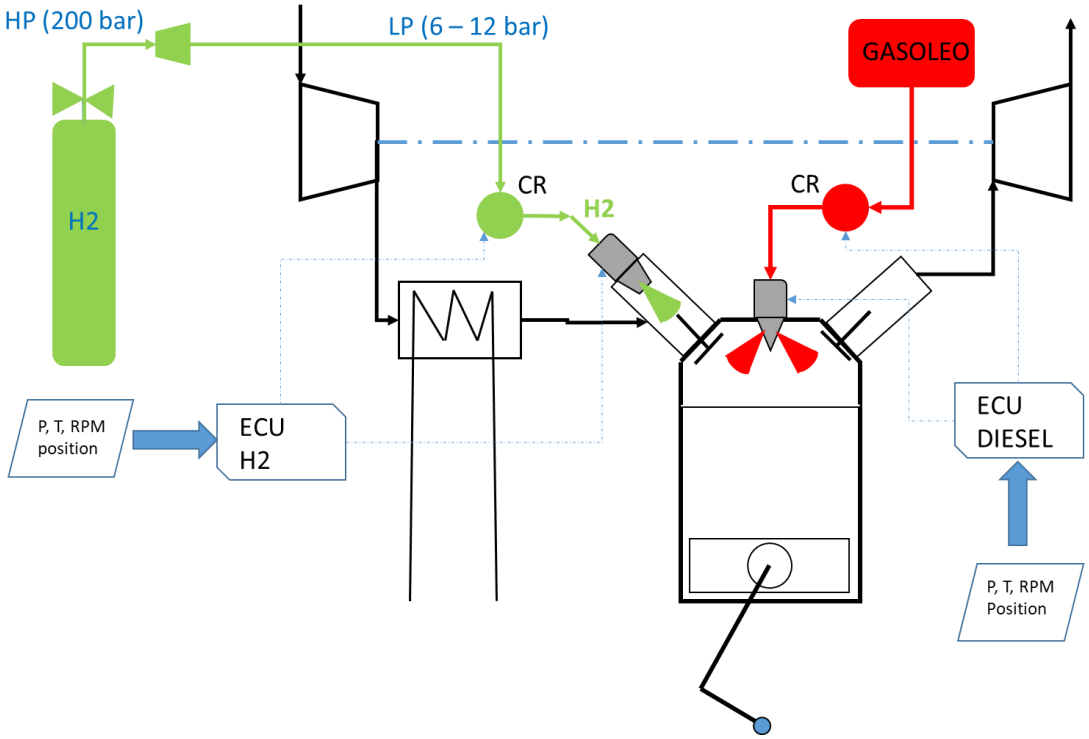
Irudia 18. Proiektuan aurrera eramango diren urratsak

Irudia 18an, proiektu honetan jarraituko diren urratsak bildu dira. Hiru bloke nagusitan desberdindu daitezke. Lehendabizi, diesel motorraren kontzeptuak ezagutu eta hidrogenoaren gainean

bildutako ikerketa teoriko praktikoak konparatu. Ondoren, laborategiko motorraren inguruan eskuragarri dagoen informazio guztia bildu beharko litzateke, aztertu eta diseinurako kalkuluak egin. Hirugarren urrats gisa, STAR CCM+ 2021.1 programari esker, simulazio tridimentsionala egingo da; horretarako aurreko bi ataletan ateratako ondorioak inplementatu beharko dira.

Azken finean, diesel bitarteko CFD simulazioa ontzat hartzen bada, etorkizuneko diesel-hidrogeno sistema duala (MAN enpresakoa bezala) ere simulatu ahal izango da, geometria, mailatu (saretu), mugimendu eta modelo fluido mekanikoak partekatzen dituzte eta. Are gehiago, sistema duala dagoeneko merkatuan eskuragarri dauden modeloetan aplikatu nahi denez, ahalik eta aldaketa gutxien egin nahi zaizkio jatorriko motorrari. Aldaketa deigarriena, hidrogenoaren injekzioa sistema da. Sarrera portuan injektatuko balitz, CFD simulazio bera erabiltzeko aukera emango luke.

Ideia bat egiteko, Ingeniaritza Energetikoko sailak eskala txikiagoko motor batean lehen saiakuntza dualak egiten hasi da eta aukeratuko hidrogeno adizio sistema, sarrera portuan kokatu da. Irudia 19an eskema ikusi daiteke.



Irudia 19. BIE Energetiko Sailak planteatutako motor dualaren eskema

Irudia 19an planteatutako inplementazio bakarra hidrogenoaren elikatze era berrelikatze sistema (ECU) da. Turbokonpresore eta hozte sistema mantenduko da etorkizuneko saikuntzetan eta bi elementu hauetatik hartuko eta hartu dira CFD simulaziorako neurketak. Zilindroko datuak ere neurgailu berekin burutu nahi da.

4 Lanak dakartzan onurak

4.1 Abantaila sozialak

Hidrogenoaren erabilera BEAM motorretan helburu jasangarria du gehienbat. Itsas garraiobideek munduko CO2 emisioen %3a suposatzen dute eta medio honek pairatzen ari duen gorakada kontuan hartuta, langa hori erraz gaindituko litzateke hurrengo urteetan. Itsasontzien bitartez mundu osoko merkantzien %90a garraiatzen dira; hortaz garraiobide honetan egiten diren aurrera pausuek nabarmenki gutxituko dira arlo honetan ematen diren emisioak.

Bestalde, iturri ez berriztagarrietatik erregai fosilera bihurtzeko emisioak ematen diren heinean, kutsadura murrizteko modutzat har daiteke erregai berdeen inplementazioa. Hidrogenoa, erregai fosiletatik etortzeaz gain, energia eoliko edo fotovoltaiko bitartez sor daiteke ere, elektrolisiari esker. Era honetan, ematen diren emisioak ez daude BEG-ekin erlazionatuta, baizik eta karga elektrikoaren galerarekin gehienbat. Hala ere, proiektu honen asmoa ez da dieselaren guztizko ordezkapen totala ematea, baizik eta diesela partzialki hidrogenoz ordezkatzea. Horrela, ahal den heinean hidrogenoa erabiliko da, baina oraindik erregai honen hornidura faltaren ondorioz, hidrogenoaren faltan itsasontziak dieselaz bakarrik funtzionatzeko aukera izango dute ere.

4.2 Abantaila ekonomikoak

Erregai fosilak herrialde gutxiren esku daude. Euskal Herria bezalako lurraldeak inportazioen bidez asetzen ditu garraioaren zein energia elektrikoaren horniketak. Hidrogenoaren sorrera, beti ere iturri berriztagarriak garatuta dauden heinean, edozein herrialdek bultza dezake. Modu honetan, dieselaren beharra murriztuko litzateke zertxobait eta autokontsumo edota auto-horniketarako lehen pausua litzateke.

Ikuspuntu ekonomikotik, munduko ontzidiak ez luke berrikuntza totala jasan behar. Hidrogenoaren erabiltzeko BEAM motorretan, gasolio motorretatik abiatuko da. Diesela bezalako injekzio sistema gehituko litzaioke, orduan ez luke hainbesteko inbertsiorik suposatuko. Gainera, errendimendua hobetzeko aukera ematen du proposamen honek.

4.3 Abantailak ikerkuntzan

Etorkizuneko garraio modeloa eraikitzeko asmoz, hidrogeno berdea bezalako proposamenak azterketa askotariko faseak gainditu behar dituzte. Askotan, proposamen asko atzera botatzen dira, ezinezko baldintzak eskatzen dituztelako edota haren inplementazioa zailtzat hartzen delako errealitatean. Izan ere, simulazio konputazionalak urrats paregabea dira proiektuen bideragarritasuna aztertzeko.

Analisia egiteko STAR CCM+ erabiliko da. Ingeniaritza Eskolako Laborategiko motorraren abiapuntu hartuta. Etorkizunean hidrogenoa ez ezik, amoniakoa edo beste aukera bat ezarri daiteke modelo fisikoan aldaketa xumeak eginda bakarrik.

Bestalde, eredu fisikoak, mailatu dinamikoak edota CAD bezalako erremintak erabiltzen ikasteko aukera ahalbidetzen du.

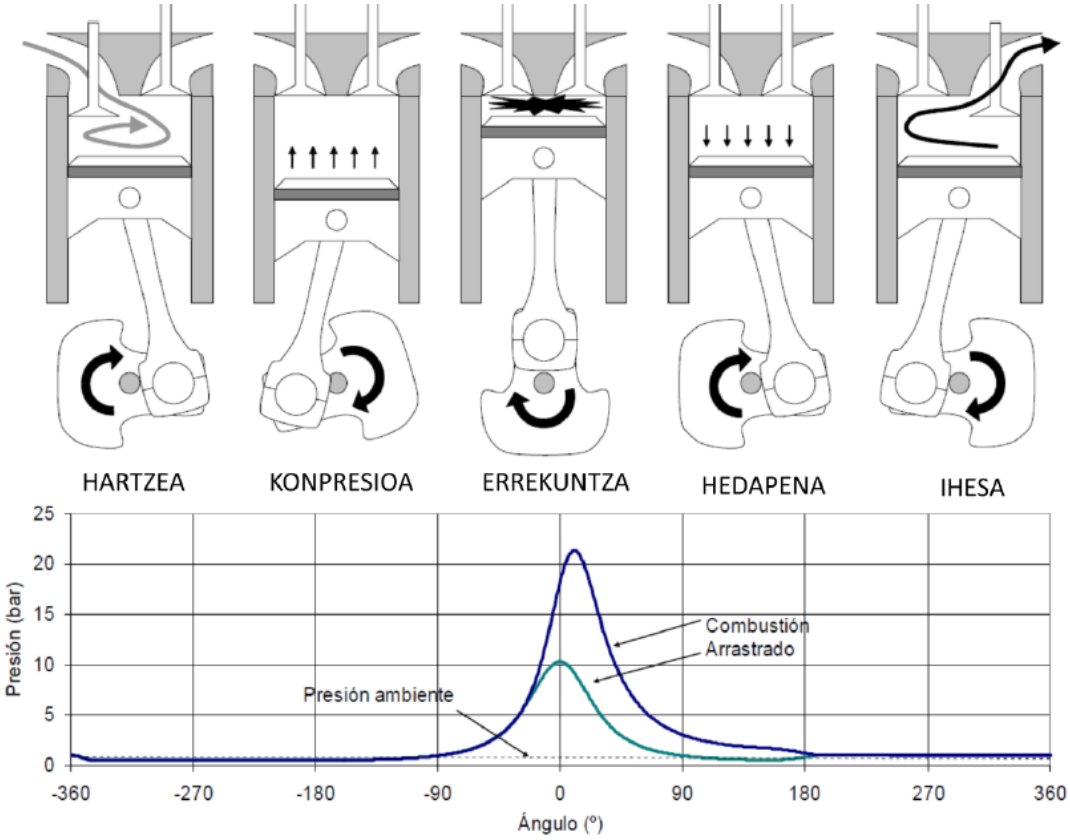
5 Marko teorikoa

5.1 Oinarrizko funtzionamendua

Diesel motorrak BEAM-etan (Barne Errekuntzako Aldizkako Motorrak) oinarritzen da, erregaietako energia termo-kimikoa energia mekanikoa bihurtzen dutena. Errekuntza fluido termodinamikoan bertan gertatzen da eta ziklo ireki batean oinarritzen da, hortaz jariakina ez da hasierako egoerara itzultzen. Motor horietan, gasek egindako indarren ondorioz barneko osagaiek mugimendu lineala egiten dute, biela-birabarki sistema bat eraginaraziz eta ondoren mugimendu birakorrean bihurraraziz.

BEAM mota nagusi bi daude, Txinpartez Pizturiko Motorrak (TPM) eta Konpresioz Pizturiko Motorrak (KPM). Lehenengoan, errekuntza pizketa elementu baten bitartez (bujia) egiten da; bigarrenean, aldiz, presio eta tenperatura hazkundea nahiko da errekuntza hasteko (erregai eta aire nahastearen auto pizketa). Diesel motorrak azkeneko motakoak dira.

Bestalde, zikloa egiteko beharrezko bira kopuruaren arabera ere sailkatzen dira aldizkako motorrak. Birabarkiak bira bakar batean egiten duenean, 2 aldiko zikloa deritzo; bi behar dituenean, aldiz, lau aldiko motorra. Laborategiko motorra lau aldiko motor diesela denez, alde batera utziko ditugu bai TPM bai bi aldiko motorrak.



Irudia 20. 4 aldiko motor baten faseak [32]

Irudia 20an ikusten den bezala lau fase desberdinetan gauzatzen da ziklo osoa, non fase bakoitzak buelta erdiko luzera duen:

- **Hartze ibiltartea (-360º GGP ÷ -180º GGP)**: GGPtik, Goi Gelditze Puntutik, BGP, Behe Gelditze Puntura bitarteko ibiltartea da. Goitik beherako ibiltarte horretan, airea edota airea+hidrogenoa (aukera dualetako bat) nahastea sartuko litzateke errekuntza ganbarara hartze balbulatik, pistoia jaisten doan heinean. Motor atmosferikoa bada, gainelikatze barik, prozesu hau presio atmosferikotik gertuko baldintzetan gertatzen da (edo sarrera baldintzetatik gainelikatu bada)
- **Konpresio ibiltartea (-180º GGP ÷ 0º GGP)**: Pistoia BGPtik GGPra igarotzen da, hartze balbula itxita mantenduta. Horren ondorioz, ganbarako karga konprimitu egiten da, presioa eta tenperatura igoaraziz. KPMtan, GGPra heldu aurretik, erregaia injektatu egiten da. Erregai hura, dieselaz osatuta dago, hala ere, aukera dualetan, hidrogenoa ez bada airearekin nahastu ganbara sartu aurretik, hidrogenoa injektatu daiteke ere, dieselaren injekzio sistema batetik kanpo; hau da, beste injektore baten bitartez. Erregai mota hauek daukaten auto-pizketa gaitasunari esker, presio eta tenperaturaren eraginez errekuntza gertatzen da, pizketa sistema barik. Irudia 20ari erreparatuz, konpresioa ez ezik, eztandak ere presio eta tenperatura handiagotzen ditu.
- **Konpresio ibiltartea (0º GGP ÷ 180º GGP):** Bai eztanda bai herrestatze indarrak eragindako lana aprobetxatzen da tarte honetan. Bertan ematen da presio maximoa, hortaz, aurrera begira bai emisioak bai potentzia-momentu eragilea aztertzeko faktorea izango da. Bertan, pistoia GGPtik berriro ere BGPra hedatzen da. Bolumen handipena dela medio, presio eta tenperatura murrizten dira.
- **Iheseko ibiltartea (180º GGP ÷ 360º GGP)**: Tarte honetan, pistoiaren inertzia eta bultzada aprobetxatuz, gas hondakinak kanporatu egiten dira iheseko balbula irekita dagoelarik. Behin fase hau bukatuta, berriro hasiko da zikloa sartze balbula irekiz eta karga berriro ere sartaraziz.

5.2 BEAM-en parametro nagusiak

Motor baten eraginkortasuna eta potentzia neurtzeko parametro anitz erabiltzen dira, oso erabilgarriak suertatuko direnak motorraren diseinu berriaren abantaila-desabantailak konparatzeko ohiko KPM motorrekin.

ERREGAI AIRE ERLAZIOA (F)

BEAM baten zikloan zehar injektatzen den erregai kopurua eta aire masa kopurua erlazionatzen ditu. KPM motorretan, erregai aire-erlazioan aldatzen den faktore bakarra erregaia da, aire sarrera konstante mantentzen delarik. Hortaz, motorraren eskakizunak aldentzeko erregai frakzioa doituz lortzen da.

$$F = \frac{Erregai - masa\ [kg]}{Aire - masa\ [kg]} = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a} = \frac{m_{fcc}}{m_{acc}}$$

$\dot{m}_f$, erregai emari masikoa, $\dot{m}_a$, aire emari masikoa, m_{fcc}, erregai masa zikloko, m_{acc}, aire masa ziklo eta zilindroko izanik

Erregai aire erlazioa (*Fe),* erregai aire erlazio estekiometriakoarekin konparatu ohi da, nahaste aberatsa edo pobrea den definitzeko. Erregai-aire erlazio estekiometriakoa errekuntza prozesu

batean soberakinik ez egoteko beharrezko aire-erregai frakzioak zehazten ditu. Hurrengo konbustio erreakzioa gertatzen da:

$$C_nH_m + (n + \tfrac{1}{4} m)(O_2 + 3.76\ N_2) \rightarrow nCO_2 + \tfrac{1}{2} m\ H_2O + (n + \tfrac{1}{4} m)\ 3{,}76\ N_2$$

$$F_e = \frac{12\,n + m}{\left(n + \frac{m}{4}\right)(32 + 3.76\ \times 28)}$$

m, hidrokarburo molekularen hidrogeno atomoak eta n, hidrokarburo molekularen oxigeno atomoak izanik

Formulan adierazten den bezala erregai bakoitzaren konposizio kimikoaren arabera, airearekiko erlazio estekiometriko desberdina izango du. Dieselaren kasuan (n-dodecane), F_e = 1/14,5-ekoa da.

Azkenik, erregai-aire erlazioa eta erregai aire erlazio estekiometrikoa erlazionatzen ditu erregai- aire erlazio erlatiboak (F_r).

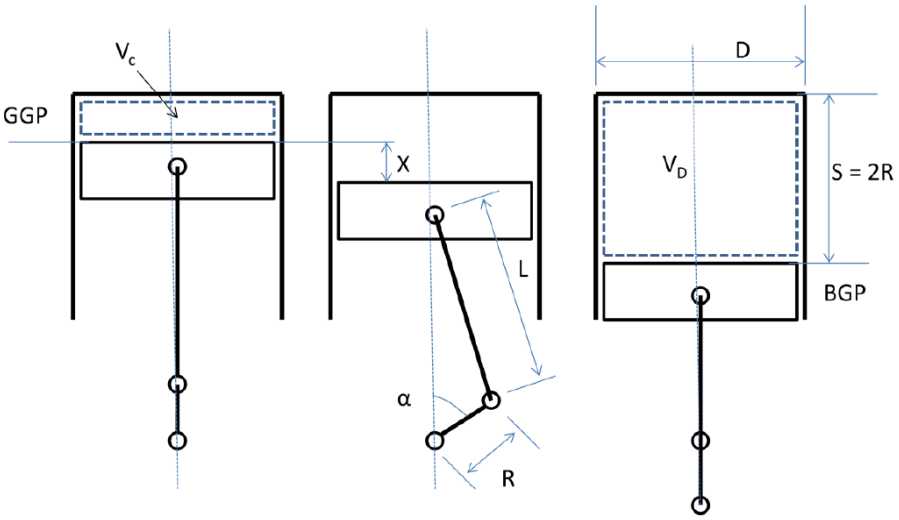
$$F_r = \frac{F}{F_e} = \begin{cases} > 1\ Aberatza\ (gehiegizko\ erregai\ masa) \\ = 1\ Estekiometrikoa \\ < 1\ Pobrea\ (erregai\ eskasia) \end{cases}$$

KPMak, berez, nahaste pobreetan oinarritzen dira F_r =0,04-0,7koak izanik [32]

H_2 gehituko balitzaio, erlazio estekiometrikoa aldatu egingo litzateke eta horrek nahastearen aberastasun maila definitzeko zailtasunak eragingo ditu. Hori dela eta, hidrogenoa masa erlazioa hauetatik kanpo mantendu beharko litzateke, kargan, aldaketak sor ditzakeen frakzio bakarra diesela izanik.

PARAMETRO GEOMETRIKOAK

Nahiz eta motor berarekin arituko den proiektu honetan, komeni da gogoratzea motor-ganbaretan erabiltzen diren parametro geometrikoak.



Irudia 21. Zilindroaren parametro esanguratsuak [32]

S: Ibiltarte

D: Pistoi-diametroa

R: Birabarki besoaren erradioa

L: Biela-luzera

α: Birabarkiak biraturiko angelua

GGP: Goi Gelditze Puntua (α = 0°)

BGP: Behe Gelditze Puntua (α = 180°)

S/D: Diametro-ibiltarte erlazioa

Vc: Errekuntza-ganbarako bolumena

Z: Zilindro-kopurua

$A_p = \pi D^2/4$ Pistoi-azalera // Zilindroaren azalera

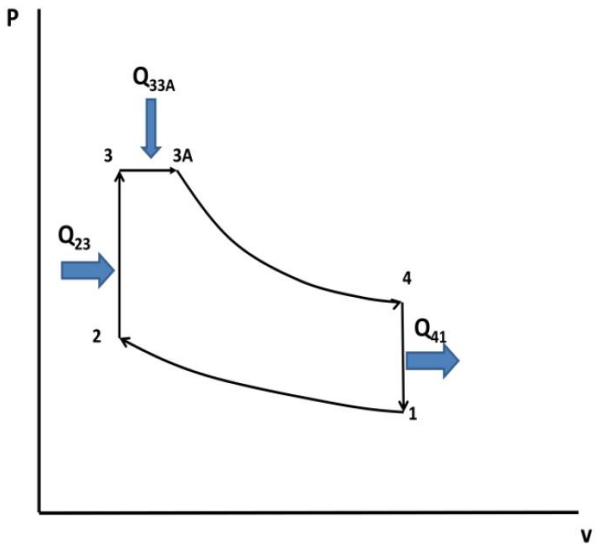
$V_D = \pi D^2/4 \cdot S$ Zilindroan desplazatutako bolumena

$r = (Vc + V_D)/\ Vc$ Konpresio-erlazioa (TPM = 8 ÷ 10 / KPM = 12 ÷ 23)

5.3 Ziklo termodinamiko baliokidea

BEAM motorren funtzionamendua azaltzeko asmoz, hipotesi termodinamiko eta mekanikoak baliatuz, ziklo osoaren ulerkera errazten dute erabat, benetako modeloarengandik asko urrundu barik. Hipotesiak dira:

- Fluidoaren bero espezifikoa konstante mantendu ziklo osoan zehar lor daitezkeen bero espezifikoen interpolazioa erabili ohi da.
- Prozesu errealaren faseen segida bera jarraitu behar du.
- Konpresio-erlazioa motor errealaren berdina izan behar da; hortaz, errekuntza ganbararen bolumena eta pistoiaren ibiltartea berdin mantenduko da.
- Prozesu errealak emandako masa unitateko adina energia emango du ziklo baliokideak.
- Prozesu errealeko hasierako operazio baldintzak (tenperatura eta presioa) mantendu egiten dira ziklo baliokidean.



Irudia 22. KPMaren aire ziklo baliokidea

KPM baten ziklo baliokidea ulertzeko, PV diagrama bat erabiliko da, atal bakoitzean gertatzen den prozesu ideala azalduz:

1-2: Airearen (+hidrogenoa, posible izanik) konpresio isentropikoa (adiabatikoa eta itzulgarria) eta bertan ematen da pistoiaren BGPtik GGPra arteko ibiltarte osoa, konpresio erlazioa guztiz betez. 2 puntura heldu aurretik injektatu ohi da erregaia, 2-3 atalean erreko dena.

2-3: Konpresio tartean sartutako erregaiarekin errekuntza eman, zikloari, bolumen konstantean, beroa igorriz. Bitartean, erregaia injektatzen jarraitzen da, 3-3A atalean erreko dena.

3-3A: Aurreko ataletan erre barik geratutako erregaia, presio konstantea erretzen da, pistoia beheranzko ibilbidea hasi duelarik.

3A-4: Airearen hedapen isentropikoa ematen da, hau da, adiabatikoa eta itzulgarria. BPGra arteko ibiltartea hartzen du eta guztiz behera heldu aurretik.

4-1: Lan edo bero galeran bihurtu ez den bero soberakinak ihes egiten du atal honetan. Prozesu hau bolumen konstantean ematen da.

KPM ziklo motaren arabera, errekuntza mota desberdinak ematen dira, presio konstantekoak edota bolumen konstantean gerta daitezke. Ziklo motak desberdintzeko bi parametro esanguratsu ematen dira:

- Errekuntza-maila bolumen konstantean $\alpha = P_3 / P_2$.
- Errekuntza-maila bolumen konstantean $\beta = V_{3A} / V_3$.

Aurreko parametroaz baliatuz, ziklo baliokidearen errendimendu termodinamikora hel daiteke, hau da, soilik lana eta sartu – atera den beroa kontuan hartzen dituena.

$$\eta_{KPM} = 1 - \frac{1}{r^{\gamma-1}} \frac{\alpha\beta^{\gamma} - 1}{(\alpha - 1) + \gamma\alpha(\beta - 1)}$$

α,β: errekuntza-maila

r: konpresio-erlazioa

γ: c_p / c_v, koefiziente isentropikoa (aire ziklo baliokidetan 1,3-1,4 artekoa)

Ziklo teorikoak ez dira baliogarriak informazio kuantitatiboak lortzeko, baizik eta kalkuluentzako hurbilketa gisa eta hobekuntza termodinamikoen analisirako, hidrogenoaren gehikuntza kasu.

5.4 Karga berritze prozesua

Karga berritze-prozesuak garrantzia handia hartzen du motorraren eraginkortasun termikoan. Operazio baldintzak ez ezik, fluxuaren inertziak edota hartze-ateratze sistemen geometria hartu behar dira kontuan. Hala ere, modelo berriaren egokitasuna aztertzeko operazio eta funtzionamendu baldintzak soilik aztertuko dira, hasierako modeloan ahalik eta aldaketa gutxien egiteko asmoz.

5.4.1 Errendimendu bolumetrikoa (η_v)

Karga berritzearen perfekzio maila aztertzeko ohiko parametroa da errendimendu bolumetrikoa, KPMtan airearen sartze gaitasuna adierazten duena. Modelo berrian, aldiz, hidrogenoa ere kontuan hartu beharko da, bai haren masak bai dentsitateak eragina izango duelako, hurrengoko formulak adierazi bezala

$$\eta_v = \frac{\dot{m}_a}{\rho_{a,0} V_d \, {}^{n}/_{2}}$$

$\dot{m}_a$ ganbararen sartzen den aire berriaren emaria, diesela injekta aurretik

$\rho_{a,0}$ aire berriaren emaria, ganbarara sartu aurretik

V_d zilindroaren bolumena

n abiadura angeluarra

5.5 Errekuntza

5.5.1 Errekuntza fase desberdinak

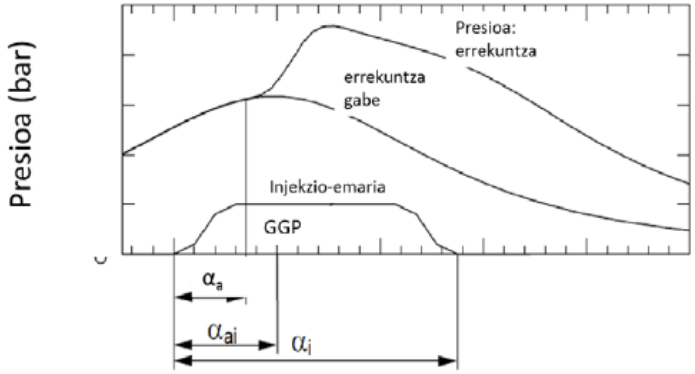
KPM motorretan berezko pizketa ematen da, presio eta tenperatura altuen eraginpean. GGPra heldu aurreko momentuan, injektatu egiten da diesela eta lurrunduko diren lehen tantak sortzen dira. Tantak airearekin nahastu orduko, aurre errekzio kimikoak hasten dira eta denbora pasa eta gero (atzerapen denbora igaro ostean), garra sortzen da. Garra KPM-tan auto-pizketaren ondorioz sortzen da.

Garraren sorgunea, ganbarako edozein ausazko puntua izango da, ez baita kanpo gailu baten bitartez sortzen. Presioa eta tenperatura dira auto-pizketa ahalbidetuko duten egoera termikoaren

eragileak. Gainera, injekzio sistemaren arabera, erregai-aire nahastearen homogeneizazioa desberdina izango da ganbara osoan zehar.

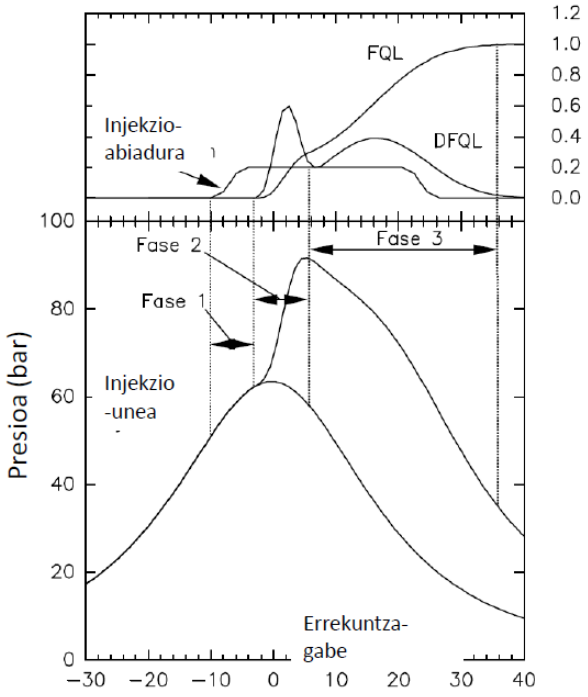
Errekuntzarako faseak hiru ataletan desberdintzen dira, parametro batzuen menpekotasun zuzena dutenak:

- Injekzio-aurrerakuntza angelua (α_{ai}): Injekzioaren hasiera eta GGParen arteko angelua
- Injekzio-angelua (α_i): Injekzio prozesua dirauen angelu tartea. Milisegundo ingurukoa da
- Atzerapen denbora (t_a): Injekzioa hasi eta erreakzio hasi arteko denbora. Denbora tarte horretan erregaia gas bihurtu eta airearekin nahasten doa. Aurre erreakzioak gertatzen dira auto pizketa eman arte, beti ere barneko presio, tenperatura eta erregaiaren konposizioaren eraginpean, hortaz hidrogenoaren errekuntzaren erraztasunak zer esan handia izango du parametro honetan. α angeluarekin adierazi daiteke ere tarte hau.
- Errekuntza denbora (t_k) edo errekuntza angelua (α_k)
- Presio gradientea ($dP/d\alpha$)
- Errekuntzako presio maximoa (P_{max}): Zikloan zehar hel daiteken presio maximoa. Horrek motorraren potentzia eta emisioak baldintzatuko ditu.



Irudia 23. Errekuntzan ematen diren faseak angelu tartetan desberdinduta

Irudia 23an ikusten den bezala, injekzio-emaria GGPa eman aurretik hasten da eta P_{max}-a heldu eta gero errekuntzak jarraitzen du, diesela isurtzen jarraitzen delarik. Bestalde, injekzioa gradualki hasi eta amaitzen da.



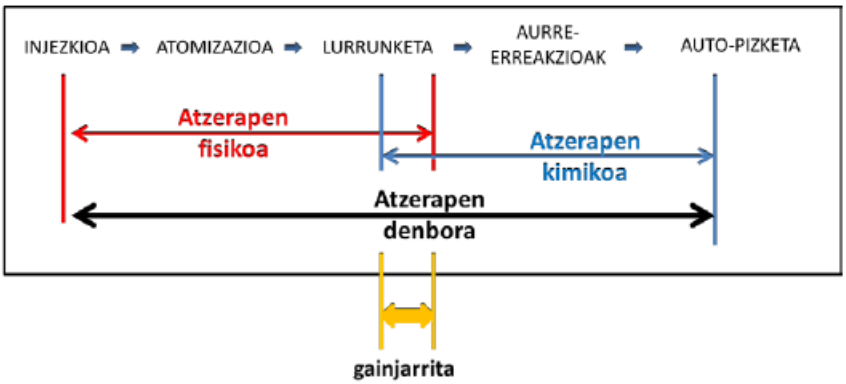
Irudia 24. Errekuntza faseak

Atzerapen denbora (Fase 1): Errekuntza gabeko lerroa jarraitzen du, ez baitu oraindik erreakziorik jasan. Tarte honetan, txorrota birrindu, tantetan banandu, tanta horiek lurrundu eta airearekin nahasteko beharrezko denbora eskatzen du [33].

Atal honetan elkarrekintza fisiko zein kimikoak nabarmentzen dira. Irudia 24ari jarraituz, ez da konprimitze fisikotaz aparte besterik geratzen; hau da, pistoiak berak bakarrik du eragina presio gradientean.

Atzerapen fisikoa 0,1 ms-koa ohi da beti ere txorroaren, erregaiaren, injekzio aurreko baldintzak eta airearen fluxu eta kontrafluxuaren mende egonik. Ostean ematen da atzerapen kimikoa, non erregaiaren konposizio kimikoak (hidrogenoaren eta bai dieselaren baldintzei erreparatu beharko zaie) eta zilindroko barne tenperatura eta presioak baldintzatzen dute [33].

Hori bai, ez da horren erreza bi atzerapen motak denboran desberdintzea, denboran gainjarri egiten baitira.



Irudia 25. Atzerapen denboraren faseak

Errekuntza azkarra edo aurre-nahasketako errekuntza (Fase 2): Atzerapen denbora bitartean injektatutako erregaiak airearekin erreakzionatu orduko gertatzen den lehen errekuntza fasea. GGPa heldu aurretik gertatzea komeni da, P_{max} handiago batera hel dadin [34]. Tarte honetan presio gradiente handienak gertatzen dira.

1. eta 2. Faseak erlazio handia dute. Atzerapen denboran injektatzen den erregai kantitatea handia bada, bat batean erretzerakoan bortizki erre egingo da; hortaz, presio gradientea oso handia izango da. Era berean, NO_x-en emisioak handitzen dituzte ere.

Berez, hidrogenoak errekuntza denbora azkarra du; baina auto-ignizio baldintzetara heltzeko motorrak tenperatura altuak izan behar ditu; hortaz denbora gehiago behar izaten du errekuntza hasteko [35]. Horrek NO_x-en emisioak areagotu ditzake. Hala ere, ziklo dualetan diesela da erretzen lehena, berez dieselaren menpe legoke errekuntza azkarraren atala.

Beste parametro batzuk ere baldintzatzen dute 2. Fasea:

- Turbulentzia maila
- Txorroaren diametroa
- Errekuntza ganbararen morfologia

Difusiozko errekuntza (Fase 3): 2. fasean erre ez den erregaia erretzen da (soberakinak egon daitezke). Erregaia injektatzen jarraituko balitz, behin 2. fasea bukatuta, fase horretan injektatzen dena nahastu ahala ere erre egingo da. Errekuntzaren presio maximoko puntutik errekuntza amaierara arteko luzera du eta bi egoera desberdin gerta daitezke:

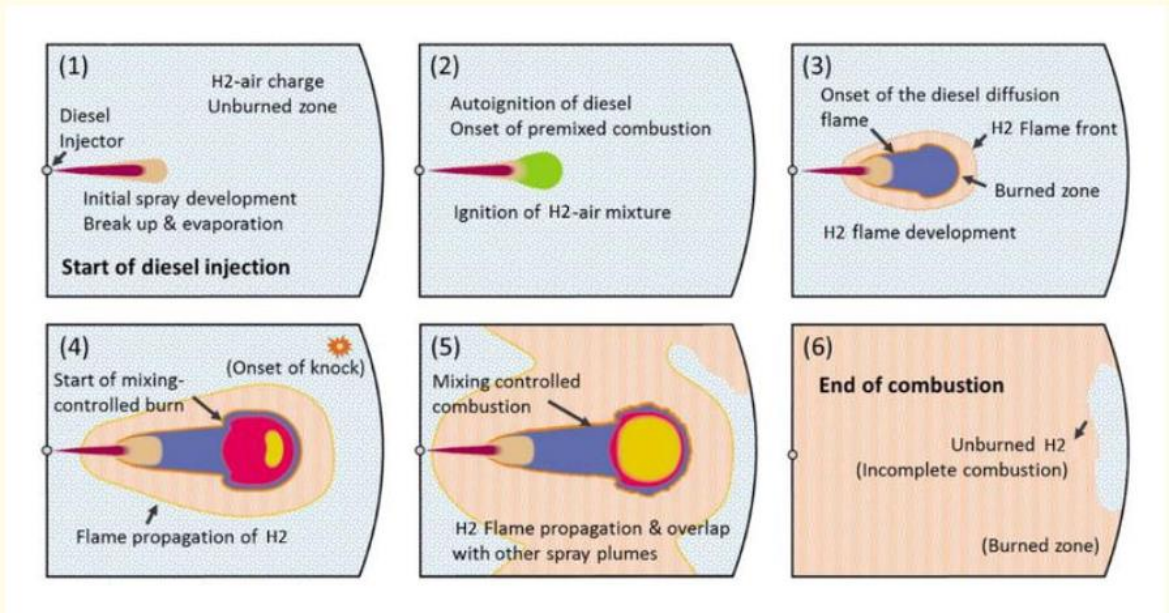
- Injekzioa 2. fasea bukatu aurretik etetea: Errekuntza abiadura erregai kantitateak ezarriko du.
- Injekzioa 2. fasea bukatu ondoren jarraitzea: Errekuntza abiadura injekzio sistemak baldintzatuko du.

Motor dualera itzuliz, atal honetan hidrogenoaren propietateek baldintzatuko lukete prozesua. Alde batetik, hidrogenoaren sugarrak lortzen duen abiadura diesela baino hamar aldiz azkarragoa izatera hel daiteke; bestetik, difusio koefizientea balio altuak aurkezten ditu [35].

3. fasean errekuntza ez-osoa gerta daiteke, iheseko keak sortaraziz. Oxigeno nahikorik eta presio eta tenperatura oso altuak "crack"-eatu egiten ditu erregai soberakinak. Hidrogenoak ez du horrelako prozesua areagotzen diesel motorretan, are gehiago, zenbat eta diesel gutxiagorekin orduan eta "cracking" gutxiago sortzeko aukera ematen du.

Laburpen gisa, Irudia 26a baliatuz azalduko da ziklo dualean gertatzen diren errekuntzaren etapa desberdinak. Lehenik eta behin, aurre-nahasketa (aire + hidrogenoa) ganbara sartuko da, eta nahasketa homogeneotzat hartuko da. Diesela injektatu arte eta dagokion atzerapen denbora pasa arte (1), ez da errekuntzarik hasi. Behin errekuntza hasten dela, errekuntza eman arteko denbora tarte horretan injektatutako aire-diesel nahasketak erreakzionatzen du (2); berez, ohiko diesel motorraren modeloa jarraitzen du, bereizketa txiki batzuk gehituz, hidrogeno gasaren ondorioz. Auto-ignizioaren ostean, hidrogenoaren pizketa emateko baldintzak betetzen dira ((3) tenperatura altua) eta H_2-ren frontea hedatzen hasten da dieselak egiten duen modura (sugar frontea difusio bidezko konbustioa ematen den tokian eta erretako zonaldea). Ondoren, errekuntza kontrolatua

ematen da H_2-ren frontea hedatzen jarraitzen duelarik (4), aurre-nahasketari esker; gainera, knock-ak (eztandak) eman daitezke atal honetan, desira gabeko egoerak emateagatik, kalitate txarreko nahasketa esaterako. Azkenik, erregaia erabat kontsumitu edo sugarraren desagerpena eman arte, konbustioak jarraitzen du, turbulentzia nabarmenduz (5) [36].



Irudia 26. Hidrogeno eta dieselaren errekuntza prozesua [37]

5.5.2 Hidrogenoaren propietateak eta abantail/desabantailak

Hidrogenoa unibertsoan aurki daitekeen elementu ugariena da. Koloregabea, usaingabea eta naturan diatomikoki topa daitekeena (H_2) eta oxigenoarekin erreakzionatzen duenean, ura sortzen du bakarrik, CO_2 edo bestelako BEGik sortu gabe. Azken finean, hidrogeno molekulak karbono gabekoak baitira, erregai organikoak ez bezala.

$$2H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2H_2O$$

Ikuspuntu kalorifiko batetik, hidrogenoak, erregai guztien artean, indar kalorifiko handiduna da, erregai nuklearrak kanpoan utzita. Hori bai, adierazpen hori zuzentzat hartzeko termino grabimetrikotan hitz egin behar da, hau da, masa unitatetan (energia/kg). Bolumetrikoki, ordea guztiz alderantzizko adierazpena hartuko luke haren dentsitate baxua dela eta [38]. Merkatuko erregaiekin alderatzeko asmoz, taula 1ean bakoitzeko datu kalorifikoak bildu dira.

Taula 1. Hidrogenoaren propietate kimikoak gaur eguneko erregaiekin alderatuta [39]

Propietate	Hidrogeno	Metano	Gasolina	Diesel
	H_2	CH_4	$C_nH_{1.8n}(C_6\text{-}C_{12})$	$C_nH_{1.8n}$ $(C_3\text{-}C_{24}$
Pisu molekularra [g/mol]	2,016	16,043	107	~200
Irakite tenperatura presio atmosferikoan [K]	20,268	111,632	310 – 478	436 – 672
Tenperatura kritikoa [K]	32,97 – 33,1	190	--	--
Presio kritikoa [MPa]	1,8 edo 12,8	4,6	--	--
Konposizio estekiometrikoa airean [% bol]	29,53	9,48	1,65 – 1,76	--
Erlazio estekiometrikoa masako airearekin [-	0,029	0,058	0,0664	0,0689
Biskositate zinematikoa 300 K-tan [mm^2/s]	110	17,2	1,18	1,9 – 4,1

Dentsitatea baldintza normaletan [kg/m^3]	0,082 (g)	0,717 (g)	--	833 - 881
Lurrun-beroa [kJ/kg]	445,6	509,9	250 – 400	232
Behe Bero Ahalmena [MJ/kg]	119,93	50,02	44,5	42,8
Goi Bero Ahalmena [MJ/kg]	141,86	55,53	48	45,7
Sukoitasun muga airean baldintza normaletan [% bol.]	4,0 – 75,0	5,3 – 15	1,0 – 7,6	0,7 – 5
Lehertze muga airean baldintza normaletan [% bol.]	18,3 – 59,0	6,3 – 13,5	1,1 – 3,3	--
Eztanda abiadura baldintza normaletan [km/s]	1,48 – 2,15	1,39 – 1,64	1,4 – 1,7	0,3
Pizte energia minimoa [mJ]	0,017	0,29	0,24	--
Auto-ignizio tenperatura [K]	858	813	501 – 744	530
Sugar tenperatura adiabatikoa airean [K]	2318	2148	~2470	~220
Sugarrak irradiatutako energia [%]	17 – 25	23 – 33	30 – 42	--
Sugarraren abiadura airean baldintza normaletan [cm^2/s]	265 – 325	37 – 45	37 – 43	~30
Difusio koefizientea airean baldintza normaletan [cm^2/s]	0,61	0,16	0,05	--
Oxigeno limitea [% bol,]	5	12,1	11,6	--
"Quenching" distantzia airean baldintza normalean [cm]	0,064	0,203	0,2	--
RON – Ikerkuntzarako Oktano Zenbakia	>130	~120	70 – 100	30

Taula 1ek argi eta garbi azaltzen ditu hidrogenoaren propietateak. Lehendabizi, Behe Bero Ahalmen (BBA) handien daukan erregaia da, besteen balio bikoiztuz. Dentsitate balio baxu eta difusibitate masiko handiak molekularen tamaina txikia, arina eta mugikorra dela ondorioztatzen du. Hain zuen ere, hidrogenoaren desabantaila handienetako bat, haren biltegiratzea datza. Energi bektore errentagarria izateko, presio altuan bildu behar da eta oraingoz sistema apropos eta merke bilatzen jarraitzen dute ikerketa taldeek [40].

Beste datu garrantzitsu bat "quenching" distantzia da edo beste hitzetan esanda, sugarra zilindroaren paretatik zenbateko distantziara desagertzeko gaitasuna da. Zenbat eta baxuago izan balioa, orduan eta hurbilago mantentzen da sugarra paretatik, zilindroa, pistoia eta ganbarako tenperatura igoaraziz. Fenomeno horrek motorra kaltetu dezake, kolokan jarriz ganbara osoaren bizitza erabilgarria

Bestalde, abantailetan artean badaude pizketa emateko beharrezko energiaren balio baxua edota, airean, sugarrak lor dezakeen abiadura azkarra baldintza normaletan (erregai soberakinak ez egoteko). Hala ere, aurrean aipatutako "quenching" distantziaz aparte, hidrogenoaren auto-ignizio tenperatura balio oso altua da ere.

Lan honetan, hidrogenoa bektore energetiko gisa planteatu den momentutik, ez da hidrogeno puruzko BEAM-a planteatu, momentu baten ere ez. Interesgarria dirudi planteamendua, baina urteak geroztik, ikerketa taldeek ez diote errentagarritasunik bilatu [38]. Lehen arrazoia, autoignizio tenperatura altua litzateke. Operazio baldintza erabat mugatzen du hidrogenoaren errekuntzak. Konpresio erlazio handi batekin (r=29:1) ez ziren gai izan egoera horretara heltzea. Oztopoari aurre egiteko beste aukera bat bujien erabilera izan zen, hau da, TPM (Txinparta bidezko Pizketa Motorra); baina errekuntza ez zen batere egonkorra [38]. Ziklo bakoitzak atzerapen denbora desberdinak

behar zituen pizketa emateko. Gainera, tenperatura altuak NO_x-ak areagotzen zituen. Beste aukera bat, hidrogenoa nitrogenoarekin diluitzea izan zen eta erregai pilotu gisa diesel pixka bat erabiltzea, pizketa gauzatzeko bakarrik [41]. Lortutako imep (indikadorearen bataz besteko presio erangikorra) balioak 10 bareko langa zeharkatu zuen %50-%40 H2, eta gainera %60ko tasarekin, erabat desagerrarazi zituzten NO_x-en emisioak.

Hala ere, gaur egunean, hidrogeno horniketa sistema aproposa baten faltan eta iturri gehienak metano edo beste jatorri ez berriztagarritik etorrita, aproposena litzateke ohiko BEAM motorretarako sistemetan oinarritu, hidrogeno kantitate txikiaren gehitzea inplementatuz. Beste era batera esanda, erregai pilotua (kantitate handiena) diesela izaten jarraitzea eta nagusia, airearekin batera nahasten dena errekuntza eman aurretik, hidrogenoa izatea.

5.5.3 Errekuntzan eragina duten parametroak

Motorrak egoera fisiko kimiko desberdinak aurkezten ditu momentuko eskakizunen arabera. Hori dela eta, parametro esanguratsuen bitartez motorraren funtzionamendu modu desberdinak ezaugarritzen dira.

5.5.3.1 Motorraren biraketa abiadura

Biraketa abiadura handietan, ganbarako tenperatura handia da ere, hortaz, errekuntza gaitasunak azkartu egiten dira (atzerapen denbora handitu). Inertziaren aprobetxamendua ahalik eta handiena izateko, interesgarria da GGParen aurreko angelu hurbiletan ematea P_{max}-eko puntua [34]. Bestalde, atzerapen denbora txikitzen da, baina abiadura angeluarra handitzen denez neurri handiago baten, atzerapen angelua balio altuagoak hartzen ditu, orduan, presio maximoa GGP osteko puntu hurbiletan egoteko, beharrezkoa da injekzio puntua aurreratzea

5.5.3.2 Injekzio aurrerapena

Motorreko errendimendu eta potentzia maximoa presio maximoa GGP eta justu gero dagoenean lortzen da. Orduan GGPra heldu orduko atzerapen denbora igarota egon beharko litzateke, errendimendu eta potentzia galerak ez izateko [34]. Injekzio puntua aurreratzen baldin bada, errekuntzako presio maximoa handitu egingo da, NO_x-ekin batera. Atzeratzekotan, aldiz, bai emisioak bai potentzia txikiagoak lirateke.

5.5.3.3 Erregai-aire erlazioa (diesela)

Erregai aire erlazioa murrizten baldin bada, aire kantitate berdinerako erregai kantitate gutxiago sartuko da. Horren ondorioz, paretako tenperatura jaitsi egingo da, atzerapen denbora handitu eta horrekin batera aurre-nahasketa fasean erabilgarri egongo den erregaia handiagoa izango da ere, errekuntzako 2.fasea are bortitzago bilakatuz [42]. Hain zuzen ere, aire-diesel frakzio pobreak interesgarriak izaten dira presio maximoa handiagoa izateko. F_{Rmin} oso txikia da dieselarentzat, 0,04 ingurukoa eta gehienezkoa kearen sorrerako mugatzen du [32].

5.5.3.4 Karga maila

Karga maila handitzen denean, erregai kantitatea handituko da potentzia handitzeko asmoz. Atzerapen denboran injektatzen den emaria handitu egingo da, nahiz eta atzerapen debora txikiagoa izan, zilindroko turbulentzia handiagotuz eta nahasketa azkarragoa ahalbidetuz [42]. Horren ondorioz, presio gradientea handitu egiten da, P_{max}-eko balioarekin batera.

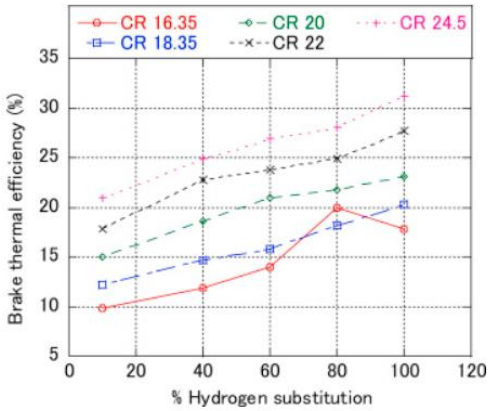
5.5.3.5 Hidrogeno tasa

Hidrogeno-tasa motor diesel dual batean aldatzeak hainbat ondorio izan ditzake errekuntza-prozesuetan. Ondorio horien artean egon daitezke pizte-denbora aldatzea, atzerapen-denbora, erreakzioaren kalitatea eta errekuntzaren beste ezaugarri batzuk. Jarraian, ondorio posible batzuk deskribatzen dira:

- **Pizte-denbora:** Hidrogenoak dieselak baino errekuntza-abiadura azkarragoa du, eta horrek esan nahi du erregai-nahasketan egoteak pizte-denbora bizkortu dezakeela. Horrek errekuntza goiztiarragoa eta azkarragoa eragin dezake [39].
- **Atzerapen-denbora:** Atzerapen-denbora erregaiaren injekzioaren eta errekuntzaren hasieraren artean igarotako denbora da. Hidrogeno-tasaren aldaketak auto-sutearen atzerapen-denboran eragina izan dezake. Oro har, ikusi da hidrogenoak atzerapen-denbora murrizten duela diesel puruarekin alderatuta, eta horrek errekuntza goiztiarragoa eragin dezakeela [39].
- **Erreakzioaren kalitatea:** Erregai-nahasketan hidrogenoaren presentziak errekuntza-erreakzioaren kalitatea hobetu dezake. Hidrogenoak errekuntza-eraginkortasun handiagoa eta zetano-indize handia ditu, eta horrek errekuntza osoagoa eta eraginkorragoa eragin dezake, kutsatzaile gutxiago isurtzen baititu [36].
- **Errekuntzaren egonkortasuna**: Hidrogeno-tasaren aldaketak eragina izan dezake errekuntzaren egonkortasunean. Hidrogenoaren gehitze kontrolatuak sugarraren egonkortasuna hobetu eta sugar ezegonkorraren eraketa murriztu dezake, eta horrek detonazioa eta kea sortzea saihesten lagun dezake [36].
- **Isuriak**: Motor diesel dual batean hidrogenoa gehitzeak eragina izan dezake emisioetan. Hidrogenoak garbitzeko gaitasun handia du, hau da, nitrogeno oxidoen (NO_x) eta partikulen emisioak murrizten lagun dezake, baita errekuntzaren eraginkortasuna hobetzen ere [41]. Hala ere, NO_x emisioak beti izango dute P_{max}-ekiko lotura zuzena, zenbat eta handiagoa izan presioa, orduan eta NO_x isuri handiagoak [38]. Bestalde, aurrerago ikusiko den bezala, Zeldovich mekanismoez gain, NO_x mekanismo gehiagok hartzen dute garrantzia, hidrogeno frakzioarekiko menpekotasun handia dutena [43].

Garrantzitsua da kontuan hartzea hidrogeno-tasaren aldaketaren ondorioak hainbat faktoreren araberakoak izan daitezkeela, hala nola, hidrogeno agregatuaren kantitatea, motorraren funtzionamendu-baldintzak eta erregaiaren injekzio-sistemaren diseinua. Gainera, arreta handiz optimizatu eta kontrolatu behar da, nahi diren onurak lortzeko eta arazo operatiboak saihesteko.

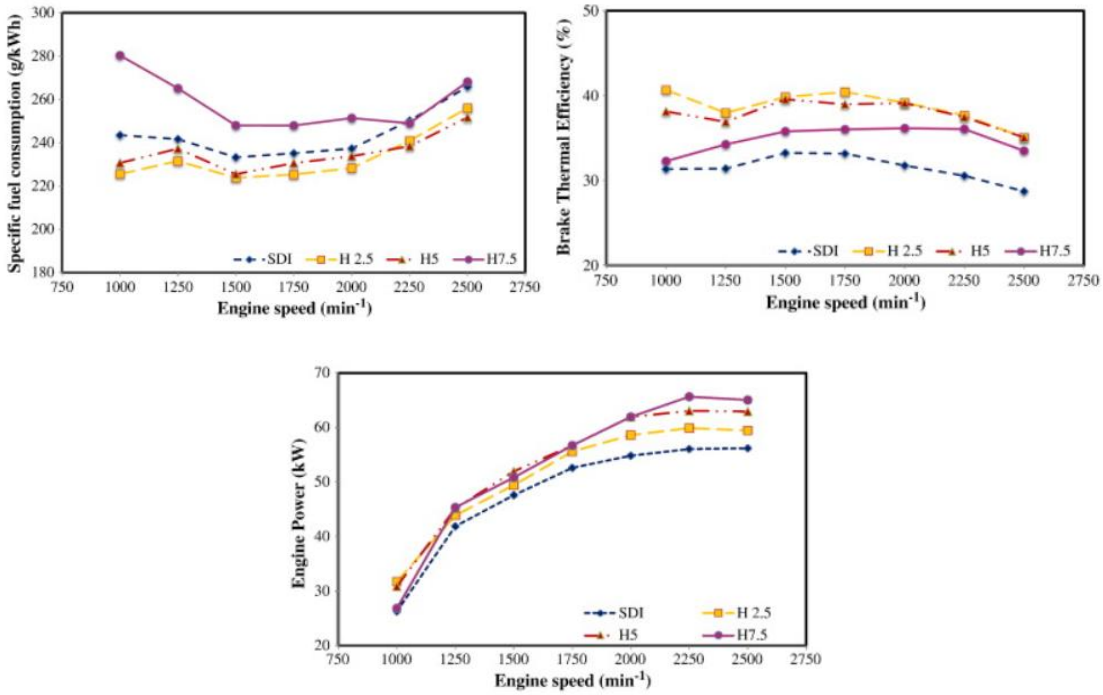
Orokorrean, orain arte bideratutako ziklo dualen ikerketetan ondorio positiboak nabarmendu dira. Beti ere egoerak hidrogeno frakzio aproposa baldintzatzen dituelarik. Adibidez, frakzio handiek bero-sorra handitu eta motorraren efizientzia termikoa hobetzen dutela ondorioztatu dute, ikuspuntua erabat globala izanik eta egoera espezifiko bakoitzak izan ditzakeen aldaerak kontuan hartu barik [38]. Irudia 27a konpresio erlazio desberdinen arabera erakusten da efizientziaren hobekuntza.



Irudia 27. Efizientzia termikoa hidrogeno ordezkapenen menpe konpresio erlazio desberdinentzat [38]

Masood et all.–ek [38] frogatu zuten konpresio erlazioak eragina zuela diesel motor dualen erregaiaren errendimenduan. Ikerketa esperimental bat egin zen 13,35:1 eta 24,5:1 arteko zilindro bakarreko motor baten konpresio-erlazio desberdinekin. Ikusi zen hidrogenoak lan hobea duela konpresio-erlazioa desberdinekin. Eraginkortasun termikoa handitu egiten zen hidrogenoaren ehunekoa handituta, maximoa %100 hidrogenoarekin lortuta irudia 27an ikusten den bezala.

Beste ikerkuntza batzuek badiote hidrogeno tasa altuek ere, %7,5 masa oinarrian, motorraren potentzia handitu egiten dutela, %17an esaterako (H. Köse M. Ciniviz, 2013) [44], motorraren potentzia 56 kW izatetik 65,63 kW izatera pasatuz, karga osoan. Proiektu beran, efizientzia termikoa (errekuntzaren hobekuntza moduan ulertuko da), biraketa abiaduraren arabera aztertu zen. Irudia 28ean agertzen den bezala, hidrogeno frakzioa gehitzeak ez du esan nahi kontsumoa, potentzia eta eraginkortasuna gehituko dituen. Biraketa abiadurak zer esana izango du.



Irudia 28. Kontsumo espezifiko, efizientzia termiko eta potentzia mekanikoak abiadura angeluarraren menpe hidrogeno frakzio desberdinentzat [41].

Karga osoko **erregai-kontsumo espezifikoaren aldakuntza** motorraren abiadurarekin eta hidrogenoa aberasteko balio desberdinekin ematen da irudia 28an. Emaitzetan ikusten denez, %2,5 eta %5 H_2 frakziotarako, SDIrekin (ohiko funtzionamendua) alderatuta, %4 eta %3,5 murrizten dira bataz beste, hurrenez hurren; baina, H7,5 kasurako erregai-kontsumo espezifikoa bataz beste % 6 handitu zen SDIrekin alderatuta. Are gehiago, biraketa abiadura oso baxuetan %17ko kontsumo handiago eskatzen du. Orokorrean hoberen moldatzen dena biraketa abiadura guztietan H2,5eko kasua litzateke. Hidrogeno gehikuntzaren H2,5 eta H5 tasetarako SFC (Specific Fuel Consumption) kantitatea murriztearen arrazoia hidrogenoa airearekin hobeto nahastea da eta motorraren potentzia pixka bat handiagotzen dela erregai-kopurua handitzearen ondorioz. Hala ere, SFCaren zenbatekoa H7,5erako handitzearen arrazoia oxigeno kantitate nahikorik ez dagoelako da.

Eraginkortasun termikoaren aldakuntza karga osoan motorraren abiadurarekin eta hidrogenoa aberasteko balio ezberdinekin. Irudia 28an, H2,5, H5 eta H7,5 hidrogeno-gehikuntzaren balazta-eraginkortasun termikoaren balioak %23, %20 eta %10,8 egin zuen gora bataz beste, hurrenez hurren, SDIrekin alderatuta. Motorraren eraginkortasun termikoa motorraren biraketa abiadura 1250 rpmtan eta motorraren gehienezko potentzian 2250 rpmtan H2,5, H5 eta H7,5 balioak %20,8 igo ziren, %17,5, %9 eta %22, %22, %16,5 SDIrekin alderatuta, hurrenez hurren. Biraketa abiadura guztietarako H2,5 kasua gailendu zen berriz ere. H2,5, H5 eta H7,5 egoeratan eraginkortasun termikoa handitzearen arrazoia esan daiteke errekuntzaren hobekuntza dela, eta hidrogenoaren (BBA) Behe Bero Ahalmena handitzea, SDIren aldean. Era berean, hidrogenoaren sugarraren abiadura gasolioarena baino bederatzi aldiz azkarragoa da. Beraz, gasolioa, oro har, hidrogenoaren aurrean erretzen bada, errekuntza azkarrago eta osoagoa izango da. Hauek eraginkortasuna hobetzen lagundu dute. Hala ere, H7,5an hobekuntza txikiagoa izan zen, errekuntza-ganberaren barruan oxigeno-kontzentrazioa murriztu egiten delako airea hidrogenoarekin ordezkatzeagatik eta motorraren energia irteera murriztu egin zelako errekuntza-ganberan sartutako energia unitate bakoitzeko.

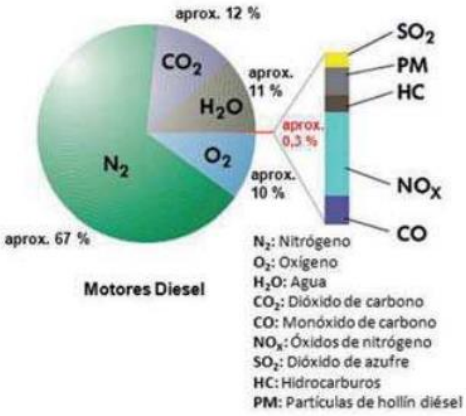
Irudia 28an ere,motorrak karga osoan duen **potentziaren aldakuntza** erakusten du, motorraren abiadurarekin eta hidrogenoa aberasteko balio desberdinekin. Erregai bikoitzeko motorraren potentzia maximoa 65,63 kW-koa izan zen H7.5arekin, eta SDIa, berriz, 56 kW-koa (hasieran jarritako adibidea da). Gainera, erregai-mota bikoitzerako motorraren potentzia %6,8, %12,4 eta %17 igo zen, hurrenez hurren, H2,5, H5 eta H7,5, 2250 rpmtan, SDIrekin alderatuz. Motorraren potentzia handitzearen arrazoia hidrogenoa airearekin duen nahasteko gaitasuna eta hidrogenoa azkarrago erretzea dira, eta horiek motorraren potentzia hobetzen dute. H7,5 gehikuntzak ez zuen motorraren potentzia beste hidrogeno tasa gehigarriek baino gehiago handitu, hidrogenoak bolumen handiagoa hartzen zuelako eta oxigeno kontzentrazioa murrizten zuelako errekuntza-ganberaren barruan.

BEAM motor dualen inguruko berrikusketa proiektu batean (V. Chintala, K.A. Subramanian, 2017) [45], hidrogenoak, karga altuko kasuetarako, efizientzia termikoa hobetu ez ezik karga baxuetarako eraginkortasuna txikitzen duela birfrogatu zen. Are gehiago, hidrogeno ordezkapena mugak izan ditzake motorraren egoeraren arabera, knocking fenomenoa dela eta; aire-hidrogeno aurre-nahasketak auto-pizketaz eztanda egin dezakete-eta. Beste mugen artean, errekuntza denbora litzateke. Hidrogenoak sugarren hedapenaazkartu egiten du erabat, zilindroko tenperatura eta presioak igoaraziz; ondorioz askatutako beroa handitu egiten da eta motorrak berak zailtasunak izan ditzake baldintza horiek jasateko.

5.6 Emisioak

Proiektu honek IMO bezalako erakundeek erabakitako akordioak betetzea du helburu, munduko ontziterien BGE emisioak 2050erako, %50en murrizpena aintzat hartuta. Bai katalizatzaile pasibo edo aktibo bai partikulentzako filtroak edota EGR bezalako sistemen bitartez emisioen isuriak kontrolatzeko zein murrizteko aukerak daude gaur egunean. Hala ere, erregai fosilak erabiltzeak emisioak suposatuko ditu beti, hortaz erregaiaren erabilera kontrolatzeaz gain (haren finketa prozesuak, garraioa, eta abar BGEen isuriak eragiten baititu), erregai fosilen emisio kutsatzaileak ekiditeko sistemak hedatu behar dira, eta horren baitan, aztertu nahi da hidrogenoaren txertatzeak hobearazi ditzakeen emisio tasak.

Ohiko motor dieseletan sortarazten diren osagai kutsatzaileak ikusiko dira irudia 29an. Diesel motorrak aire soberakinarekin aritzen direnez, O_2 emisio handia daukate N_2-arekin batera. BGEen artean CO_2-a da emisio atal handiena eta munduko politika gehienak isuri hauetan jartzen dute fokua. Neurri txikiagotan, NO_x, CO eta HC soberakinak eta partikula solidoak (kedarrak). SO_2ak ere ager daitezke olio lubrifikatzailetik eratorriak edo hidrokarburo pisutsuak erabiltzeagatik.



Irudia 29. Diesel motorren emisioak [46]

5.6.1 Karbono dioxidoa

Industrializazio prozesu ostetik, CO_2 emisioak esponentzialki areagotu ziren erregai fosilen erabilpena dela medio. 1750tik 2010erako tartean %40ean areagotu dira [47] eta gaur egunean 419 ppm-ko kontzentrazioa antzeman da atmosferan [48]. Egia da, karbono dioxidoak ez duela arrisku handirik eragiten beti ere emisioak kontrolatuak badira; baina gaur eguneko emisio mailak berotegi efektua areagotzen dute. Dieselak, edozein hidrokarburoren errekuntzan bezala, ura eta karbono dioxidoa sortzen dute hidrogeno eta karbono elementuetan oinarritzen baitira.

$$HC(g) + O_2(g) \rightarrow H_2O(g) + CO_2(g)$$

Karbono dioxidoa murrizteko aukera, erregaiaren konposizioan legoke. Karbonoaren presentzia zenbat eta urriagoa izan orduan eta CO_2 emisio gutxiago egongo lirateke. Hidrogenoaren erabilerak, esaterako, karbono gabeko erregaia izanik, irtenbide oso aproposa dirudi. Errekuntzatik sortutako produktu bakarra ur-lurruna litzateke.

5.6.2 Nitrogeno oxidoak (NO_x)

Airearen %78 N_2-z osatuta dago, berez inertea dena eta atmosferan diatomikoki topa daitekeena. Hala ere, tenperatura altuetan, airean aurkitzen den oxigenoa eta nitrogenoa erreakzionatzeko aukera daukate nitrogeno oxidoak sortuz.

$$N_2(g) + O_2(g) \rightarrow NO(g) + NO_2(g)$$

Atmosferan, dioxido nitrogenoek ozono fotokimikoaren sorkuntzan lagun dezakete (smog fotokimikoa) osasunerako kaltegarria suertatu daitekeena. Bestalde, BEG gisatzat hartzen da eta euri azido sorrarazi dezake ere. NO_x-ak estratosferan, ozono geruza suntsitzen dute, behar beharrezkoa dena eguzkitik erradiatzen diren UV izpiak iragazteko. Zoritxarrez, oreka erreakzioetan oinarritzen dira eta nitrogeno oxidoak sortarazten dira eta ozono estratosferiko gehiago suntsitzeko aukera ematen du [49]. Hurrengo sorrera mekanismoaren bitartez suntsitzen dituzte

$$NO(g) + O_3(g) \leftrightarrow NO_2(g) + O_2(g)$$

$$NO_2(g) + O(g) \leftrightarrow NO(g) + O_2(g)$$

Mekanismo ugarik sortzen dituzte NO_x-ak BEAM motorretan. Diesel motorretan ohikoena "**Mekanismo termikoa (NOx thermal)**" da (Zeldovich) [50], tenperatura altuen ondorioz (>1800 K). Aire atmosferikoan dagoen nitrogenoaren oxidazioaren ondorio da, eta hori da errekuntza-sistema gehienetan erabili ohi den oxidatzailea. Oxido nitrikoa nitrogeno molekularretik (N_2) abiatuta sortzeko, beharrezkoa da molekula horren nitrogeno-atomoen arteko lotura hirukoitza haustea. Oxigeno molekula bat (O_2) ez da gai lotura hori errekuntza-baldintzetan hausteko; izan ere, tenperatura altuetan ere, oxigeno molekularraren eta nitrogeno molekularraren arteko zuzeneko erreakzioa motelegia da [51].

$$N_2(g) + O_2(g) \leftrightarrow 2NO(g)$$

Beraz, oxido nitrikoaren eraketa, N_2-tik abiatuta, kate-erreakzioko mekanismo baten bidez gertatzen da, Zeldovichek hasiera batean 40ko hamarkadan proposatua. Erregai/aire nahasketa pobreak edo estekiometrikotik hurbil daudenak erretzean, diesel motorretan gertatzen den bezala, NO eraketa gobernatzen duten erreakzio nagusiak honako hauek dira:

$$N_2(g) + O(g) \leftrightarrow N(g) + NO(g)$$

$$N(g) + O_2(g) \leftrightarrow O(g) + NO(g)$$

$$N(g) + OH(g) \leftrightarrow H(g) + NO(g)$$

Aurreko hiru erreakzioek irudikatzen duten kate-erreakzioa oxigeno-atomoen presentziarekin hasten da, O_2 molekulen disoziazioak osatuak, disoziazio hori errekuntza-prozesuetan lortzen diren tenperatura altuek eraginda. Oxigeno-atomoak dira, beraz, kate-erreakzioaren erantzuleak, haien oreka-kontzentrazioa nitrogeno-atomoena baino askoz handiagoa baita. Erreakzioaren aktibazio-energia handia da (319 kJ/kmol), eta horrek tenperaturarekiko mendekotasun handia duela adierazten du, mekanismo termikoak 1800 – 2000 K baino gutxiagoko tenperaturetan garrantzirik ez izatea eraginez [32].

"N2O tarteko mekanismoa" garrantzitsua da tenperatura baxuetan NO sortzeko prozesuetan (T < 1500 K) eta nahasketa pobreen errekuntzan (F_r < 0.8) [32]. Gainera, presio altuko zonaldeetan bitarteko mekanismo honek NO_x formakuntzen %90a suposa dezake [52]. Hori dela eta, errekuntza ganbaratan kontuan hartu beharko da. Bibliografian proposatutako mekanismoen artean, ezagunenetako bat Lavoiek garatutakoa da, honako erreakzio hauek kontuan hartzen dituena

$$N_2O(g) + O(g) \leftrightarrow NO(g) + NO(g)$$

$$N_2O(g) + O(g) \leftrightarrow N_2(g) + O_2(g)$$

$$N_2O(g) + H(g) \leftrightarrow N_2(g) + OH(g)$$

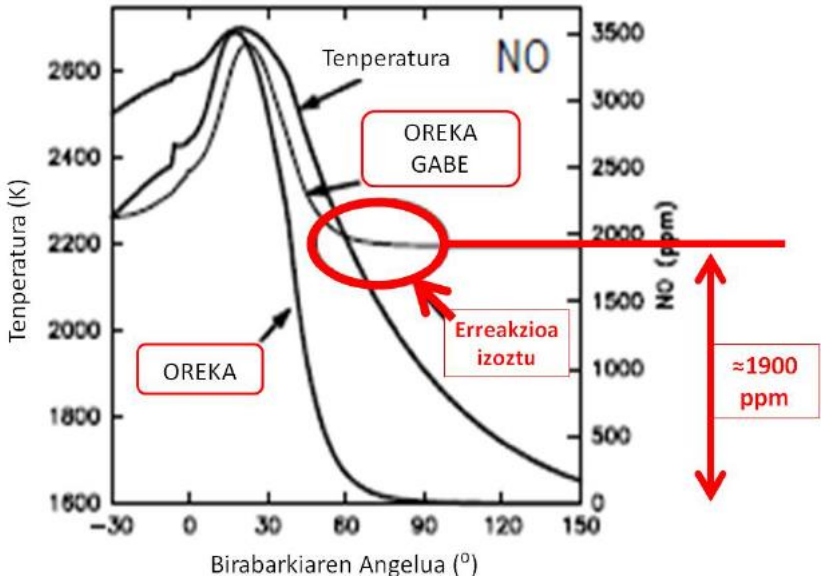
Hidrogeno erradikalek eragina daukatela nabaria da, hortaz kontuan hartu beharko litzateke sistema duala erabiltzerakoan. Are gehiago, zenbat eta hidrogeno erradikal gehiago sortu orduan eta N_2O gehiago kontsumituko lirateke; gainera, hidrogeno erregaiak aire sarreraren lekua hartzen badu, erreakzioa aire soberakin gutxiagorekin arituko litzateke; hau da, mekanismoaren eragina ez litzateke horren garrantzitsua izango.

"Prompt NO" hidrokarburo kate handien bitartez ahalbidetzen den NO_x formazio modua da. Erregai zonalde aberatsetan eta tenperatura baxuko (T < 1800 K) zonaldeetan ematen da [51]. BEAMetan "NO_x thermal" mekanismoak garrantzirik ez duenean kontsideratzen da, injekzio hasi eta lehen erreakzioak ematean edota konbustioaren azken fasean, difusio bitarteko errekuntza gailentzen denean. Hayhurst et. al. prompt mekanismoa bi oreka ekuazioekin sinplifikatzen ditu:

$$CH + N_2 \leftrightarrow HCN + N$$

$$CH_2 + N_2 \leftrightarrow HCN + NH$$

Mekanismo garrantzitsuak azalduta, aipatu behar da, KPM motorretan, NO_x-en formazio gehiena gar frontean izaten dela, bertan ematen baitira tenperatura altuenak [32]. Tenperatura baxuetan, aldiz, NO_x-ak deskonposatzeko joera izaten dute; hortaz barneko tenperatura jaitsi ahala desagertzeko aukera emango luke, baina pistoiaren zikloa oso azkarra da eta ez du denbora nahikorik izozteko, horregatik hiru mekanismoak kontuan hartuko dira. Hitz gutxitan esanda, tenperatura altua eta haren iraupenak baldintzatuko dituzte NO_x-ak. Horren adibide gisa, irudia 30ko egoera da. Difusiozko errekuntzan erabat sartuta dagoenen NOx kontzentrazioa konstante mantentzen da, tenperatura jaisten jarraitzen delarik.



Irudia 30. NOx emisioak motorraren zikloan [32]

Azkenik, Espainiako Trantsizio Ekologiko eta Erronka Demografikorako ministerioak erabakita, 30 g/m^3-ko tasa maximoa urtean ezarrita dago, genienez jota urtean ordu bateko iraupenean 200 g/m^3-ko langa gainditu barik (18 aldiz baino ezin daiteke kasuistika hura gertatu) [53]. Motorren legislazioei dagokionez, ministerio beraren esanetan, motorren isuri maximoak ezin du 190 mg/Nm^3-ko tasa gainditu, beti ere 2006tik geroztik ekoiztu bada (bestela 1850 mg/m^3). Motorraren potentzia izendatua 1 MW- 5 MW artekoa bada 250 mg/m^3-tara mugatuta dago [54].

5.6.3 Karbono monoxidoa (CO)

Hidrokarburoen errekuntzan sortzen diren emisio kutsakorrak dira. Karbono dioxidoarekin orekan dago, baina oxigeno gutxiko espaziotan ez da CO_2-an bilakatzen. Zoritxarrez, oso toxikoa da eta tasa altuetan, oxigenoa organismoan sartzea eragozten du, eta horrek ehunetan kalteak eragin ditzake eta heriotzan amaitu. Estatu Batuetan esaterako 500 pertsona hiltzen dira urtero karbono monoxidoa arnasteagatik [55]. Hurrengo da CO eta CO_2 arteko oreka:

$$CO(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \leftrightarrow CO_2(g)$$

Zenbat eta tenperatura handiagoa izan, erreakzioa eskumarantz mugituko da. Oxigeno maila ere handiagotzen bada, karbono dioxidoa sortzeko joera izango du.

Diesel motorretan, bi fase desberdinetan banatzen da karbono monoxidoaren oxidazioa: lehenengo erregaiaren oxidazioaren bitartez CO sortzen da; ondoren, karbono monoxidoaren oxidazioak karbono dioxidoan eraldatzen da. Zenbat eta aberatsagoa izan karga maila, oxigeno gutxiago izango du eskura CO-ak eta oxidatzeko zailtasunak izango ditu. Hala ere, diesel motorretan nahaste pobreak erabiltzen dira.

Hidrogenodun molekulak sartzen baldin badira orekan, azkartu egiten du monoxidoaren oxidazioa. Hori dela eta, ura edo H_2 bezalako adizioak erabiltzen dira, hurrengo mekanismo kimikoa jarraituz:

$$CO(g) + OH(g) \leftrightarrow CO_2(g) + H(g)$$

Oxigeno tasaz aparte, tenperaturak badu eragina ere karbono monoxidoaren oxidazioan. Hori bai, ez oxigeno tasaz beste. Tenperatura altuak oreka eskumatara bultzatzen du.

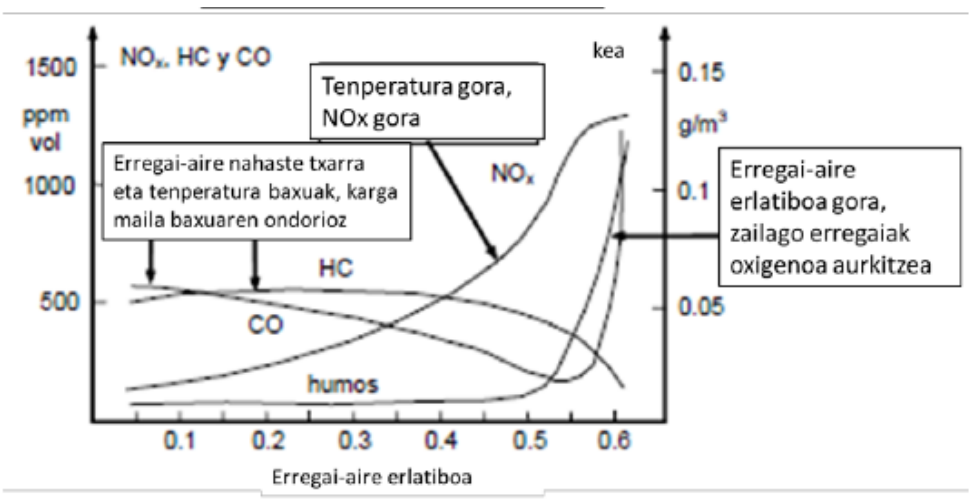
5.6.4 Kea eta partikulak

KPM motorretan, errekuntza osoa gertatzen ez den kasuetan, ihesean keak agertzen dira. Arrazoiak bi izan daitezke: alde batetik, erregaiak oxigenoa topatzeko zailtasunak izatea (horrek ez du esan nahi oxigenoa ez dagoenik, nahastearen homogeneotasun maila txikia izatea baizik) edota tenperatura altuengatik erregaiaren polimeroak banatzea, hidrogenoa galtzea eta karbono partikulak ikatz bihurtzea [56]. Beste arrazoi posibleen artean ere errekuntza denbora legoke, atzerapen denbora luzedun nahasteak denbora nahikorik ez izatea errekuntza osoa emateko.

5.6.5 Erregai-aire erlazio erlatiboaren araberako emisioak

Aurretik aipatutako emisio mota guztiak erregai aire erlazioarekin erlazionatu daitezke. Nahasteak pobreak direnean, zilindroko tenperatura ez da horren altua izango ere ez; hortaz, NO_x-ak maila baxuan isuriko dira eta "cracking" fenomenoa gertatzeko aukerak ia ezinezkotzat har daitezke. Egia da, airea soberan egongo dela eta horrek CO eta HC soberakinak murriztuko lituzkeela dirudiela, baina tenperatura alturik gabe, nahasketa kalitate txarrekoa izanik, hidrokarburo eta karbono monoxidoen emisioak maila ertainean agertuko dira.

F_R handitu ahala, nitrogeno oxidoak eta keak agertzeko probabilitatea handituz doa, bai tenperatura bai aire kantitate erlatiboa murrizteagatik. Hidrokarburo soberakinekin, aldiz, nahaste maila tenperatura handiagoekin hobetzen denez, gutxituz joango dira. Azkenik, karbono monoxidoen isuriak aire-erregai maila altuetan, nahiz eta tenperatura handiak izan eta nahastearen homogeneotasun maila aproposa izan, aire faltagatik, goranzko tendentzia nabarmenduko da.

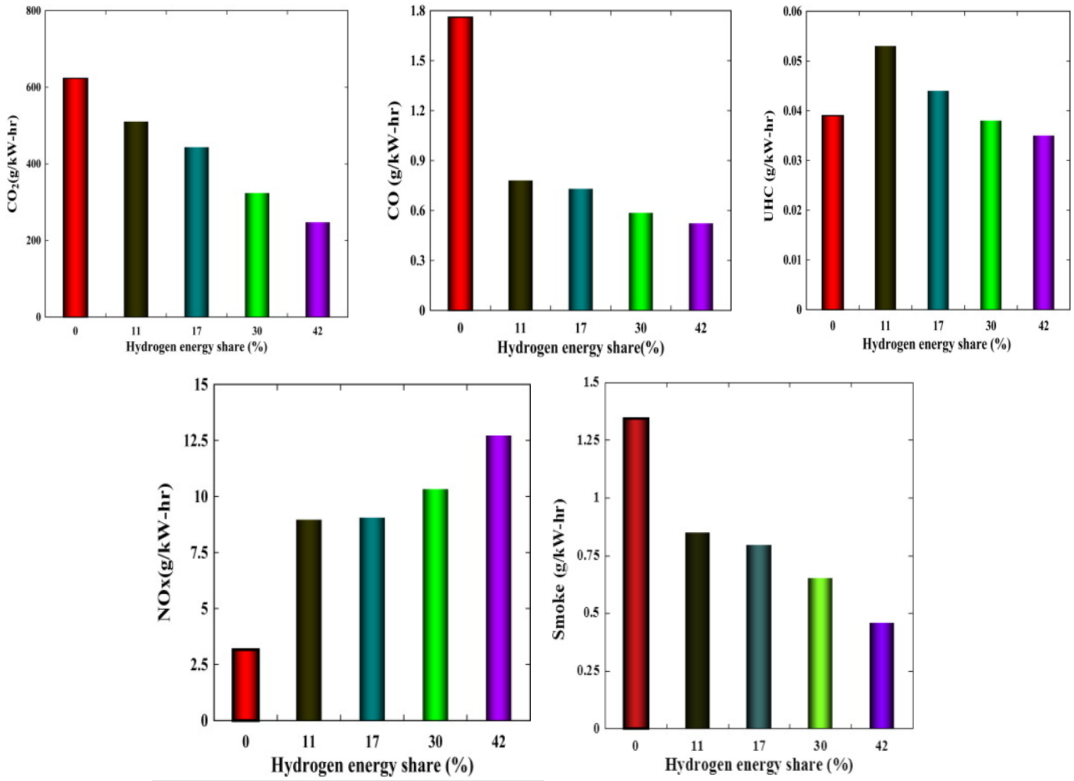


Irudia 31. NOx, HC eta CO emsioak erregai-aire erlazioren arabera [32]

5.6.6 Hidrogenoaren eragina emisio mailetan

Proiektuaren helburu nagusiak eraginkortasun termikoa eta emisio kutsakorren murrizpena diren heinean, Berotegi Efektuko Gasak zein kedarren murrizpena aztertu behar dira, H_2-ren frakzio edo egoera baldintzako kasuistikak kontuan hartuta. Hasiera batean, karbono partikulen faltan, hidrogenoaren inplementazioak CO_x-ak murrizteko aukera ematen duela aurreikusi dugu; gainera, errekuntza azkarra izateko tendentziagatik, kedar eta HC soberakin gutxiago eragiten ditu. NO_x-ak,

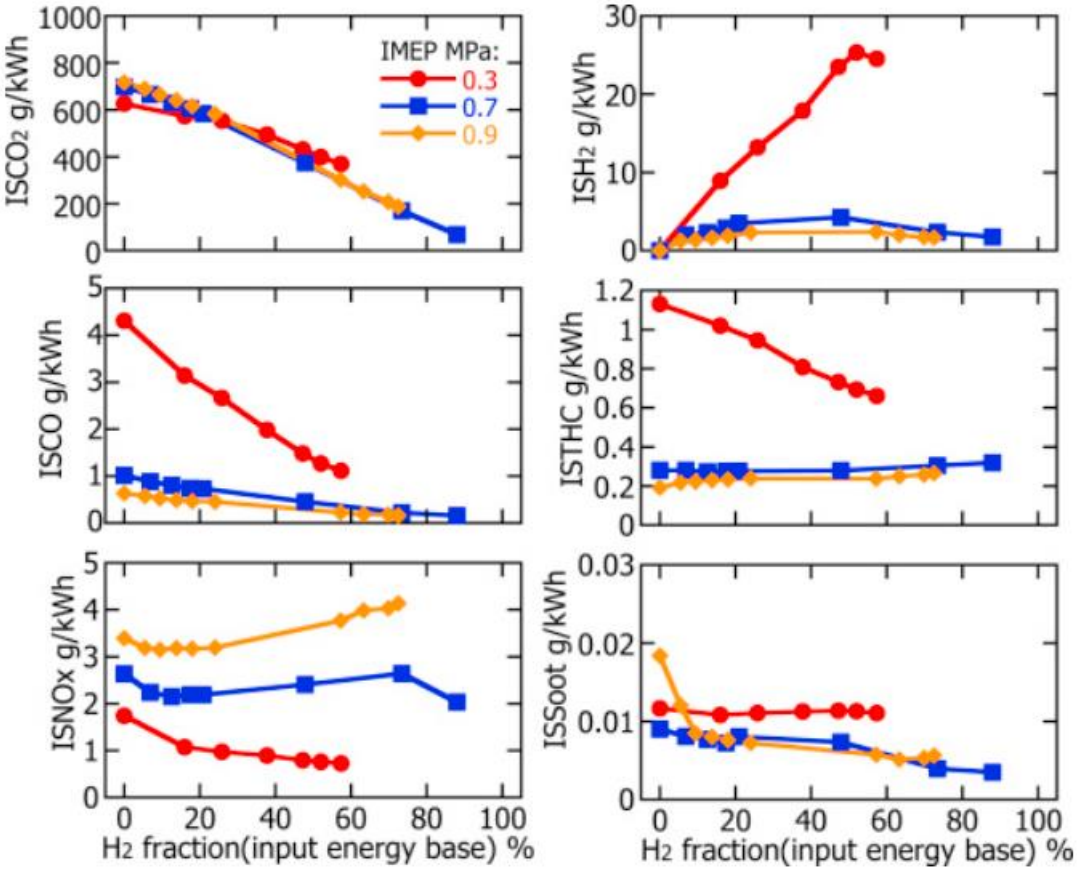
aldiz, tenperatura oso altuak eragiten dituenez H_2-ak, emisioak hidrogeno frakzioarekin batera hazten dira. Irudia 32an, (H.A. Alrazen, A.A. Talib, R. Adnan, K. Ahmad, 2016) [57] lau aldiko motor dual baten esperimentutik lortutako emisioak islatzen dira.



Irudia 32. CO2, CO, UHC (Unburnt hydrocarbon), NOx eta Smoke emisioak hidrogeno ordezkapen energetikoaren menpe [57]

Karbono dioxido eta monoxidoei dagokionez, hidrogenoak dieselari lekua kentzen dionez, karbono gutxiago egongo da; hortaz, karbonodun molekula gutxiago ere. Gainera, CO_2-aren bilakaera nahiko lineala dirudi; CO-arena, ordea, nahiko berdin mantentzen da hidrogenoa gehitu zaionean, bi arrazoiengatik: hidrogeno sugarraren abiadura azkarrak murriztu egiten ditu emisioak; baina era berean, hidrogenoak aireari lekua kentzen dio eta oxigeno faltan agertzen da karbono monoxidoa. HC emisiotan, %11ko hidrogeno frakzioak datu oso altuak azaltzen ditu bi arrazoiengatik: hidrogeno gutxirekin, errekuntzaren amaierako tenperatura horren altua ez izateagatik, hidrokarburo zatiren bat erreakzionatzeko aukera ez izateagatik; bestetik, diesel frakzio handia izaten jarraitzen duela eta posible litzateke ere konbustioaren kalitatea ez izatea besteetan bezain egokia. NO_x eta errautsak, H_2-ak eragiten duen tenperaturaren igoerarekin erlazionatuta daude.

Karga ere kontuan hartu beharreko parametroa da; egia da KPM motorretan karga konstante mantentzen dela eta doikuntza diesel injekzioarekin egiten dela, baina (T. Tsujimura, Y. Suzuki, 2017) [58] kargarekin hidrogeno-diesel-aire konbinazio gehiago lortu zituzten. Horrela, aireak konbustioaren egokitasunean izan dezakeen eragina ikusi daiteke. Irudia 33an, agertzen dira karga desberdinekin (imep balio bitartez adierazita) lortutako emisioak.



Irudia 33. CO2, CO, NOx H2, THC eta kedar emisioak imep eta H2 frakzioen menpe [58]

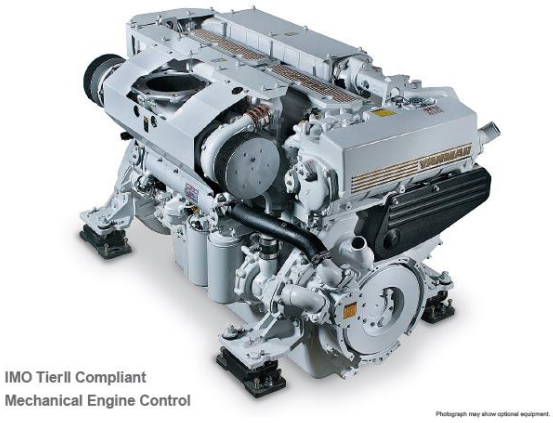
Karbonodun emisiotan ez da desberdintasun handirik ikusten. Egia da, karga baxuarekin CO emisio handia dagoela aire gutxiagok oxigeno gutxiago esan nahi duelako; baina tenperatura altuagotan konbustioa azkartzen denez emisioak jaitsi egiten dira. H_2 soberakinen aldetik, argi eta garbi adierazten du irudia 33k aire nahikoa behar dela konbustioan hidrogenoak ondo parte har dezan. Zenbat eta karga handiagoa, orduan eta NO_x emisio handiagoa; azken finean, erreaktibo gehiago, tenperatura altuagoa adierazi nahi baitu. Hori bai, hidrogeno asko eta karga txikiarekin konbustioaren kalitatea eskasagoa denez, amaierako tenperatura ez da horren altua orduan NO_x ez dira horrenbestekoak ere ez. Azkenik, kedarra murrizteko argi dago airea beharrezkoa dela eta hidrogeno frakzioak baino eragin handiagoa daukala.

6 Metodologia

Behin Barne Errekuntzako Motorren (BEM) funtzionamendu eta ezaugarriak aztertuta eta hidrogenoaren inplementazioak eragingo lituzkeen aldaketak identifikatuta, simulazioaren diseinuaren txanda da. Horretarako aztergai dagoen motorraren geometria, funtzionamendu baldintzak eta ezaugarriak ezagutuko dira ondoren, simulazioan sartu ahal izateko.

6.1 Motorraren ezaugarriak

Laborategiko motorra, itsas garraiora bideratutako motorra da eta ezaugarri nagusien artean, bere ibiltarte luzea nabarmentzen da, potentzia gaitasun handiarekin batera. IMO Tier II araudia betetzen du.



Irudia 34. Laborategiko motorraren irudia

4 aldiko BEAM diesel motorra da. **6 zilindroz** osatuta dago, bertikalki orientatuta. Geometria parametroei dagokionez, zilindro bakoitzaren **ibiltartea 165 mm-koa** da eta **diametroa 132,9 mm**-koa. Ziklo bakoitzeko **13,73 litro desplazatzen** ditu totalean, konpresio erlazioa **(rc) 15,18** izanik.

Injekzio sistema zuzenekoa da, hau da, diesela errekuntza ganbara zuzenean injektatzen da, 30.4 MPa-eko presioarekin. Injekzio momentua, funtzionamendu baldintzaren araberakoa da; hala ere, **simulazioan GGP baino 16º aurrerago** finkatuko da. Injektore bakoitza 12 zuloz osatzen da, bi altuera desberdinetan antolatzen direnak: goian 0,25 mm diametroko 8 eta azpian 0,2 mm diametroko beste 4 zulo.

Biraketa abiadura, injekzioa bezala, funtzionamendu baldintzaren araberako da; hala ere, azterketa errazteko 2100 rpm-tan zehaztu da entseguetan.

Informazio guztia fitxa teknikotik atera da (ikusi irudia 35)

Type		–	Vertical, water-cooled, 4-cycle diesel engine			
Combustion chamber		–	Direct injection type			
No. of cylinders - cylinder bore × stroke		mm	6 - 132.9 × 165			
Total cylinder displacement		ℓ	13.73			
Rating		–	S	L	M	H
Rated output (at flywheel)		kW (PS)	515 (700)	478 (650)	441 (600)	368 (500)
Rated engine speed		min^{-1}	2200	2150	2100	1950
Crankshaft rotation direction		–	Counterclockwise (viewed from the flywheel)			
Firing order		–	1 - 4 - 2 - 6 - 3 - 5 - 1			
Fuel system	Fuel injection pump	–	YANMAR 6 in-line			
	Injection timing (FIC) (before T.D.C.)	deg.	16 ± 0.5	15 ± 0.5	14.5 ± 0.5	13 ± 0.5
	Type of injection nozzle	mm × degree	Hole type 8 - ø0.25 × 155° + 4 - ø0.20 × 90°			Hole type 8 - ø0.24 × 155° + 4 - ø0.20 × 90°
	Injection pressure	MPa	30.4 ± 0.5			
Lubricating system	Lubricating	–	Forced lubricating with gear pump			
	Cooling	–	Freshwater (coolant) cooling			
	Lubricating oil pressure	MPa	0.4 - 0.5			
	Lubricating oil capacity: Oil pan	ℓ	36			
	Lubricating oil capacity: Piping	ℓ	10			
Cooling water system	Seawater pump	–	Rubber impeller, gear driving type			
	Water pump (coolant)	–	Centrifugal, gear driving type			
	Cooling	–	Freshwater (coolant) cooling (with a heat exchanger)			
	Coolant capacity	ℓ	40 (engine), 1.5 (reservoir)			
Turbocharger	Type	–	RHC7 (twin-turbo)			
	Cooling	–	Air cooling			
Air cooler	Type	–	Fin and tube			
	Cooling	–	Seawater cooling			
Starting system		–	Electric starting			
Engine dry mass (without marine gear)		kg	1385			

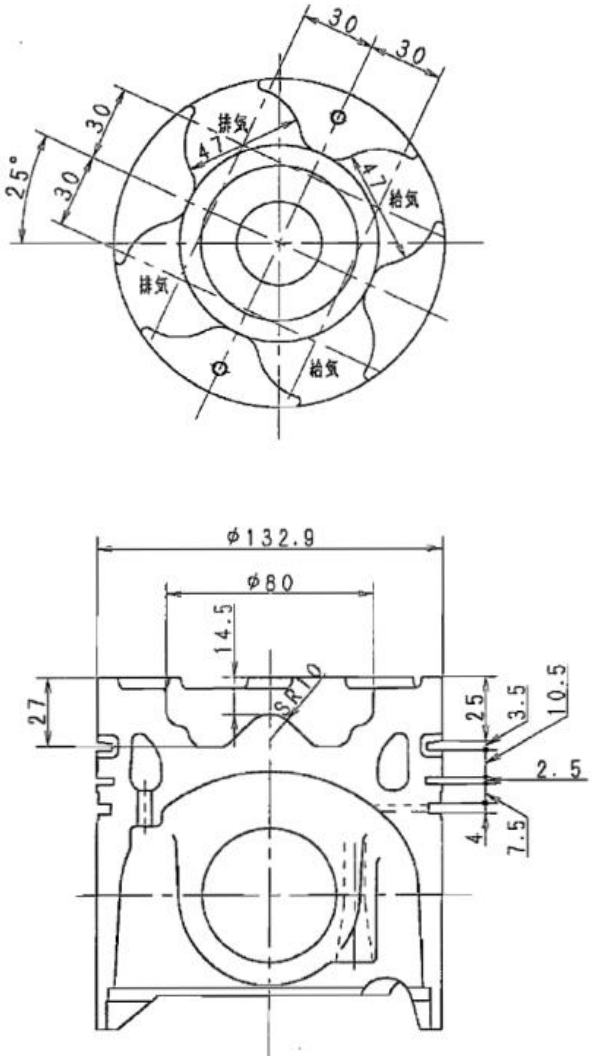
Irudia 35. Motorraren fitxa teknikoa

Hiru dimentsiodun ganbara diseinatzeko, fitxa teknikoak ez du informazio nahikorik eskaintzen; hortaz, hornitzailerengana jo behar izan da hurrengo datuak jasotzeko:

Taula 2. Laborategiko motorraren informazio gehigarria

Irteera balbularen zuloaren diametroa	39 mm
Sarrera balbularen zuloaren diametro	39 mm
Birabarkiaren erradioa	82,5 mm ($2 \cdot R_{birabarkia}$)
Bielaren luzera	278,85 mm
Pin Offset (GGP eta birabarkiaren goi puntuaren arteko desfasea)	0º

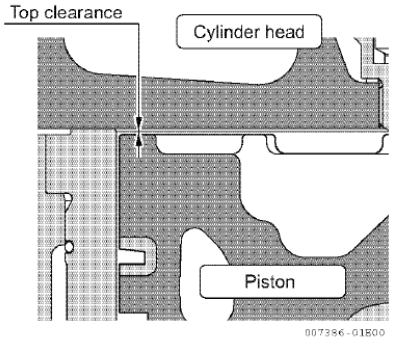
Pistoiaren ezaugarri geometrikoak beharrezkoak dira, ganbarako korronte fluxuak behar bezala kalkulatzeko; kontuan izanda ber-fluxuak behin eta berriro gertatzen direla eta simulazioa iragankorra eta ez-egonkorra dela. Irudia 36an pistoiaren planoak daude ikusgai eta irudia 37an GGPan pistoiak duen posizioa.



Irudia 36. Pistoiaren planoa

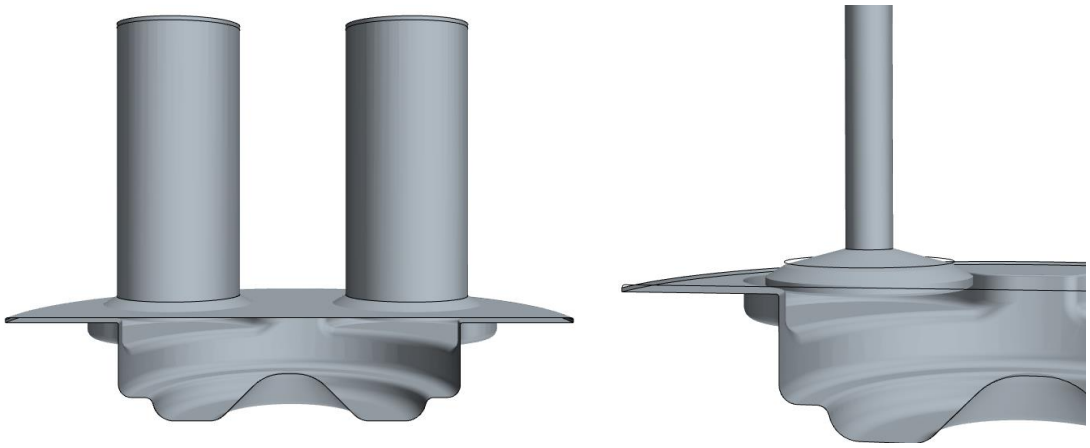
5. Measure the top clearance.

Top clearance	1.06 ± 0.10 mm



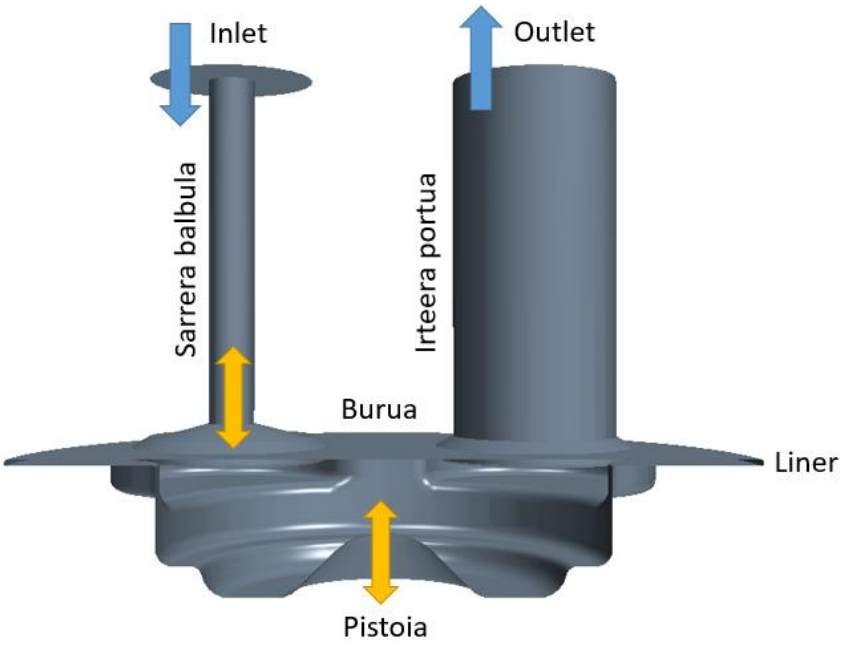
Irudia 37. Pistoi eta zilindro buruan arteko xehetasunak

Geometriaren inguruan jasotako informazioa guztia atal honetan bildu da. Zoritxarrez, ez da informazio gehiagorik lortu, baina konpresio erlazioa jakinda eta datu esanguratsuenak ezagututa, modeloaren diseinua irudia 38an azaltzen den bezala planteatu da. Bertan, pistoia GGPan dagoen momentua hartu da. Balbulak nolakoak diren ezagutzen dira, baina datu edo neurri adierazlerik gabe, orduan hurbilpen gisa suposatu behar da.



Irudia 38.Modeloaren geometria (cranck angelua 0º denean)

Bestalde, ikerkuntza honetan aztergai den eremu bakarra fluidoa; hortaz, ahalik eta errore matematiko gutxien eman ditzan, erpin zorrotzak leundu egin dira, 3 – 5 mm-ko erradioarekin, balbulen mugimendua aktibatzean bolumen negatiboak kalkulatzen baitzituen programak. Zailtasun handiko beste atal bat balbularen ixte posizioa erabakitzea izan da; alde batetik, fluidoa, ahal den heinean, ezin baita pasa (zertxobait pasako da) eta bestetik, balbulen eta sarrera/irteera portuen artean tolerantzia minimo bat egokitu behar da, balbula higikorrak baitira eta portuak finkoak. Hortaz, saiakuntza desberdinen ostean erabaki da 0,7 mm-ko ixte tolerantzia ezartzea. Motorraren atalak behar bezala ulertzeko ikusi irudia 39.



Irudia 39. Modeloaren geometria azalpenekin (adierazi ez diren atalak: sarrera portua eta irteera balbula)

Irudia 39ari erreparatuta, hiru gorputz desberdindu behar dira: Sarrera eta irteera balbulak eta bestetik portuak, inlet, oultet, burua, zilindro atorra (liner) eta pistoia osatzen dituena ("engine-fluid" deritzona). Atal mugikorrak balbulak eta pistoiaren gainazalak izango dira.

6.2 Funtzionamendu baldintzak

Ikerketa honen aurretik, motor berarekin saiakuntza monodimentsionalak burutu ziren eta EIB/BIE Portugaleteko saiakuntza bankuan probatu,. Esperimentazio prozesu horretatik lortu ziren emaitzak izango dira egoera baldintzak zehaztuko dituenak simulazio tridimentsionalean. Hori bai, orain arte ez dira hidrogeno frakzioarekin gauzatu saiakuntza monodimentsionalak; hortaz, hasierako balio gisa hartuko dira soilik.

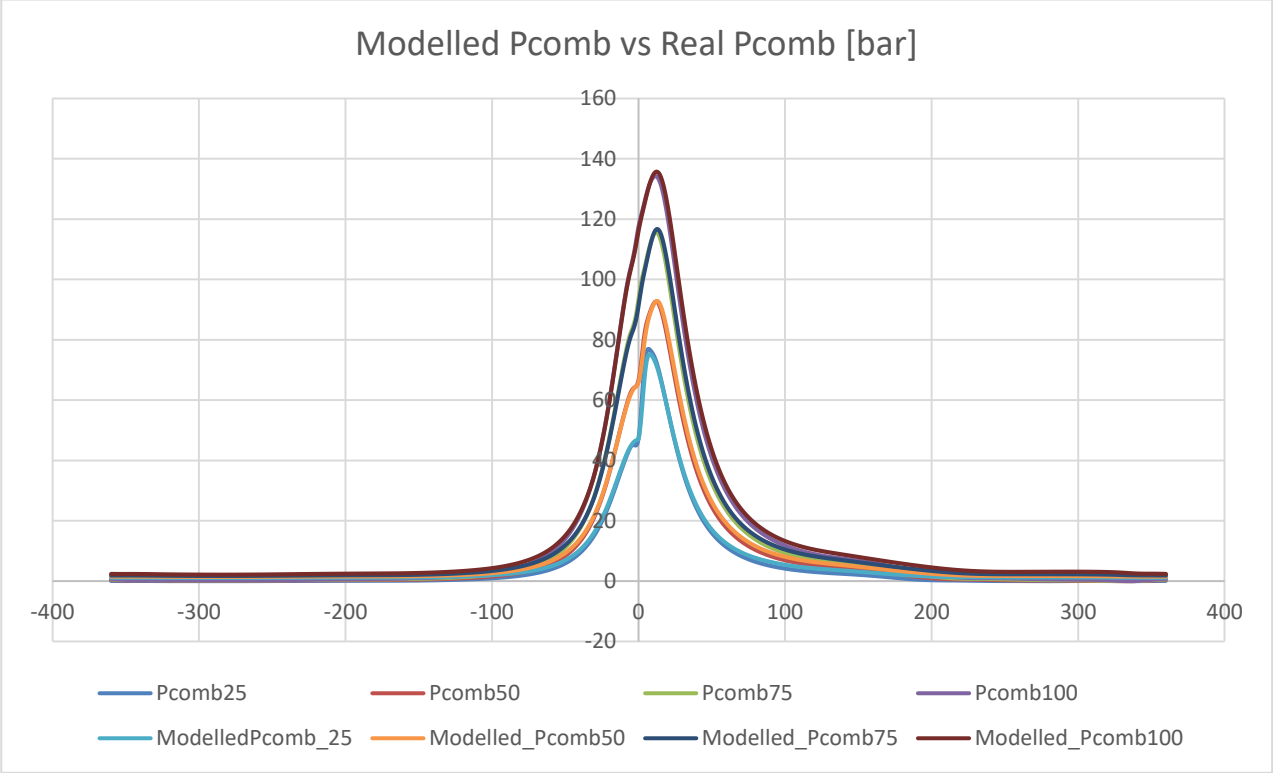
Karga desberdinekin egin ziren saiakuntzak, hurrengo potentziekin erlazionatzen direnak (ikusi taula 3)

Taula 3. Karga eta potentziak motorrean

KARGA [%]	POTENTZIA [kW]
25	100
50	200
75	300
100	400

6.2.1 Presioak

Karga guztietarako presio distribuzio teorikoak (simulazio monodimentsionalak) eta errealak ikusten dira irudia 40an. Oso balio antzekoak dituztela ikus daitezke, hau da, errore gutxikoak. Zenbat eta karga handiagoa, orduan eta goizago ematen da errekuntza eta altuago da presiomaximoa; aldiz presio maximoa ematen den unea antzeko (edo zertxobait beranduago) mantentzen da.



Irudia 40. Saiakuntza monodimentsionaletik lortutako presio distribuzioa

Konputazio fluido mekanikoan, hasierako balioak zuzen erabakitzeak erabat baldintza dezake simulazioaren konbergentzia; hortaz, karga egoera bakoitzarentzat (hidrogeno frakzio desberdinentzat ere) presioaren distribuzioa adieraziko zaio, noski, birabarkiaren angeluaren arabera. Gainera, modu honetan, ziklo oso bat simulatu ordez, angelu tarte bat erabakiko balitz, hasierako presioa tarte horretara egokitzeko aukera emango luke.

Inlet-aren presioa (sarrerakoa), hau da, ganbarara sartu aurreko, konprimatutako eta ondoren hoztutako airearen (edo aire + H_2) presioa, kargaren araberako da ere (ikusi irudia 19):

Taula 4. Airearen sarrera presio diesel soilarekin

Hozte sistema ostean neurtutako presioa			
Karga [%]	Presio erreala [bar]	Presio teorikoa [bar]	%Error
25%	1,13	1,16	2,65
50%	1,56	1,56	0
75%	2,04	1,95	4,42
100%	2,59	2,48	4,25

6.2.2 Tenperaturak

Tenperaturei dagokionez, garrantzia handia duten datuak hasierako baldintzak balioztatzeko aire sarreraren tenperatura eta irteerako gasen bataz besteko tenperaturak izango dira. Ez dira zuzenran konbustio ganbaratik atera; baizik eta turbokonpresore eta shozte-sistemaren irteeratik eta sarreratik,hurrenez hurren.

Taula 5. Airearen sarrera tenperatura diesel soilarekin

Hozte sistema ostean neurtutako tenperatura			
Karga [%]	Tenperatura erreala [ºC]	Tenperatura teorikoa [ºC]	%Error
25%	28,8	28,60	0,69
50%	35,50	34,78	1,33
75%	43,97	40,28	8,39
100%	48,97	47,5	3,00

Taula 6. Irteerako gasen tenperatura diesel soilarekin

Konpresorera sartu aurretik neurtutako tenperatura			
Karga [%]	Tenperatura erreala [ºC]	Tenperatura teorikoa [ºC]	%Error
25%	358,05	368,26	2,85
50%	458,65	431,33	5,96
75%	511,7	509,78	0,38
100%	556,83	552,69	0,74

Tenperatura hauek konstante gisa hartuko dira, suposatuta ganbaratik nahiko urrun kokatuko direla eta ez duela interferentzia handirik izango zonaldeak (ganbararen eragina leunduta distantziagatik).

6.2.3 Biraketa abiadura

Potentzia bakoitzarentzat biraketa abiadura desberdina izango du motorrak. Ezaguna da potentzia eta biraketa angeluarraren arteko erlazio kubikoa dela (beti ere motorra bera bada eta helize kurbako saiakuntzan probatu bada) [59], hau da, $N_e = kn^3$ eta potentzia handienadun kasuan (400 kW) biraketa abiadura 2100 rpm dela, orduan, karga desberdinentzat taula 7an adierazten bezalakoa izango da.

Taula 7. Motorraren karga egoera desberdinentzako abiadura angeluarra

KARGA [%]	POTENTZIA [kW]	ABIADURA ANGELUARRA [rpm]
25	100	1323
50	200	1667
75	300	1908
100	400	2100

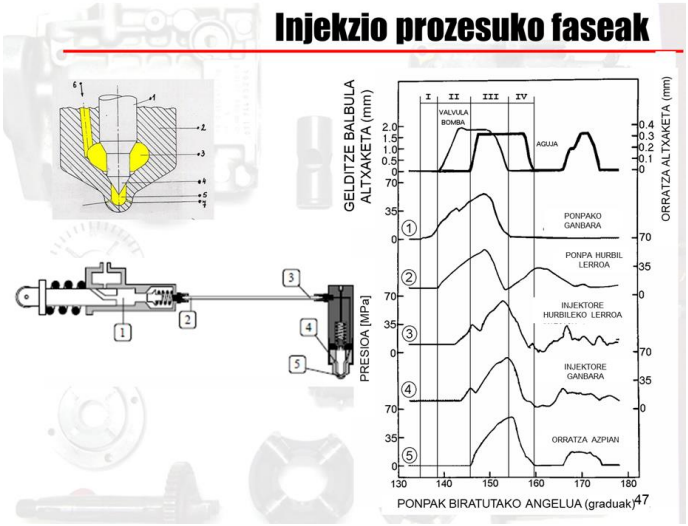
6.2.4 Emariak (hidrogeno barik)

Hidrogenoak emarien kalkuluan eragingo lituzkeen aldaketekin sartu aurretik, saiakuntza monodimentsionaletik ondorioztatu diren emariak komentatuko dira. Lehendabizi, erregaiari, dieselari, potentziarekiko dagokion erlazioa lineala da taula 8an ikus daitekeen bezala.

Taula 8. Erregai emari masikoa diesel soilarekin

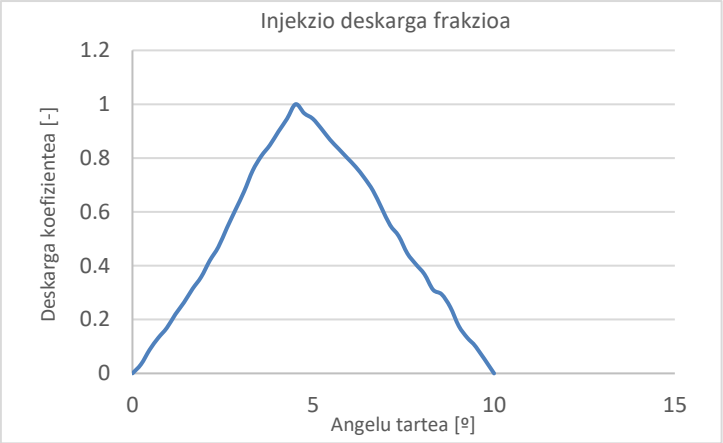
Erregai emaria			
Karga [%]	Emari masiko erreala [kg/s]	Emari masiko teorikoa [kg/s]	%Error
25%	20	22,3	11,50
50%	40	42,8	7,00
75%	60	63,6	6,00
100%	80	86	7,50

Bestalde, erregaia "injekzio zuzena" deritzon sistema bitartez sartzen da errekuntza ganbarara; hortaz, ezinbestekoa da emari kurba birabarkiaren angelu posizioaren menpe adieraztea. Kasu honetan, injektorea orratz motadun balbulaz osatuta dago, injekzioa tartea hasten denean, irudia 41an ikusten den bezala, barrurantz sartzen da erregai fluxua sorraraziz.



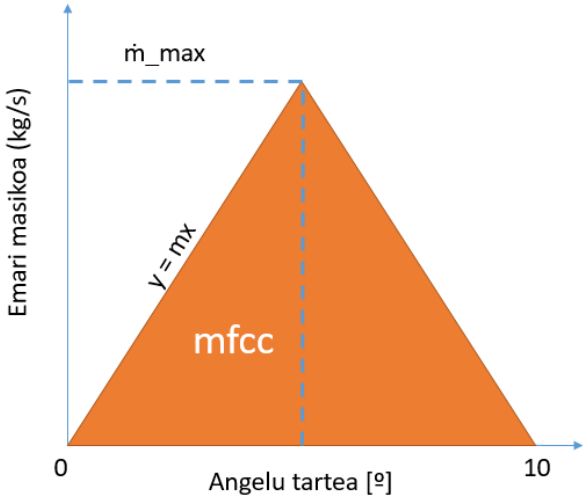
Irudia 41. Injekzio prozesurako faseak [32]

Irudia 41ean, azken grafikoari erreparatzen badiogu, hau da ardatz azpian dagoen egoerari, presioaren distribuzioa funtzio lineal (triangeluarra) baten bitartez hurbil daitekeela dirudi. Egia da, kasu orokor bat adierazten duela eta aztertu beharreko egoeran 30,4 MPa-era heltzen dela presio maximoa (irudia 35) Are gehiago, injekzio deskarga frakzioak lortu ahal izan dira aztergai den injektorearentzat; hain zuzen ere, 10º-ko iraupena duena (ikusi irudia 42)



Irudia 42. Injekzio deskarga frakzia cranck angeluaren menpe

Beste behin ere, distribuzio triangeluarra agertzen da. Zoritxarrez, ez da deskarga frakzioa aztergai, uneoroko emari masikoa baizik. Hala ere, hurbilpen triangeluarraz baliatuta hurrengo planteamendua egin daiteke:



Irudia 43. Injektorearen emaria crank angeluaren menpe

Injektorearen emaria, biraketa angelua eta angeluaren menpeko deskarga koefizienteak ezagunak dira; baita emariaren bilakaera ere, orduan, irudia 43ean agertzen den y funtzioa lortu daiteke:

- Ziklo oso batean injektatzen den erregai totala (m_{fcc}):

$$m_{fcc} = \frac{\dot{m}}{nZi}$$

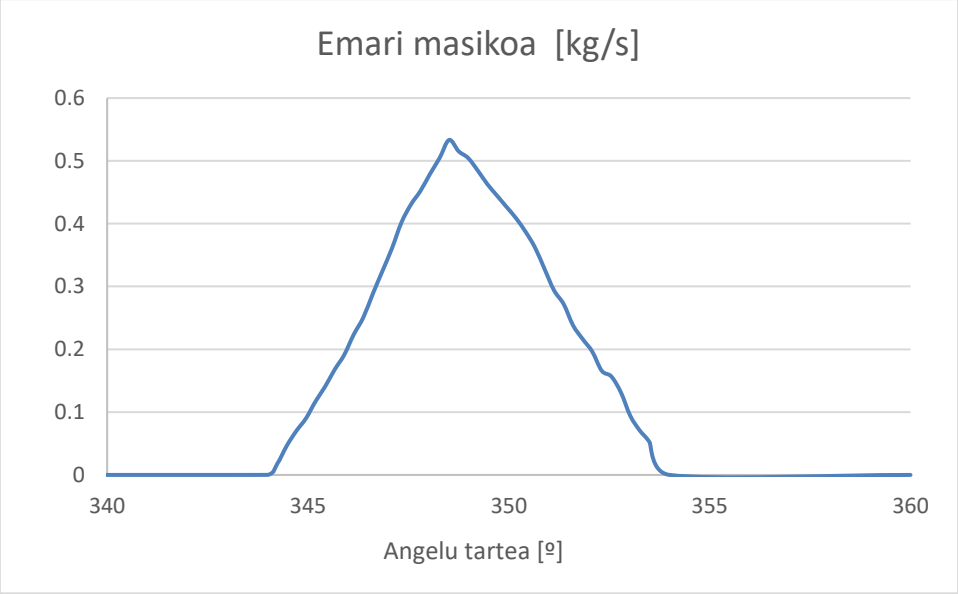
  $\dot{m}$, erregai emaria; *n*, biraketa abiadura; *Z*, zilindro kopura (6); *i* = 0,5, lau aldiko motorra izateagatik.

- Angelu tartea biraketa angeluaren bitartez, denbora *(t)* tartean bilakatu da.
- mf_{cc} irudia 43eko y=mx agertzen den azaleraren erdia litzateke; beti ere, angelu tartea denbora tartez ordezkatuta. Integrala horrela geratuko litzateke:

$$\frac{m_{fcc}}{2} = \int_0^{t_{10º}} mx\,dx \rightarrow \frac{m_{fcc}}{2} = \frac{m{t_{10º}}^2}{2}$$

- Biraketa angelu eta karga bakoitzaren m parametroa kalkulatuko da.
- Deskarga koefiziente bakoitza m-rekin biderkatuko da, eta horrela uneoroko masa emaria lortuko da.
- Azkenik, zikloko zein momentutan injektatu den adierazi beharko zaie (GGPa baino zenbat gradu aurrerago)
- Prozesua hau injektore baten emarirako balio du; hala ere, injektore bakoitzeko zuloaren emaria jakin nahiko balitz, emaria zulo kopuruengatik zatituko litzateke (suposizioa)

Irudia 44an 2100 rpm eta 80 kg/h erregaiarekin (400 kW), GGPtik 16º aurrerago injektatuta eta injektore oso batentzako egoera adierazten da.



Irudia 44. 400 kWko kasuarentzako injekzio emari masikoa ziklo batean

Aire emariari dagokionez, ezin izan dira saiakuntza monodimentsionaletatik lortu; hortaz, hornitzailearengana joan behar izan da eta antzekotasunak aplikatu. **ERANSKINAK lean** antzeko motor bati praktikatutako bi saiakuntza mota daude; bata, helize kurba jarraitzen duena eta bestea biraketa abiadura konstantea izanik karga desberdinak dituena. Helize kurban jarriko dugu bakarrik arreta, potentzia eta biraketa abiaduraren erlazioa kubikoa delako. Datu esanguratsuenen artean:

Taula 9. Airea emaria kalkulatzeko datuak

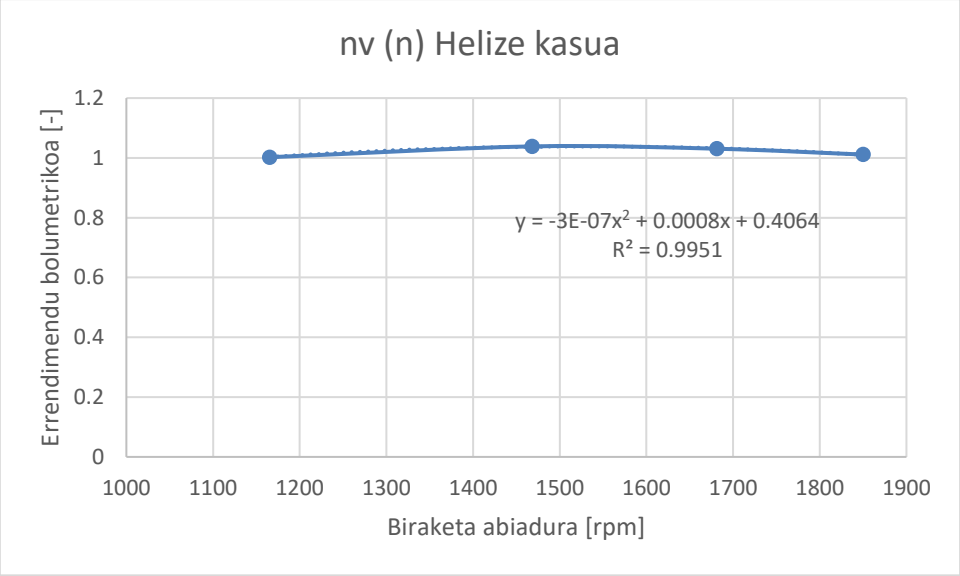
POTENTZIA [kW]	BIRAKETA ABIADURA [rpm]	AIRE EMARIA [kg/h]	SARRERA TENPERATURA [K]	SARRERA PRESIOA [atm]
303	1850	1785	310	2,0365
227	1681	1361	309	1,6713
152	1468	943	309	1,3159
76	1165	589	305	1,0592

.

Taula 9ko saiakuntzak antzeko motor batean egin dira; hala ere, suposatuko da errendimendu bolumetrikoren tendentzia bera jarraituko duela, geometrikoki motor bera baita doiketa batzuk aplikatu zaizkionak. Taula 9ko datuetatik, taula 10a lortuko da. Errendimendu bolumetrikoa unitatea baino handiagoa dela lortzen da, horren arrazoia aire hezea erabiltzea edo tenperaturaren neurketak izan dezakeen zehaztasun falta izan liteke. Hala ere, antzekotasuna praktikatzeko ez du arazorik emango.

Taula 10. Errendimendu bolumetrikoa helize kurba jarraitzen duen kasuan

POTENTZIA [kW]	BIRAKETA ABIADURA [rpm]	AIRE SARRERAREN DENTSITATEA [kg/m3]	ERRENDIMENDU BOLUMETRIKOA [-]
303	1850	2,3161	1,01113
227	1681	1,9069	1,03055
152	1468	1,5014	1,03847
76	1165	1,2244	1,00223



Irudia 45. Errendimendu bolumetrikoa helize kurba jarraitzen duen kasuan

Errendimendu bolumetrikoa, biraketa abiaduraren menpe adierazten baldin bada, argi eta garbi ikus daiteke joera parabolikoa nabarmentzen dela. Orain, irudia 45ean agertzen den funtzioari, proiektu honetan aztergai izango diren biraketa abiadurak sartuta, behar diren errendimendu bolumetrikoak lortuko dira.

Taula 11. Aztergai den potentzia kasuetarako errendimendu bolumetrikoa

POTENTZIA [kW]	BIRAKETA ABIADURA [rpm]	ERRENDIMENDU BOLUMETRIKOA [-]
400	2100	0,95005
300	1908	0,99937
200	1667	1,03308
100	1323	1,02676

Errendimendu bolumetrikoaren esanahia gogoratuz, sarrerako aire emaria lortu daiteke, sarrerako presio eta tenperaturak karga egoera bakoitzarentzat ezagunak baitira.

Taula 12. Aztergai den potentzia kasuetarako aire emari masikoa

KARGA [%]	SARRERA TENPERATURA [K]	SARRERA PRESIOA [bar]	AIRE EMARI MASIKOA [kg/s]
100	322,12	2,59	0,63895
75	317,12	2,04	0,48857
50	305,40	1,56	0,35034
25	301,95	1,13	0,20247

6.3 Mugimendua

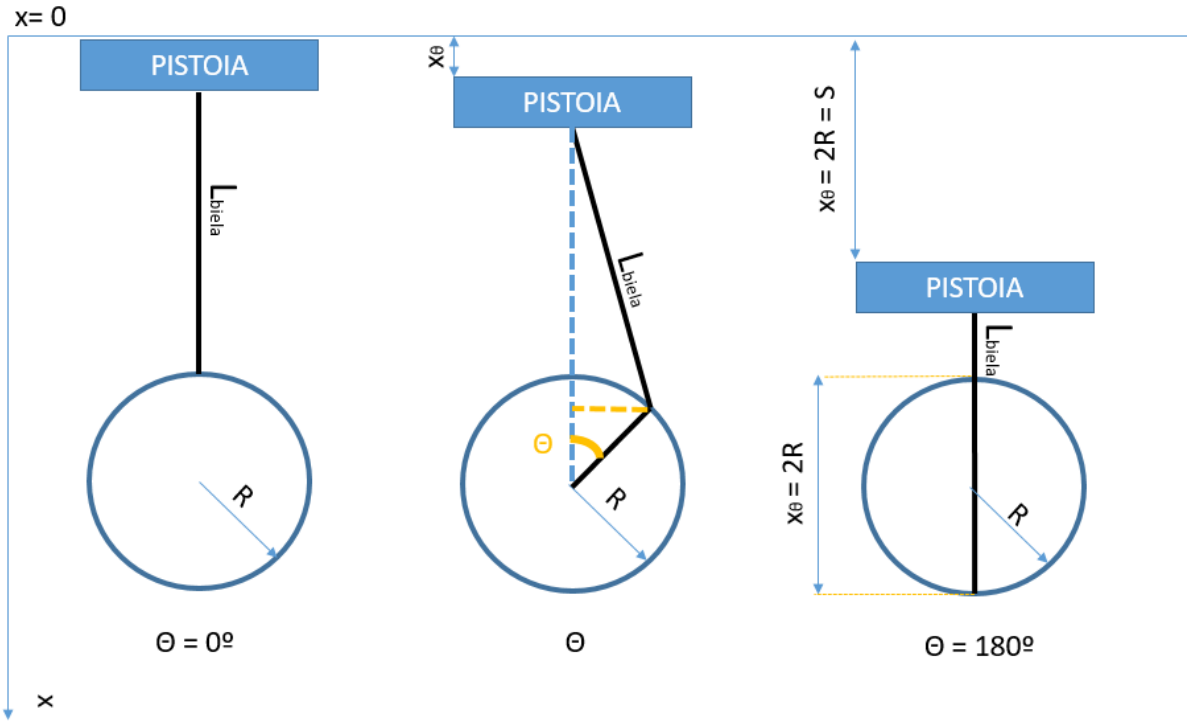
Bai pistoia bai sarrera eta irteera balbulak elementu mugikorrak dira. Hori dela eta, mugimendua ezaugarritu behar da formula matematikoen bitartez edota angelu posizio bakoitzerako elementuaren altxamendu adieraziz.

6.3.1 Pistoia

Pistoiaren mugimendua, motor guztietan ezaugarritzen da era berean; beti ere, pin offseta nulua bada, hau da, GGPan biela eta pistoia perpendikularrak badira Horretarako hiru datu bakarrik behar dira: Birabarkiaren erradioa, *R*, bielaren luzera, *L*, eta biraketa abiadura, *n*. Lehendabizi, biraketa abiadura [rpm] eta angelua [º] erlazionatuko dira, denboraren [s] menpe.

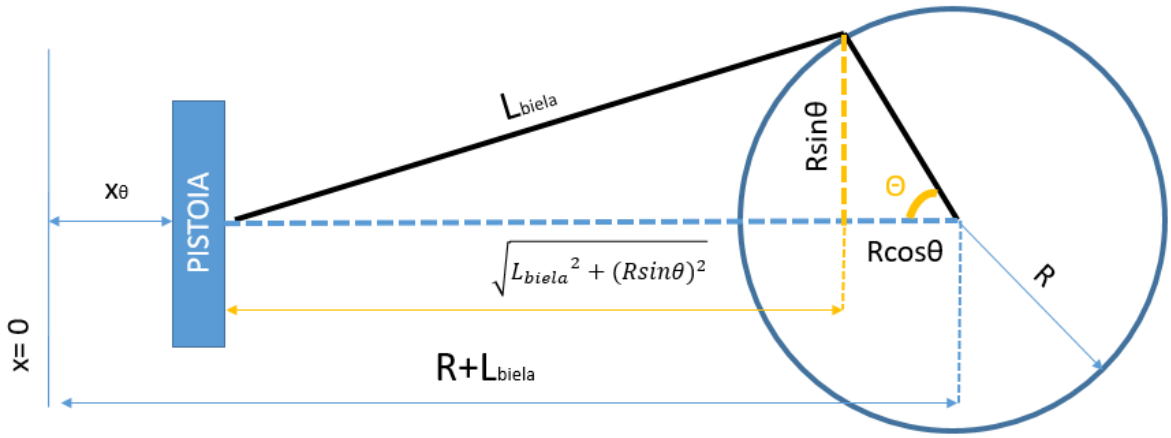
$$\theta = \frac{2\pi n}{60} t$$

θ, birabarkiak bertikalarekin sortzen duen angelua izanik, pistoiaren hiru posizio desberdin adieraziko dira irudia 46an, planteamendua errazteko asmoz.



Irudia 46. Pistoiaren hiru posizio esanguratsuak

Egoera orokorrari erreparatuz, erraz kalkulatu daiteke angeluaren menpeko ekuazioa:



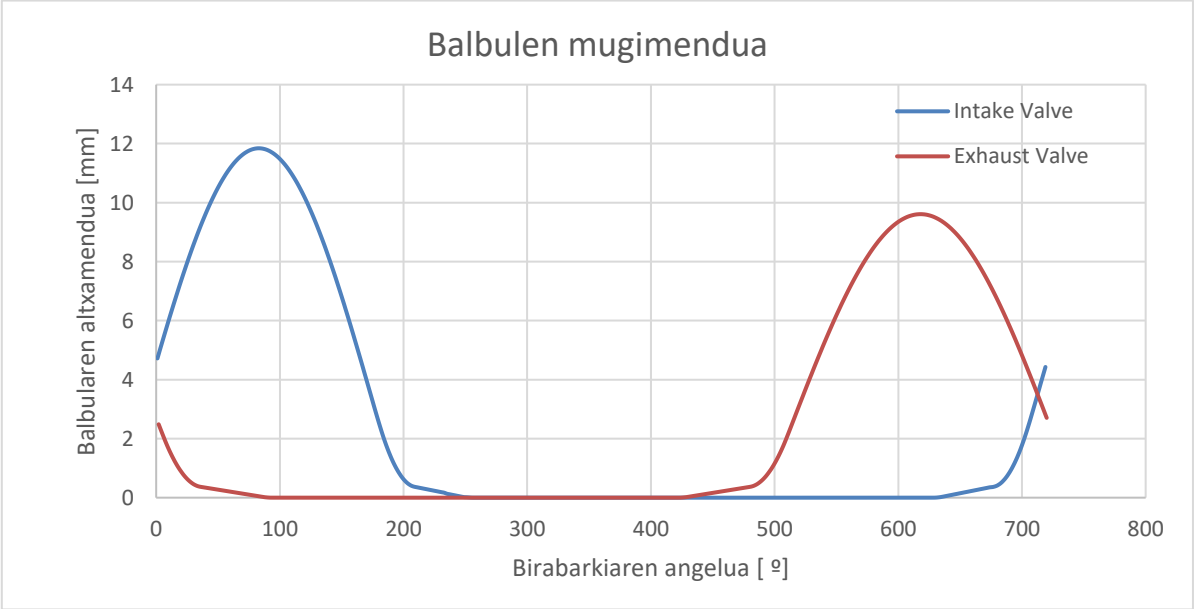
Irudia 47. Pistoiaren posizio orokorra biraketa angeluaren menpe

$$x_\theta = (R + L_{biela}) - Rcos\theta - \sqrt{{L_{biela}}^2 + R^2 sin\theta^2}$$

Bada ez bada ere, egiaztatu dira GGPan eta BGPan x=0 eta x=S (ibiltartea) ematen dutela, hurrenez hurren.

6.3.2 Balbulen mugimendua

Balbulen mugimendua, aldiz, taularatutako datuekin lortu dira. Beste behin, θ = 0º angelua pistoia GGP dagoenean hartu da, karga berritzen eta deskarga prozesuaren artean, hain zuzen ere. Irudia 48an bi balbulen altxamenduak adierazi dira.



Irudia 48. Balbulen altxamendua biraketa angeluaren menpe.

Argi eta garbi, ikus daiteke karga berritze eta deskargak akoplatu egin direla, sarrera eta irteera balbulak aldi berean irekita baitaude. Azken finean, inertziak eta presioak aprobetxatzea du helburu, horrela erraztasun handiagoz sartuko da karga hondakinak kanporatzera behartuta.

6.4 STAR CCM+ (In-Cylinder adds on)

STAR-CCM+ simulazio konputazionaleko softwarea da, Siemens Digital Industries Software-k garatua. Nagusiki fluido konputazionalen dinamikan (CFD) eta bero-transferentziaren analisian erabiltzen da, industria mota askotan. Software honek modelatzeko gaitasun aurreratuen aukera zabala eskaintzen du, eta horrek fenomeno konplexuak simulatzea ahalbidetzen du, hala nola turbulentzia-eredu desberdinak dituzten fluxu zurrunbilotsuak, fluxu multifasikoak, fluxu-egitura desberdinen arteko elkarreragina eta fenomeno multifisikoak. Gaitasun horiei esker, STAR-CCM+ funtsezko tresna bihurtu da fluidoak eta bero-transferentzia dituzten sistemen diseinuan eta analisian lan egiten duten ingeniari eta zientzialarientzat.

STAR-CCM+ sistemak prozesatu aurreko eta osteko ingurune integratua du, simulazio-prozesua nabarmen sinplifikatzen duena. Tresna intuitiboekin, erabiltzaileek erraz presta dezakete ereduaren geometria, ingurune baldintzak zehaztu, simulazioak konfiguratu eta gauzatu, eta emaitzak modu eraginkorrean bistaratu eta aztertu.

STAR-CCM+ sistemaren ezaugarri nabarmenetako bat konputazio paraleloko sistemak ahalik eta gehien aprobetxatzeko duen gaitasuna da. Paralelizazio-teknika eraginkorrak erabiliz, softwareak prozesamendu-nukleo askoren artean banatzen du lan-karga, eta, horri esker, simulazio handiagoak eta konplexuagoak egin daitezke arrazoizko denboran. Gaitasun hori funtsezkoa da simulazio zehatzak behar dituzten mundu errealeko ingeniaritza-arazoei aurre egiteko. Bilboko Ingeniaritzako eskolako Ingeniaritza Energetiko Saileko kalkulu zentroan 64 nukleodun eta 2 TB ordenagailua erabili da. Zehazki, 48 nukleo erabili dira eta gutxi gorabehera simulazioak 3-4 egun behar izan ditu simulazio bakoitza guztiz osatzeko, 10 GBko lekua behar izanik simulazio bakoitzak.

Praktikan, STAR-CCM+ aplikazio industrial askotan erabiltzen da. Adibidez, automobilgintzan ibilgailuen aerodinamika, motorren errekuntza eta esekidura-sistemetako fluido-egitura elkarreragina simulatzeko erabiltzen da. Industria aeroespazialean, hegazkin eta suzirien inguruko fluxua simulatzeko erabiltzen da. Energiaren industrian, turbina eta erreaktore nuklearretako bero-transferentzia simulatzeko erabiltzen da, besteak beste.

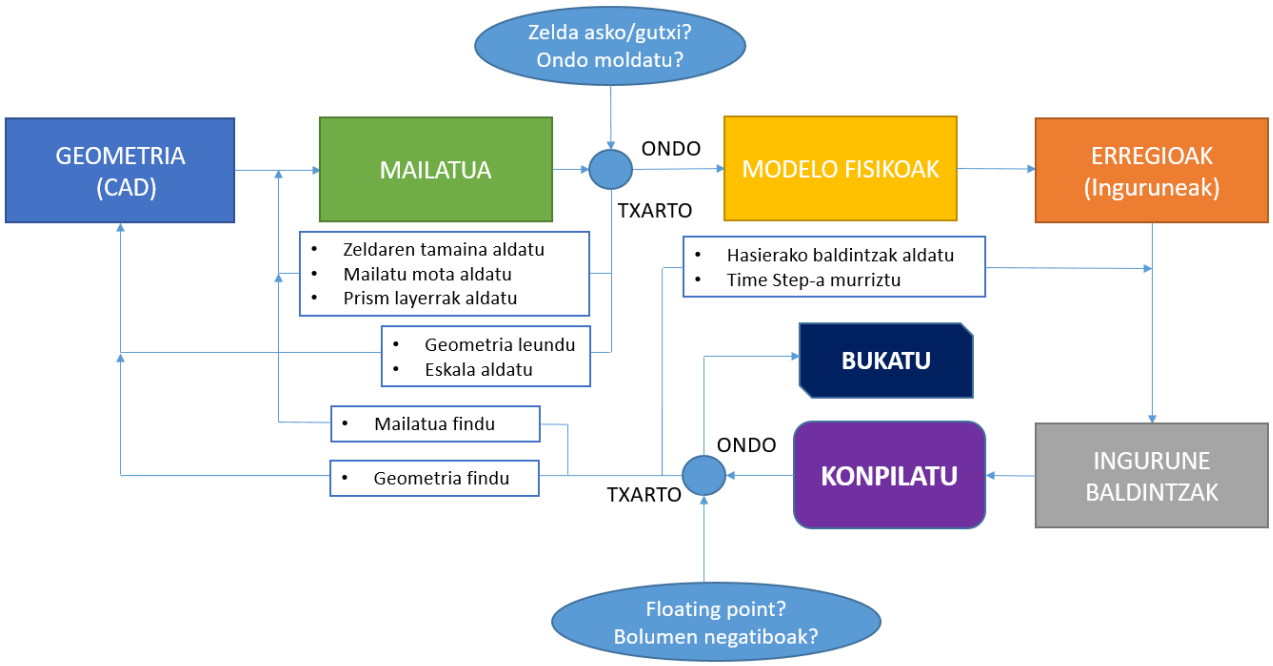
STAR-CCM+ In-Cylinder paketea STAR-CCM+ softwarearen hedapen espezializatu bat da, barne-errekuntzako motorren errekuntza-prozesuen simulazioan zentratzen dena.

STAR-CCM+ In-Cylinder paketearen ezaugarri nagusiak hauek dira:

- **Errekuntzaren modelatzea:** Paketeak tresna aurreratuak ematen ditu barne-errekuntzako motorretan errekuntza modelatzeko. Horren barruan sartzen da su hartzea simulatzeko gaitasuna, sugarraren hedapena, errekuntza-produktuen eraketa eta errekuntza-prozesuarekin lotutako beste alderdi batzuk.
- **Erregai-injekzioaren modelatzea:** Errekuntza-ganberan erregaia injektatzeko prozesua simulatzea ahalbidetzen du, erregaiaren atomizazioa, airearekin nahastea eta erregaiak ganbera barruan duen banaketa espaziala barne.

- **Turbulentziaren modelatzea:** Paketeak eredu aurreratuak ditu errekuntza-ganberan turbulentzia simulatzeko, eta hori funtsezkoa da airea eta erregaia nola nahasten diren eta errekuntza-prozesuan sugarrak nola hedatzen diren ulertzeko.
- **Bero-transferentzia modelatzea**: Errekuntza-gasen, errekuntza-ganberako hormen eta motorraren beste osagai batzuen arteko bero-transferentzia simulatzea ahalbidetzen du, eta hori garrantzitsua da motorraren eraginkortasun termikoa eta sistemaren barruko tenperatura-banaketa zehazteko.
- **Errekuntzaren kimika modelatzea**: Paketeak errekuntza-prozesuan gertatzen diren erreakzio kimiko konplexuak modelatzeko gaitasunak ditu, eta horri esker, nitrogeno oxidoak (NOx) eta erre gabeko hidrokarburoak (UHC) bezalako kutsatzaileen eraketa azter daiteke, baita motorraren eraginkortasuna optimizatu ere.

CFD simulazio guztietan jarraitu beharreko prozedura bera da: Geometria batetik hasita, mailatua edo sarea (elementu finituen diskretizazioa) egiten da, gune interesgarriak identifikatuz eta simulazioaren eskala aintzat hartuta; ondoren baldintza fisikoak ezartzen zaizkio, aurretik modelo fisikoak erabakita eta konpilatzen saiatzen da. Prozedura oso sinplea dirudi, baina diskretizazio falta, karga handiegiak edo kalkulu arazoengatik ("overflow") atzerako pausuak egin behar izaten dira askotan. Irudia 49an simulazio zehatz honetarako jarraitutako fluxu diagrama azaltzen da.



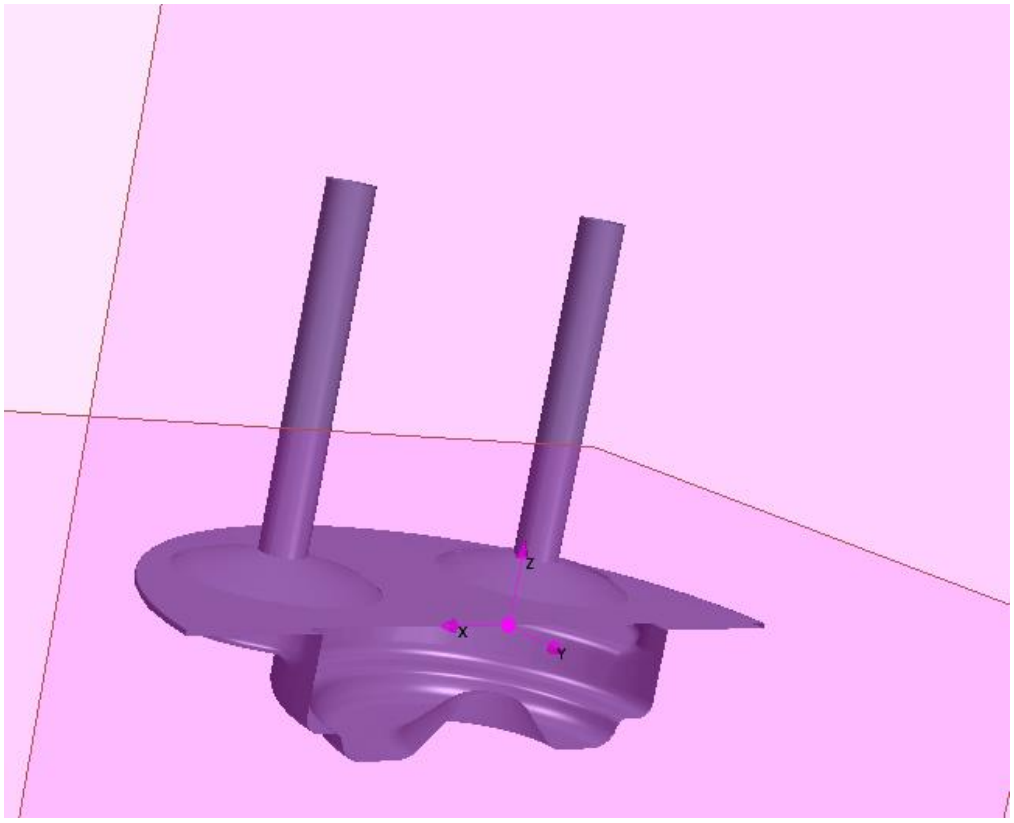
Irudia 49. CFD simulazioarako jarraitutako fluxu diagrama

Motor baten simulazioa oso konplexua da. Alde batetik, elementu mugikorrak daudelako (balbulak eta pistoia) eta horrek fluxu domeinua tamainaz aldatzen du; hau da, diskretizazioa prozesua (mailatua) behin eta berriro egin beharko da; bestetik, simulazioa oso pisutsua izango da, erreakzio kantitate handia dela medio. Hori dela eta, antolakuntzak berebiziko garrantzia hartuko du.

6.4.1 Geometria

6.1 atalean komentatu bezala, ahal izan den heinean geometria originala mantendu. Hiru gorputz desberdinetan antolatu da, higidura independenteak behartuta: "engine-fluid" (fluidoz beteta egongo den zonaldea) eta "exhaust and intake valves" (sarrrera eta irteera balbulak). Azkenengo hauek solidotzat hartuko dira bakarrik. Gogoratzearren, "engine-fluid" atala zonalde desberdinetan antolatu da: "head" (zilindroaren burua), "liner" (zilindroaren pareta, tamaina aldatuz joango dena pistoia mugitzen den heinean), pistoia (deformatu barik, posizioaz aldatzen joango dena), sarrera eta irteera portuak (fluidoaren pareta mugakideak), eta azkenik, "inlet"-a (aire sarrera) eta "outlet"-a (gas produktuen ihesa). Gainera, zilindroa simetrikoa denez, gorputz erdiarekin egingo da simulazioa. Hobeto ulertzeko ikusi irudia 39.

Simulazioak elementu mugikorrak izango dituenez, berebiziko garrantzia hartuko du espazioa ondo definitzea. Erreferentzia puntu gisa, (0,0,0) Injektorearen posizioa hartu da, edo beste era batera esanda, zilindro buruaren zentroa. Mugimendu guztiak ardatz bertikalean ematen direnez, Z ardatza esleitu zaio.



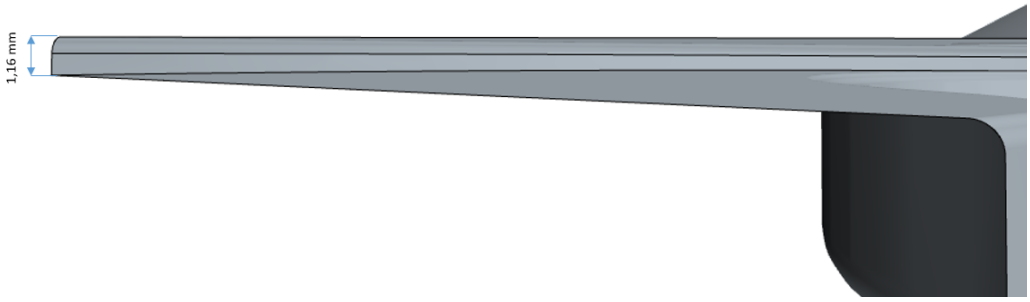
Irudia 50. Modeloaren erreferntzia ardatzak eta jatorrizko puntua

Gorputzen arteko tolerantziei dagokionez, fluxu egokia garatzeko eta errealitateko geometriatik ahalik eta gutxien aldentzeko asmoz, behin eta berriro hasieratu da modelo geometrikoaren mailatua. Ikusi da hurrengoko distantzia minimoekin nahiko dela bolumen negatiboa edota gorputzen arteko akoplamenduak ekiditeko:

- **Liner-aren** distantzia (pistoia eta zilindro buruaren arteko tolerantzia): 1,16 mm.
- **Balbulen hasierako posizioa** (erabat itxita daudenean)
    - Balbularen goi aurpegia eta zilindro buruaren artean: 0,7 mm

- Balbularen zabalera: 0,5 mm + 1,5 mm
- Erreferentzia puntutik 2,7 mm-ra kokatzen da.

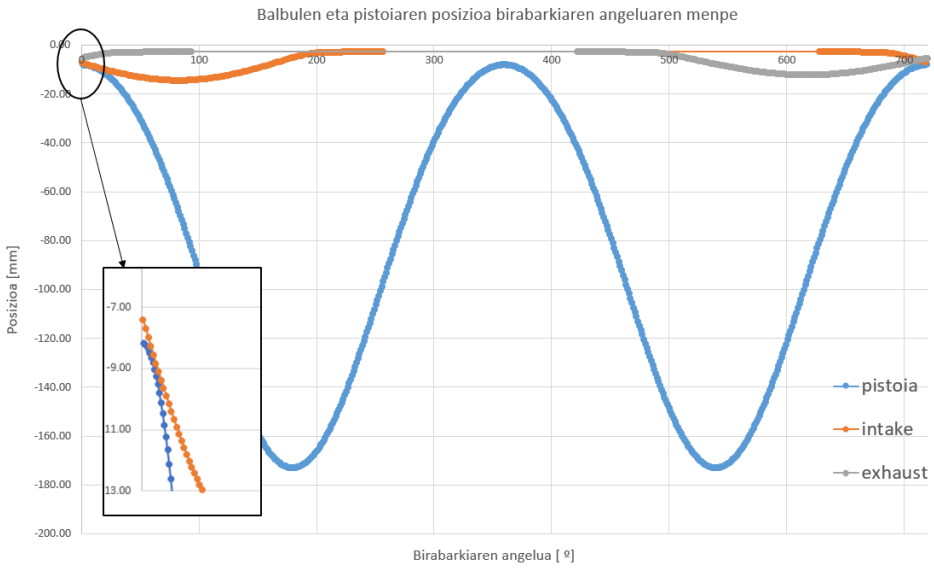
- **Pistoiaren zuloa** (balbula pistoia gainjarri egiten diren zonaldea): 7 mm



Irudia 51. Lineraren distantzia

Irudia 52.Pistoi eta balbularen distantzia esanguratsuak

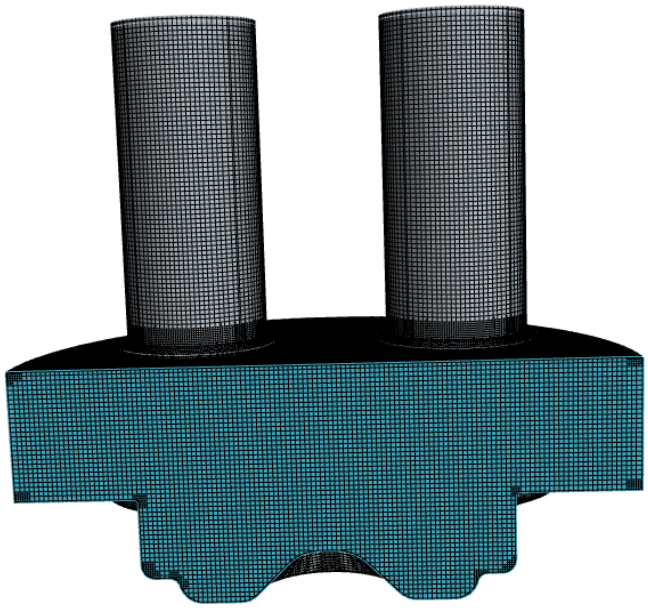
Bada ez bada, hiru elementu higikorren mugimendua irudikatu da, haien arteko talkarik ematen ez dela egiaztatzeko; baita gune kritikoak identifikatzeko ere. Birabarkiak 13º birtzean ematen da gune hori; hau da, sarrera balbula eta pistoiaren arteko distantzia 0,3 mm-ko denean, hain zuzen ere.



Irudia 53. Pistoia eta balbulen mugimendua grafikatuta

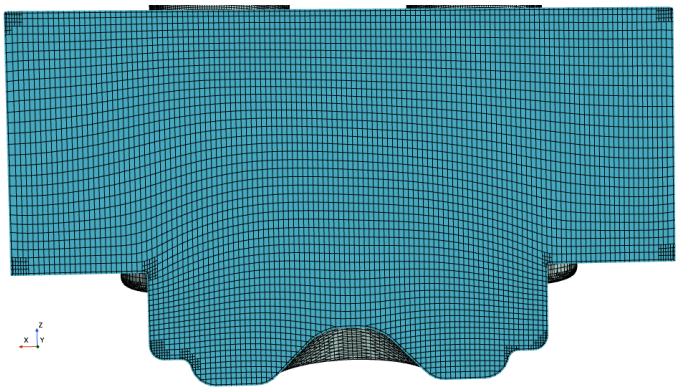
6.4.2 Mailatua

CFD simulaziotan, mailatuaren diseinua atal konplexu eta zailenetarikoa izaten da. Funtsean bolumen jarraituaren diskretizazioa da, hau da, jarraitutzat hartzen diren gorputzak edo fluxuak bolumen txikiagotan zatitzen dira; ondoren, modelo osoari ezarriko zaizkion ekuazio fisiko kimikoak edota aldagaiak bolumen txiki (gelaxka) horietako bakoitzean kalkulatuko direnak. Baldintza askoren menpekoa izan daiteke mailatua: interes gune handiko zonaldea izateagatik, geometriaren tamainagatik, gradiente/aldaketa handiko zonaldea izateagatik, etab.



Irudia 54. Errekuntza ganbararen mailatua momentu zehatz batean

Gutxi balitz, geometria aldatzen doan heinean, kalkulatutako mailatuak baliogarri izateari uzten dio. Modeloa handiagoa/txikiagoa bihurtzen da eta diskretizazio berria beharko du, pistoiaren muimendua dela eta. Prozesu horri "remesh" (birmailaketa) deitzen zaio. Hori dela eta, gelaxka kopurua aldakorra da ziklo osoan zehar. Birmaila ezean, irudia 55eko egoera okertzen doa. Horregatik, kontrol parametroak ezarriko zaizkio, irizpide batzuk betetzen ez dituenean, programak automatikoki "remesh"-eatzeko, momentu horretara arte konpilatutakoa galdu gabe.



Irudia 55. Mailaren deformazioa

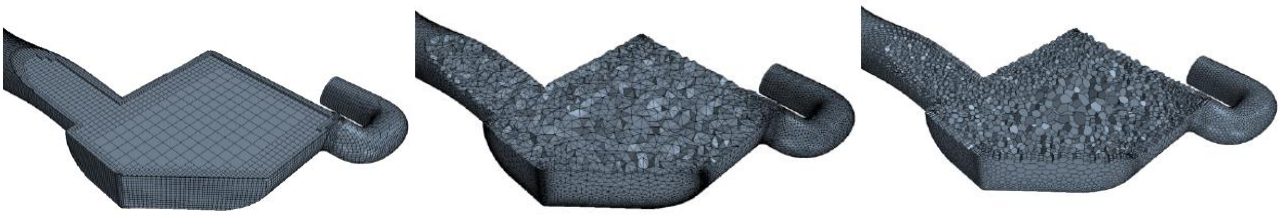
Mailatu dinamikoak agertzen direnean, aztergai dena kasu, hiru atal desberdinetan antolatuko da: hasieran, oinarrizko parametroak ezarriko dira modelo osoari aplikatu zaizkionak; ondoren,

adierazgarriak izango diren zonaldeetan (balbularen ireki/ixte zonaldea, injekzio zonaldea, eta abar) mailatu gehigarriak ezarriko dira; azkenik, "morphing" (jariakinaren domeinua deformatzeko prozedura) eta "remesh"-eatzeko baldintzak aplikatuko dira.

6.4.2.1 Oinarrizko parametroak

STAR CCM+ programan, hiru diskretizazio modu nagusi existitzen dira:

- **Trimmed (hexaedrikoa)**: Hexaedroak erabiltzen ditu definizio eremua diskretizatzeko. Oso emaitza zehatzak ematen ditu eta tetraedriko baino eraginkorra da ikuspuntu konputazional batetik, bere forma simetrikoa dela eta. Geometria simetriko eta erregularretan erabiltzen da eta oso aproposa da fluxu geldikor eta laminarrak simulatzeko [60].
- **Tetraedrikoa**: Tetraedroak erabiltzen ditu definizio eremua diskretizatzeko. Azkar sortzen dira eta geometria oso konplexuetan edo ezaugarri irregularrak dituenean metodo aproposa izaten da. Fluxu iragankorretarako erabiltzen da; baita fluxua erregimen solidoengatik aldentzeko kasuak (zimurtasun edo kurbatura handiak) daudenean ere edota kontra-fluxu adierazgarriekin [60].
- **Poligonala**: Definizio eremua diskretizatzeko, 2D kasuetan, poligonoak erabiltzen ditu; 3Dn, aldiz, poliedroak. Gainazal leun eta erregularrez osatutako geometrietan erabiltzen da. Fluxu laminar eta geldikorrentzat aproposa da, beti ere geometria erregularra eta simetrikoa bada [60].



Irudia 56. STAR CCM+ko mailatu hexaedriko, tetraedriko eta poligonala (ezkerretik eskumara) [60]

Errekuntza ganbaretan geometria nahiko sinple eta erregularra da eta fluxua erabat iragankorra, non gradiente eta zurrunbilo handiak ematen diren. Kalkulu kimiko eta termiko anitz burutuko dira eta zehaztasun handikoak izan beharko dira; gainera, sarrera eta irteerekin interferentziak ahal diren heinean ekidin behar dira (sarrerako eta irteerako baldintzak berdin mantendu). Arrazoi guzti hauengatik aukeratu den **metodoa hexaedrikoa** izan da, nahiz eta fluxua geldikorra eta laminarra ez izan.

Forma alde batera utzita, mailatuaren eskalaren ikuspuntutik, geometriaren tamaina ikusita, 1 mm-ko oinarria aplikatu zaio; horren egokitasuna ikusteko simulazioan eman den zehaztasuna erreparatu zaio eta egokitzat hartu da. Bestalde, zilindroko paretak eta fluxuaren arteko elkarrekintza adiabatikotzat hartu denez eta biskositateak garrantzia txikia duenez, "prism layer" (CFDn, solidoen gainazaletik gertuko gelaxketan gehitzen diren geruzak kalkulu zehatzagoentzat) bakarra aplikatu zaio, 0,25 mm zabalerarekin.

Zeldaren tamaina maximoa nahikotxo mugatu da zurrunbilotasun eta gradiente maila altuengatik (oinarriaren eskalan); irizpide bera ezarriko zaio ere gainazalari ere ("target surface size" bera), baina

kasu honetan, minimoa ere mugatuko da (0,5 mm). Azken finean, zehaztasun handiagoko zonaldeetan, beharrezkoa den kasuetan, maila finagoa bilatuko da bolumen kontrolen bitartez.

Taula 13an mailatu orokorrari dagokion parametro esanguratsuak bildu dira:

Taula 13. Mailatuaren oinarrizko parametroak

Mailatuaren oinarrizko parametroak	
Mailatu mota	Trimmed (hexaedrikoa)
Mailatuaren oinarriaren tamaina	1,00 mm
Number of prism layers	1
Prims layers total thickness	%25 (0,25 mm)
Prism layers streching	1,0
Zeldaren tamaina maximoa	%100 (1,00 mm)
Target surface size	%100 (1,00 mm)
Gainazal birmailatzeko modua	Triangeluarra
Gainazal zeldaren tamaina minimoa	%50 (0,50 mm)

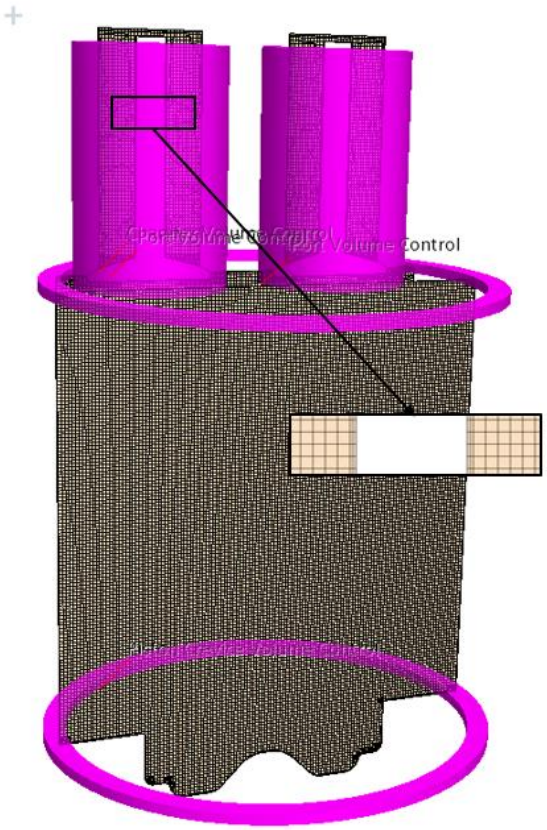
6.4.2.2 Kontrol bolumenak

Bai mugimenduak bai kalkulu fluidodinamikoak baldintzatuta, mailatu orokorra baino zehaztasun handiko zonaldeak findu dira:

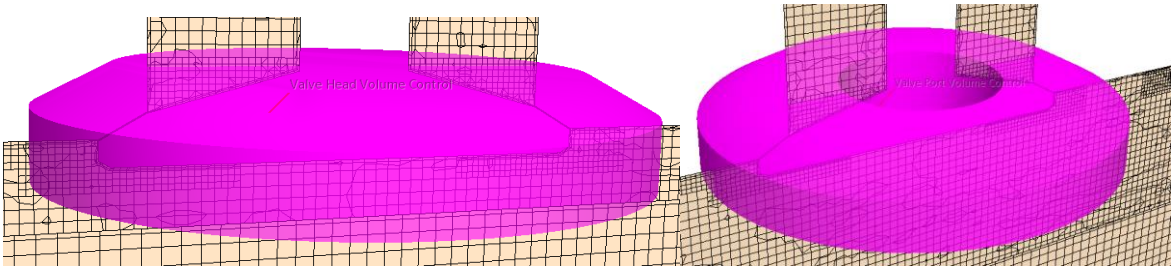
- **Cylinder Chamfer (zilindroaren bisela, alaka**): Zilindroaren geometria dela eta, zilindro atorra (liner) eta zilindro buruaren arteko angelu zorrotza leuntzeko kontrol bolumena da. Pistoia GGP puntutik gertu dagoenean, fluido gelaxkaren kalitatea bermatzen du (momentu kritikoa izaten da). Oinarrizko parametroaren gainean %50eko tamaina murrizketa ezarri zaie horko gelaxkei.
- **Cylinder Piston Crevice (pistoiaren zirrikitua**): Pistoiaren geometria dela eta, linerra (zilindro pareta) eta pistoiaren arteko angelu zorrotza leuntzeko kontrol bolumena da. Pistoia GGP puntutik gertu dagoenean, fluido gelaxkaren kalitatea bermatzen du (momentu kritikoa izaten da). Oinarrizko parametroaren gainean %50eko tamaina murrizketa ezarri zaie horko gelaxkei.
- **Port Volume Control (irteera/sarrera portuak):** Portuetan, nahiz eta erreakziorik ez gertatu, fluxuaren norabidea egonkortu behar da; gainera, balbularen zurtoina mugitzen joango denez, abiadura gradienteak ere kontrolatuko dira. Are gehiago, bertan, fluxuaren bidea oztopatuta egongo da, zikloaren tarte handi batean (balbula itxita dagoenean), hortaz, mailatu fina ezinbestekotzat hartu da. Oinarrizko parametroen gainean, %100eko gelaxka tamaina ezarri da eta pareten gainazalean bi kontrol geruza ezarri dira ("prism layers").
- **Valve Port Volume Control (balbularen eragina portuan):** Errekuntza ganbararen sarrera/irteera balbularen altxamenduak baldintzatzen du fluxuaren garapena atal honetan. Sekzio handiago/txikiagoa izan dezake momentuan arabera eta horrekin abiadura gradiente oso aldakorra; orduan, mailatu finagoa eskatzen du. Oinarrizko tamaina baina %50 txikitu da. Are gehiago, balbularen gainazalak eragin handia izango du fluxuan, hortaz, bi geruzekin diseinatu da kontrol bolumena. Kontrol bolumena beti egongo da leku berean, edozein dela ere balbularen altxamendua (estatikoa).
- **Valve Face Volume Control (balbularen goi gainazalak):** Balbularen formak irteera/sarrera fluxuaren norabide eta garapenean eragingo du. Hori dela eta, beharrezkoa

da balbularekin batera mugitzen den kontrol bolumena diseinatzea. Mailaketa finagoarentzat "Valve Port Volume Control"-aren parametro berak hartu dira.

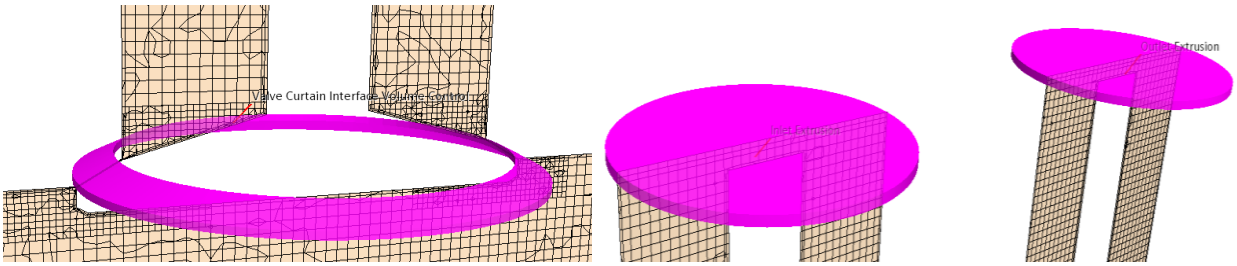
- **Valve Curtain Interface (Balbulen ixte tolerantziarentzat):** Balbulak erabat ixte egotetik gertu daudenean (ixte tolerantzia baino bost aldiz handiago denean) aktibatu egiten da, berriro irekitzen hasten den arte (tolerantzia irizpide berarekin). Kontrol bolumen honen bitartez findu egiten da mailatuaren gainazala eta geruzen arteko zabalera txikitu (defektuz %25 ezarri da).
- **Inlet/Outlet Extrusion (Sarrera/irteera fluxuen egonkortzea):** Direct Mesh bati esker (gainazalak soilik hartzen dituen maila) posible da fluxuaren garapena egonkortzea; batez ere oso distantzia laburrak direnean. Mailatua estruitzeak emariaren luzera handitzen du zelula kopuru baxua mantenduz. Gainera, alderantzizko fluxua eta konbergentzia ez eragozteko aukera ematen du. Irteera eta sarrera baldintzak aintzat hartzeko modua da.



Irudia 57. Port Volume Control (goian), Cylinder Chamfer Control (erdian) eta Cylinder Piston Crevice (behean)

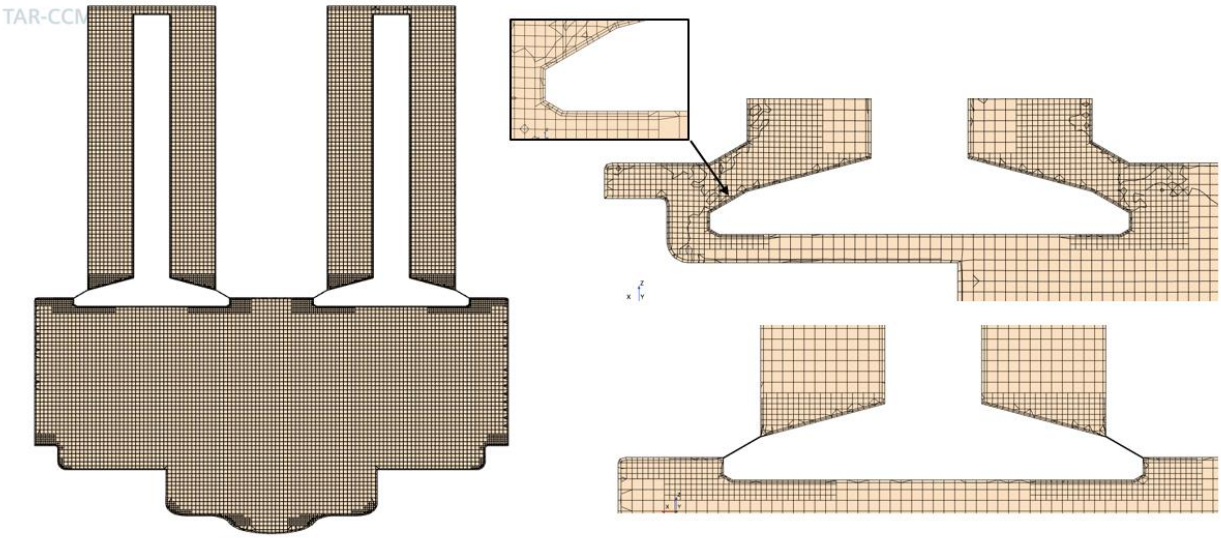


Irudia 58. Valve Port Volume Control (ezkerrean) eta Valve Face Volume Control (eskuman)



Irudia 59. Valve Curtain Interface (ezkerra) eta Inlet/Outlet Extrusion (eskuma)

Mailatuaren argazki batzuk atera dira, gune desberdinak eta kalitateak ikusteko (irudia 60)



Irudia 60. Mailatuaren argazkiak

6.4.2.3 Remesh / morphing

"Morphing" metodoari esker mugimendua ezartzeko aukera ematen du. Pistoia eta balbulak mugiarazteko oso aproposa da, mugimendua ahalbidetu ez ezik bere mailatua deformatzeko aukera ematen du, nahi den posiziora egokituz. Funtzionamendua oso sinplea: mugimendua esleitu nahi zaion gainazalak aukeratu behar dira; ondoren, gainazal horien artean mugatuta dauden gelaxkak hartuko ditu eta, defektuz, gelaxka horien erpinak hartuko ditu kontrol puntutzat (kontrol puntu gehiago ezartzeko aukera dago ere); horietan ezarri nahi izan zaion mugimendua egingo du; azkenik, behin geometriari moldatu, kalitate parametroak bete (aurrerago azalduko dira) eta konbergentzia baldintzak bete, konpilazioarekin hasiko da, forma berriko gelaxkatan kalkuluak eginez.

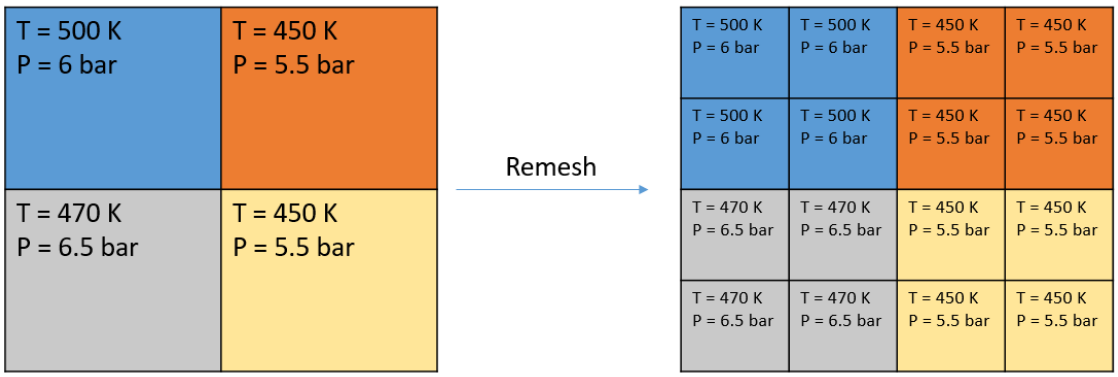
Kontuan izan behar da, metodo honen bitartez ez direla gelaxka berriak sortzen, deformatu baizik. Deformazio horiek burutzeko modu asko ditu STAR CCM+. Kasu honetan erabili direnak:

- **Fixed:** Gainazal estatikoak deritze, denboran posizioz aldatzen ez direnak. Horien artean zilindro burua, irteera/sarrera portuak eta inlet/outlet.
- **Displacement**: Formula edo taularen bitartez, kontrol puntuak mugiarazten dira. Esaterako, balbula bien gainazal guztietan eta pistoiaren gainazalean egin den bezala.

- **Constraint**: Beste gorputz baten edo batzuen mugimendua dela eta, deformatzera behartu diren gainazalak dira, linerra kasu. Pistoia mugitzen doan heinean, linerra luzeraz aldatzen doa ere, zilindro burua finko mantendu baita. Constraint aukerak, deformazioa ahalbidetzen du, beti ere deformazio hori ze norabidean ematen den adierazita (z ardatza).

Argi dago, errekuntza ganbaran bolumena aldatuz doala eta horrekin batera, mailaren egitura deformatuz joango dela era berean. Deformazioa oso handia denean, aurre-kalkulatutako diskretizazioa ez da baliogarria izango: alde batetik, gelaxka kopurua handiegia/txikiegia izango delako bolumen berriarentzat; bestetik gelaxkaren forma jatorri hexaedrikotik oso urrun egongo delako. Fenomeno hori ekiditeko deformazioari mugak jarri beharko zaizkio eta diskretizazio berria aplikatu. Horretako, **"remesh"** metodoa aplikatuko da.

"Remesh" metodoa aplikatzerakoan, gelaxka berrien hasieratze datuak (hasierako baldintza gisa hartuko dituena), zaharkitutako gelaxka egituratik hartuko ditu. Kontuan izan behar da, modeloaren geometria ez dela aldatzen prozesu honetan, orduan, gelaxka berriak aurreko gelaxkaren baten espazio zati bat hartuko lukete eta zelda zahar horri dagokion datuak hartuko lituzkeela hasierako datutzat. Hobeto ulertzeko ikusi irudia 61.



Irudia 61. "Remesh"-eatzean gelaxka berrien hasierako datuak extrapolatzeko modua

Birmailatzeko baldintzekin hasi aurretik, komeni da baldintzak planteatzeko erabili diren parametroak azaltzea:

- **Cell Skewness Angle:** Gelaxka baten aurpegien angeluek poliedro erregular baten angelu idealekiko duten desbideratzea neurtzen du. Angelu txikiagoak gelaxka erregularragoa adierazten du, eta, beraz, kalitate hobea. Trimmed mailatua erabilita, hexaedro baten angeluekin konparatuko ditu (90º). Unitatea: angelua [º]
- **Cell Volume Change**: Gelaxka baten bolumenaren eta perimetro beradun poliedro erregular baten bolumenaren (kasu honetan hexaedroa) arteko erlazioa da. 1 inguruko bolumen-erlazioak gelaxka erregularragoa adierazten du, eta, beraz, kalitate hobea.
- **Least Square Quality (LQS):** Gelaxka sareen kalitatea ebaluatzen duen metrika da. Gutxieneko karratuen teknikak erabiltzen ditu, gelaxka bat 0 eta 1 arteko balio batez irudikatutako forma geometriko (hexaedriko) ideal batetik zein hurbil dagoen neurtzeko. Balio altuak kalitate hobea adierazten du, eta horrek simulazioaren zehaztasuna eta egonkortasuna hobetzen ditu.
- **Cell Aspect Ratio**: Gelaxka baten luzeraren eta zabaleraren arteko erlazioa da. 1etik hurbil dagoen itxura-erlazioak lauki handiagoko gelaxka bat adierazten du, eta hori, oro

har, kalitate onekotzat hartzen da. Itxura altuko erlazio batek gelaxka oso luzeak edo oso konprimatuak adieraz ditzake, eta horrek simulazioaren zehaztasunari eragin diezaioke.

- **Face Validity:** Jatorrizko geometriaren gainazalera gelaxkak moldatzeko gaitasuna neurtzen du. Beste era batera esanda, gelaxken aurpegiak modelatutako geometriaren gainazalekin lerrokatuta dauden egiaztatzeko metrika. Zenbat eta antzekoago izan, orduan eta kalitate handiagoko modeloa lortuko da. Beste behin ere, 0tik 1era neurtzen da, okerrenetik hoberenera, hurrenez hurren.
- **Cell Quality:** Kalitatea neurtzeko parametro orokorra da bere gain hartzen ditu aurretik azaldutako parametro guztiak. Gainera, ortogonaltasuna (gelaxken ertzen perpendikulartasuna inguruko azalerekiko) eta jakobiarra (gelaxka baten distortsioa, haren deformaziotik abiatuta) kontuan hartzen ditu ere.

Parametroen kuantifikazioa, STAR CCM+ In-Cylinder paketeak, defektuz, ezarrita zituenak izan dira. Parametro asko errepikatu egin dira, "remesh"-eatzeko baldintza desberdinetan ezarri baitira. Taula 14an bildu dira.

Taula 14. Birmailatzeko kriterioak

Re-mesh criteria	
Base Criteria (any one can be satisfied)	
Min Cell Quality	1,0E-5
Max Piston Stretching	2,0
Max Valve Stretching	2,0
Max Valve Displacement	2,5 mm
Piston Tolerance (Lift Closure Tolerance)	-0,1 mm
Cell Skewness Criteria (both must be satisfied)	
Max Cell Skewness Angle 1	90,0º
Min Cell Aspect Ratio 1	0,1
Bad Morphed Cell Criteria (all must be satisfied)	
Max Cell Skewness Angle 2	60,0º
Min Cell Aspect Ratio 2	0,82
Min Cell Quality 2	0,025
Min Volume Change	0,0045
Min Least Square Quality	0,3
Valid Face Criteria (both must be satisfied)	
Max Cell Skewness Angle 3	8,.0º
Min Face Validity	0,95

Oraindik ere parametro gehiago definitu behar dira, birsaretzeko baldintzetan erabiliko direnak:

- **Max Streching**: Geruza aldean dauden bi geruzen artean egon daitekeen zabaleraren aldaketa erlatibo maximoa. Azterketako kasura eramanaz, paretatik gertuen dagoen geruza batek, alboan duen eta paretatik urrunago dagoen geruza baino 2 aldiz txikiagoa izan behar da gutxienez jota.
- **Min Cell Quality Reference**: Birmailatu aurretik gordetzen den datua, gelaxkaren kalitateari dagokiona.
- **Piston/exhaust-valve/intake-valve offset: "**Remesh"-eatu aurretik, pistoi eta balbulen posizioak.

Orain bai, remsheatzeko baldintzak azalduko dira, lau multzo desberdinetan bilduta daudenak taula 14an ikus daitekeen bezala.

- **"Base Criteria":** Irizpide honen bitartez, pistoiak eta balbulak mailaren gainean eragindako deformazioaren kontrola egiten du. **Hurrengo baldintzetako bat betetzen bada**, automatikoki aktibatuko birmailaketa *(Gogoratu "report"-ak simulazioak kalkulatutako datuak direla):*

    - *${MinCellQuality1Report} <= ${Min Cell Quality}*

      Esanahia: Simulazioko gelaxka guztiek kalitate minimoa bermatu behar dute (1E-5)
    - *${MinCellQuality1Report} <= ${Min Cell Quality Reference}*

      Esanahia: Simulazioko gelaxka guztiek birmailatu aurreko kalitate minimoa hobetu behar dute (aldakorra).
    - *(${PistonStretchRatio1Report} >= ${Max Piston Stretching}) && (ETA) (${PistonZ1Report} <= (${Piston Tolerance})*

      Esanahia: Pistoia zilindro burutik oso gertu dagoenean aktibatu egiten da bi baldintzen menpe: Simulazioak pistoian neurtutako distantzia erlatiboaren arabera* (maximoa gailendu ezean, 2,0, aktibatu) **eta** pistoiaren posizioa tolerantzia minimoa baino txikiagoa denean (-0,1 mm-tik GGP-rako posizioan)

        - **(${PistonStretchRatio1Report} funtzioa: ((${Piston Z} – 0,001) > (${Piston Offset} – 0,001)? (${Piston Offset} - 0.001) / (${Piston Z} – 0,001) : (${Piston Z} – 0,001) / (${Piston Offset} – 0,001))*

          Esanahia: Pistoiaren posizio erreala eta birmailaketaren aurreko pistoiaren posizioaren arteko distantzia erlatiboa. Kasu honetan, bi aldiz handiagoa bada diferentzia (Max Piston Stretching), aktibatu.
    - *(${intake-valve2StretchRatio1Report} >= ${Max Valve Stretching}) && (ETA) (${intake-valve2Z1Report} > ${intake-valve 2 Lift Closure Tolerance})*

      Esanahia: Irteera balbula ixte posiziotik gertu dagoenean aktibatu egiten da bi baldintzen menpe: Simulazioak balbulan neurtutako distantzia erlatiboaren arabera* (maximoa gailendu ezean, 2,0, aktibatu) **eta** pistoiaren posizio tolerantzia minimoa baino txikiagoa denen (-0,01 mm ixte posiziotik)

        - ** ${intake-valve2StretchRatio1Report} funtzioa: ((${intake-valve 2 Offset} == 0) || (EDO) (${intake-valve 2 Z} == 0))? 0:(${intake-valve 2 Z} < ${intake-valve 2 Offset}? ${intake-valve 2 Offset} / ${intake-valve 2 Z} : ${intake-valve 2 Z} / ${intake-valve 2 Offset})*

          Esanahia: Balbularen posizio erreala eta birmailaketaren aurreko balbularen posizioaren arteko distantzia erlatiboa. Kasu honetan, bi aldiz handiagoa bada diferentzia (Max Valve Stretching), aktibatu.

- *${intake-valve2Displacement1Report} >= ${Max Valve Displacement}*

  Esanahia: Birmailatu aurreko eta balbularen arteko diferentzia 2,5 mm (Max Valve DIsplacement) baino handiago denean.

  - *${intake-valve2Displacement1Report} funtzioa: abs(${(intake-valve 2 Z} - ${intake-valve 2 Offset})*

    Esanahia: Balbularen posizioa erreala eta birmailatu aurreko balbularen posizio diferentzia lineala eta absolutua.

- *(${exhaust-valve2StretchRatio1Report} >= ${Max Valve Stretching}) && (ETA) (${exhaust-valve2Z1Report} > ${exhaust-valve 2 Lift Closure Tolerance})*

  Esanahia: Irteera balbula ixte posiziotik gertu dagoenean aktibatu egiten da bi baldintzen menpe: Simulazioak balbulan neurtutako distantzia erlatiboaren arabera* (maximoa gailendu ezean, 2,0, aktibatu) eta pistoiaren posizio tolerantzia minimoa baino txikiagoa denen (-0,01 mm ixte posiziotik)

  - * ${exhaust-valve2StretchRatio1Report} funtzioa: (${exhaust-valve 2 Offset} == 0) || *(EDO)* (${exhaust-valve 2 Z} == 0))? 0:(${exhaust-valve 2 Z} < ${exhaust-valve 2 Offset}? ${exhaust-valve 2 Offset} / ${exhaust-valve 2 Z} : ${exhaust-valve 2 Z} / ${exhaust-valve 2 Offset}

    Esanahia: Balbularen posizio erreala eta birmailaketaren aurreko balbularen posizioaren arteko distantzia erlatiboa. Kasu honetan, bi aldiz handiagoa bada diferentzia (Max Valve Stretching), aktibatu.

- *(${exhaust-valve2Displacement1Report} >= ${Max Valve Displacement})*

  Esanahia: Birmailatu aurreko eta balbularen arteko diferentzia 2,5 mm (Max Valve DIsplacement) baino handiago denean.

  - *${exhaust-valve2Displacement1Report} funtzioa: abs(${(exhaust-valve 2 Z} - ${exhaust-valve 2 Offset})*

    Esanahia: Balbularen posizioa erreala eta birmailatu aurreko balbularen posizio diferentzia lineala eta absolutua.

- **"Cell Skewness Criteria":** Gelaxkek morphing metodoaren ondorioz jasan dezaketen erpinen distortsioa kontrolatzen du. **Hurrengo baldintza guztiak bete behar dira**:

  - *${CellAspectRatio} < ${Cell Aspect Ratio 1}*

    Esanahia: Simulazioak neurtutako gelaxkaren itxurazko ratioa (Cell Aspect Ratio) 0,1 (Cell Asepect Ratio 1) baino txikiago denean aktibatu. Karratu itxuratik oso urrun egoteagatik aktibatu.

  - *${SkewnessAngle} > ${Max Cell Skewness Angle 1}*

    Esanahia: Simulazioak neurtutako gelaxken erpinen angeluak (SkewnessAngle) 90º (Max Cell Skewness Angle 1) baino kamutsagoa denean aktibatu.

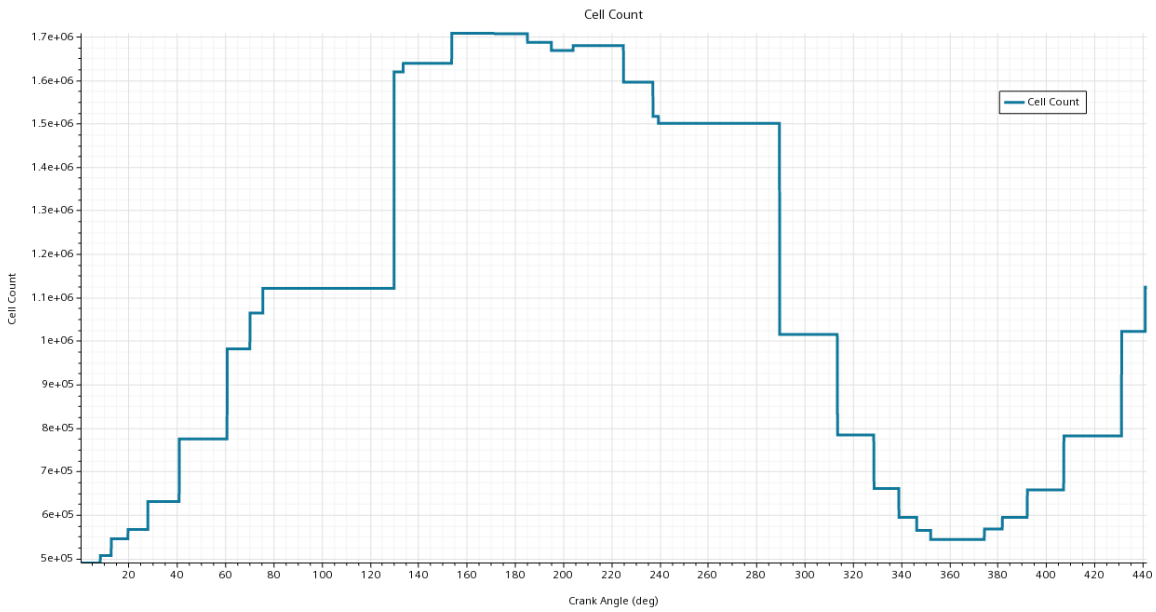
- **"Bad Morphed Cell Criteria":** Gelaxkek morphing metodoaren ondorioz ez dituztenean kalitate parametroak betetzen (angelu, forma, bolumen aldaketa, eta abar). **Hurrengo baldintza guztiak bete behar dira birsaretzea:**

    - *(${CellAspectRatio} < ${Min Cell Aspect Ratio 2}*
      Esanahia: Simulazioak neurtutako gelaxkaren itxurazko ratioa (Cell Aspect Ratio) 0,82 (Cell Asepect Ratio 2) baino txikiago denean aktibatu. Karratu itxuratik zertxobait urrun egoteagatik aktibatu.
    - *${VolumeChange} < ${Min Volume Change}*
      Esanahia: Gelaxkek jasan dezaketen erregulartasun ezin da 0,0045 (Min Volume Change) baino txikiagoa izan. Hau aktibatzen denean, hexaedro forma oso distortsionatuta dagoela esan nahi du.
    - *${CellQuality} < ${Min Cell Quality 2}*
      Esanahia: Simulazioko gelaxka guztiek kalitate minimoa bermatu behar dute (0,025), bestela aktibatu.
    - ${SkewnessAngle} > ${Max Cell Skewness Angle 2}
      Esanahia: Simulazioak neurtutako gelaxken erpinen angeluak (SkewnessAngle) 60º (Max Cell Skewness Angle 2) baino kamutsagoa denean aktibatu.
    - ${LeastSquaresQuality} < ${Min Least Square Quality})
      Esanahia: Simulazioak neurtutako hexaedrikotasun maila kuadratikoa 0,3 (Min Least Square Quality) baino txikiagoa bada, aktibatu.

- **"Valid Face Criteria":** Gelaxken gainazalaren kalitatea kontrolatzen dute. **Hurrengo baldintzak bete behar dira birsaretzea:**

    - ${SkewnessAngle} > ${Max Cell Skewness Angle 3}
      Esanahia: Simulazioak neurtutako gelaxken erpinen angeluak (SkewnessAngle) 85º (Max Cell Skewness Angle 3) baino kamutsagoa denean aktibatu.
    - ${FaceValidity} < ${Min Face Validity}
      Esanahia: Jatorrizko gainazalen lerrokatutasun mailak ez badu 0,95 minimoa (Min Face Validity) betetzen, aktibatu.

Oso konplexua litzateke zein mekanismok "remesh"-a aktibatu duen ikustea. Hala ere, birabarkiaren angeluaren menpe bolumen osoak izandako zelda kopurua irudika daiteke, irudia 62an bezala. Gelaxka kopurua nabarmen aldatu da ziklo osoan zehar. GGPan 500.000 gelaxka zituen eta BGPra heltzean 1.700.000 zelda zenbatu dira.



Irudia 62. Gelaxka kopurua birabarkiaren angelu bakoitzean

6.4.3 Modelo fisikoak

Behin disktretizazioa aplikatuta, gelaxken gainean erabiliko diren modelo eta baldintza fisikoak zehaztu beharko dira, indarrean jarriko diren ekuazio diferentzialek gobernatuko dituztenak. Simulazioaren araberakoa izango da gobernu-ekuazioen aukeraketa; baina badaude edozein modeloan behar beharrezkoak izango diren irizpideak ere.

Fluido konputazionalen dinamikan (CFD), fluidoen fluxuaren portaera gobernatzen duten ekuazio diferentzial nagusiak masa, momentu (edo mugimendu-kantitatea) eta energiaren kontserbazio-ekuazioak dira. Ekuazio horiek fluidoen mekanikaren funtsezko ekuazioak dira, eta hainbat modutan adieraz daitezke, modelatzen ari den problema zehatzari aplikatutako baldintzen eta sinplifikazioen arabera. Hona hemen ekuazio horien forma orokorrak:

- **Jarraitutasunaren ekuazioa (masa kontserbazioaren printzipioa)**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho v) = 0$$

Ekuazio honek deskribatzen du nola aldatzen den fluidoaren dentsitatea denboran eta espazioan, non ρ fluidoaren dentsitatea da, eta v abiadura-bektorea.

  - $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ dentsitatearen aldaketa denboraren menpe adierazten du. Egoera iragankorretan garrantzia handia hartzen duen atala da.
  - $\nabla\,(\rho v)$ kontrol-bolumen baten barruko edo kanpoko masa-fluxua adierazten du, fluidoaren abiadura dela eta. Egoera geldikorretan, atala hau bakarrik geratuko litzateke. Simulazio tridimentsionalean, gradienteak, ∇, hiru norabide kartesiarretan hartu behar dira (x,y,z).

- **Momentuaren kontserbazio ekuazioa (Navier-Stokes)**

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla(\rho v v) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g$$

Ekuazio honek deskribatzen du nola aldatzen den fluidoaren momentua (mugimendua) denboran eta espazioan, non p presioa da, τ tentsio biskosoen (norabide normalean zein tangentzialean) da, eta g azelerazio-bektorea da.

- $\frac{\partial(\rho v)}{\partial t}$ jariakinaren momentu aldaketa tasa denboraren menpe adierazten du. Egoera iragankorretan bakarrik erabili.
- $\nabla(\rho v v)$ termino konbektiboa da, fluxuaren gaineko momentuaren garraioa adierazten duena.
- $-\nabla p$ presio gradientea, presioak eragindako bolumen-unitateko indarra adierazten duena. Negatiboa da, presio gradientearen kontrako noranzkoan eragingo baitu mugimendua. Gradientea,∇, norabide kartesiarretan aztertzen da.
- $\nabla \cdot \tau$ biskositatearen terminoa, fluxuaren likatsutasun mailaren eraginak barneratzen ditu. Norabide kartesiar bakoitzeko indar normalak eta marruskadura indarrak kontuan hartzen ditu. Fluxua erabat perfektua balitz termino hau ez litzateke kontuan hartuko.
- ρg indar bolumetrikoaren terminoa grabitatearen ondorioz. Ganbararen tamaina txikia eta barruko gasen propietateak direla eta termino hau nulutzat har daiteke.

Mugimenduaren ekuazioa hiru norabide kartesiarretan kalkulatuko da.

- **Energiaren kontserbazio printzipioa**

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e + \frac{v^2}{2}\right)\right] + \nabla\left[\rho\left(e + \frac{v^2}{2}\right)v\right] = \rho\dot{q} - \nabla\,(pv) + \nabla\,(k\nabla T) + \nabla\,(v\tau) + \rho g v$$

Energiaren ekuazioan arlo energetiko guztiak hartzen dira, nahiz eta simulazioaren arabera nulutzat har daitezke horietako asko:

- $\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e + \frac{v^2}{2}\right)\right]$ denboraren menpeko energia aldakuntza tasa da. Atal honetan, partikulen barne-energia, e, eta energia zinetikoa $\frac{v^2}{2}$ hartzen ditu kontuan. Atal hau simulazio iragankorretan erabiltzen da bakarrik.
- $\nabla\left[\rho\left(e + \frac{v^2}{2}\right)v\right]$ konbekzio bitarteko garraio-energia da. ρv, masa-fluxua da, eta guztizko energiarekin $\left(e + \frac{v^2}{2}\right)$ biderkatzean, energia-fluxua lortzen dugu. Termino honen dibergentziak (∇) kontrol-bolumen batetik sartzen eta irteten den energia-fluxuaren aldaketa garbia neurtzen du.
- $\rho\dot{q}$, erradiazio terminoa da, eta erradiazio bidez jariakinera transferitutako energia adierazten du. $\dot{q}$, bero bolumetrikoaren aldaketa masa-unitateko da. Baldintza espezifikoen arabera, termino horrek modelatu egin dezake fluidoko energia

erradiaktiboaren xurgapena, igorpena eta transferentzia. Erradiazioa nabarmena denean erabiliko da, errekuntza ganbaretan bezala..

- $\nabla\,(pv)$ terminoak presioak egindako lana adierazten du. p presioak fluidoari eragiten dio, eta lana egin dezake fluidoa mugitzen den heinean. pv dibergentziak (∇) neurtzen du nola presio-lanak fluidoaren barne-energian aldaketak eragiten dituen.
- $\nabla\,(k\nabla T)$ eroapen termikoaren terminoa da, eroankortasunaren ondoriozko bero-transferentzia adierazten duena. k fluidoaren eroankortasun termikoa da, eta T tenperatura-gradientea. Termino honen dibergentziak (∇) kontrol-bolumen baten barrurantz eta kanporantz eroaten den bero-fluxua neurtzen du.
- $\nabla\,(v\tau)$ termino honek disipazio likatsua adierazten du, hau da, energia zinetikoa bero bihurtzea fluidoko indar likatsuen ondorioz. t, gainazal tentsioa da (bai norabide normalean bai tangentzialean). Fluido perfektuetan, biskositatearen eragina nulua denez, atal hau ez litzateke kontuan hartuko.
- $\rho g v$, energia grabitatorioaren termino da. Simulazioan ez da kontuan hartuko, ganbararen tamaina txikia eta fluidoaren propietateengatik.

Behin fluxua gobernatzen duen hiru ekuazio garrantzitsuenak azalduta, simulazioa zehatz honentzat kontuan hartu behar diren beste ekuazio gehigarriak justifikatu behar dira. Modelo horiek dira: iragankortasuna, turbulentzia modeloa,konbustioa, NOx modeloak, erradiazioa eta injekzio sistema.

6.4.3.1 Denbora

Errekuntza ganbaretako simulazioek daukaten zailtasun handiena, iragankortasuna da. Geldikorretan ez bezala, konbergentzia lortzea ez da bat ere erraza izaten; azken finean, momentu bakoitzeko egoera asko aldatzen da eta denbora oso azkar igarotzen da. STAR CCM+ programan bi modelo iragankor artean aukeratu behar da:

- **"Implicit Unsteady"** [60]**:** Navier-Stokesen ekuazioak ebazten ditu denbora-eskema guztiz inplizitu bat erabiliz. Metodo honetan, etorkizuneko denboraren fluxu-aldagai guztiak aldi berean ebazten dira Newton-Raphson iterazio bakar batean edo antzeko metodo batean.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

  Metodo oso gomendagarria izaten da, emaitza eraginkor bat lortzeko denbora urrats luzeak behar izaten direnean. Aproposa da muga baldintza konplexuetan egonkortasun handia eta sendotasun handia behar denean.

  Metodo inplizituak, orokorrean, oso egonkorrak izaten dira eta urrats denbora handiagoak har ditzakete, esplizituekin alderatuta; baina, kontran, gastu konputazional handiagoa eskatzen dute ere, ekuazio sistema ez linealak ebatzi behar izanagatik.

- "**PISO Unsteady"** [60]**:** Urrats anitzen eskema batean esplizituki akoplatutako Navier-Stokes ekuazioak ebazteko diseinatuta dago, eta horrek efektu iragankorrak hobeto maneiatzea eta konbergentzia azkartzea ahalbidetzen du denbora-urrats bakoitzean. Abiadura handiko fluxu iragankorretan erabiltzen dira, non abiadura eta presio aldaketa

azkarrak ematen diren. Bereizmen altuko mailatu eta fluxu konprimaezinentzat oso metodo aproposa da.

PISOk hainbat presio-zuzenketa egiten ditu denbora-igaroaldi bakoitzaren barruan, eta, horri esker, abiadura eta presioa gehiago akoplatzen dira haien artean, eta soluzio iragankorraren egonkortasuna eta zehaztasuna hobetzen dira.

PISO metodoa lehenesten da errekuntza-ganberen simulaziorako, gaitasuna baitu presio eta abiadura momentu azkarrak doitasunez maneiatzeko. Bereizmen handiko sareetan egonkortasuna eta zehaztasuna mantentzeko gai da, eta konponbide konputazionalki eraginkorra da, errekuntza-prozesuen ohiko fenomeno dinamiko eta konplexuetarako. Are gehiago, karga konputazional ez horren handia eskatzen du.

6.4.3.2 Turbulentzia

Fluxuak ezaugarritzeko propietate kritikoa turbulentzia izaten da. Turbulentzia modelatzeko hamaika metodo ikertu dira; baina kasu bakoitzak bere modu aproposena dauka, zehaztasuna edo gastu konputazionala lehenesten baldi bada. STAR CCM+ bost metodo desberdintzen dira: Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS), Large Eddy Simulation (LES), RANS-LES hibridoak, Reynolds Stress Models (RSM) eta Vorticity-Based Models (VBM). Simulazio gehienetan RANS eta LES modeloak erabiltzen dira, gastu konputazionala dela eta; hortaz bi hauetan bakarrik zentratuko da.

- **Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)** [60]**:** RANS turbulentzia modeloak lotura itxia daukate fluxua gobernatzen duten Navier-Stokes ekuazioekin. RANS ekuazioak lortzeko, aldagai bakoitza ϕ, bere bataz besteko balioan $\bar{\varphi}$ eta fluktuazio osagaian ϕ' deskonposatzen da.

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'$$

Non ϕ abiadura osagai, presio, energia edo espezieen kontzentrazioa adierazten duen. Orain, deskonposaketa Navier Stokes ekuaziotan sartzean, hurrengo RANS ekuazioak sortzen dira, jarraitutasunari eta mugimenduaren kontserbazio printzipioei dagokiena:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u}_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial \overline{\rho u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u}_i \bar{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k}\right)\right] - \frac{\partial \overline{\rho u'_i u'_j}}{\partial x_j}$$

δ_{ij} Kronecker delta, $i = j$ bada 1, $i \neq j$ bada 0

$\partial \overline{\rho u'_i u'_j}$ Reynolds stress deritzo eta fluxuaren bataz besteko turbulentziaren fluktuazioak barneratzen ditu. Aldagai honetan dago RANS ekuazioen emaitzen lorpena. Turbulentzia metodo desberdinen arabera, era batera edo bestera itxiko dira ekuazioak. Eddy modeloen teorietan oinarrituta hurrengo adierazpena egin daiteke:

$$\tau = \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j}; \tau = -\overline{\rho u'_i u'_j}$$

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \ (biraketa\ dago) \rightarrow -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_k}\right) \ (simetrikoa)$$

$$\boldsymbol{-\overline{\rho u'_i u'_j} = 2\,\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}$$

μ_t zurrunbiloaren turbulentzia deritzon kontzeptu irreala da, ekuazioa ixteko erabiliko dena. Parametro hau kalkulatzeko hurrengo ekuazioen konbinaketak planteatu dira

- $\boldsymbol{k-\varepsilon}$ **turbulentzia** [60]**:** Bi garraio ekuazio gehigarritan oinarritzen da, non beste bi aldagai berri definitu diren: alde batetik, *k* (turbulentziaren energia zinetikoa), turbulentzien fluktuazioak eragindako masa unitateko energia unitarioa adierazten du; bestetik, *epsilon* (turbulentziaren disipazio tasa), energia termiko bihurtu den energia zinetiko turbulentua adierazten du.

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla(\rho\varepsilon u_i) = \nabla\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla\varepsilon\right] + C_1\frac{\varepsilon}{k}\left(P_k + C_\mu P_b\right) - C_2\rho\frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla(\rho k u_i) = \nabla\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right] + P_k + P_b - \rho\varepsilon + S_k$$

$$non, \mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Bi garraio ekuazioek eskema bera jarraitzen dute:

$$DENBORA + KONBEKZIOA = DIFUSIOA + ITURRIAK$$

P_k, abiadura ebakitzaileen eragina kontuan hartzeko produktua.
P_b, flotagarritasunak eragindako produktua.
S_k S_ε, erabiltzeak ezarriko nahiko lukeen iturria.

(Launder and Sharma , 1974) formula enpirikoei hurrengo balio konstanteak ezarri zizkieten:

$$\sigma_k = 1;\ \sigma_\varepsilon = 1{,}3;\ C_1 = 1{,}44;\ C_2 = 1{,}92;\ C_\mu = 0{,}09$$

Modelo fluido mekanikoa sinpletasun, sendotasun eta eraginkortasun konputazionalagatik nabarmentzen da, eta horrek aplikazio industrial ugaritarako tresna baliaezin bihurtzen du. Fluxuen simulazioan abantaila esanguratsuak eskaintzen ditu, eta analisi zehatzak eta diseinu-azterketak arrazoizko kalkulu-denborarekin egiteko aukera ematen du.

Hala ere, eredu estandarrak hainbat muga garrantzitsu ditu: ez ditu behar bezala aurreikusten horma-fluxu banaketak eta birzirkulazio-fluxuak, turbulentzian isotropia egoera suposatzen duelako; zailtasunak ditu fenomeno iragankorrak harrapatzeko, abiadura-fluktuazioak leuntzen baititu eta fluxuaren dinamikaren xehetasun kritikoak gal baititzake; bere zehaztasuna mugatua da hormetatik gertu, bereziki presio-gradientea bortitzak dituzten fluxuetan; ez ditu ondo maneiatzen anisotropia handidun turbulentziak, non propietate zurrunbilotsuak nabarmen aldatzen baitira norabide desberdinetan; gehiegizko hedapen numerikoa izan dezake, fluxuaren ezaugarriak gehiegi leunduz eta emaitzen zehaztasuna murriztuz; eta, azkenik, zailtasunak ditu geometria konplikatuetako fluxuen konplexutasuna antzemateko, sareen diskretizazio eta parametroen doikuntza findurik gabe. Horren ondorioz, baliteke "**Realizable k-ε**" [61] erabili behar izatea.

Diferentzia nagusia energia zinetiko zurrunbilotsuaren disipazio-tasa, **ε** kalkulatzeko modua da. "Realizable" kasuan, garraiorako ekuazioa birformulatzen da turbulentziaren ekoizpenaren ekarpena modu zehatzagoan eta errealistagoan kalkulatzeko, eta horrek modeloak fenomeno zurrunbilotsu konplexuak harrapatzeko duen gaitasuna hobetzen du, hala nola, birzirkulazioa eta horma-fluxuaren bereizketan. Hori dela eta, egokiagoa da ezaugarri oso zurrunbilotsuak dituzten edo fluxu-horma banaketa esanguratsua duten fluxuetarako. Formula horrela geratuko litzateke:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla(\rho\varepsilon u_i) = \nabla\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla\varepsilon\right] + \rho C_1 S\varepsilon + C_2\rho\frac{\varepsilon^2}{k+\sqrt{\nu\varepsilon}} + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}C_{3\varepsilon}P_b$$

$$C_1 = 1.44;\ C_{1\varepsilon} = \max\left(0.43, \frac{\eta}{5+\eta}\right) non\ \eta = \frac{Sk}{\varepsilon};\ C_\mu = 0.09;\ C_{3\varepsilon} = \tan\frac{[u_{ib}]}{[u_{jb}]}$$

$$[u_{ib}], [u_{jb}]\ abiadura\ osagaiak\ grabitatearekiko\ paralelo\ eta\ perpendikular$$

"Realizable" modeloan, egoera askotan eredu estandarraren gaineko zehaztasuna eta egonkortasuna hobetzen dituen arren, mugak ere baditu. Ez da hain sendoa fluxu oso anisotropikoetan eta kurbadura handiko ibilbidetan, hala nola fluxu oso birakarietan. Gainera, mailatuaren kalitatearekiko sentikorragoa izan daiteke eta eremu kritikoetan fintze handiagoa eska dezake, zenbakizko egonkortasunari eusteko. Konprimagarritasun-efektuak esanguratsuak diren aplikazioetan, doitasuna mugatua izan daiteke. Halaber, fluxu-bereizketaren aurreikuspena hobetzen duen arren, oraindik ere zailtasunak izan ditzake turbulentzia-fenomeno konplexuak antzemateko, doikuntza gehigarririk gabe edo beste modelo batzuekin konbinatu ezean.

- $\boldsymbol{k-\omega}$ **turbulentzia** [60]**:** k-ε modeloak aurkezten zituen mugen aurrean k-ω modeloa planteatu zen, batez ere, presio gradiente oso kontrajarriak agertzen ziren kasuetan, muga geruza behar bezala antzemateko; esaterako aerofoil , difusoretan edo turbomakinetan. Gainera, fluxu-pareta banaketak ematen direnean zehaztasun handiagoa ematen da eta turbulentzia maila desberdin dituzten fluxuetarako da

baliogarria. Bi garraio ekuaziotan oinarritzen da ere, non, turbulentziaren energia zinetikoa, *k*, disipazio tasa espezifikoa, *ω,* ebatzi behar diren (Wilcox, 1998):

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla(\rho\omega u_i) = \nabla\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}\right)\nabla\omega\right] + \gamma\frac{\omega}{k}P_k - \beta\rho\omega^2$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla(\rho k u_i) = \nabla\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right] + P_\varepsilon - \beta^*\rho\varepsilon$$

$$\omega = \frac{\varepsilon}{k}\,;\mu_t = \frac{\rho k}{\omega}$$

$$\sigma_k = 0{,}5; \sigma_\omega = 0{,}5;\ \gamma = \frac{3}{40};\ \beta = \frac{3}{40}, \beta^* = 0{,}09$$

Eredu k-ω estandarrak, hormetatik gertu ondo simulatu arren, mugak ditu, hala nola inguru-baldintzekiko sentikortasuna eta doitasun-murrizketa fluxu libreko eskualdeetan. Gabezia horiei aurre egiteko, k-ω SST (Shear Sterss Transport) eredua sortu zen, k-ω eta k-ε ereduen onena konbinatzen duena. Eredu honek trantsizio leuna eskaintzen du bi ikuspegien artean, mugako geruzaren eta fluxu libreko eskualdeen zehaztasuna hobetuz, inguruneko baldintzekiko sentikortasuna murriztuz eta fluxu-bereizketaren erabilera hobetuz. Oro har, SST modeloak soluzio moldagarriagoa eta sendoagoa eskaintzen du turbulentzia simulatzeko aplikazio ugarietarako. Hona hemen (Menter, 1994) disipazio tasarentzat egindako ekuazio berria:

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla(\rho\omega u_i) = \nabla\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}\right)\nabla\omega\right] + \gamma\frac{\omega}{k}P_k - \beta\rho\omega^2 + (1 - F_1)\frac{2\rho\sigma_{\omega 2}}{\omega}\nabla k : \nabla\omega$$

$$k - \varepsilon\ denean, F_1 = 0\ eta\ k - \omega\ denean, F_1 = 1$$

$$\nabla k : \nabla\omega = \frac{\partial k}{\partial x}\frac{d\omega}{dx} + \frac{\partial k}{\partial y}\frac{d\omega}{dy} + \frac{\partial k}{\partial z}\frac{d\omega}{dz}$$

$$\sigma_{\omega 2} = 0{,}856$$

Gelaxkaren kokapenaren arabera edota gelaxkatik igarotzen duen fluxuen propietateen arabera, F_1 aren balioa nulua edo osoa izango du modelo turbulentua aintzat hartutza.

- **Large Eddy Simulation (LES)** [60]**:** Teknika aurreratua da fluidoen simulazioan, eta zuzenean ebazten ditu turbulentziaren eskala handienak, eskala txikienak ondoren modelatzen edo iragazten dituen bitartean. Horri esker, fenomeno zurrunbilotsu garrantzitsuenak zehatz antzeman daitezke, batez ere fluxu konplexu eta iragankorretan. Eskala handiko egitura bat datorrenean turbulentzia teoria ezin hobea da, LESak zurrunbiloaren irudikapen fidelagoa ematen baitu RANS ereduekin alderatuta. Hala ere, bere inplementazioa konputazionalki pisutsua izan daiteke eta oso sare fina eskatzen du xehetasunak hartzeko, ikerketa edo ingeniaritzako simulazio zehatzetarako egokiagoa eginez, non zehaztasuna funtsezkoa den eta kostu konputazionala justifikagarria.

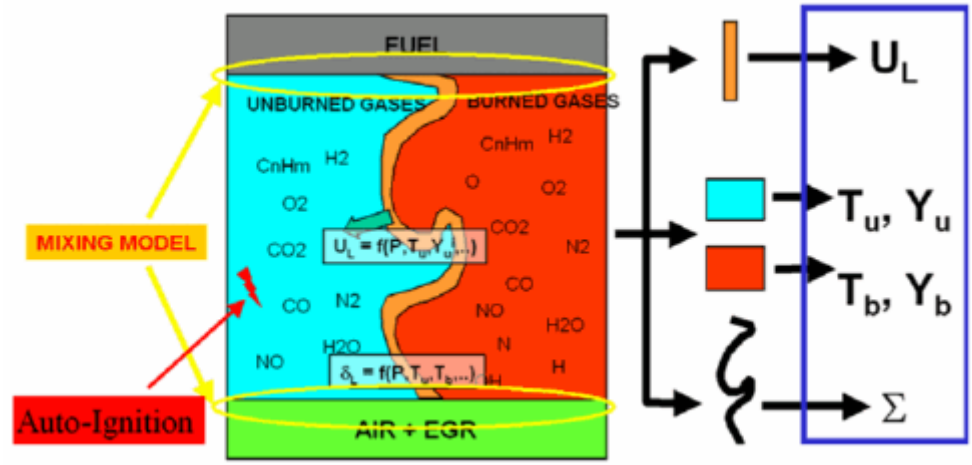
Errekuntza-ganbera bat simulatzeko LESen ordez, RANS ereduak erabiltzea justifikatu daiteke kostu konputazional eta doitasun-eskakizunak direla eta. Errekuntza-ganberak oso sistema konplexuak dira, eta espazio- eta denbora-eskala asko hartzen dituzte. LES ereduak eskala handienak zuzenean ebaztean turbulentziaren irudikapen zehatzagoa eskaintzen badu ere, haren inplementazioak kostu konputazional handia dakar, eskala txikienak ere harrapatu behar direlako. Horrek baliabide konputazional, nabarmen, handiagoak eta simulazio-denbora luzeagoak behar direla esan nahi du. RANS ereduak, aldiz, ez dira hain zorrotzak konputazionalki, eta emaitza onargarriak eman ditzakete errekuntza-ganberetako zenbait aplikaziotarako, non eskala txikien bereizmen zehatza ez den kritikoa. Beraz, LES ordez RANS ereduak erabiltzea aukera pragmatikoa izan daiteke, errekuntza-ganberetako errekuntzaren azterketan zehaztasunaren eta eraginkortasun konputazionalaren arteko oreka bilatzen denean.

RANS ereduen artean, "Realizable k-ε" hobesten da, fenomeno zurrunbilotsu konplexuak eta abiadura- eta presio-gradiente handiak irudikatzeko gaitasun hobetua duelako. Turbulentziaren anisotropia lokalean zentratzen denez, geometria konplexuetako turbulentzia handiko irudikapen zehatzagoa ematen du, eta horrek egokiagoa egiten du ganbaren barruko baldintza aldakor eta konplexuetarako. Nahiz eta k-ω eredu estandarrak eta k-ω SST ereduak ere aukera bideragarriak izan, "Realizable k-ε" doitasun hobetuarekin, gradiente handiko fluxuak maneiatzeko gaitasun handia eskaintzen du ere; horren kostu konputazional handirik behar izan gabe (SSTk zein modelo erabakitzeko izugarrizko gastua behar du eta uneoro aldatzen egon beharko litzateke ganbararen iragankortasun handia dela eta), eta horrek errekuntza-ganberetako errekuntzaren simulazio fidagarriagoa eta zehatzagoa bermatzen du.

6.4.3.3 Konbustioa

Errekuntza ganbaretan erreakzio kimikoek garrantzi handia izango dute, batez ere, konbustioari dagokienak. Egia da, motorraren ziklo osoan ez lukete garrantzia handirik izango; soilik, injekzioa behin emanda. Hala ere, oso garrantzitsua da erreakzio mekanismoak behar bezala adieraztea eta kontu handiz ibili behar da mekanismo gehiegi erabiltzearekin, simulazioa larregi pisutu dezake-eta. STAR CCM+ erreakzioak simulatzeko baditu modelo ugari (erabiliena konbustiorako: Complex Chemistry); baina barne errekuntza motorrentzat badu beste pakete gehigarri ("adds on") bat STAR CMM+ In-Cylinder deiturikoa, motorren konbustiorako oso aproposak direnak (ECFM-3Z eta ECFM-CLEH)

- **Extended Coherent Flame Model Three Zone (ECFM-3Z)** [60]**:** ECFM modeloaren luzapen bat da, sugar azaleraren dentsitatearen garraio ekuazioan eta difusio bidezko konbustio eta aurre-nahasitako turbulentzia heterogeneoan oinarritzen den nahasketa modeloa da. Errekuntza-ganberako gelaxkak sub-gelaxkatan zatitzen dira, era berean, turbulentzia lokaleko denbora eskalan oinarrituta. Zonalde horiek dira: aire-erregaia, sugarra eta errekuntza-produktuak nahastuta.



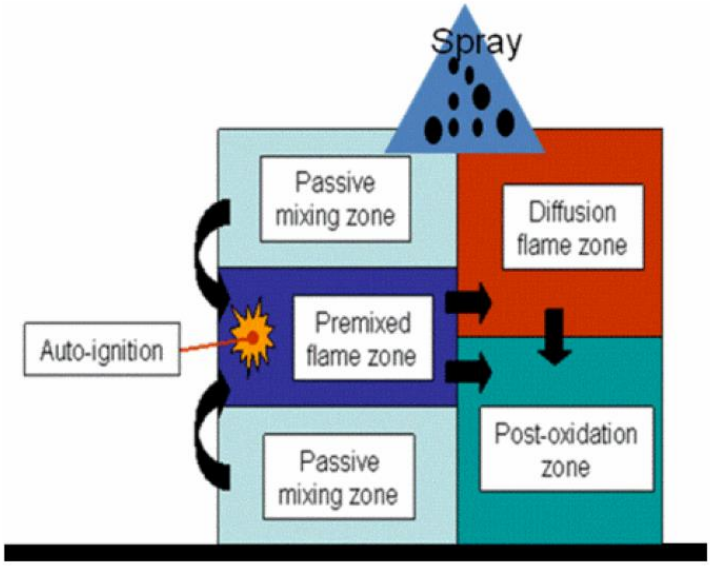
Irudia 63. ECFM-3Z modeloaren zonalde desberdinak [60]

T_u, Y_u oraindik erre gabeko zonaldearen tenperatura eta masa frakzioa.
T_b, Y_b erretako zonaldearen tenperatura eta masa frakzioa.
U_L, garraren abiadura lineala presio, erretako gasen tenperatura eta masa frakzioak baldintzatuta gehien bat.
$\sum$ edo δ_L sugar azaleraren dentsitatea, presio eta erre gabeko eta erretako tenperaturek baldintzatuta gehienbat.

Hiru zonaldeen arteko trantsizioa modelatzen du ECFMk, errekuntzaren dinamika hobeto harrapatzeko, eta bero-askapenaren tasa zehatz-mehatz kalkulatzen du, nahasketa-frakzioa garraiatzeko ekuazio bitartez ebatzita. Kontuan hartzen ditu turbulentziaren eta errekuntzaren arteko interakzioa, funtsezkoa baita sugarraren hedapena eta errekuntzaren eraginkortasuna aurreikusteko. Hitz gutxitan esanda, modelo honen bitartez hurrengo mekanismo konplexuak ebatzi ditzake: turbulentzien nahasketa, sugarraren hedapena, difusio bitarteko konbustioa eta emisio kutsakorrak (azkenengo hau postprozesatzaileekin)

Eredu hau ezin hobea da barne-errekuntzako motorretarako, non errekuntza iragartzeko eta kutsatzaileak sortzeko zehaztasuna funtsezkoa den. Simulazioetan erabiltzen da, sugarraren egituraren eta aire-erregaia nahasteko prozesuen irudikapen ona behar denean.

- **Extended Coherent Flame Model – Characteristic Length Estimation for Homogeneus charge (ECFM-CLEH)** [60]**:** ECFM ereduaren beste aldaera bat da, non errekuntza tasa, egoera kimikoak baldintzatutako oreka termodinamikoak mugatzen duen. Modelo honetan, gelaxka konputazionalak lau zonaldetan (sub-gelaxkatan) banatzen da: nahastu gabeko, aurre-nahastutako, difusiozko eta post-oxidatutako zonaldeak.



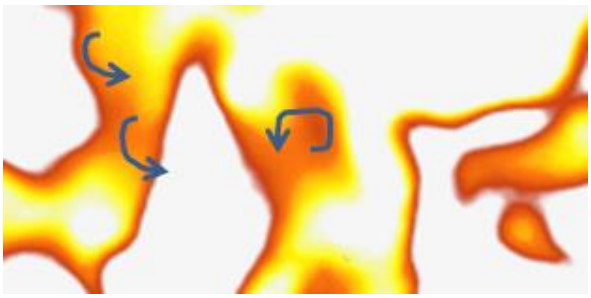
Irudia 64. ECFM-CLEH modeloaren lau zonaldeak [60].

Nahastu gabeko eta aurre-nahastutako eremuak, erre gabeko gasetarako bakarrik definitzen dira; difusio eta oxidazio-osteko eremuak, berriz, gas erreetarako bakarrik.

ECFM-CLEH eredua, ECFM-3Zren antzekoa da. Gelaxkako azpi-sarea zona-kopuru finko batekin modelatzen delako, eta sugarraren modelaketa, berriz, berdina delako bi ereduetan (sugarraren hedapena eta autoignizioa), eta ekuazio bat ebazten delako sugarraren gainazalaren dentsitaterako. Desberdintasuna handiena da, ECFM-CLEHn, espezie kimikoak trazatzaileekin, masa erregaiarekin eta, ondoren, aurrerapen-aldagaiekin irudikatzen direla, flamelet modeloen antzera. Erreakzionatzaileen erabateko errekuntza saihesteko eta errekuntza-energiaren askapen egokia eskuratzeko, oreka termodinamikoko taulek mugatzen dituzte espezieen masa zatikiak.

Egokia da zuzeneko injekzioko motorretarako, non erregaiaren eta airearen nahasketa sua hartu aurretik lortzen den, karga-baldintza homogeneoak simulatzeko diseinatuta baitago injekzio zuzeneko gasolinazko motorretan bezala. Luzera bereizgarriaren estimazioa erabiltzen du nahastearen eta errekuntzaren eskala modelatzeko. Turbulentziaren eta errekuntzaren arteko interakzioa hartzen du kontuan, nahasketa homogeneoaren baldintzetara egokituta, eta errekuntzaren eta kutsatzaileen isurien eraginkortasunaren aurreikuspen zehatza ahalbidetzen du.

- **Reacting Species Transport (Complex Chemistry)** [60]**:** Erreakzio kimikoak gertatzen diren fluxutan, espezie kimikoen portaera simulatzeko teknika da. Eredu honek inplikatutako espezie kimiko bakoitzerako garraio-ekuazioak ebazten ditu, konbekzio, difusio eta erreakzio kimikoko terminoak barne, eta horrek simulazio-eremuan espezieen kontzentrazioak arakatzea ahalbidetzen du. Fluxu- eta energia-ekuazioekin akoplatuta dago, fluxuaren abiadurak, presioak eta tenperaturak erreakzio kimikoei nola eragiten dieten antzemateko, eta, hala, errekuntza-ganberetako eta erreaktore kimikoetako prozesu erreaktiboen ikuspegi i zehatza ematen du.



Irudia 65. Reacting Species Transport modeloaren planteamendua [60]

Irudia 65an, eremu ilunak erreakzio fronte lodi bat erakusten du (non erreakzioak gertatzen diren). Erreakzio batzuk nahaste zurrunbilotsua baino motelago gertatzen direnez, nahaste zurrunbilotsuak erreakzio fronte lodi honetatik ihes egitea lortzen dute; baina gar frontea hedatzen doan heinean, erre gabeko nahaste zurrunbilotsu eta geldo horiek, behin garatuta, erreakzionatuko dute, kimikak eta termodinamika mugak baldintzatuta.

Reacting Species Transport modeloren barruan, STAR CMM+k erreakzio kimikoen kalkulatze modua eskatzen du. Konbustio ganbaretan, Complex Chemistry mekanismoa lehenesten da, mekanismo zinetikoen bitartez gauzatzen den. Fenomeno zinetikoak esanguratsuak diren sugar zurrunbilotsuetan oso aproposa da.

Ikuspegi horrek erreakzio eta espezie kimiko ugari hartzen ditu kontuan, haien garraio-ekuazio espezifikoak ebatziz eta energiako eta termodinamikako ekuazioekin akoplatuz. Horri esker, CO, CO2 eta NOx bezalako errekuntza-produktuen eta kutsatzaileen eraketa zehatz aurreikusi daitezke. Inplikatutako mekanismo zinetikoen konplexutasunagatik konputazionalki intentsiboagoa den arren, Complex Chemistry eredua funtsezkoa da erreakzio kimikoak iragartzeko zehaztasuna funtsezkoa duten aplikazioetarako, hala nola errekuntza-motorren eta gas-turbinen eraginkortasunaren eta isurien analisirako.

Kasuak kasu, modelo bat besteen gainean gailentzen da aztertu nahi denaren arabera. Hala ere, BEAMetako errekuntza ganbaretako ECFM modeloak erabiltzen dira gehienbat. Alde batetik, kostu konputazional baxuagoa daukatelako, sugarraren azaleraren dentsitatearen kontzeptuari esker; bestetik, fluxu iragankorretara oso ondo moldatzen dira (eskala eta luzera eskalak definitzen dituzte modu zehatzagoan). Hala ere, STAR CMM+ programan, airearen konposizioa ez du aldatzen uzten; hortaz ezin zaio hidrogeno frakzioa sartu (defektuz airea %76.7 nitrogeno masa eta %23.3 oxigeno masa). Bilboko Ingeniaritzako Eskolako Ingeniaritza Energetiko Sailaren asmoa hidrogenoa sarrerako portuan sartzea da, aire hidrogeno nahasketa erabat homogeneoa izango balitz; hortaz Complex Chemistry modeloa aukeratu da. Alde onari arreta jarrita, kimikoki zehaztasun handiko modeloa da; nahiz eta gastu konputazional esanguratsua izan.

Etorkizunean, ECFM modelotan hidrogenoa inplmentatu ahalko balitz, ECFM-3Z aukeratuko litzateke, gastu konputazionala murrizteko aukera emanaz eta kontuan hartuta aire –hidrogeno-diesel karga nahasketa heterogeneoentzat hobeto moldatzen dela. Gainera, garraren osaketaren inguruan zehaztasun handiagoa ematen du, horrela hidrogenoak eragindako aldaketak garraren egituran ikusi ahalko lirateke edota dieselarekin alderaketak egin.

Oraingoz, Complex Chemistry erabili behar izango denez, modelo honek behar duen informazioan zentratuko da. Erreakzio kimiko, termodinamiko eta garraio mekanismoak Chemkin [62]formatuaren bitartez inportatzen dira simulazioan.

Errekzio kimikoaren zinetika Arrhenius ekuazioaren bitartez planteatzen da:

$$k = AT^b exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

Non erreakzio bakoitzarentzat *A,b* eta E_a parametroak zehazten diren Chemkin tauletan. Gerta liteke erreakzioan parte hartzen ez duten hirugarren gorputzak agertzea ere (+M). Horretarako, Lindemann edo Troe´s formulak erabiltzen dira, edota erreakzioaren ingurugiroko gasen eraginaren bitartez ere ("*enhancement factor*"). Hobeto ulertzeko joan [63] edota **ERANSKINA IIn** ikusi.

Mekanismo termodinamikoei dagokionez, konposatu bakoitzaren propietate termodinamikoak hartzen ditu bero espezifiko, C_P, entalpia, H^o, eta entropia, S^o, bitartez. Funtzio termodinamikoak NASA polinomioen bitartez adierazten dira, tenperatura aldagai bakarri izanik [64]:

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4$$

$$\frac{H^o}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T}$$

$$\frac{S^o}{R} = a_1 lnT + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7$$

a_1...a_7 parametroak Chemkin taula bitartez adierazten da eta bi tenperatura tartentzat adierazte dira; hau da, konposatu bakoitzak hamalau parametro izango ditu. Hobeto ulertzeko joan [63] edota **ERANSKINA IIn** ikusi.

Azkenik, nahiz eta erabat beharrezkoa ez izan, garraio ekuazioentzako parametroak adierazten dira, konposatu bakoitzarentzat. Sei parametro adierazten dira:

- Geometria: 0, monoatomikoa bada, 1, molekula lineala bada, 2, molekula ez lineala bada.
- Lennard-Jonesen putzu potentzialaren sakontasuna (ε/k_B) Kelvinetan
- Lennard-Jonesen kolisio diametroa (σ) Angstrometan.
- Momentu dipolarra (μ) Debyetan.
- Polarizazioa (α) Angstrom kubikoetan
- Amortiguazio biraketa kolisio zenbakia (Z_{rot}) 298 K-etan.

Hobeto ulertzeko ikusi [65] edo ERANSKINETAN.

ERANSKINETAN simulazioan n-dodecanoarentzat erabiliko diren Chemkin taulak atxikitu dira, "The San Diego Mechanism" bitartez lortu direnak [66]. Bai diesel zein motor dualentzat erabili daiteke, hidrogenoaren inplementazioak ez dakartza aldaketa handirik Chemkin tauletan.

6.4.3.4 Erradiazioa

Errekuntza-ganberetan erradiazioa kontuan hartzea funtsezkoa da, bero-transferentzian eta tenperatura-banaketan berebiziko garrantzia duelako. Erradiazio termikoa tenperatura altuko

baldintzetan beroa transferitzeko modu nagusia izan daiteke, konbekzioa eta eroapena gaindituz. Erradiazioa hori alde batera utziko balitz, tenperaturaren eta bero-transferentziaren tasen gutxiespen esanguratsuak egingo lirateke, eta horrek eragina izango luke simulazioaren zehaztasunean eta motorraren materialen eta osagaien osotasun termikoan. Gainera, erradiazioak eragina du erreakzio kimikoetan eta kutsatzaileen eraketan, eta horrek eragina izan dezake ere errekuntzaren eraginkortasunean eta gas kutsakorren isurketan.

Zilindroaren paretek baino errekuntza ganbarako gas ez-gardenek izango dute eragina, ura edo karbono dioxidoak bezala, erradiazioa dispertsatu eta xurgatzeko gaitasuna handia dutenak [67]. Horren ondorioz, "**Participating Media Radiation"** aukera ezin hobea bilakatzen dute.

Erradiazio termikoa xurgatu, isuri edo barreia dezaketen bitartekoen bidez igarotzen da erradiazio bolumetrikoa. Gasen fenomenoa diskretizatu ahal izateko, **"DOM (Discrete Ordinate Method)"** metodoa erabiltzen da; horrela, esfera angeluarra (norabide angeluar infinitu guztiak) norabide edo "ordenatu" multzo finitu batean diskretizatzen dira. Erradiazioa norabide horietan zehar kalkulatzen da eta eremu erradioaktibo osoa hurbiltzeko erabiltzen da [68]. Azkenik, erradiazio termikoaren espektro osoa banda bakartzat hartu da, eta onartzen du propietate erradiaktiboak konstanteak direla espektro horretan [60] gastu konputazionala sinplifikatu eta murrizteko helburuarekin. Modelo horri **"Gray Thermal Radiation**" deritzo.

STAR CCM+n, gainazaleko propietate erradioaktiboak emisibitate, islapen (difusiozko eta espekulatiboa) eta transmitibitate parametro eta erradiazioko tenperaturen bitartez kuantifikatzen dira. Ez dira norabidearen menpekoak; baina banda anitzeko espektroarentzat, gainazalaren propietateak uhin-luzeraren araberakoak izan daitezke.

Gainazalen arteko espazio betetzen duen bitartekariak (gasa) erradiazioa xurgatu, isuri edo barreiatu dezakeenez, gainazal bakoitzak jasotzen eta igortzen duen erradiazio kopurua bitartekari horren araberako izango da ere; baita gainazalaren propietate optiko eta haren muga termikoak ere.

Bitartekariaren barrutik erradiazioa igarotzen den heinean, tarteko material horretako I erradiazio intentsitatea igarotzen da Ω norabidean haren balioa handiagotuz. Erradiazio-transferentziaren ekuazioak (RTE) gobernatzen du prozesua. Ekuazioa hau intentsitatearen menpe adierazi daiteke, uhin luzera λ zehatz batentzat [60]:

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = -\beta_\lambda I_\lambda + k_{a\lambda} I_{b\lambda} + \frac{k_{s\lambda}}{4\pi}\int_{4\pi} I_\lambda \, d\Omega + k_{pa\lambda} I_{pb\lambda} + \frac{k_{ps\lambda}}{4\pi}\int_{4\pi} I_\lambda \, d\Omega$$

I_λ erradiazio intentsitatea uhin luzera zehatz batentzat [W/(m^2 sr m^{-1})]

$I_{b\lambda}$ gorputz beltzaren intentsitatea uhin luzera zehatz batean.

$I_{pb\lambda}$ partikularen gorputz beltzaren intentsitatea uhin luzera eta partikula zehatz batentzat

s, distantzia Ω norabidean

β_λ, desagertze koefizientea, hurrengo moduan definituta: $k_{a\lambda} + k_{s\lambda} + k_{pa\lambda} + k_{ps\lambda}$

$k_{a\lambda}$, absortzio koefizientea uhin luzera zehatzean (m^{-1})

$k_{s\lambda}$, barreiatze koefizientea uhin luzera zehatzean (m^{-1})

$k_{pa\lambda}$, partikularen absortzio koefizientea uhin luzera zehatzean (m^{-1})

$k_{ps\lambda}$, partikularen barreiatze koefizientea uhin luzera zehatzean (m^{-1})

Ω, angelu norabidea

6.4.3.6 Emisioak

Errekuntza ganbaretan, konbustioan oinarritutako edozein gailutan bezala, BEGen murrizketa bilatzen da. Motor dualetan, 5.6.5 atalean ikusi den bezala, karbonodun emisioen murrizketa ematen da; baina, kontran, tenperatura egoerek baldintzatuta, NOx-ekin ez da igual gertatzen. Ikasketaren arabera emaitza bat edo beste bat ikusi da. Horregatik, simulazio honetan garrantzia handia izango du, batez ere NOx-en ikasketak.

Berez, CO_2 eta COari dagokionez, edozein errekuntza aztergai dagoen Chemkin taulan (ikusi 6.4.3.3) inplementatuta dago; oinarrizko errekuntzatik sortzen baita. NOx, aldiz, errekuntzan parte hartzen ez duen fenomenoa izanik (ez du konbustio mekanismoan parte hartzen), Chemkin tauletan mekanismoak gehitu behar izan dira, 5.6.2 ataletan komentatu diren mekanismoak (besten artean) gehituz. **ERANSKINA IIn** ikusi daiteke

6.4.3.7 Injekzioa

Injekzioa funtsezko aplikazio da industria askotan, barne-errekuntzako motorren errekuntza-ganberetan barne. Injekzio-eredu batek bi fase izaten ditu**: fase euleriarra** eta **fase lagrangiarra**.

Fase euleriarrak [60] ingurunearen fluxu jarraitua adierazten du simulazio-eremuan, non Navier-Stokesen ekuazioak ebazten diren fluidoaren abiadura, presioa eta beste propietate batzuk aurreikusteko. Fase honek errekuntza-ganberan fluidoaren mugimendu orokorra modelatzen du, eta fluxuaren banaketari eta inguruneko (mugaldeko) baldintzei buruzko informazioa ematen du.

Fase lagrangiarra [60], bestalde, eulien fluxuan injektatutako partikula diskretuak edo fluido tantak adierazteko erabiltzen da. Partikula bakoitzak bere gainean diharduten indarrek zehaztutako ibilbide espezifiko bat jarraitzen du, hala nola inertzia, grabitatea, arraste-indarra eta ingurunearekiko interakzio-indarrak. Atomizazio-eredu batean, hala nola huh atomization-ean, likido zurrusta baten haustura simulatzen da tanta txikietan, atomizazio-teknikak erabiliz, hala nola haustura mekanikoa edo esfortzu ebakitzaileen ondoriozko desintegrazioa. STAR CCM+n huh atomizazio beharrezkoa da "**nozzle**" (ahotxoa) sartzeko injekzio sisteman.

"Huh atomization" [60] edo huh motako atomizazioa likido zorrotada baten atomizazioa tanta txikietan simulatzeko ikuspegi espezifikoa da. Metodo hau zurrusta likidoaren puntu estrategikoetan haustura-indar espezifikoak aplikatzean oinarritzen da, eta horrek zurrusta tanta txikiagoetan zatitzea eragiten du. Huh motako atomizazioaren simulazioa garrantzitsua da tanten dispertsioaren irudikapen zehatza behar duten aplikazioetan, hala nola erregaiaren injekzioan barne-errekuntzako motorretan.

Modelo hou sistema dualean inplementa daiteke ere, azken finean, injekzio sisteman hidrogenoak ez baitu parte hartzen; soilik diesela.

6.4.4 Erregioak

Behin mailatua diseinatzean eta modelo fluido mekanikoak erabakita, saiakuntza monodimentsionaletik lortutako datuak simulazioan sartzeko erregioen atalak definituko dira; horretarako, garrantzia handia izango dute gainazalei adierazitako datuak edota fluxuaren domeinuari egokitzen zaizkion hasierako baldintzak. Injekzioaren diseinua ere, garrantzia handiko puntua da, ahal den heinean errealitateko geometriaren antza izan behar baitu.

Ziklo oso baten simulazioak (720º) izugarrizko karga konputazionala eskatzen duenez (5 bat eguneko iraupena, 48 core erabiliz), lan honetan karga maximoko funtzionamendua (400 kW) aztertuko da bakarrik, nahiz eta beste kargen funtzionamendu baldintzak ere kalkulatu diren.

6.4.4.1 Gainazal esanguratsuak

Star CCM+ programako jarraibideetara erreparatuz, hiru gune desberdin definituko dira motorrean eta 6.2 ataleko funtzionamendu baldintzak gehituko zaizkie, dagokien gainazaletan:

- **Aire sarrera ("Inlet")**: Mass Inlet gainazal gisa definitu da. 400 kW potentziarako, zilindro batek 0,1065 kg/s aire emaria behar du. Tenperatura eta presioak konstante mantenduko direla suposatu dira, 322,12 K eta 2,59 bar, hurrenez hurren. Horrela errendimendu bolumetrikoa 0.95ean mantentzen da.
- **Gasen irteera ("Outlet")**: Outlet gainazal gisa definitu da. Irteera emaria aldakorra izango denez, tenperatura eta presioaren menpe adierazi dira. Tenperatura konstantetzat hartu da, 829,98 K, baina presioa ez (bestela emaria ez luke aldakortzat hartuko). Gainera, gasen irteerako presioa ez da ezaguna; hortaz User_guide-ko tutorialetik [60] presio datuak erabili dira, antzeko motor bati dagokienak eta 1,1-2,2 bar artean daudenak.
- **Zilindro paretak:** Paretei tenperatura zehatz bat ezarri zaie, datuen konbergentzian izugarrizko eragina duela ikusi dena. Ez da ezaguna, baina jakina da 450 K - 600 K izaten dela, altzairuaren propietateak direla eta. Hainbat tenperaturekin saiatu da, baina hoberen moldatu dena errekuntza eta hasierako konbergentziara, 550 K izan da.

6.4.4.2 Hasierako baldintza

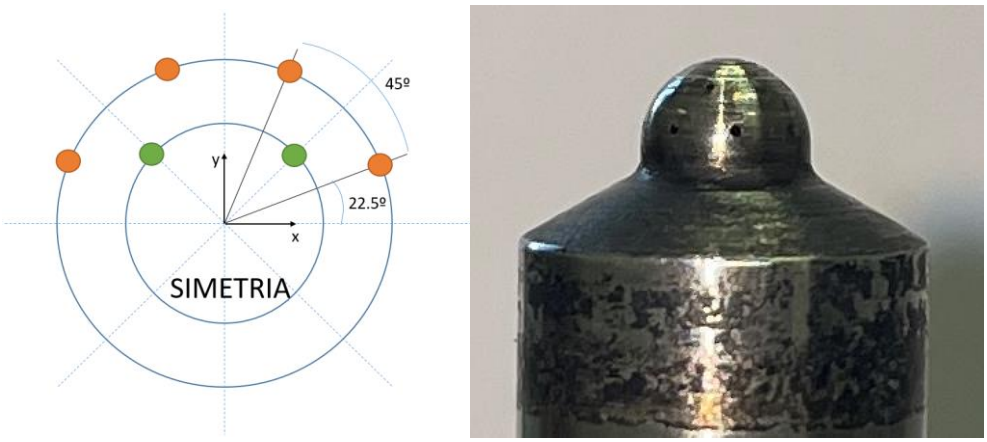
Hasierako baldintzak ezartzerako orduan ere, datu errealetatik abiatu da. Hasierako iterazio gauzatzeko bakarrik erabiliko dira, baina hasierako egoerak erabat baldintza dezake simulazioaren bilakaera, batez ere, fluxu iragankorretan.

- **Sarrera Portuan**: Tenperatura eta presio konstanteak ezarri dira, aire sarreraren berdinak hain zuzen ere, 322,12 K eta 2,59 bar.
- **Irteera Portuan**: Irteerako gasen egoera baldintza berak ezarri dira, 829,98 K (tenperatura konstantea) eta 1,1-2,2 bar presio aldakorra.
- **Errekuntza ganbaran:** Konbergentzia bermatzeko asmoz, komeni da irteerako fluxuaren egoerara hurbiltzea, datuak izan ezean. Hori dela eta tenperatura 829,98 K-tan ezarri da; presioa; aldiz, haren bilakaera ezaguna denez, irudia 40an agertzen den bilakaera ezarri zaio.

Adierazitako hasiera balioak edozein hasierako angeluarentzat litzateke baliogarria. Kasu honetan, 0º angelutik hasiko da, ziklo osoa aztertu nahi delako; baina injekzio tartea edo beste edozein tarte simulatu nahiko balitz, posible litzateke ere.

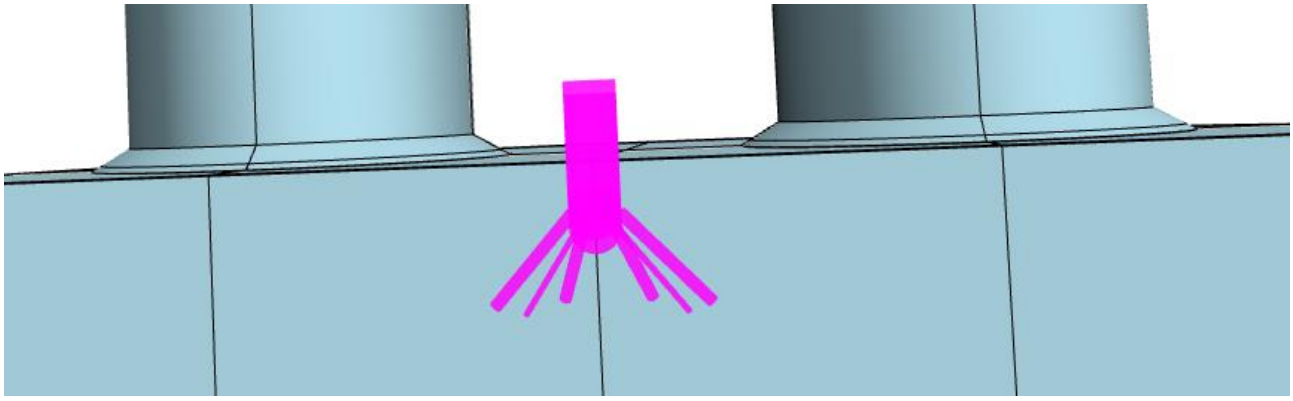
6.4.4.3 Injekzio sistema

Injekzio sistemaren geometria 12 zulotan oinarritzen da, aldi berean, altuera desberdinetako bi multzotan desberdintzen direnak. Lehenengoa, koordenatu jatorritik 4 mm beherantz (z ardatzean) kokatzen da eta 0,5 mm diametrodun 8 zulok osatzen dute (irudia 66an laranjez). Bigarrena, ordea, koordenatu jatorritik 5 mm beherantz (z ardatzean) kokatzen da eta 0,25 mm diametrodun 4 zulok osatzen dute (irudia 66an berdez).



Irudia 66. Injektore zuloen kokapena

Zulo guztietatik emari bera pasako da 30,4 MPa presioarekin; hori dela eta, irudia 44ko emari banaketa 12 aldiz txikituko da. Injekzioaren norabide bektorea egokitu behar izan zaio zulo bakoitzari. Bestalde, erregairen injekzio tenperatura ezagutzen ez denez, 360 Kelvinetan ezarri da EN590 normatiban oinarrituta. Azkenik, lagrangian fase gisa, dodecano materiala ezarri zaio.



Irudia 67. Injekzio sistema simulazioan

6.4.4.4 Beste egoera baldintzak

Denboraren parametro ondo ezarri behar da, urrats-denborak konbergentzia eta kostu konputazionala baldintza dezake eta. Alde batetik, biraketa abiadurari dagokionez, 400 kW potentziarekin 2100 rpm balio ezarri zaio; "time-step" aldiz aldakorra da ziklo osoan zehar. Injekzioa ematen den bitartean edo errekuntza ganbarak bolumen txikia edota balbulen mugimendua

ematen denean murriztu egiten da (taula 15 ikusi). Time-step orokorra 0,01 ms-tan dago.

Taula 15. Balbulek eta injektoreak baldintzatu urrats-denborak

Global | Valves | Injectors

	Lift Offset	Time-Step	Units
Closed	Per Valve	1.0E-5	s
Very Low	-0.005 mm	1.0E-6	s
Low	0.005 mm	1.0E-6	s
Medium	1.4 mm	5.0E-6	s
High	3.9 mm	5.0E-6	s
First Opening Event			
Before	-0.001 mm	1.0E-7	s
After	0.002 mm	1.0E-7	s

Global | Valves | Injectors

	Period	Time-Step	Units
Before Injection	0.9999999999999998 c	1.0E-6	s
During Injection		7.5E-7	s
After Injection	19.999999999999996 c	5.0E-6	s

Errekuntza ganbararen barruan dauden gasak hasierazteko posible da gasen konposizioa adieraztea. Ez da beharrezkoa, baina konbergentziari laguntzeko metodo aproposa da. Aire soilarekin hasierazten bada, erradiazio, konbekzio eta beste fluxu propietateak ez dira horren zehatzak izango. Hori dela eta, erlazio estekiometriko ideala suposatuz eta konbustioaren errekuntza pausu bakar batean gertatzen dela suposatuz, gasen egoera kalkulatuko da. Motorraren funtzionamendu baldintzak ezagunak diren, aire soberakina (λ) kalkulatu daiteke. Are gehiago, etorkizunean hidrogenoa inplementatu nahi denez, konbustioaren erreakzioan hidrogeno-tasa bolumetrikoa *(f)* ezarriko da, nahiz eta lan honetan ez aplikatu:

$$fH_2 + (1-f)C_{12}H_{26} + (37-36f)\lambda(O_2 + 3.76N_2)$$

$$\rightarrow 12(1-f)CO_2 + (13-12f)H_2O + 3.76\lambda(37-36f)N_2 + (\lambda-0.5)(37-36f)N_2$$

Erreakzio idealeko produktuak izango dira hasierako gasen frakzioak erabakiko dituztenak, f eta λ parametroen arabera. Hidrogeno gabeko kasu eta potentzia desberdinentzako gas frakzio masikoak taula 16an bildu dira.

Taula 16. Hasierako gasen egoera potentzia desberdinentzat (f=0)

POTENTZIA (kW)	Aire soberakina (λ)	CO_2 (% masa)	H_2O (% masa)	N_2 (% masa)	O_2 (% masa)
400	1,924641	3,4763	3,7630	77,5054	15,2581
300	1,962221	3,4083	3,6923	77,5333	15,3662
200	2,110565	3,1728	3,4372	77,6340	15,7559
100	2,439538	2,7513	2,9806	77,8144	16,4537

6.4.5 Emaitzak

Emaitzen atal honetan, modeloari ezarriko fenomenoak betetzen diren aztertuko dira; bai arlo teorikoan konbustioari dagokioen printzipio bai arlo esperimentaleko neurriekin bat datorren. Horretarako, presio diagrama, birabarkiaren angeluaren menpe; PV (presio-bolumen) diagrama, ziklo baliokidearekin alderatzeko; tenperaturaren bilakaera, birabarkiaren angeluaren menpe; eta bataz besteko erregai/aire aire erlazioa, errekuntza azkarreko tartea identifikatzeko, besteak beste.

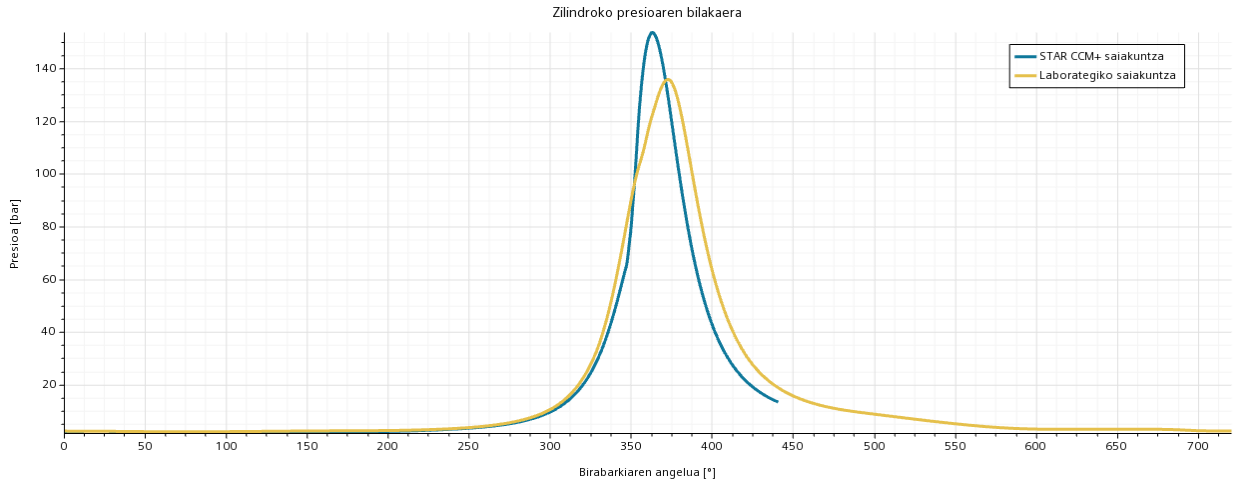
Bestalde, simulazio fluidomekanikoaren ikuspuntutik, beste aldagaien artean, "residuals"-ak aztertuko dira, konbergentzia/dibergentzia aurreikusten laguntzen dutena. Gainera, presio, tenperatura eta abiaduraren bilakaera ganbara osoan zehar aztertuko da; horrela, turbulentziaren bilakaera eta zonalde esanguratsuren gaineko ikasketa planteatu daiteke.

Zoritxarrez, "input" desberdinekin probatuta ere (zilindro pareten tenperatura, hasierako baldintzak edo injekzio norabideen doiketak aldatuta) ez da ziklo osoaren konbergentzia lortu. Birabarkiak 440º egitean, errorea gertatu da, nonbaiten tenperaturaren egoera dela eta, N_2-ren garraio ekuazioan "zati 0" antzeman delako. Hala ere, datu interesgarriak atera daitezke emaitzetatik

6.4.5.1 Presioaren bilakaera

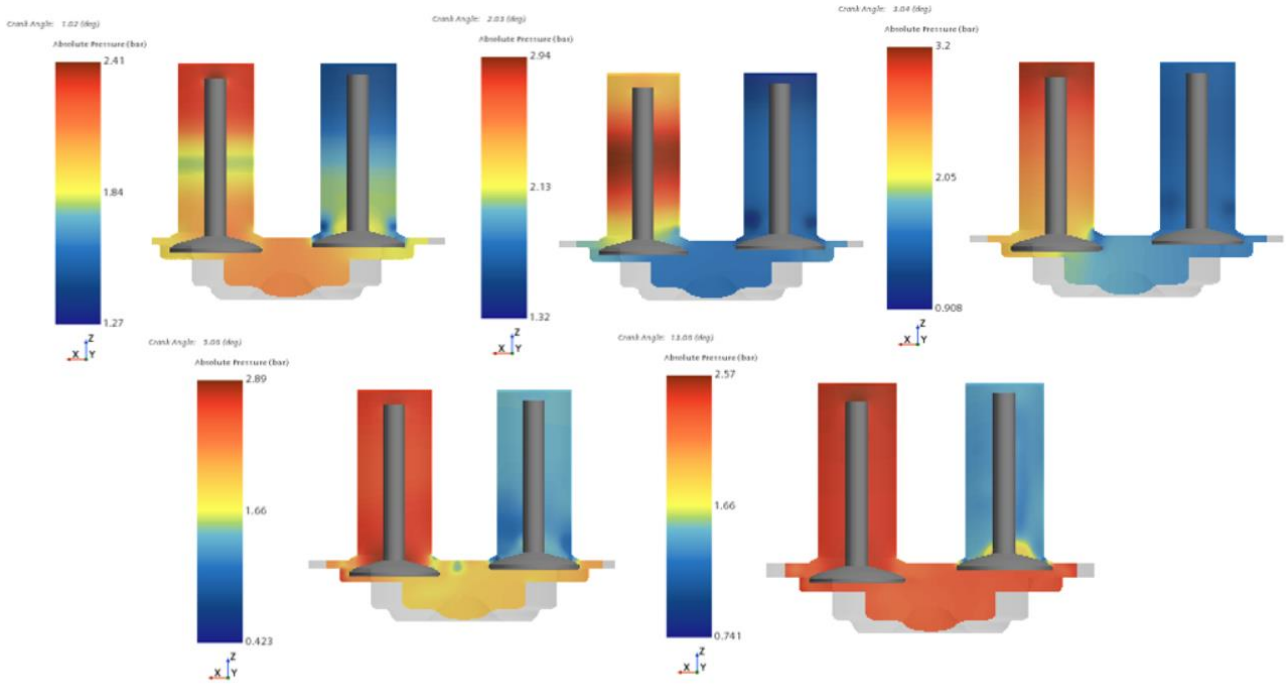
Arlo teorikoan ikusi bezala, presioren bilakaerak adierazten du, gehien bat, motor baten funtzionamendua. Horretarako, ezaguna den laboretegiko saikuntzetako presio bilakaera konparatu da simulazion lortutakoarekin (irudia 68). Antzeko bilakaera dute eta erraz identifikatu daitezke hartze, konpresio eta hedapen tarteak. Hala ere, balore eskalarrak ez datoz bat; esaterako simulazioko presio maximoa 155 bar-era heltzen da eta laborategiko neurketetan, aldiz, 135era (%14,5eko aldea). Gainera, P_{max} GGPtik oso gertu kalkulatu du programak, 363º-an eta benetan 375º-an dago.

Bestalde, errekuntzak, presioaren bilakaeran sortzen duen eraginaz aparte, kurbak baditu antzekotasunak ere. Hartze eta konpresio tartean tendentzia oso antzekoa mantentzen da; baita errekuntza osteko hedapenean ere. Horren arrazoietariko bat, simulazioko geometria eta errealitatekoren antzekotasuna izan daiteke edota hasierako presioak eta presio baldintzak (sarreran eta irteeran) ondo erabaki direla.



Irudia 68. Simulazioko bataz besteko presioa zilindroan, laborategiko saikuntzarekin alderatuta.

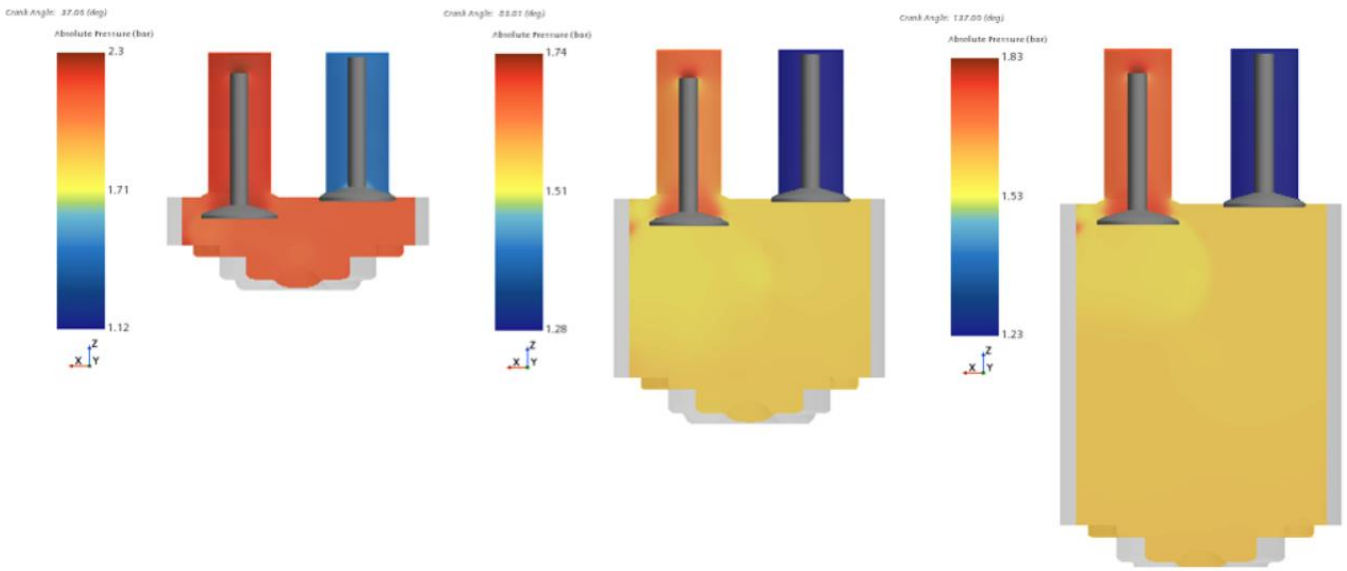
Ziklo osoan zehar lortutako bataz besteko presiotaz gain, uneoro zilindro osoko presio egoera aztertu da. Alde batetik ikusteko, simulazio iragankorra izanik, zenbateko denbora behar izan modeloak hasierako baldintzetatik, mugalde baldintzetara egokitzeko; bestetik, turbulentzia edo zentzuzko presio egoerak kalkulatu diren aztertzeko. Irudia 69an hasierako iterazioetatik lortutako argazkiak daude ikusgai.



Irudia 69. Birabarkia 1º, 2º,3º, 5º eta 13º duenean zilindroren presioa

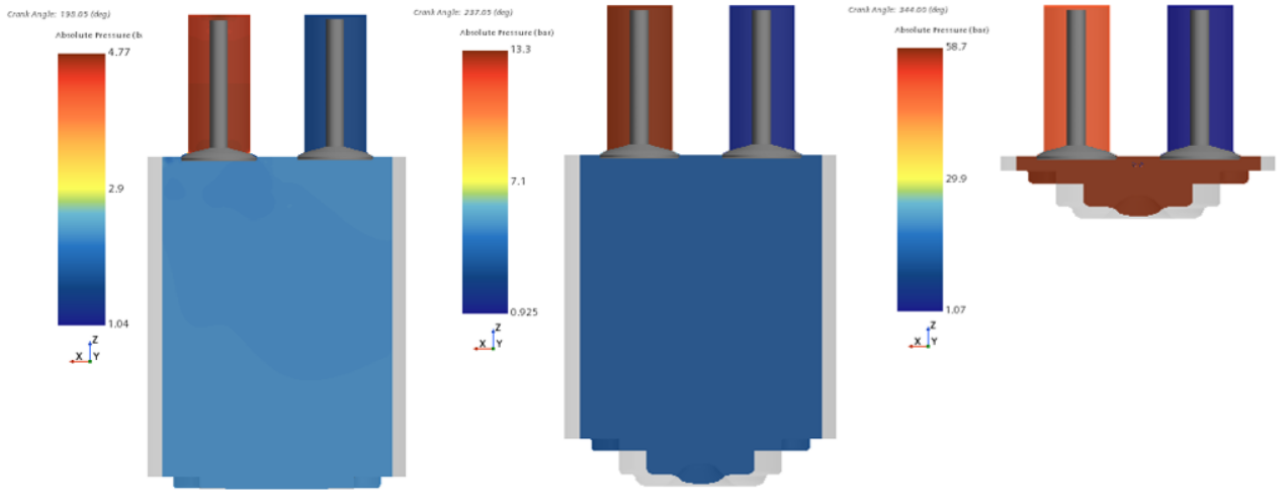
Hasierako presioei dagokionez, sarrerako presioa 2,59 bar absolutu, irteerako presioa 1,49 bar absolutu eta zilindro barruko presioa 1,87 bar-etan (laborategiko neurketatik atera) ezarri. Depresioak behartuta, sarrerako airea zilindrora abiatuko, irudia 69an ikusi daitekeen bezala, eta pixkanaka-pixkanaka zilindroko presioa homogenizatzen doa (birabarkiak 13º dituenean, oso homogenizatuta, 2,05 bar-rekin)

Irudia 70etik, argi eta garbi ondoriozta daiteke, sarrera balbula irekita dagoen bitartean, sarrerako presioak baldintzatuko duela errekuntza ganbararen presioa, beti ere, bolumen aldaketa ez bada oso handia. Are gehiago, ateratze balbula itxi dagoela kontuan hartuta. 83º-ko argazkiari erreparatuta, presioa jaitsiera eman da 2,1 bar ingurutik, 1,7ra arte. Hala ere, 137º-an presio jaitsiera mantentzen da.



Irudia 70. Birabarkiak 37º, 83º eta 137º duenean zilindroaren presioa

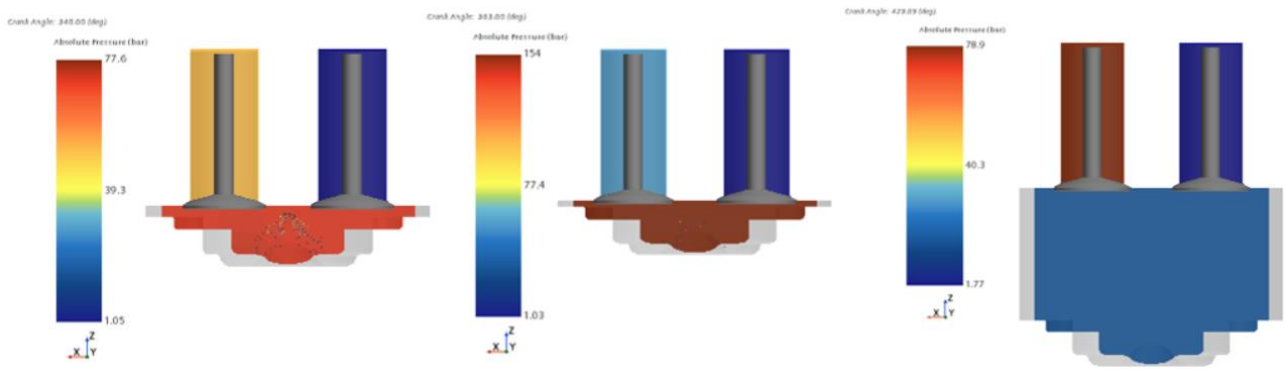
Konpresio tartean sartuta, presioaren homogenizazioa nabarmentzen da. Behin sartze balbula erabat itxita dagoenean, irudia 71ko 198º argazkia, ganbarako presioa berdin mantentzen da espazio osoan zehar. Azkenean, injekzio momentura heltzen denean, presioa homogenoa izango da, hori bai, balio eskalar askoz ere handiagoarekin ia 60 bar-era helduz. Ikusi irudia 71.



Irudia 71. Birabarkiak 198º, 237º, 344º duenean zilindroaren presioa

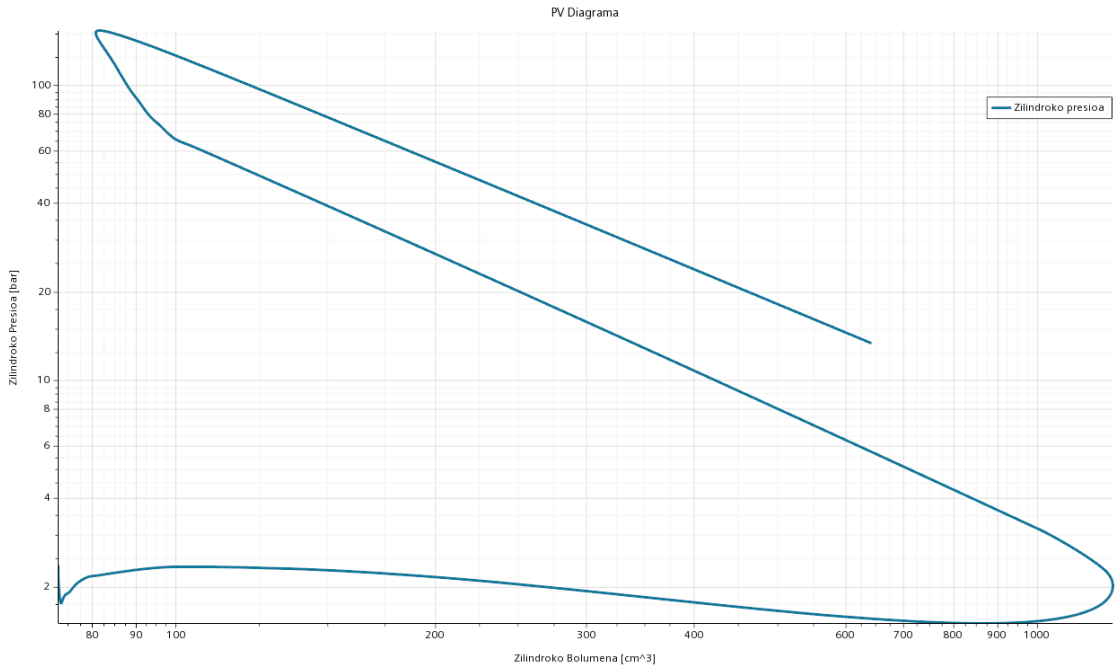
Errekuntza-tartean sartuta, presioa oso azkar igo da. Injkezio puntutik, P_{max}-era heldu arte 47 bar gehiago hartu ditu sistemak eta prozesu horretan, presioa homogeneoa (ez konstante) mantendu da. Ezin izan da ikusi presio konstantedun "bero irabazpena". Azkenik, hedapen tarteari dagokionez,

presioa konstante mantendu da irudia 72an adierazten den bezala (429º dituenean). Azken prozesu honetan, presioa txikituz joango da.



Irudia 72. Birabarkiak 348º, 363º eta 429º duenean zilindroaren presioa

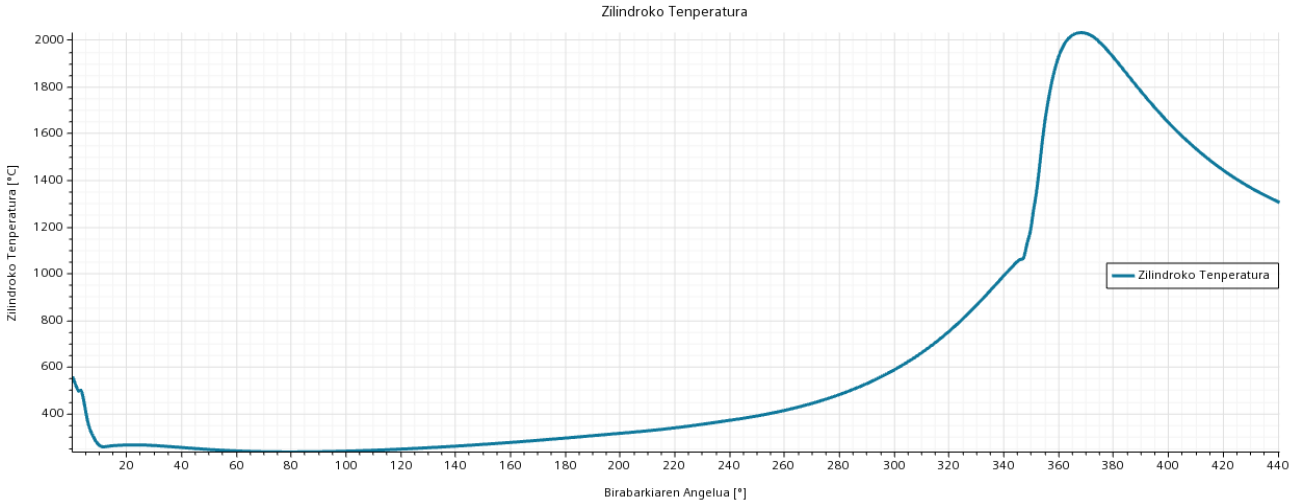
Presioaren atalarekin amaitzeko, PV diagrama (eskala logaritmikoan) irudikatu da ziklo termodinamikoarekin konparatzeko. Lehenik eta behin, ziklo baliokididea baliogarria da motor baten ikasketa teorikoa egiteko eta errealitaren hurbilpen bat egiteko; hortaz ez da aintzat hartuko. Hala ere, baliogarria da sistemak jasotako beroa ulertzeko. Bi modu desberdinetan jasotzen da beroa, presio edo bolumen konstantean. Irudia 73an bi modu horiek distortsionatuta agertzen dira, baina gutxi gorabehera, 100-80 cm^3-ko tartean bolumen nahiko konstatearekin sortu/sartzen da beroa eta ondoren presio konstantean, 150 bar-etan inguru, hain zuzen. Bestalde, lan positiboa sortzen da, konpresio kurba hedapen kurbaren gainean dagoelako (erreakzioak aktibatu direlaren adierazle), gainera bi kurbak (edo zuzenak hobeta esanda) nahiko paraleloak dira; hortaz konpresio/hedapena politropikotzat har daiteke (PV^{γ}).



Irudia 73. Simulazioaren PV diagramal logaritmikoa

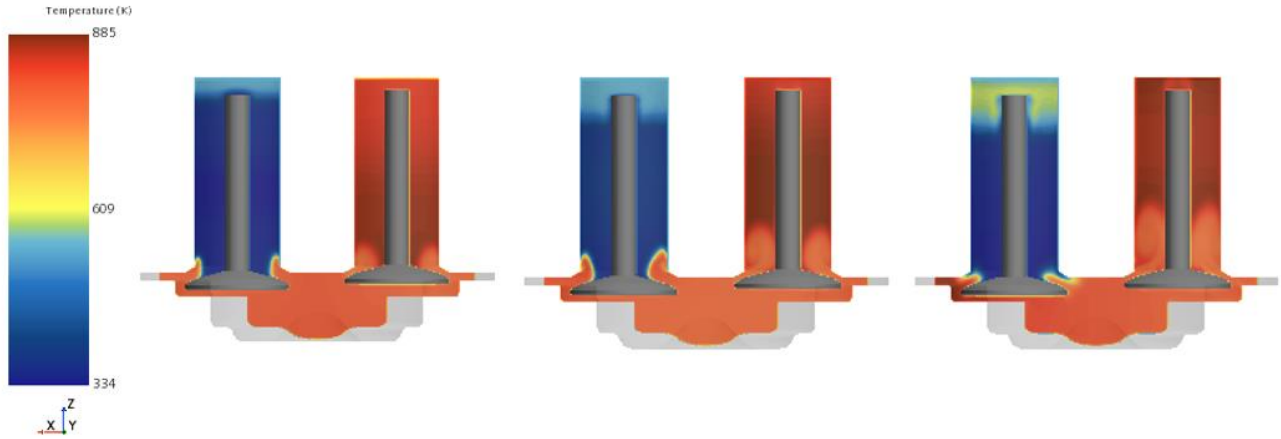
6.4.5.2 Tenperaturaren bilakaera

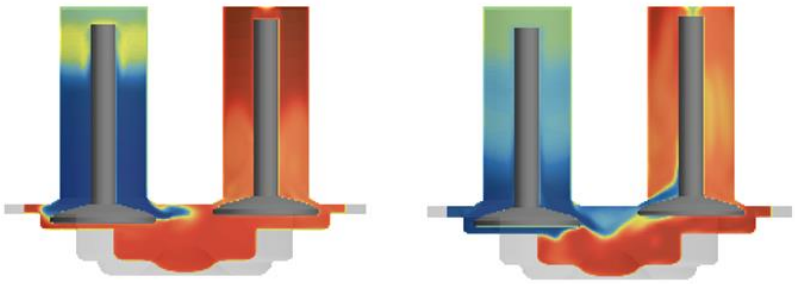
Presioaz gain, tenperaturaren ikasketa ere egin da. Zoritxarrez laborategiko neurketatik ez da tenperaturaren kurba lortu, hortaz ezin izan da errealitateko egoerarekin alderatu; baina zilindroaren barruan gertatutakoa ulertzeko komenigarria da tenperaturari arreta jartzea.



Irudia 74. Zilindroko bataz besteko tenperatura.

Irudia 74an, hasierako angeluetan, birabarkiaren lehenengo 10º-tan gutxi gorabehera, tenperaturaren jaitsiera antzeman daiteke, hasierako baldintzetatik, programak konbergitu duen baliotara hurbiltzeko tartea baita. Gainera, ihesetik kanporatzen den fluxu beroa kontuan hartu behar da. Beste puntu adierazgarritzat birabarkiak 350º osatzen dituenean har daiteke. Bertan, errekuntza azkarra hasiko da eta 1080 ºC-tik 2000 ºC-ra helduko da. Azkenik, errekuntza difusoan sartuta, tenperatura jaisten hasiko da.

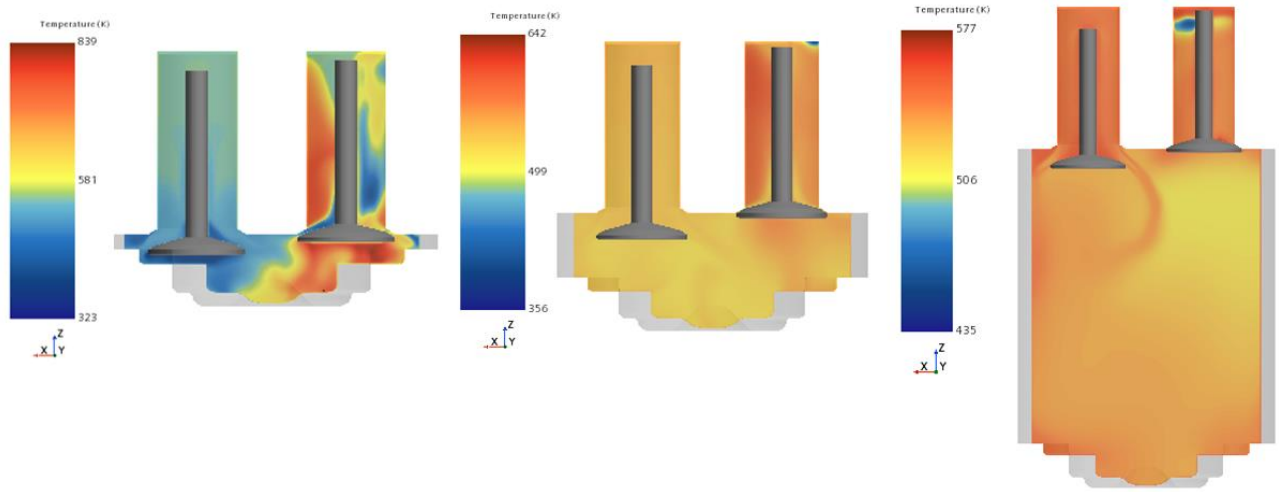




Irudia 75. Birabarkiak 1º, 2º, 3º, 4º eta 8º duenean zilindroaren barneko tenperatura

Aurretik komentatutako hasierako balioen egonkortzea ikus daiteke irudia 75ean. Sarrerako tenperatura hotzak (48,86ºC), ganbarako tenperatura beroarekin (556,83ºC) eragiten du. Hasierako iteraziotan, sarrera emariak ez du denbora nahikorik izan errekuntza ganbara heltzeko hortaz, zilindroko tenperatura beroak sarreratik irtetzen saiatzen da, nahiz eta birabarkiak 3º biratzen dituenean, sarrera fluxua egonkortuta dagoenez, fluxu hotza ganbara sartzen hasten den.

Errealitateko egoeran, sartze eta irtetze balbulak irekita egoten dira aldi berean, aurreko errekuntzako zikloko gas hondakin-produktuak hobeto bultzatzeko kanpora. Irudia 75an fenomeno hori antzeman daiteke, hau da, irtetze balbulatik hondakinak (eta aire sarreraren zati bat) kanporatzen dira.

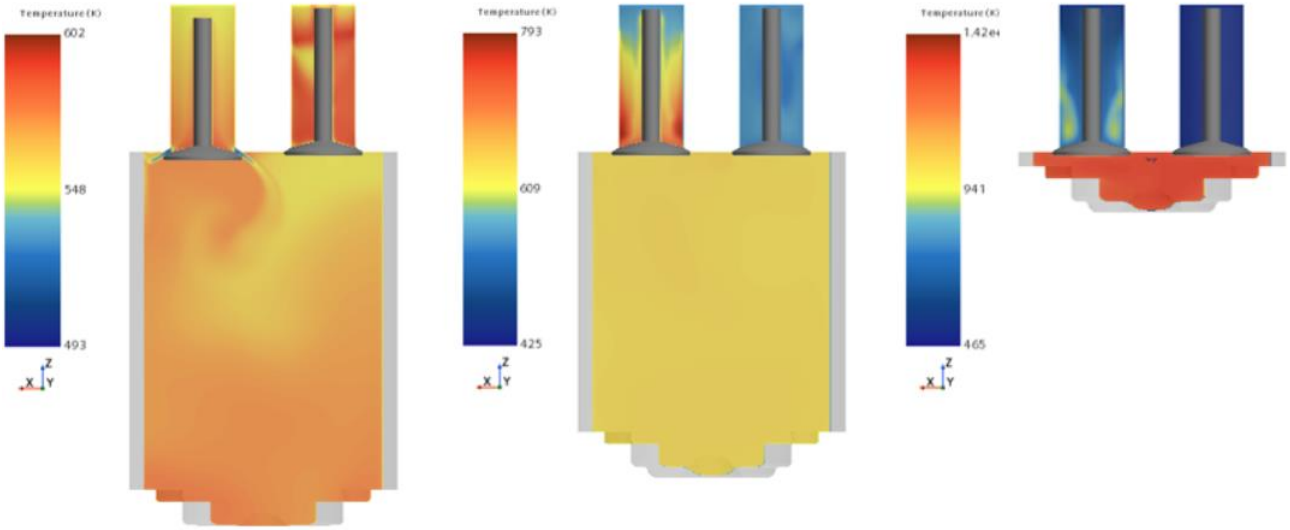


Irudia 76. Birabarkiak 13º, 40º eta 137º duenean tenperatura zilindroan

Zertxobait irekita egonda ere irteera balbula, ihesa ematen dela ikus daiteke irudia 76an. Behin itxita, hasiko da temperatura egonkortzen (esaterako birabarkiak 40º duenean). Hala ere, sarrera balbulatik urrunen dagoen zonaldea presio desberdinekin arituko da inertziak eta presioak baldintzatuta (zonalde laranja 40º dituenean birabarkiak eta horia 137º-tan). Bestalde, sarreraren eragin termikoa adierazten da, alde batetik, sarguneren zabalerak berotu egiten du fluxua; bestetik, balbularen formak sortutako turbulentziak tenperaturaren hedapenean eragina du.

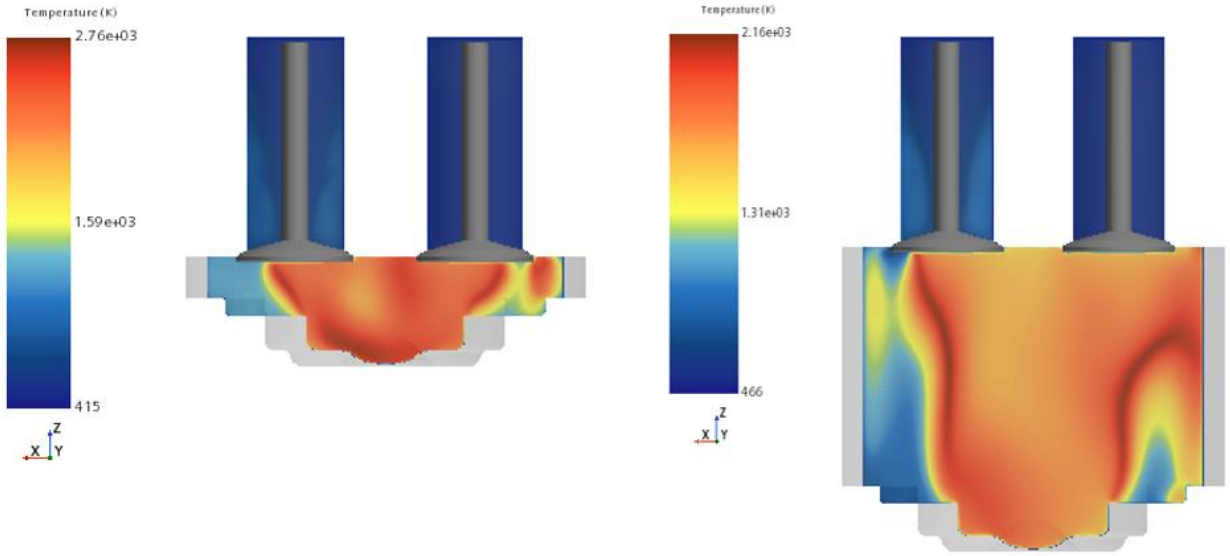
Zikloa konpresio tartean hasten denean, pistoiak goranzko mugimendua du. Horrek tenperatura homogenizatuko du ganbaran (irudia 77), kontuan hartuta sartze fluxua eten egin dela momentu honetarako eta turbulentzia maila ez da horren nabaria. Fase honetan, 650 Kelvinetatik 1420

Kelvinetara heltzen da zilindro barruko tenperatura. Azkeneko tenperatura horrekin ematen zaio injekzioari hasiera.



Irudia 77. Birabarkiak 181º, 237º eta 344º duenean tenperatura zilindroan

Errekuntzan zehar ematen den egoera 6.4.5.3 atalean ikusiko da; hortaz difusio eta difusiotik aurrera gertzen dena adierazi da irudia 78an. Errekuntza dela eta, tenperatura handitu da, erretako eta erre gabeko zonaldeak argi eta garbi desberinduz. Horrek, tenperaturaren espazio osoa desberdinduko du, eta gradiente oso handiak nagusituko dira.



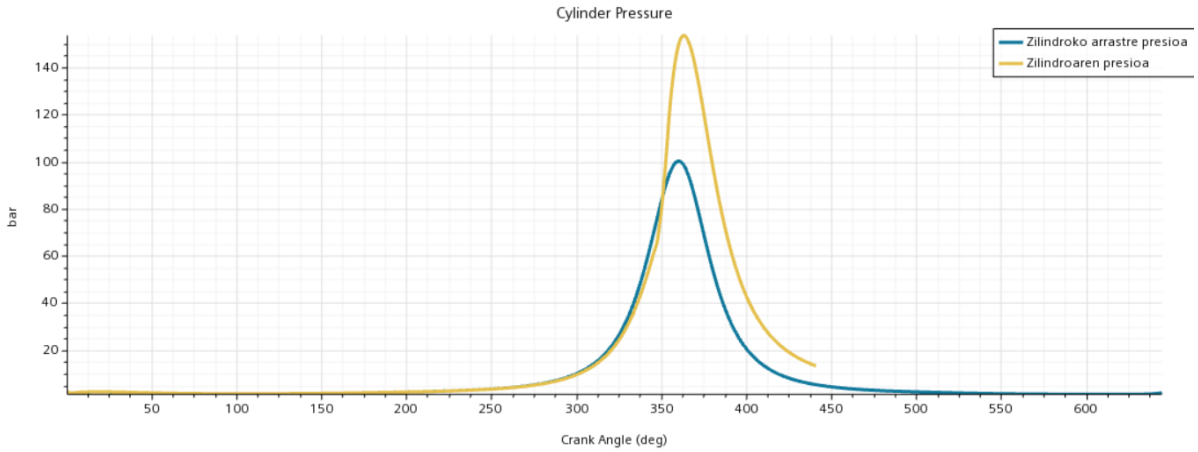
Irudia 78. Birabarkiak 386º eta 440º duenean tenepratura zilindroan

6.4.5.3 Konbustioaren ezaugarritzea

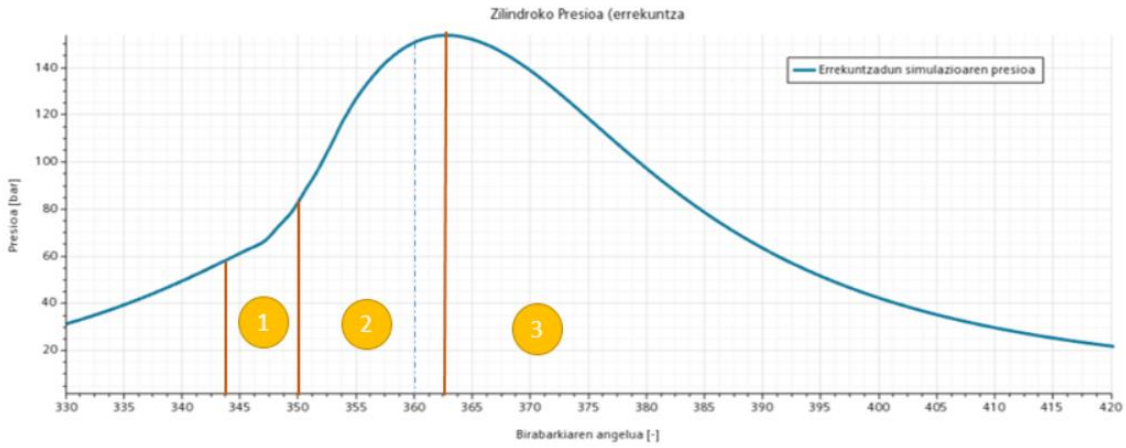
Injekzio ematen hasten denetetik, konbustioaren hiru faseak desberdindu ahal izan dira simulazioan, atzerapen fisiko-kimiko, errekuntza azkar eta difusio bitarteko errekuntza, hain zuzen ere. Lehenengo, presio diagramen bitartez sailkatu dira, ikuspuntu orokor batetik noski; ondoren,

aire/erregai erlazio, OH frakzio masiko eta tenperaturaren bilakaeri esker sakontasun handiagorekin ezaugarritu dira.

Normalean, konbustioaren bilakaera aztertzeko, errekuntzari esker lortutako presio diagramaz gain, "arrastre" (errekuntzarik gabe) kurba ere irudikatzen da. Bi kurba horien bereizketa ematen denean, errekuntza azkarra hasten da. Simulazioan, nahiz eta zilindroaren presioaren bilakaera erabat zentzuduna ez izan, birabarkiaren biraketa posizioa 350º denean separatzen dira bi kurbak (ikusi irudia 79). Hobeto desberdintzeko zonaldeak irudia 80a adierazi da.



Irudia 79. Simulazioaren presio kurba eta arrastre presio kurba

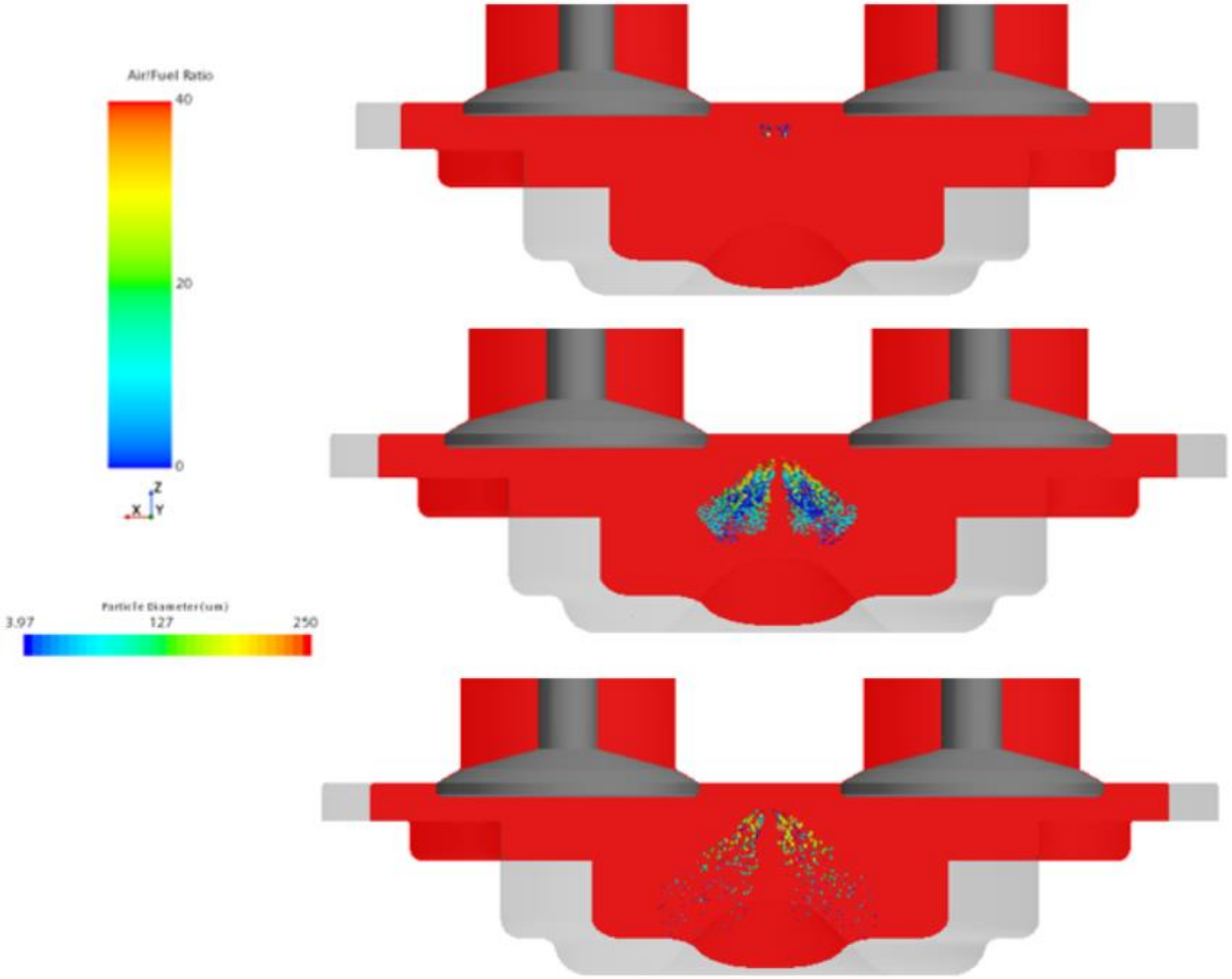


Irudia 80. Errekuntza fase desberdinak: atzerapen denbora (1), errekuntza azkarra (2), difusiozko errekuntza (3)

Lehenengo fasea, injekzioaren hasieratik arrastre kurbatik desberdintzen den puntura arte izango da, atzerapen denbora, hain zuzen ere. Ondoren, errekuntza azkarra emango da presio maximoa (gutxi gorabehera) izan arte. Azkenik, difusio bidezko errekuntza egongo da, erregai guztia errea arte (beti ere errekuntza egoteko baldintza fisiko-kimikoak ematen badira)

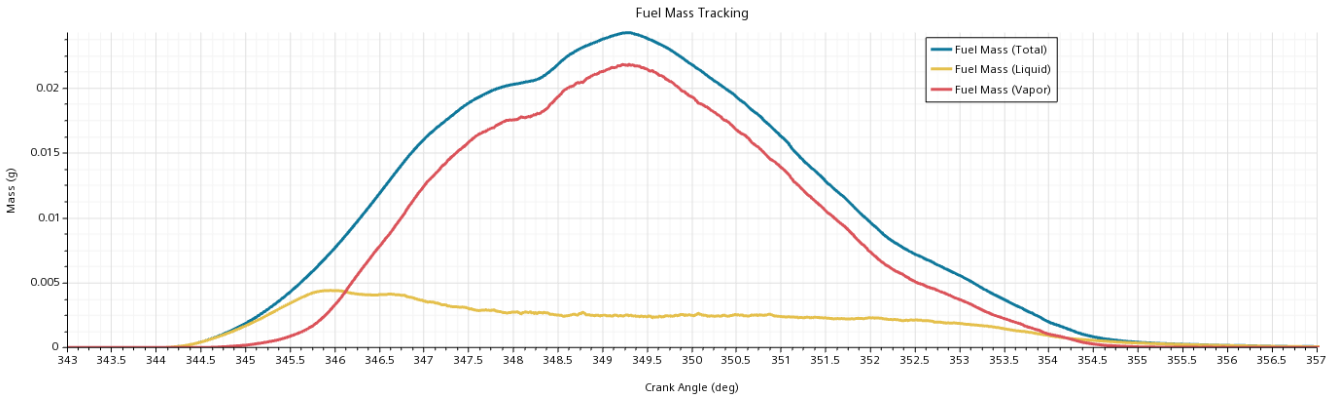
ATZERAPEN DENBORA (344-350º)

Atzerapen denbora, erregaia injektatu denetik errekuntzarako baldintzak bete arteko tartea da. Prozesu horretan, behin erregai partikulak injektatu direla, txorroa birrundu eta tantetan txikitu dira (irudia 81eko bigarren argazkia) eta denbora aurrera joan ahala, tantak lurrundu dira (irudia 81eko hirugarren argazkia) eta airearekin nahastuz joango da.

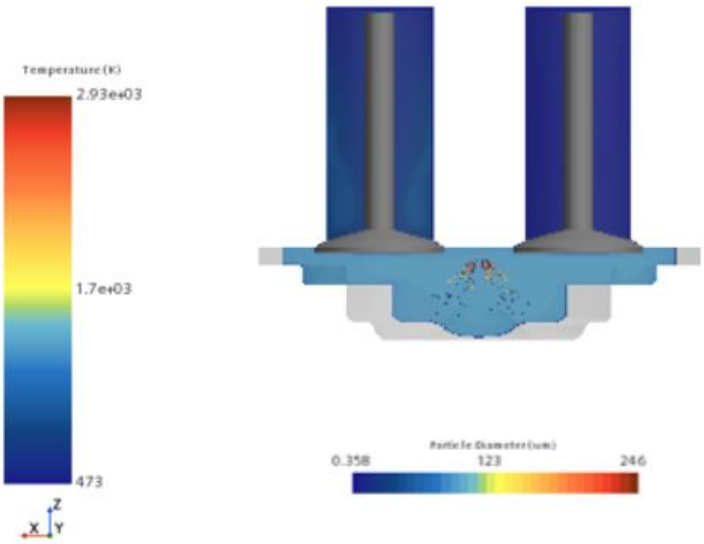


Irudia 81. Injekzioa atzerapen denboran eta nahastutako aire/erregai erlazioa eta erreagai partikulen hedapena

Irudia 82an injektatutako masa erregaia agertzen da (birabarkiaren angelu zehatz batentzako ganbaran dagoen erregai kantitatea). Hasieran, erregaia erabat likidoa dela ikusten da (344º-345º angeluen artean) eta 346º-tik aurrera lurrunketa are azkarragoa dela ikusten da. Puntu honetatik aurrera, ganbarako erregai masaren gehiengoa lurrunduta dago.



Irudia 82. Injektatutako erregai masa totala, lurruna eta likidoa

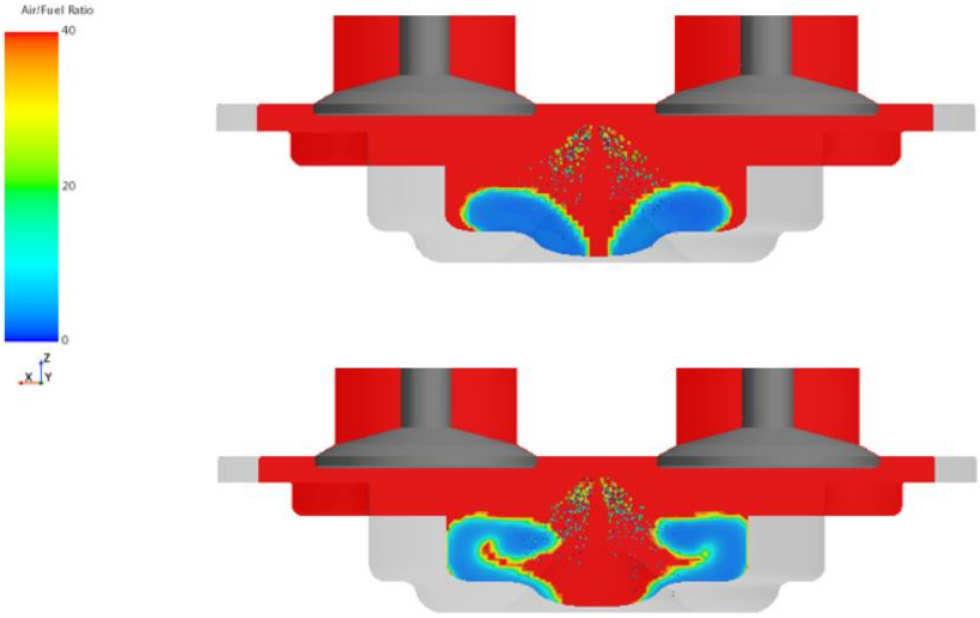


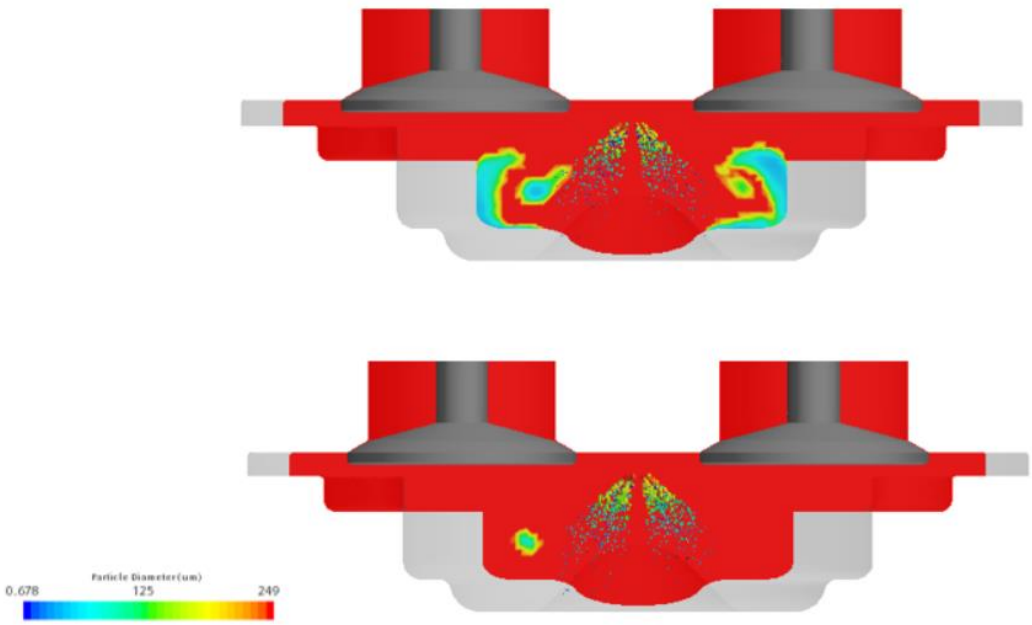
Irudia 83. Tenperatura zilindroan atzerapen denboran

Azkenik, atzerapen denborarekin bukatzeko, tenperatura oso homogeneo mantentzen da tarte honetan. Gainera, konpresio tartetik gailendutako tenperaturaren igoera leundu egiten da (1080 Kelvin inguru, ikusi irudia 71ko 350º-ko posizioa). Ondoren, errekuntza azkarra hasterakoan, oso bortizki igoko da tenperatura berriro.

ERREKUNTZA AZKARRA (350º-363º)

Behin erregai partikulen zati bat airearekin nahastu dela, erregai-aire nahastea agertu da simulazioan; hau da, errekuntzarako prest dagoen erregaia (irudia 84). Bilakaera oso azkarra da. Behin erregaia erreta, irudia 84an ikusten den bezala, kolore gorria (nahastea erabat airea) izatera itzultzen da; baina bien bitartean, ganbarako beste zonaldean erregai-nahastea errekuntzarako prestatzen da (irudia 84ko lehen eta bigarren argazkiaren arteko aldea) eta oso azkar erreko da ere (irudia 84ko hirugarren argazkian ikusi).





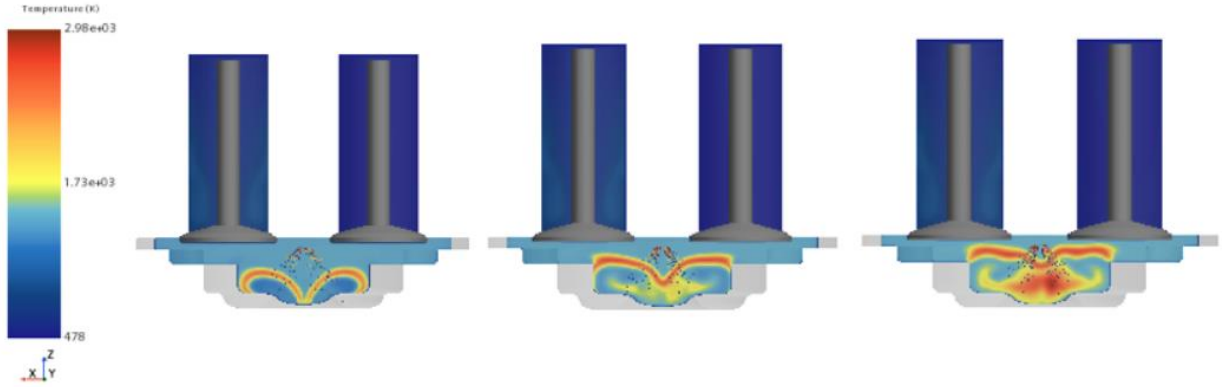
Irudia 84. Nahaste gaseosoaren erregai-aire erlazioa

Azkenik, atzerapen denboran zehar injektatu eta errekuntzarako prestatutako aire-erregai nahastea erabat desagertzen da, errekuntza azkarreko tarteari amaiera emanaz. Horrek ez du esan nahi erragaia injektatzeari utzi zaionik, fase honetan zehar (irudia 84an ikusgarri), injekzioak jarraitzen baitu.

Barne-errekuntzako motor batean hidroxilo erradikala (OH) agertzeak adierazten du errekuntzaren hasiera, oxigenoarekin erregaiaren oxidazio-erreakzioetan sortutako lehen produktuetako bat delako. OH-ak aktiboki parte hartzen du errekuntza mantentzen duten kate-erreakzioetan, energia askatuz. Beraz, errekuntza hasi dela adierazten du argi eta garbi. Zenbat eta frakzio handiagoko gunean izan, orduan eta konbustio intentsitate handiagoa.

Irudia 85. OH masa frakzioa errekuntza azkarrean

Irudia 85ean, ezkerreko argazkian, errekuntza azkarraren hasieran konpresio eta tenperatura baldintzak beteta errekunza puntualak (injektoretik gertu) agertzen hasten dira. Denbora igaro ahala, puntu gehiago sortu direla antzematen dira. Fenomeno hau oso ohikoa izaten da errekuntza azkarreko fasean.

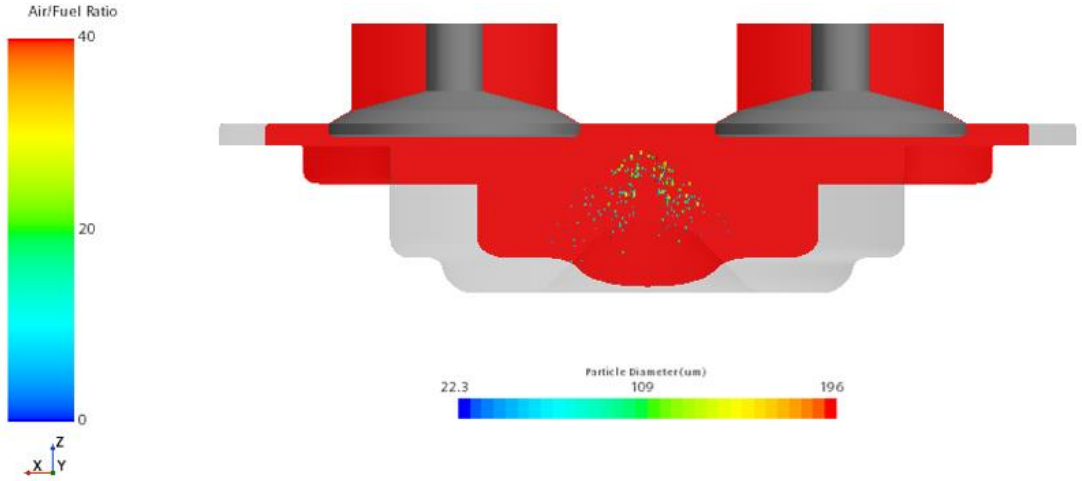


Irudia 86. Tenperaturaren bilakaera errekuntza azkarrean

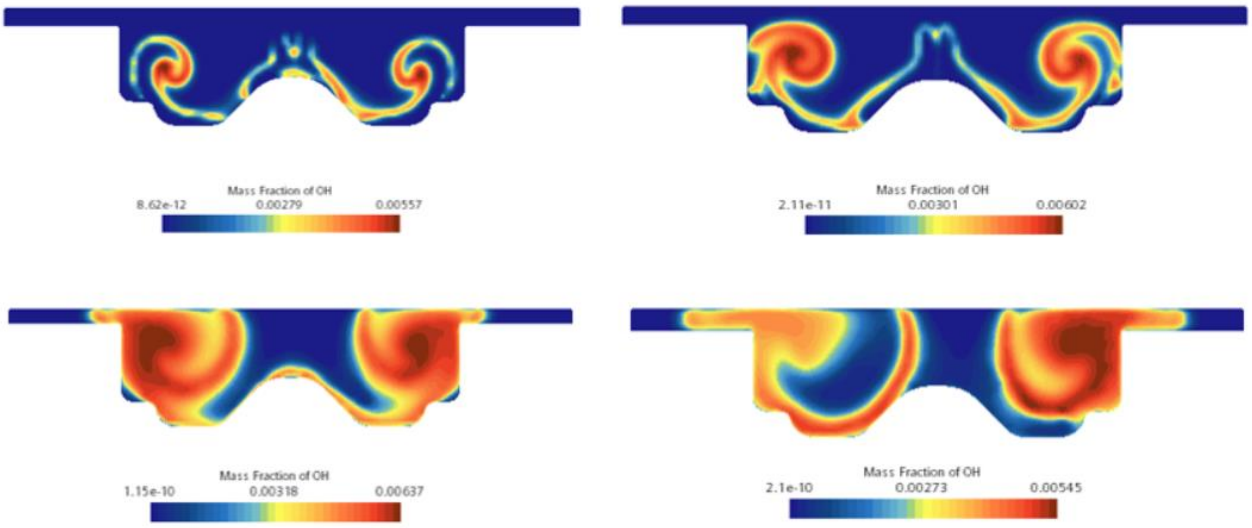
Errekuntza azkarraren atalarekin amaitzeko, tenperaturaren bilakaera adierazi da irudia 86an. Atzerapen denboran, tenperatura konstante eta homogenoa gailendu da; fase honetan, aldiz, tenperatura sugar frontearen bilakaerarekin bat dator. Tenperatura altuenak, erretzeen ari den zonaldean antzematen da, erreakzio exotermikoen bero askapenagatik. Sugarra ganbaran zehar hedatzen doa eta erretako zonaldea, hasiera batean, azkar hozten da da, diesel motorrek aire soberakin handiarekin aritzen baitira. Aitzitik, Irudia 86ko azken argazkian, pistoitik gertuko zonaldean tenperatura altuak agertzen hasten dira ere; alde batetik, difusioa hastear dagoelako; bestetik, erretako egoera egonkortzen hasi delako.

DIFUSIO BITARTEKO ERREKUNTZA (363º-tik aurrera)

Behin errekuntza azkarra amaitu dela eta P_{max}-eko puntua gainditu denean, difusiozko errekuntzaren txanda da. Tarte honetan, nahastea ez da homogenoa (ez dira erabat nahasten) eta aire eta erregaia elkar nahasten dira difusioz. Errekuntza azkarrean injektatu eta erre gabeko erragai edo oraindik injektatzen jarraitzen den erregaiak parte hartzen du. Kasu honetan, injekzioa amaitu da, nahiz eta erregai partikulak ondino ganbaran jarraitu (irudia 87). Hala ere, ez dago aire –erregai nahaste homogeneorik (irudia 87).

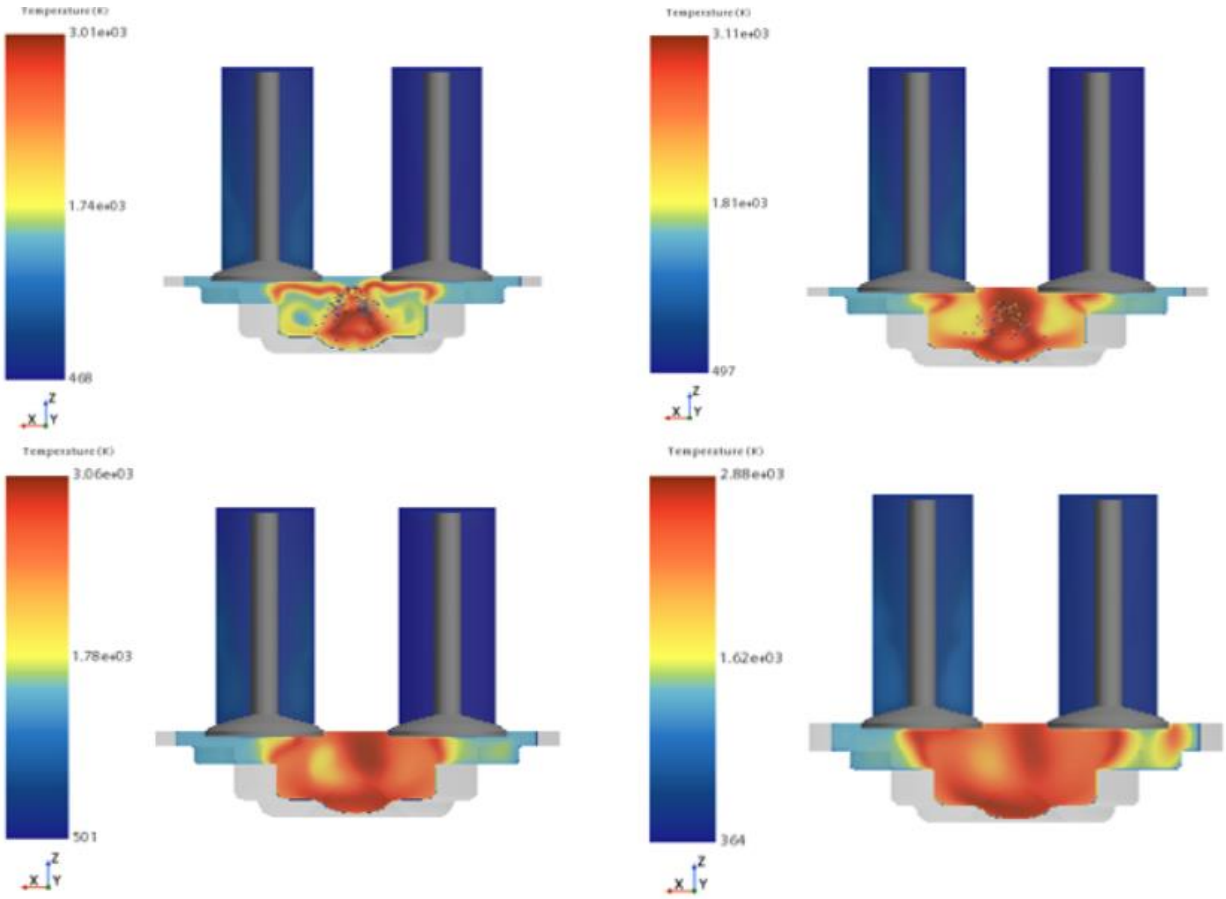


Irudia 87. Erregai-aire erlazioa eta partikulen hedapena errekuntza difusoaren hasieran



Irudia 88. OH erradikalen masa frakzioa errekuntza difusoan

OH erradikalen egoera, tarte honetan, erabat hedatuta agertzen da. Errekuntza guneak ez dira horren puntualak (irudia 88ko lehen argazki eta azkenengoaren arteko ezberdintasunari erreparatu), errekuntza guneak batu egiten dira eta aire-erregaia difusioz nahasten doazen heinean, errekuntza zonaldea handituz doa ere.



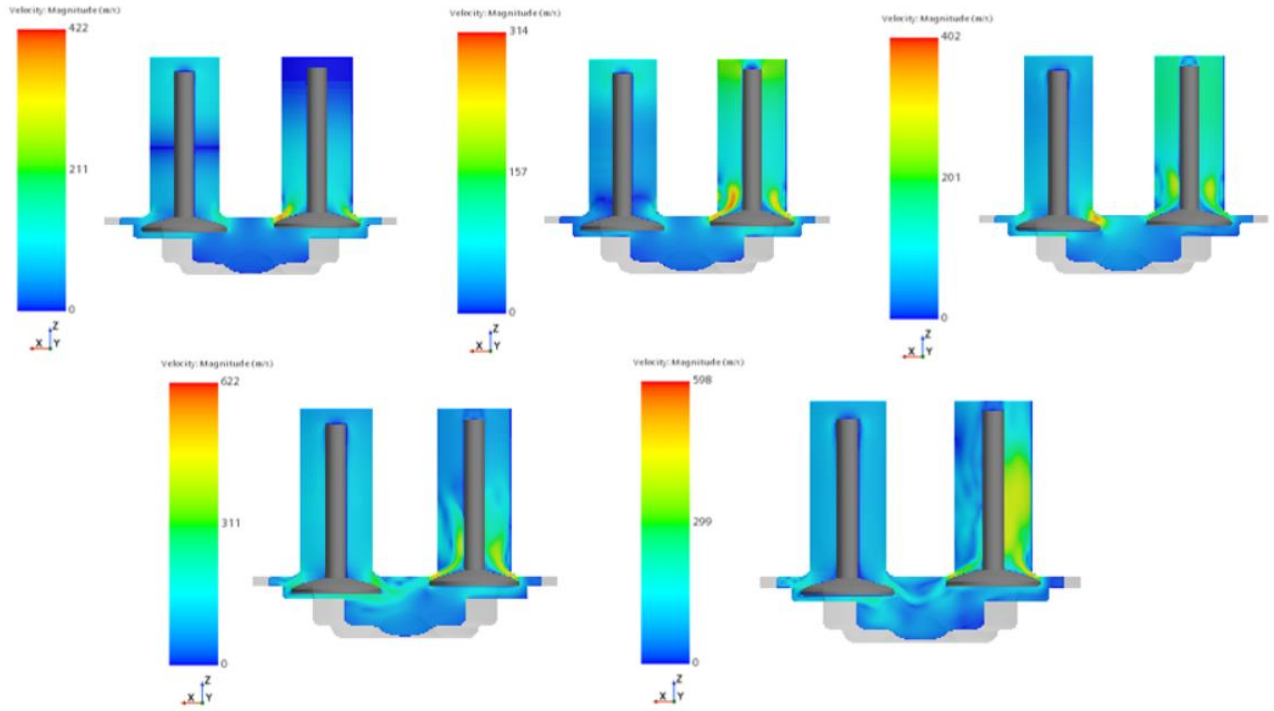
Irudia 89. Tenperaturaren bilakaera errekuntza difusoan

Azkenik, tenperaturaren bilakaeraren bitartez difusio bitarteko errekuntza ondorioztatuko da. Irudia 89ko lehen argazkian, gar fronteak nagusitasuna uzten dio pistoitik gertuko zonalde beroari; hau da, errekuntza azkarrako fasetik difusiora pasatzen hasten da. Denbora igaro ahala tenperatura beroak (ez-homogeneoak) ganbara osotik hedatzen dira (oraindik partikulekin, irudia 89ko bigarren argazkia); baina zikloari jarraituz, tenperatura homogenizatzen eta hozten hasten da (difusioagatik eta bolumen handitzearekin).

6.4.5.4 Abiaduraren bilakaera

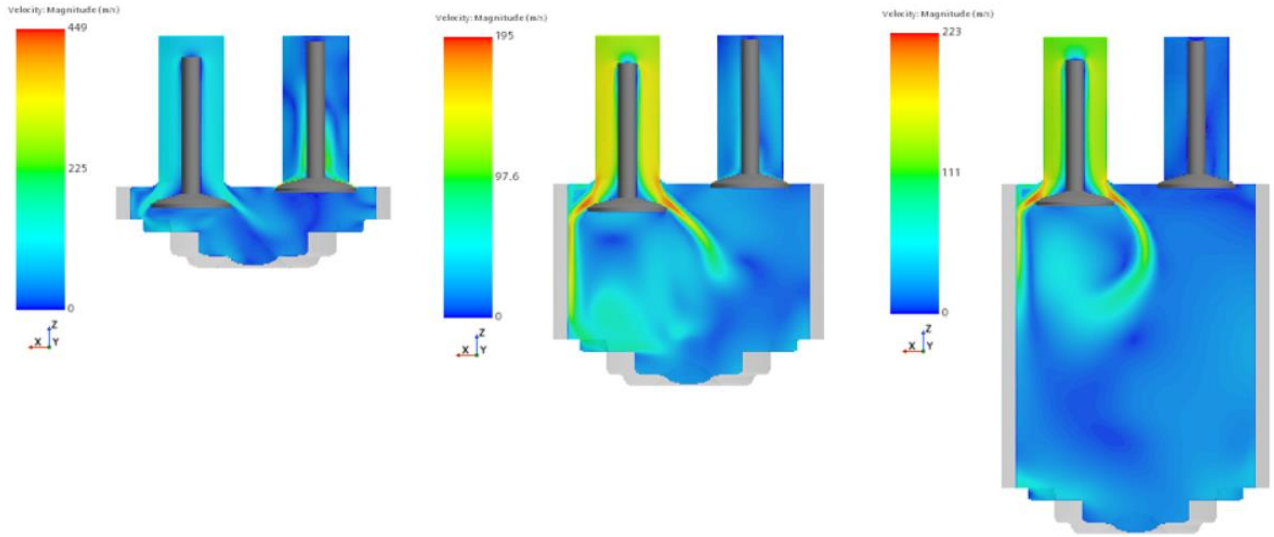
Abiadura bada kontuan hartzeko beste parametro bat, fluxuaren norabideak eta turbulentzia maila ezaugarritzeko, batez ere. Presio eta tenperaturen bitartez, abiadurarekin lor daitezkeen ondorioak atera ahal dira; baina bada ez bada ere aztertu egin da.

Beste behin, lehen iterazioak irudikatu dira (irudia 90), hasierako egoeraren egonkortzea aztertzeko asmoz. Birabarkiak 3º biratzen dituenerako, aire sarrera errekuntza ganbaran sartu da. Haren inertziak, irteera balbula irekita dagoelarik, bultzatu egiten du fluxua irteerako portura (bultzada eta inertziaren erabilera karga berritzeko), bai aire sarrera bai gas hondakinak kanporatuak izanik. Bestalde, zonalde kritikoak irteera/sarrera direla antzeman daiteke; bertan, abiadura oso altuak (baina tenperatura altukoak) baitaude, estuguneengatik, hai zuzen ere. Orokorrean, sarrera fluxuak baldintzatuta, turbulentzia maila altua nabarmentzen da.



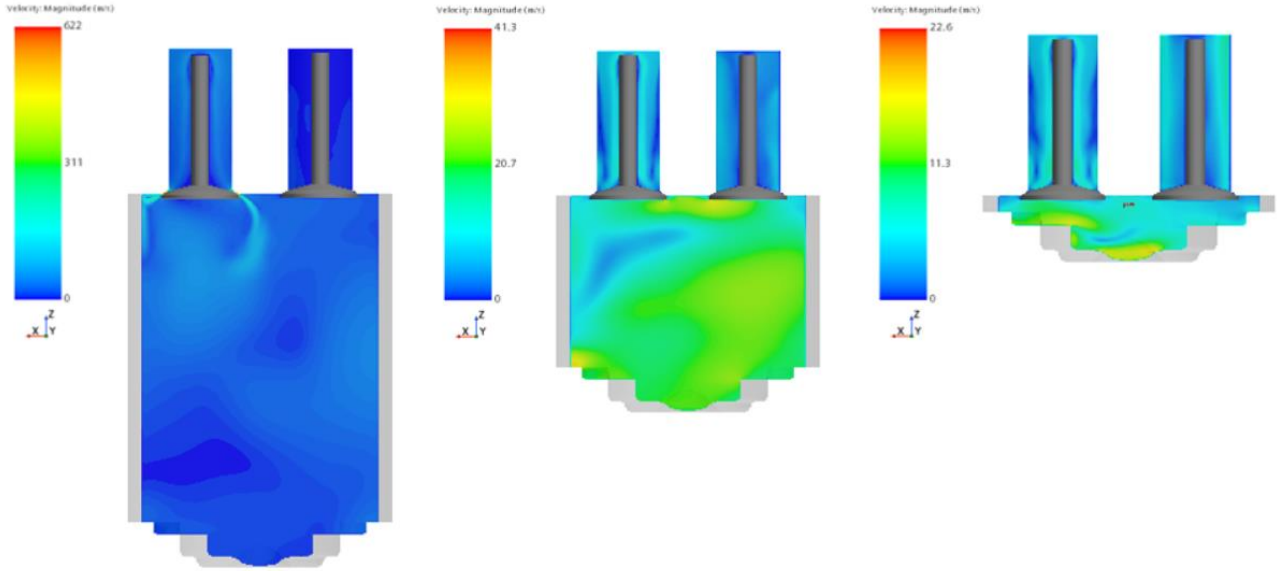
Irudia 90. Birabarkiak 1º, 2º, 3º, 5º eta 8º duenean abiaduraren bilakaera

Irteera balbula ixterakoan, ihes fluxua desagertzen da eta sarrera fluxuak pistoiarantzako bidea hartzen du (irudia 91). Berriro, balbularen forma jarraizen du aire fluxuak; baita zilindro paretaren norabide tangentziala ere. Paretetatik gertu laminartasuna eta abiadura handiak nabarmentzen dira; baina fluxua urruntzen hasten denean, tenperaturan ikusitako joera bera hartzen du, zurrunbilotsua. Zenbat eta bolumen handiago izan ganberan, fluxuaren energia zinetikoa murriztuz doa.



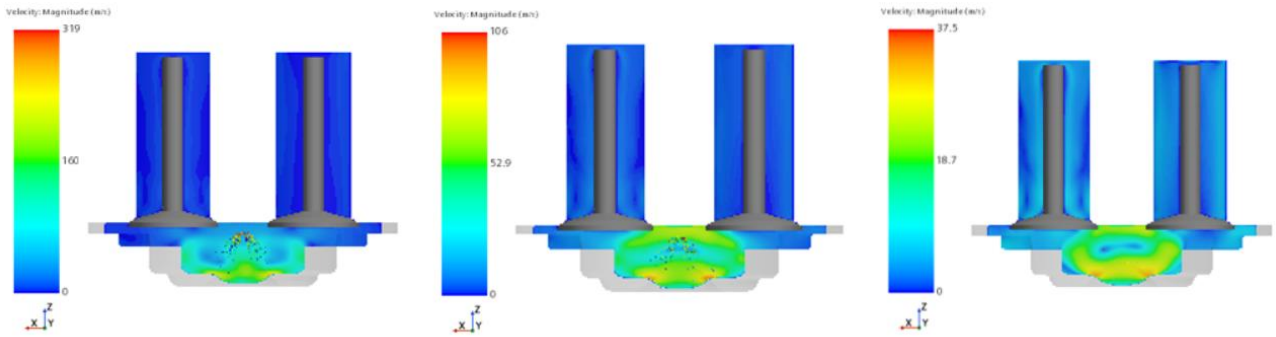
Irudia 91. Birabarkiak 28º, 75º, 132º duenean abiaduraren bilakaera

Errekuntza aurreko konpresioan, sarrera balbula ia itxita dagoelararik, fluxua turbulentua izaten jarraitzen du, nahiz eta, turbulentzia maila ganbara osoan murritu den. Injekzioa hasten denean (irudia 92ko azken argazkia), fluxua turbulentua da, baina abiadura eskala txikiarekin.



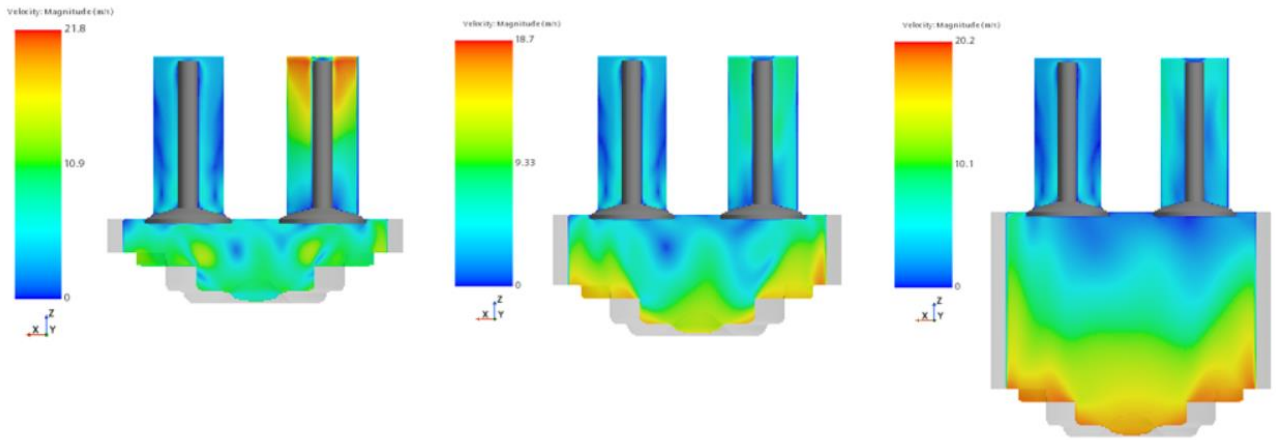
Irudia 92. Birabarkiak 200º, 273º eta 344º duenean abiaduraren bilakaera

Errekuntza fasean zehar bi fenomenok baldintzatzen dute tenperatura: injekzioak eta errekuntzak. Atzerapen denboran, partikulen abiadura azkarrak kitzikatuko dute ingurunea (irudia 93ko lehen argazkia); baina errekuntza azkarrean (irudia 93ko bigarren argazkian), garraren hedapenarekin bat etorriko da abiaduraren bilakaerarekin. Difusio bitarteko errekuntza fasean, abaidura moteltzen hasten dela ikus daiteke irudia 93ko azken argazkian.



Irudia 93. Errekuntza fasean zehar abiaduraren bilakaera

Difusioari esker, zilindoraren barruko abiadura homogenizatzen hasten da, gar frontearen eragina desagerraraziz. Hedapenean zehar, difusioan lortutako abiadura eskala mantentzen da, baina, pistoitik zenbat eta gertu egon orduan eta azkarragoa da fluxua. Gainera, turbulentzia ez da horren nabaria fase honetan.



Irudia 94. Difusiozko errekuntza eta hedapen fasean zehar abiaduraren bilakaera

6.4.5.5 Emisioak

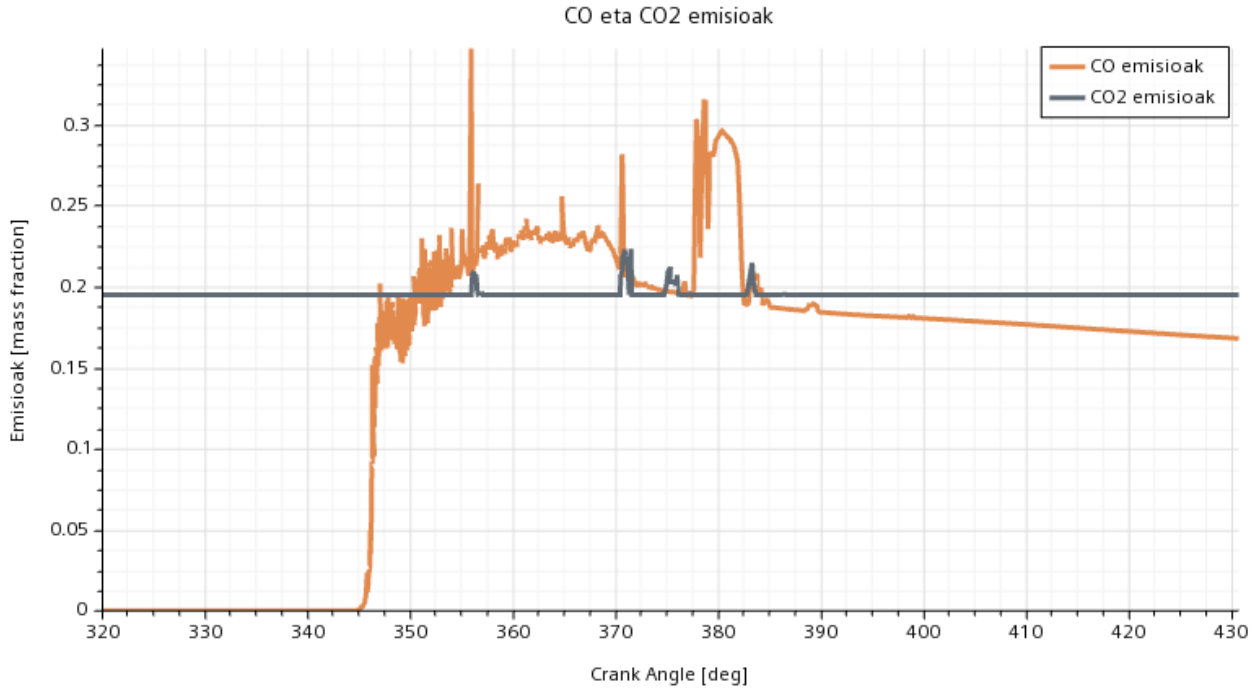
Motor baten edozein ikasketan emisioak aztertu behar dira. Atal teorikoan ikusi bezala, NOx, karbono monoxido eta dioxido eta hidrokarburo soberakinak aztertzen dira gehienbat. ERANSKINAK Iletan irteerako portuan, antzeko saikuntzetatik neurtutako emisio emari eta frakzioak daude ikusgai. Hasiera batean, eranskinetako neurketekin alderatu nahi ziren modeloan kalkulatutakoak, baina ziklo osoa ezin izan denez simulatu, ez dira bat etorri. Azken finean, motorretik kanporatzen diren gasen konposizioari erreparatu nahi zaio eta ez ihes balbula oraindik irekita ez dagoen egoera bati.Hori dela eta, Taula 17an adierazitako emisio mailak, errealitatetik asko urruntzen dira. Emisioen artean, HC soberakinak aztertzea ohikoa izaten da emisioen neurketan, baina hidrokarburoak neurtzeko dodecano polimeroa zein beste kate txikiagotan bilakatzen den kontuan hartu beharko litzateke eta hori oso lan konplexua da.

Taula 17. 440º-tan neurtutako emisio mailak

Emisioa	Unitatea	Kantitatea
NO	ppm	1398
CO	ppm	50.586
CO2	% masa	10,03
O2	% masa	6,08

Emisio mailatik erabat aldentzen datua CO-ren emisio tasa da. Datu horrek argi eta garbi adierazten du zikloa ez dela amaitu, haren balioa 100 ppm-ko eskalan egon ohi baita eta saikuntzan 100 aldiz handiagoa da. Egia da COaren balio, hedapenean, bortizki murrizten doala, baina, oraindik ere, 440º-ko birabarki angeluarentzat handiegi da. NOari erreparatuta, haren baliio ohiko eskalara moldatzen da, nahiz eta tasa handiegia neurtu. Kontuan izan, behin difusio errekuntza bukatuta NO frakzioa oso konstante mantentzen da (ikusi irudia 30), haren sorrera/desagertze mekanismoak tenperatura altuekin aritzen dira-eta.

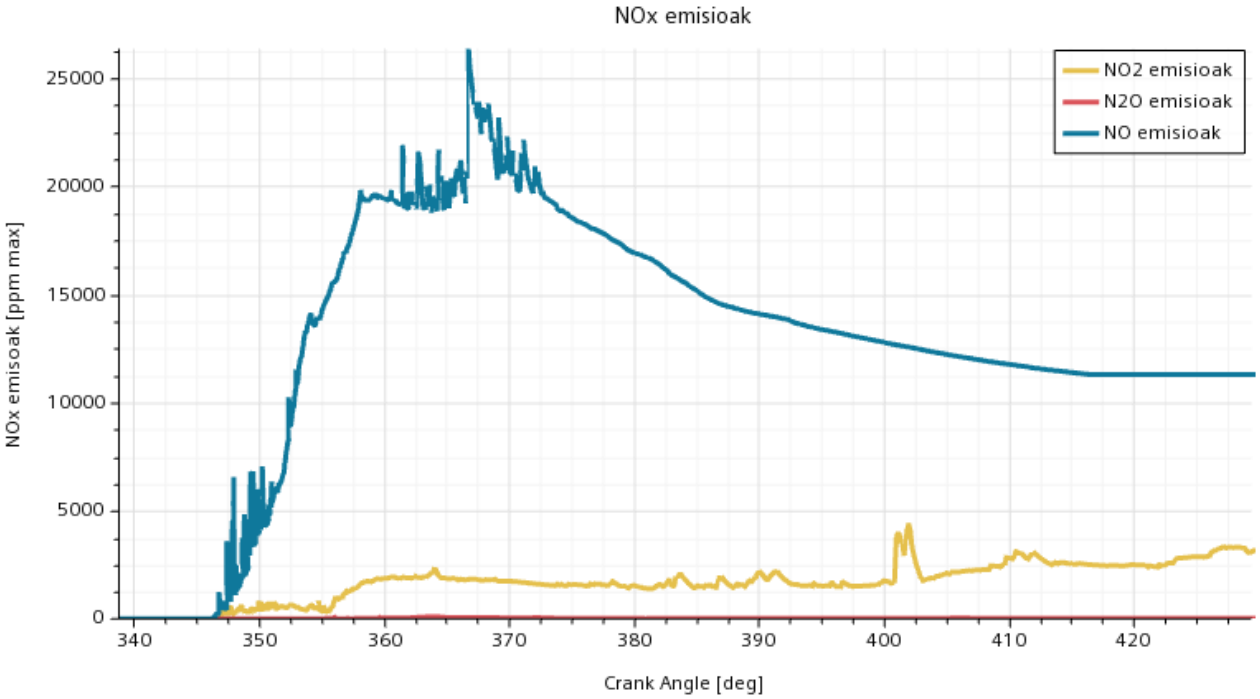
CO eta CO_2 makanismoak, ziklo osoa zehar izandako bilakaera ikusteko irudia 95 grafikatu da. Ez zaie balore eskalarrei arreta jarriko, momentu bakoitzean gelaxka guztietatik neurtutako emisio maximoa adierazi baita), bakarrik tendentziei. Errekuntza azkarrarekin batera agertzen dira CO emisioak. Erabat zentzuduna. Hala ere, errekuntza difusoa aire nahikodun egoera izanik, ez du logikarik CO pikorik agertzea (birabarki angelu 380º-an). Hori bai hedapen fasean, balioz murrizten doala antzeman daiteke. CO_2, aldiz, nahiko konstante mantentze da. Bakarrik COaren beherakadan areagotzen du bere balioa (CO-a suntsitu).



Irudia 95. CO eta CO2 emisioak (gelaxketan neurtutako frazkio maximoak)

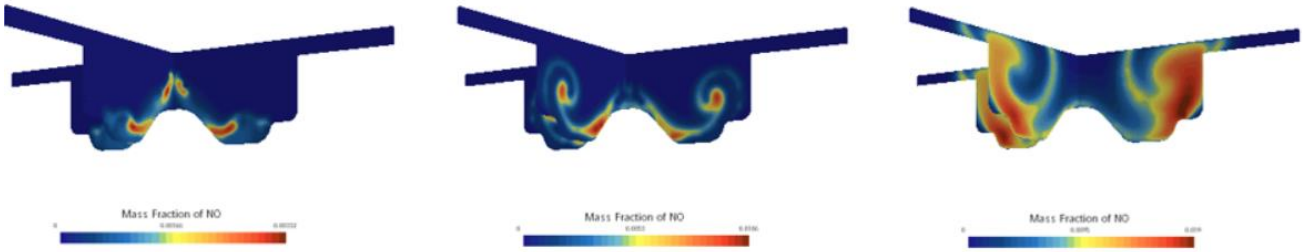
Irudia 96an, NOx emisioak adierazi dira eta gelaxka guztietatik lortutako frakzio maximoak adierazi dira (bakarrik tendentziei erreparatu). Errekuntza azkarrean, NO emisioak izugarrizko gorakada pairatzen dute, tenperaturak izugarrizko gorakadaren ondorioz. Gainera, NO_2 konstante

mantentzen da, hau da, NO-ren suntsiketa mekanismoa ez da gai NO-ren gorakada neutralizateko. Behin P_{max}-era helduta, tendentzia berakorra jarraitzen du eta hedapenean sartuta, hoztu egiten da, tenperatura dela eta. Gainera, hedapenean zehar, teneperatura ez denez horren altua, NO_2-ak areagotzen dira, NO-ren suntsiketagatik.



Irudia 96. NOx emisioak (gelaxkaetan neurtutako frakzio maximoak)

Azkenik, NO emisioak adierazi dira irudia 97an. Errekuntza azkerreko tartean, OH erradikalen antzera, gune puntualetan metatzen dira, konbustio-injekzio sistemak horrela baldintzatuta. Ondoren, difusioan zonalde handiagotan sortu/metatu egiten dira, erregai-aire aurre nahasketak ez daudelako.

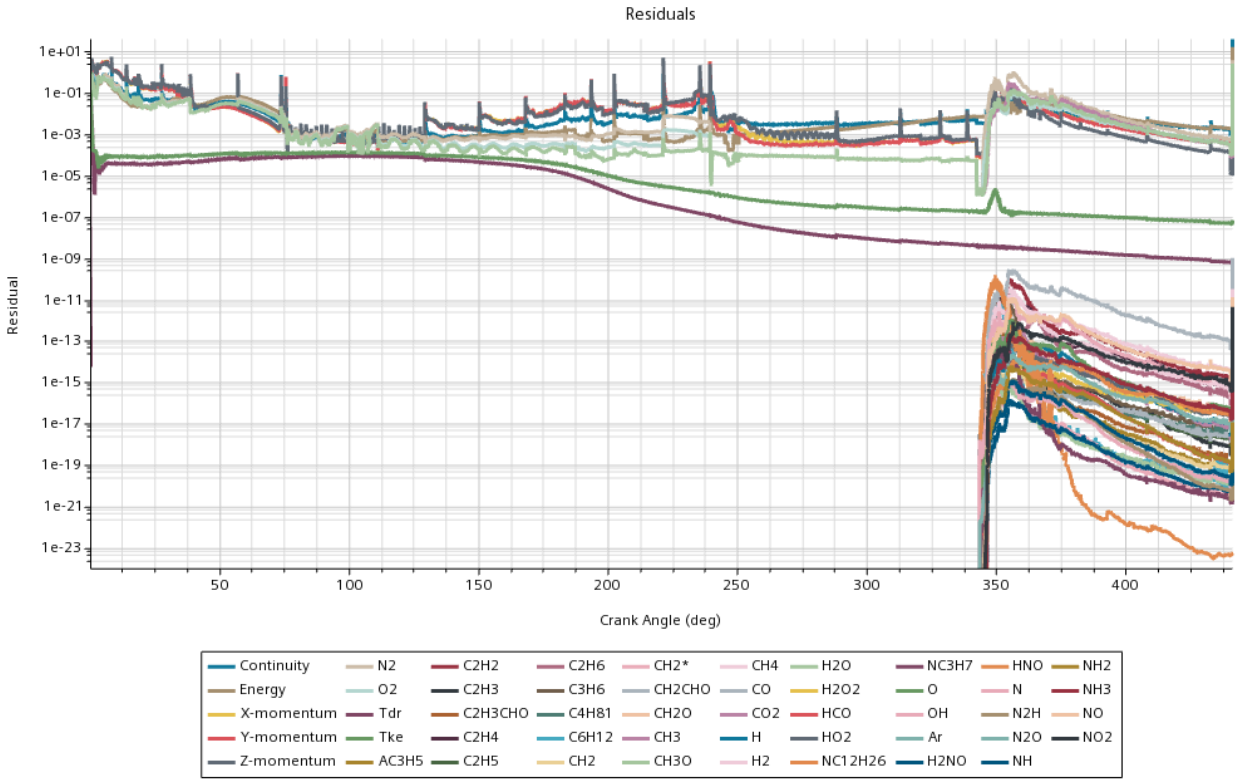


Irudia 97. Errekuntza azkar eta difusiozkoan NO-aren bilakaera

6.4.5.6 Konbergentzi / dibergentzia

"Residuals"-en (hondakinak) azterketak, STAR CCM+ konbergentzia/dibergentzia aztertzeko balio du. Azken finean, simulazio-sareko gelaxka bakoitzerako kontserbazio-ekuazioetako (masa, momentu, energia, etab.) erroreen edo desoreken neurketak dira hondakinak. Irudia 98an, ikusten den bezala hiru norabide kartesiarrentzako garraio ekuazioak, jarraitutasunaren eta energiaren kontserbazio ekuazioak, turbulentziarenak (Tdr eta Tke) eta konposatu bakoitzaren kontserbazio

ekuazioak adierazten dira, edo hobeto esanda iterazo artean emandako errore erlatiboa (hondakinak).



Irudia 98. Simulazioaren errorea ("Residuals") birabarkiaren angeluaren menpe

Iragankortasun handiko simulazioetan, konbergentzia zehetasun handiz interpretatu behar da. Simulazioaren aldagaiak (tenperatura, abiadura, presioak, etab) uneoro aldatzen dira; gainera, birmailaketaren ("remesh") ondorioz, simulazioa osoa berriro hasierazten denez konbergentziaren tendentzia aldatzen da (irudia 98ko pikoiei erreparatu). Are gehiago, balbula eta pistoiaren mugimenduak badu zer esanik ere; zorionez, konbergentzian ez du oztoporik suposatu, birmailaketarekin alderatura.

344º-tik aurrera, erreakzioan parte hartzen duten konposatu berrien erreakzioak ikusten dira, konbergentziarako tendentzia adierazten dutenak eta badirudi birmailaketak eragin gutxi egiten diela. Hortaz, erreakzio kimikoen bideragarritasuna bermatzen da.

Konbustioari dagokionez, 440º-tako dibergentzia aipatu behar da. Zoritxarrez, konposatuen garraio ekuazioak dibergitu egiten dute. Injekzio sistemaren, zilindro tenperatura edo hasierako baldintzak doituta ere ez da lortu dibergentzia puntu horretatik mugitzea edo desagertaraztea. Hala ere, motorraren zikloaren fenomenoak aztertu ahal izan dira. Programaren lehen dibergentzia nitrogenoaren garraio ekuazioak pairatu du, bataz besteko tenperaturaren dibergentzia handiagatik. Azkeneko arlo horretan jarri beharko da fokua.

Azkenik, errore mailari buruz ondorio positiboak atera daitezke, amaierako dibergentzia kenduta, noski. Momentu baten ere ez du unitatearen langa gainditzen eta turbulentzia parametroetan esaterako konbergentzia maila oso ona da.

6.4.6 Emaitzen interpretazio orokorra eta etorkizunerako urratsak

Parametro guztiak komentatuta, simulazioaren gaineko emaitzetatik abiatuta, modeloaren bideragarritasuna ondorioztatuko da. Horretarako, diesel bitartez bakarrik funtzionatzen duen simulazioa baloratu, beharrezko moldaketak aipatu eta modelotik esperotako fenomenoak nabarmenduko dira.

Lehendabizi, motorraren ziklo osoa ezin izan da simulatu. Birabarkiak 440º biratutakoan, programak gainezka egin du, nitrogenoaren garraio ekuazioan, bataz besteko tenperaturaren gehiegizko dibergentzea dela eta (seguraski konposatu gehienetan gertatuko litzateke; baina lehenengo dibergitzen nitrogenoarena izan da).

Bestalde, presio diagraman (irudia 68) ikusi daiteke P_{max}-k alde batetik, laborategiko entseguetako neurketak gainditzen dituela eta bestetik, puntu hori GGP-tik gertuegi dagoela. Presio maximoaren kokapena, GGPtik 10º gradura (gutxi gorabehera) kokatzen da, bielak birabarkiaren gainean eragindako bultzada eraginkorragoa izan dadin (palanka efektua) eta simulazioan 3º-ra bakarrik kokatzen da. Zenbat eta goiztiarragoa izan, orduan eta presio handiagoa sortuko da ganbaran (konprimatze fasean errekuntza azkar guztia), baina, nahiz eta bultzada oso handia izan, ikuspuntu mekaniko batetik, ez da horren eraginkorra. Komenigarriago da P_{max}-eko puntua atzeratzea eta presioa ez izatea horren altua. Laburbilduz, errealitateko egoerara hurbiltzeko, errekuntza azkarreko tartea moteldu egin behar da. Horretarako bi posibilitate daude:

- **Injekzio-sistema doitu**: Ez bilbliografiatik ezta hornitzaileraren eskutik ere ez da lortu injekzio fenomenoaren gaineko informazio handirik. Injekzio presio, zuloen kokapen eta diametro eta injekzio emariaz gain, ez da beste daturik ezagutzen. Propietate gehiago ezagutu ezean zail samar lortuko da errekuntza azkarra moteltzea.
- **Tenperaturak aldatu**: Hasierako egoera interpretatzeko datuak hasieratik egon dira eskuragarri, baina simulazioan posible da ondo ez moldatzea. Gainera, paretatako tenperaturen inguruan ez da asko ezagutzen. 550 Kelvinetan ezarri da ohiko datua delako; baina ez da ezagutzen laborategiko egoera. Ondo legoke hasierako eta pareten tenperaturak hobeto ezagutzea; bestela saikuntza anitz egiten jarraitu beharko da esperotako presio-diagrama lortu arte.

Hala ere, 440º-ko birabarki angelura heldu izana, hasierako egoera eta mugalde baldintzengatik izan da; hortaz, kontu handiz ibili behar da datu hauek moldatzearekin, esaterako, simulazio asko planteatu dira pareten tenperatura eta hasierako egoerako tenperaturak aldatutata eta batzutan, ez beharrezko tenperatura lortu konbustioa aktibatzeko.

Turbulentziari dagokionez, bai tenperatura bai presio eta abiaduraren aragazkietan datu zentzudunak lortu dira eta kalitatate (zehaztasun) handikoak. Are gehiago, "residuals"-etan turbulentzia parametroek konbergentzia oso erraz lortu dute.

Errekuntzan ere, mekanismoak behar bezala funtzionatu dute, konbustioko atal guztietan adierazi bezala; egia da errekuntza azkarra, azkarregia izan dela, baina presio maximoaren kokapena ikusita, seguraski, ez dela mekanismo kimiko, termodinamiko edo konposatuen garraio ekuaziaoen arazoengatik izan. Gainera, "residuals"-etan mekanismoen konbergentzia gailentzen da. Hori bai, erreakzio eta konposatu gehiegi erabili dira konbustiorako eta horrek simulazioa asko pisutu du. Etorkizunerako, simulazioak erabili gabeko mekanismoak identifikatu beharko lirateke eta sistematik kanporatu, nola ez, txarreranzko aldaketak egiten ez dituela bermatuz.

Simulazioaren ondorioekin amaitzeko, emisiotan badagoela zer eginik nabarmendu behar da. Grafikatutako tendentziak badute zentzuzko esanahia orokorrean, baina balore eskalarrak errealitatetik oso urrun daude. Ondo legoke, behin erabateko konbergentziadun simulazioa izatean, emisioak berriro kalkulatzea; baina ez dirudi lan honetako emaitzak balioagarriak izango direnik.

Etorkizunean, suposatuta dieselarekin simulazioa laborategiko emisio, potentzia, tenperatura, presio eta abar lortzen dituela, hidrogenoa inplementatzeko unea izango da. Karga desberdinentzat balioztatutako hasiera balio, injekzio sistema eta mugalde baldintzak sistema dualerako abaipuntutzat hartuko da.

Oso garrantzitsua izango da zein ikuspuntutik planteatzen den hidrogenoaren ordezkapena. Bibliografiatik atera bezala, masa frakzio, bolumen frakzio edo energiaren frakzioen ordezkapena erabiltzen da hidrogenoaren eragina antzemateko eta horren arabera, dieseldun simulazioatik garatutako informazioa modu batera edo bestera erabili beharko litzateke. Modelo fluidomekaniko, geometria, maialatua, sistema dualaren simulazioa,n berdin berdin erabiliko lirateke.

7 Azken ondorioak

Arrazoiak arrazoi, aldaketa klimatikoaren aurrean, gizarteak badauzka hamaika urrats egiteko, horien artean Berotegi Efektuko Gasen emisioak erabat deuseztatu edo ahal den heinean murriztu. Mundu globalizatu honetan, produktuen ekoizpena, moldaketa eta salmenta puntua erabat deszentralizatuta daude, garraiobide industrialak ezinbestekotzat hartuz. Itsasontziak eskala industrialean merkatalgaiak garraiatzeko modu ezinhobea da, karga kantitate oso handiak (hamar milako eskalan) garraio ditzake-eta.

Hala ere, testuinguruan ikusi bezala, BEG emisioen %5ak merkatal-ontziek osatzen dute eta etorkizunean ontzi gehiago espero dira. Horren ondorioz, erregai konbentzionalen aurrean proposamen ekologiko eta jasangarriak bilatu dira. Horien artean, lan honetan, diesel-hidrogeno motor dualak aukeratu dira, batez ere aplikagarritasun graduala dela, gaur eguneko gizarteak denbora behar baitu hidrogenoa bezalako inplementazioa erabat ezartzeko.

Bi izan dira proiektu honen helburuak: alde batetik, hidrogenoak dakartzan aldaketak ikastea eta ohiko konbustioan zer/nola funtzionatzen duen aztertzea; bestetik, CFD simulaziorako erreminta konbustioan erabiltzen ikastea. Horretarako Bilboko Ingeniaritza eskolako motor batean aplikatu da eta dagoeneko, bertan, aurrera eramandako neurketak eta simulazio monodimentsionalak, STAR CCM+rekin alderatu. Etorkizunean hidrogenoaren gainean simulazioak egiteko baliogarritzat har daiteke simulazio hauetan lortutako emaitza eta ondorioak.

Hidrogenoaren inplementazioari dagokionez, argi geratu da, proposamen paregabe eta aurrerakoia izan daitekeela. Sugarraren bilakaera bestelakoa izango da, NO_x emisioak bestelakoak; baina karbono dioxidoen emisioak murrizten ditu hein handian eta dieselaren aurrean potentzia gaitasun handiagoa du.

CFD saikuntzaren harira, horrelako simulazioen konplexutasuna argi geratu da; ez bakarrik karga konputazional oso handia eskatzen duelako; baizik eta errealitateko diseinutik beharrezkoa delako ahalik eta datu gehien ezagutzea eta askotan ez da posible. Konbergentzia, aldagai termodinamiko askoren zein gelaxkaren kalitatearen menpekoa da; horregatik diseinu parametroak behar bezala adostu behar dira, askotan "proba-errore" metodoa erabiliz. Etorkizunera begira, ondo legoke motorraren parametro gehiago ezagutzea (txorrotaren luzera edo pareten uneoroko tenperatura), batez ere hidrogenoa sartu nahi bazaio. Dualtasuna inplementatzerakoan, hasierako balioak ez dira ezagunak izango, ezta mugalde baldintzak; hortaz diesel soileko saikuntzetik lortutakoetatik hasi beharko da, konbergentzia bermatu beharko luketena.

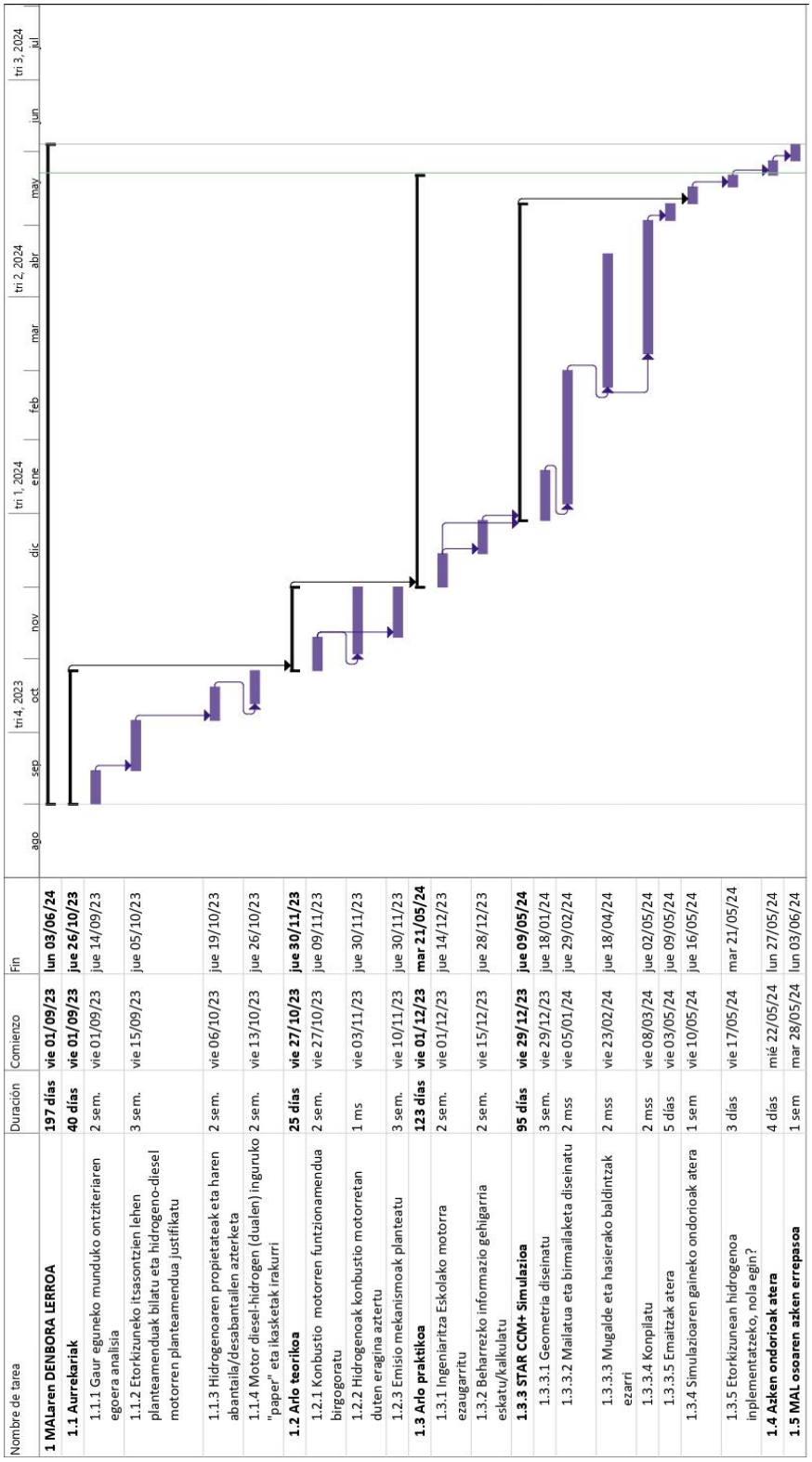
Hala ere, simulaziotan lortutako emaitzetan ikusi den bezala, lana ez dago gaizki bideratuta. Geometria eta haren mailaketa sistema zehaztasun handikoak izan dira, ez baitu errorik eman. Erreakzio kimikoak eta injekzio sistema aproposa da errekuntza fase desberdinak antzemateko; presioaren bilakaera ere errealetatik nahiko hurbil dago, nahiz eta presio handiagotxoak adierazi. Azkenik, iragankortasun handiko modelotan, urrats-denborak berebiziko garrantzia du eta simulazioetan zehaztasun nahikoa egon dela egiaztatu da (batez ere konbustioa ematen den zatian)

Laburbilduz, hidrogenoa inplementatzeko oraindik hobeto diseinatu behar da modeloa; nahiz eta urratsak eman diren eta aztertutako fenomenoak identifikatu ere; hortaz lan hau hasierako pausutzat har daiteke.

8 Gantt Diagrama

Berrehun egun inguru behar izan dira proiektua gauzatzeko. Lau atal nagusitan banatu da: Aurrekariak (hasierako informazioa bilatzeko tartea), arlo teorikoa (proiektuan zehar behar izan den teoria bilatzeko eta ikasteko tartea), arlo praktikoa (motorraren informazioa aztertzeko eta simulazioak egiteko unea) eta ondorioentzako azken tartea.

Nombre de tarea	Duración	Comienzo	Fin
1 MALaren DENBORA LERROA	**197 días**	**vie 01/09/23**	**lun 03/06/24**
1.1 Aurrekariak	**40 días**	**vie 01/09/23**	**jue 26/10/23**
1.1.1 Gaur eguneko munduko ontziteriaren egoera analisia	2 sem.	vie 01/09/23	jue 14/09/23
1.1.2 Etorkizuneko itsasontzien lehen planteamenduak bilatu eta hidrogeno-diesel motorren planteamendua justifikatu	3 sem.	vie 15/09/23	jue 05/10/23
1.1.3 Hidrogenoaren propietateak eta haren abantaila/desabantailen azterketa	2 sem.	vie 06/10/23	jue 19/10/23
1.1.4 Motor diesel-hidrogen (dualen) inguruko "paper" eta ikasketak irakurri	2 sem.	vie 13/10/23	jue 26/10/23
1.2 Arlo teorikoa	**25 días**	**vie 27/10/23**	**jue 30/11/23**
1.2.1 Konbustio motorren funtzionamendua birgogoratu	2 sem.	vie 27/10/23	jue 09/11/23
1.2.2 Hidrogenoak konbustio motorretan duten eragina aztertu	1 ms	vie 03/11/23	jue 30/11/23
1.2.3 Emisio mekanismoak planteatu	3 sem.	vie 10/11/23	jue 30/11/23
1.3 Arlo praktikoa	**123 días**	**vie 01/12/23**	**mar 21/05/24**
1.3.1 Ingeniaritza Eskolako motorra ezaugarritu	2 sem.	vie 01/12/23	jue 14/12/23
1.3.2 Beharrezko informazio gehigarria eskatu/kalkulatu	2 sem.	vie 15/12/23	jue 28/12/23
1.3.3 STAR CCM+ Simulazioa	**95 días**	**vie 29/12/23**	**jue 09/05/24**
1.3.3.1 Geometria diseinatu	3 sem.	vie 29/12/23	jue 18/01/24
1.3.3.2 Mailatua eta birmailaketa diseinatu	2 mss	vie 05/01/24	jue 29/02/24
1.3.3.3 Mugalde eta hasierako baldintzak ezarri	2 mss	vie 23/02/24	jue 18/04/24
1.3.3.4 Konpilatu	2 mss	vie 08/03/24	jue 02/05/24
1.3.3.5 Emaitzak atera	5 días	vie 03/05/24	jue 09/05/24
1.3.4 Simulazioaren gaineko ondorioak atera	1 sem	vie 10/05/24	jue 16/05/24
1.3.5 Etorkizunean hidrogenoa inplementatzeko, nola egin?	3 días	vie 17/05/24	mar 21/05/24
1.4 Azken ondorioak atera	4 días	mié 22/05/24	lun 27/05/24
1.5 MAL osoaren azken errepasoa	1 sem	mar 28/05/24	lun 03/06/24



9 Aurrekontua

Denbora lerroari erreparatuz, guztira 197 lan-egun behar izan dira proiektua gauzatzeko. Lan-egun bakoitza 4 ordukoa kontsideratu da, totalean 788 ordu izanik. Ingeniari juniorrak ordu guztiak burutu ditu eta %20ko denbora horretan ingeniari senior baten ikuskapenean. Aurrekontua erabat osatzeko lizentziak eta ordenagailu amortizazioa kontsideratu dira.

Taula 18. Aurrekontua

BALIABIDEA	ORDU KOPURUA (h)	PREZIO/ORDU (€/h)	DIRU TOTALA (€)
Junior ingeniaria	788	25	19,700
Senior ingeniaria	157.6	50	7,880
STAR CCM+ lizentzia	Urteko lizentzia	5,000 €/urte	5,000
Ordenagailuaren amortizazioa	Urteko amortizazioa	2,000 €/urte	2,000
Microsoft Office paketea	Urteko lizentzia	69 €/urte	69
		TOTALA	**34,649 €**

ERANSKINA I

Measured data (Parent Engine)							
Power/Torque	%	100	75	50	25		
Speed	%	100	91	79	63		
Mode point		1	2	3	4	5	

Engine Performance							
Speed	rpm	1850	1681	1468	1165		
Power	kW	303	227	152	76		
Fuel flow	kg/h	60.9	45.7	30.4	15.7		
Intake air flow wet	kg/h	1785	1361	943	589		
Exhaust gas flow(qmew)	kg/h	1877	1439	970	612		
Intake air temperature	℃	32.0	32.0	31.0	30.0		
Charge air temperature	℃	37	36	36	35		
Charge air reference temperature	℃	34	33	33	32		
Charge air pressure	kPa	105	68	32	6		
Additional parameter(s) used for emission corrections (specify)							

Ambient conditions							
Atmospheric pressure	hPa	1015	1015	1015	1015		
Relative humidity (RH) of intake air	%	46.8	47.6	47.6	50.0		
Dry bulb temperature of intake air	℃	32.0	32.0	31.0	30.0		
Wet bulb temperature of intake air	℃	22.8	22.8	22.4	21.8		
Absolute humidity of intake air	g/kg	13.6	13.7	13.2	13.1		

Emission concentrations							
NOx concentration (dry)	ppm	704	726	834	893		
CO concentration (dry)	ppm	82	84	85	64		
CO2 concentration (dry)	%	7.20	7.05	6.93	5.61		
O2 concentration (dry)	%	10.51	10.67	11.11	12.82		
HC concentration (wet)	ppmC	107	116	115	107		

Calculated data (Parent Engine)							
Intake air humidity	g/kg	13.6	13.7	13.2	13.1		
Charge air humidity	g/kg	19.5	22.6	29.0	34.3		
Test condition parameter , fa		1.032	1.031	1.027	1.022		
Dry / Wet correction factor , kwr		0.924	0.925	0.926	0.937		
NOx humidity correction factor , khd		1.047	1.048	1.039	1.034		
Exhaust gas flow rate (qmew)	kg/h	1877	1439	970	612		
NOx emission flow rate	g/h	2026	1605	1234	841		
CO emission flow rate	g/h	137	108	74	35		
CO2 emission flow rate	kg/h	189.3	142.3	94.5	48.8		
O2 emission flow rate	kg/h	201.0	156.6	110.1	81.1		
HC emission flow rate	g/h	96	80	54	31		
NOx emission	g/kWh						7.3

Test cycle		E3					
Emission value	g/kWh	7.3					

ERANSKINA II

MEKANISMO KIMIKOAK

```
! A 31-species skeletal mechanism for high-temperature oxidation of n-dodecane

! with lumped fuel cracking reactions

!

! Developed by Yang Gao and Tianfeng Lu

! Department of Mechanical Engineering

! University of Connecticut

!

! Email: tlu@engr.uconn.edu

!

! Reference:

!    Vie A., Franzelli B., Gao Y., Lu T.F., Wang H., Ihme M.,

!    "Analysis of segregation and bifurcation in turbulent spray flames:

!     a 3D counterflow configuration,"

!    Proc. Combust. Inst., DOI: 10.1016/j.proci.2014.06.083.

!


ELEMENTS

O  H  C  N  AR  HE

END


SPECIES

H          O          OH

HO2        H2         H2O        H2O2

O2         CH2        CH2*       CH3

CH4        HCO        CH2O       CH3O

CO         CO2        C2H2       C2H3

C2H4       C2H5       C2H6       CH2CHO

aC3H5      C3H6       nC3H7      C2H3CHO

C4H81      NC12H26    C6H12      N2

NO         N2O        AR         NO2

NH3        HNO        N          N2H

NH2        NH         H2NO

END


REACTIONS

!R1

 H+O2 = O+OH                    2.644E+16  -0.6707  17041.00 !GRI3.0 * 1.00

!R2

 O+H2 = H+OH                    4.589E+04   2.700   6260.00 !GRI3.0 * 1.19

!R3

 OH+H2 = H+H2O                  1.734E+08   1.510   3430.00 !GRI3.0 * 0.80

!R4

 OH+OH = O+H2O                  3.973E+04   2.400  -2110.00 !GRI3.0 * 1.11

!R5

 H+H+M = H2+M                   1.780E+18  -1.000      0.00 !GRI3.0 * 1.78

                                H2/0.0/ H2O/0.0/ CO2/0.0/

!R6

 H+H+H2 = H2+H2                 9.000E+16  -0.600      0.00 !GRI3.0

!R7

 H+H+H2O = H2+H2O               5.624E+19  -1.250      0.00 !GRI3.0 * 0.94

!R8

 H+H+CO2 = H2+CO2               5.500E+20  -2.000      0.00 !GRI3.0

!R9
```

```
 H+OH+M = H2O+M                    4.400E+22  -2.000
0.00 !GRI3.0 * 2.00

                    H2/2.0/ H2O/6.30/ CO/1.75/ CO2/3.6/

!R10

 O+H+M = OH+M                      9.428E+18  -1.000
0.00  !86TSA/HAM * 2.00

                    H2/2.0/ H2O/12.0/ CO/1.75/ CO2/3.6/

!R11

 O+O+M = O2+M                      1.200E+17  -1.000
0.00 !GRI3.0

                    H2/2.4/ H2O/15.4/  CO/1.75/ CO2/3.6/

!R12

 H+O2(+M) = HO2(+M)                5.116E+12   0.440
0.00 !00 TROE - Based on M=N2 * 1.10

                    LOW / 6.328E+19  -1.400    0.00 /

                    TROE/ 0.5  1E-30  1E+30         /

                    O2/0.85/  H2O/11.89/ CO/1.09/ CO2/2.18/

!R13

 H2+O2 = HO2+H                     5.916E+05   2.433
53502.00 !00MIC/SUT * 0.80

!R14

 OH+OH(+M) = H2O2(+M)              1.110E+14  -0.370
0.00 !88ZEL/EWI * 1.50

                    LOW  /  2.010E+17  -0.584  -2293.00
/!Fit 88ZEL/EWI and 92BAU/COB

                    TROE / 0.7346   94.  1756.00  5182.0
/!H2O=6xN2 88ZEL/EWI

                    H2/2.0/ H2O/6.00/ CO/1.75/ CO2/3.6/

!R15

 HO2+H = O+H2O                     3.970E+12    0.000
671.00 !GRI3.0

!R16

 HO2+H = OH+OH                     7.485E+13    0.000
295.00 !99MUE/KIM * 1.06

!R17

 HO2+O = OH+O2                     4.000E+13    0.000
0.00 !GRI3.0 * 2.00

!R18

 HO2+HO2 = O2+H2O2                 1.300E+11    0.000 -
1630.00 !90HIP/TRO

 DUPLICATE

!R19

 HO2+HO2 = O2+H2O2                 3.658E+14    0.000
12000.00 !90HIP/TRO * 0.87

 DUPLICATE

!R20

 OH+HO2=H2O+O2                     1.41E+18   -1.760
60.0 ! Wang07

 Duplicate

!R21

 OH+HO2=H2O+O2                     1.12E+85  -22.300
26900.0 ! Wang07

 Duplicate

!R22

 OH+HO2=H2O+O2                     5.37E+70  -16.720
32900.0 ! Wang07

 Duplicate

!R23

 OH+HO2=H2O+O2                     2.51E+12    2.000
40000.0 ! Wang07

 Duplicate

!R24

 OH+HO2=H2O+O2                     1.00E+136  -40.00
34800.0 ! Wang07

 Duplicate

!R25

 H2O2+H = HO2+H2                   6.050E+06    2.000
5200.00 !GRI3.0 * 0.50

!R26

 H2O2+H = OH+H2O                   2.410E+13    0.000
3970.00 !86TSA/HAM

!R27

 H2O2+O = OH+HO2                   9.630E+06    2.000
3970.00 !86TSA/HAM

!R28

 H2O2+OH = HO2+H2O                 2.000E+12    0.000
427.00 !95HIP/NEU

 DUPLICATE

!R29
```

```
H2O2+OH = HO2+H2O                    2.670E+41  -7.000
37600.00 !Refit95HIP/NEU

 DUPLICATE                           !2.2E14 MAX K

!R30

CO+O(+M)=CO2(+M)                     1.362E+10   0.000
2384.00 !99MUE/KIM * 0.76

                    LOW / 1.173E+24  -2.79   4191.  /

                 H2/2.0/ H2O/12/ CO/1.75/ CO2/3.6/

!R31

CO+OH = CO2+H                        7.046E+04   2.053  -
355.67  !06JOS/WANG

  DUPLICATE

!R32

CO+OH = CO2+H                        5.757E+12  -0.664
331.83  !06JOS/WANG

  DUPLICATE

!R33

CO+O2 = CO2+O                        1.119E+12   0.000
47700.00 !86TSA/HAM * 0.44

!R34

CO+HO2 = CO2+OH                      1.570E+05   2.180
17942.61 !07YOU/WANG

!R35

HCO+H = CO+H2                        1.200E+14   0.000
0.00 !02FRI/DAV * 1.00

!R36

HCO+O = CO+OH                        3.000E+13   0.000
0.00 !GRI3.0

!R37

HCO+O = CO2+H                        3.000E+13   0.000
0.00 !GRI3.0

!R38

HCO+OH = CO+H2O                      3.020E+13   0.000
0.00 !86TSA/HAM

!R39

HCO+M = CO+H+M                       1.870E+17  -1.000
17000.00 !02FRI/DAV * 2.00

                 H2/2.0/ H2O/0.0/ CO/1.75/
CO2/3.6/

!R40

HCO+H2O = CO+H+H2O                   2.244E+18  -
1.000  17000.00 !12xM * 2.00

!R41

HCO+O2 = CO+HO2                      1.204E+10   0.807  -
727.00 !96HSU/MEB

!R42

CO+H2(+M) = CH2O(+M)                 4.300E+07   1.500
79600.00  !GRI

                    LOW  /  5.070E+27  -3.420  84350.00  /

                    TROE/  0.9320  197.00  1540.00 10300.
/

          H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/
C2H6/3.0/

!R53

HCO+H(+M) = CH2O(+M)                 1.090E+12   0.480
-260.00  !GRI

                    LOW  /  1.350E+24  -2.570   1425.00  /

                    TROE/  0.7824  271.0  2755.00  6570.0
/

          H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/
C2H6/3.0/

!R54

CH2+H(+M) = CH3(+M)                  2.500E+16  -0.800
0.00  !GRI

                    LOW  /  3.200E+27  -3.140   1230.00  /

                    TROE/  0.6800   78.00  1995.0  5590.0 /

          H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/
C2H6/3.0/

!R55

CH2+O = HCO+H                        8.000E+13   0.000
0.00  !GRI

!R56

CH2+OH = CH2O+H                      2.000E+13   0.000
0.00  !GRI

!R58

CH2+H2 = H+CH3                       5.000E+05   2.000
7230.00  !GRI

!R59

CH2+O2 = HCO+OH                      1.060E+13   0.000
1500.00  !GRI##

!R60
```

CH2+O2 = CO2+H+H 2.640E+12 0.000 1500.00 !GRI##

!R61

CH2+HO2 = CH2O+OH 2.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R65

CH2+CH2 = C2H2+H2 3.200E+13 0.000 0.00 !GRI

!R66

CH2*+N2 = CH2+N2 1.500E+13 0.000 600.00 !GRI

!R68

CH2*+O = CO+H2 1.500E+13 0.000 0.00 !GRI

!R69

CH2*+O = HCO+H 1.500E+13 0.000 0.00 !GRI

!R70

CH2*+OH = CH2O+H 3.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R71

CH2*+H2 = CH3+H 7.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R72

CH2*+O2 = H+OH+CO 2.800E+13 0.000 0.00 !GRI

!R73

CH2*+O2 = CO+H2O 1.200E+13 0.000 0.00 !GRI

!R74

CH2*+H2O = CH2+H2O 3.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R75

CH2*+CO = CH2+CO 9.000E+12 0.000 0.00 !GRI

!R76

CH2*+CO2 = CH2+CO2 7.000E+12 0.000 0.00 !GRI

!R77

CH2*+CO2 = CH2O+CO 1.400E+13 0.000 0.00 !GRI

!R78

CH2O+H(+M) = CH3O(+M) 5.400E+11 0.454 2600.00 !GRI

LOW / 2.200E+30 -4.800 5560.00 /

TROE/ 0.7580 94.00 1555.0 4200.00 /

H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/

!R79

CH2O+H = HCO+H2 2.300E+10 1.050 3275.00 !GRI

!R80

CH2O+O = HCO+OH 3.900E+13 0.000 3540.00 !GRI

!R81

CH2O+OH = HCO+H2O 3.430E+09 1.180 -447.00 !GRI

!R82

CH2O+O2 = HCO+HO2 1.000E+14 0.000 40000.00 !GRI

!R83

CH2O+HO2 = HCO+H2O2 1.000E+12 0.000 8000.00 !GRI

!R85

CH3+H(+M) = CH4(+M) 1.270E+16 -0.630 383.00 !GRI

LOW / 2.477E+33 -4.760 2440.00 /

TROE/ 0.7830 74.00 2941.00 6964.0 /

H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/

!R86

CH3+O = CH2O+H 8.430E+13 0.000 0.00 !GRI

!R87

CH3+OH = CH2+H2O 5.600E+07 1.600 5420.00 !GRI

!R88

CH3+OH = CH2*+H2O 2.501E+13 0.000 0.00 !GRI

!R89

CH3+O2 = O+CH3O 3.083E+13 0.000 28800.00 !GRI

!R90

CH3+O2 = OH+CH2O 3.600E+10 0.000 8940.00 !GRI

!R91

CH3+HO2 = CH4+O2 1.000E+12 0.000 0.00 !GRI

!R92

CH3+HO2 = CH3O+OH 1.340E+13 0.000 0.00 !GRI

!R93

CH3+H2O2 = CH4+HO2 2.450E+04 2.470 5180.00 !GRI

!R96

CH3+HCO = CH4+CO 8.480E+12 0.000 0.00 !GRI

!R97

CH3+CH2O = CH4+HCO 3.320E+03 2.810 5860.00 !GRI

!R98

CH3+CH2 = C2H4+H 4.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R99

CH3+CH2* = C2H4+H 1.200E+13 0.000 -570.00 !GRI

!R100

CH3+CH3(+M) = C2H6(+M) 2.120E+16 -0.970 620.00 !GRI

LOW / 1.770E+50 -9.670 6220.00 /

TROE/ 0.5325 151.0 1038.00 4970.0 /

H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/

!R101

CH3+CH3 = H+C2H5 4.990E+12 0.100 10600.00 !GRI

!R104

CH3O+H = CH2O+H2 2.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R105

CH3O+H = CH3+OH 3.200E+13 0.000 0.00 !GRI

!R106

CH3O+H = CH2*+H2O 1.600E+13 0.000 0.00 !GRI

!R107

CH3O+O = CH2O+OH 1.000E+13 0.000 0.00 !GRI

!R108

CH3O+OH = CH2O+H2O 5.000E+12 0.000 0.00 !GRI

!R109

CH3O+O2 = CH2O+HO2 4.280E-13 7.600 -3530.00 !GRI

!R110

CH4+H = CH3+H2 6.600E+08 1.620 10840.00 !GRI

!R111

CH4+O = CH3+OH 1.020E+09 1.500 8600.00 !GRI

!R112

CH4+OH = CH3+H2O 1.000E+08 1.600 3120.00 !GRI

!R114

CH4+CH2 = CH3+CH3 2.460E+06 2.000 8270.00 !GRI

!R115

CH4+CH2* = CH3+CH3 1.600E+13 0.000 -570.00 !GRI

!R133

C2H3 (+M) = C2H2+H (+M) 3.860E+08 1.620 37048.2 !96KNY/SLA

LOW / 2.565E+27 -3.400 35798.72 /

TROE/ 1.9816 5383.7 4.2932 -0.0795 /

H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/ C2H2/3.00/

C2H4/3.00/

!R135

C2H2+O = CH2+CO 4.080E+06 2.000 1900.00 !GRI (0.2 branching ratio)

```
!R139

 C2H2+OH = CH3+CO                    4.830E-04   4.000  -
2000.00  !GRI

!R140

 C2H2+HCO = C2H3+CO                  1.000E+07   2.000
6000.00  !Estimated

!R146

 C2H2+CH3 = aC3H5                    2.68E+53   -12.82
35730.0  !99DAV/LAW RRKM 1 atm

!R153

 C2H3+H(+M) = C2H4(+M)               6.080E+12   0.270
280.00 !GRI1.2

                    LOW  /  1.400E+30  -3.860   3320.00 /

                    TROE/  0.7820  207.50  2663.00
6095.00/

          H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/
C2H6/3.0/

                              C2H2/3.00/ C2H4/3.00/

!R154

 C2H3+H = C2H2+H2                    9.000E+13   0.000
0.00 !86TSA/HAM

!R156

 C2H3+O = CH3+CO                     4.800E+13   0.000
0.00 !86TSA/HAM

!R157

 C2H3+OH = C2H2+H2O                  3.011E+13   0.000
0.00 !86TSA/HAM

!R158

 C2H3+O2 = C2H2+HO2                  1.340E+06   1.610
-383.40 !96MEB/DIA

!R159

 C2H3+O2 = CH2CHO+O                  3.000E+11   0.290
11.00 !96MEB/DIA

!R160

 C2H3+O2 = HCO+CH2O                  4.600E+16  -1.390
1010.00 !96MEB/DIA

!R161

 C2H3+HO2 = CH2CHO+OH                1.000E+13
0.000      0.00 !Estimated

!R162

 C2H3+H2O2 = C2H4+HO2                1.210E+10
0.000   -596.00 !86TSA/HAM

!R163

 C2H3+HCO = C2H4+CO                  9.033E+13   0.000
0.00 !86TSA/HAM

!R164

 C2H3+HCO = C2H3CHO                  1.800E+13   0.00
0.0  !86TSA/HAM

!R165

 C2H3+CH3 = C2H2+CH4                 3.920E+11   0.000
0.00 !86TSA/HAM

!R166

 C2H3+CH3 (+M) = C3H6(+M)            2.500E+13
0.000      0.00 !86TSA/HAM

                    LOW  / 4.270E+58  -11.940   9769.80 /

                    TROE / 0.175  1340.6 60000.0 10139.8
/

    H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/
C2H6/3/C2H2/3.00/ C2H4/3.00/

!R167

 C2H3+CH3 = aC3H5+H                  1.500E+24  -2.830
18618.0 !86TSA/HAM

!R171

 C2H3+C2H3 = C2H2+C2H4               9.600E+11   0.00
0.  !NIST DB

!R172

 CH2CHO = CH3+CO                     7.800E+41  -9.147
46900.00 !RRKM 1 atm

!R174

 CH2CHO+H = CH3+HCO                  9.000E+13   0.000
0.00 !Estimated

!R179

 CH2CHO+O2 = CH2O+CO+OH              1.800E+10
0.000      0.00 !92BAU/COB

!R187

 C2H4+H(+M) = C2H5(+M)               1.367E+09   1.463
1355.00  !04-MIL-KLI

                    LOW  /  2.027E+39  -6.642   5769.00  /

                    TROE / -0.569  299.0  9147.0  -152.40 /

          H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/
C2H6/3.0/
```

```
!R188

 C2H4+H = C2H3+H2                    5.070E+07   1.900
12950.00  !96KNY/BEN

!R189

 C2H4+O = C2H3+OH                    1.510E+07   1.900
3740.00  !87MAH/MAR

!R190

 C2H4+O = CH3+HCO                    1.920E+07   1.830
220.00  !87MAH/MAR

!R191

 C2H4+O = CH2+CH2O                   3.840E+05   1.830
220.00  !87MAH/MAR

!R192

 C2H4+OH = C2H3+H2O                  3.600E+06   2.000
2500.00  !88LIU/MUL1

!R193

 C2H4+HCO = C2H5+CO                  1.000E+07   2.000
8000.00  !Estimated

!R196

 C2H4+CH2 = aC3H5+H                  2.000E+13   0.000
6000.00  !Estimated

!R197

 C2H4+CH2* = aC3H5+H                 5.000E+13   0.000
0.00  !Estimated

!R198

 C2H4+CH3 = C2H3+CH4                 2.270E+05   2.000
9200.00  !GRI

!R199

 C2H4+CH3 = nC3H7                    3.300E+11   0.00
7700.0  !KP

!R200

 C2H4+O2 = C2H3+HO2                  4.220E+13   0.000
60800.00  !86TSA/HAM

!R202

 C2H5+H(+M) = C2H6(+M)               5.210E+17  -0.990
1580.00  !GRI

                LOW  / 1.990E+41  -7.080  6685.00  /

                TROE / 0.8422  125.0  2219.00 6882.0
/

        H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.5/ CO2/2.0/
C2H6/3.0/

!R203

 C2H5+H = C2H4+H2                    2.000E+12   0.000
0.00  !GRI

!R204

 C2H5+O = CH3+CH2O                   1.604E+13   0.000
0.00  !86TSA/HAM

!R205

 C2H5+O2 = C2H4+HO2                  2.000E+10   0.000
0.00  !90BOZ/DEA

!R206

 C2H5+HO2 = C2H6+O2                  3.000E+11   0.000
0.00  !86TSA/HAM

!R207

 C2H5+HO2 = C2H4+H2O2                3.000E+11
0.000   0.00  !86TSA/HAM

!R208

 C2H5+HO2 = CH3+CH2O+OH              2.400E+13
0.000   0.00  !86TSA/HAM

!R209

 C2H5+H2O2 = C2H6+HO2                8.700E+09
0.000  974.00  !86TSA/HAM

!R210

 C2H5+C2H3(+M) = C4H81(+M)           1.50E+13  0.00
0.0   !86TSA/HAM

                LOW  / 1.55E+56 -11.79    8984.5   /

                TROE / 0.198 2277.9 60000.0 5723.2
/

        H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/
C2H6/3/

!R211

 C2H5+C2H3 = aC3H5+CH3               3.90E+32  -5.22
19747.0   !86TSA/HAM RRKM 1 atm

!R212

 C2H6+H = C2H5+H2                    1.15E+08   1.900
7530.00  !GRI

!R213

 C2H6+O = C2H5+OH                    8.98E+07   1.920
5690.00  !GRI

!R214

 C2H6+OH = C2H5+H2O                  3.54E+06   2.120
870.00  !GRI
```

```
!R215

 C2H6+CH2* = C2H5+CH3                    4.00E+13   0.000
-550.00   !GRI

!R216

 C2H6+CH3 = C2H5+CH4                     6.14E+06   1.740
10450.00   !GRI

!R242

 aC3H5+H(+M) = C3H6(+M)                  2.00E+14   0.00
0.0    !91TSA

                    LOW  / 1.33E+60 -12.00   5967.8     /

                    TROE / 0.020  1096.6  1096.6  6859.5 /

              H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/
C2H6/3/

!R244

 aC3H5+O = C2H3CHO+H                     6.00E+13   0.00
0.0    !91TSA

!R245

 aC3H5+OH = C2H3CHO+H+H                  4.20E+32  -
5.16   30126.0    !91TSA RRKM 1 atm

!R249

 aC3H5+O2 = C2H3CHO+OH                   1.82E+13  -0.41
22859.0    !93BOZ/DEA RRKM 1 atm

!R250

 aC3H5+HO2 = C3H6+O2                     2.66E+12   0.00
0.0    !92BAU/COB

!R251

 aC3H5+HO2 = OH+C2H3+CH2O                6.60E+12
0.00       0.0    !92BAU/COB

!R252

 aC3H5+HCO = C3H6+CO                     6.00E+13   0.00
0.0    !91TSA

!R253

 aC3H5+CH3(+M) = C4H81(+M)               1.00E+14  -0.32
-262.3    !91TSA

                    LOW  / 3.91E+60 -12.81     6250.0    /

                    TROE / 0.104  1606.0 60000.0  6118.4
/

              H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/
C2H6/3/

!R255

 C3H6+H(+M) = nC3H7(+M)                  1.33E+13   0.00
3260.7    !91TSA

                    LOW  / 6.26E+38  -6.66     7000.0    /

                    TROE / 1.000  1000.0  1310.0 48097.0
/

              H2/2/ H2O/6/ CH4/2/ CO/1.5/ CO2/2/
C2H6/3/

!R256

 C3H6+H = C2H4+CH3                       8.00E+21  -2.39
11180.0    !91TSA RRKM 1 atm

!R257

 C3H6+H = aC3H5+H2                       1.73E+05   2.50
2490.0    !91TSA

!R259

 C3H6+O = C2H3CHO+H+H                    0.40E+08   1.65
327.0    !91TSA

!R260

 C3H6+O = C2H5+HCO                       3.50E+07   1.65    -
972.0    !91TSA

!R261

 C3H6+O = aC3H5+OH                       1.80E+11   0.70
5880.0    !91TSA

!R262

 C3H6+OH = aC3H5+H2O                     3.10E+06   2.00    -
298.0    !91TSA

!R263

 C3H6+HO2 = aC3H5+H2O2                   9.60E+03   2.60
13910.0    !91TSA

!R264

 C3H6+CH3 = aC3H5+CH4                    2.20E+00   3.50
5675.0    !91TSA

!R266

 C2H3CHO+H = C2H4+HCO                    1.08E+11   0.454
5820.00    != C2H4+H

!R267

 C2H3CHO+O = C2H3+OH+CO                  3.00E+13
0.00     3540.00    != CH2O+O

!R269

 C2H3CHO+OH = C2H3+H2O+CO                3.43E+09
1.18     -447.00    != CH2O+OH

!R271
```

nC3H7+H = C2H5+CH3 3.70E+24 -2.92 12505.0 !88TSA RRKM 1 atm

!R272

nC3H7+H = C3H6+H2 1.80E+12 0.00 0.0 !88TSA

!R273

nC3H7+O = C2H5+CH2O 9.60E+13 0.00 0.0 !88TSA

!R274

nC3H7+OH = C3H6+H2O 2.40E+13 0.00 0.0 !88TSA

!R275

nC3H7+O2 = C3H6+HO2 9.00E+10 0.00 0.0 !88TSA

!R276

nC3H7+HO2 = C2H5+OH+CH2O 2.40E+13 0.00 0.0 !88TSA

!R277

nC3H7+CH3 = CH4+C3H6 1.10E+13 0.00 0.0 !88TSA

!R308

C4H81+H = C2H4+C2H5 1.60E+22 -2.39 11180.0 != C3H6+H

!R309

C4H81+H = C3H6+CH3 3.20E+22 -2.39 11180.0 !Estimated

!R311

C4H81+O = nC3H7+HCO 3.30E+08 1.45 -402.0 !91KO/ADU

!R326

NC12H26 => C6H12+C2H4+nC3H7+CH3 8.53E+23 -2.03 90034.0 !BS

!R328

NC12H26 => C6H12+2nC3H7 5.640E+26 -2.680 88171.0 !BS

!R330

NC12H26 => C4H81+C2H4+2nC3H7 7.88E+25 -2.65 88391.0 !BS

!R331

NC12H26 => 2C3H6+2nC3H7 4.00E+26 -2.66 88392.0 !BS

!R332

NC12H26+H => C6H12+C3H6+nC3H7+H2 1.30E+06 2.54 6756.0 ! =(C3H8+H) BS

duplicate

!R333

NC12H26+H => C6H12+C3H6+nC3H7+H2 5.20E+06 2.40 4471.0 ! =(C3H8+H) *2 BS

duplicate

!R335

NC12H26+O=>C6H12+C3H6+nC3H7+OH 2.50E+06 2.40 5504.0 ! !BS 86/CW (octane) BS

duplicate

!R336

NC12H26+O=>C6H12+C3H6+nC3H7+OH 4.60E+05 2.60 1768.0 ! !BS 86/CW (octane) *2 BS

duplicate

!R338

NC12H26+OH=>C6H12+C3H6+nC3H7+H2O 1.40E+07 1.80 974.0 ! !BS 91Coh (decane) BS

duplicate

!R339

NC12H26+OH=>C6H12+C3H6+nC3H7+H2O 4.00E+06 2.00 -596.0 ! !BS 91Coh (decane) *2 BS

duplicate

!R341

NC12H26+CH3=>C6H12+C3H6+nC3H7+CH4 9.03E-01 3.65 7153.0 ! =(C3H8+CH3) BS

duplicate

!R342

NC12H26+CH3=>C6H12+C3H6+nC3H7+CH4 6.00E+00 3.46 5480.0 ! =(C3H8+CH3) *2 BS

duplicate

!R344

NC12H26+O2=>C6H12+C3H6+nC3H7+HO2 4.00E+13 0.00 50930.0 ! =(C3H8+O2)

duplicate

!R345

NC12H26+O2=>C6H12+C3H6+nC3H7+HO2 1.60E+14 0.00 47590.0 ! =(C3H8+O2) *2 BS

duplicate

!R347

NC12H26+HO2=>C6H12+C3H6+nC3H7+H2O2 4.76E+04 2.55 16490.0 ! =(C3H8+HO2) BS

duplicate

!R348

NC12H26+HO2=>C6H12+C3H6+nC3H7+H2O2 38.0E+03 2.60 13910.0 ! =(C3H8+HO2) *2 BS

duplicate

!R355

C6H12 = aC3H5+nC3H7 1.07E+23 -2.03 74958.0 ! 08/TSAwip !BS

!R357

C6H12+H = C3H6+nC3H7 1.60E+22 -2.39 11180.0 ! Estimated

!R359

C6H12+O = C2H4+nC3H7+HCO 3.30E+08 1.45 -402.0 !=(C4H81+O)

!*****N*****

N2+O = N+NO 1.470E13 0.30 75286.81 !(92MiC/liM)

N+O2 = NO+O 6.400E09 1.00 6285.85 !(Mb89)

N+OH = NO+H 3.800E13 0.00 0.00 !(glarbOrg94)

NH+H = N+H2 1.000E14 0.00 0.00

NH+O = NO+H 9.200E13 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 CEC94

NH+OH = HNO+H 4.000E13 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 JAM est

NH+OH = N+H2O 5.000E11 0.50 2000.48 ! GLA/MIL98 JAM est

NH+O2 = HNO+O 4.600E05 2.00 6500.96 ! GLA/MIL98 MIL/MEL92

NH+NO = N2O+H 1.800E14 -0.351 -244.00 ! pw 1.3.12 Klip

NH+NO = N2+OH 2.200E13 -0.23 0.00 ! GLA/MIL98 MIL/MEL92

NH2+H = NH+H2 4.000E13 0.00 3652.01 ! GLA/MIL98 DAV/HAN90

NH2+O = HNO+H 6.600E14 -0.50 0.00 ! GLA/MIL98 DRA/WAG84,JAM est

NH2+O2 = H2NO+O 2.600E11 0.4872 29050.00 ! DB 96 UPDATE

NH2+OH = NH+H2O 4.000E06 2.00 1001.43 ! GLA/MIL98 JAM est

NH2+N = N2+H+H 7.000E13 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 WHY/PHI83

NH2+NO = N2+H2O 2.800E20 -2.654 1258.00 ! MIL/GLA99 MIL/GLA99

NH2+NO = N2H+OH 3.100E13 -0.48 1180.00

NH3+H = NH2+H2 6.400E05 2.39 10181.64 ! GLA/MIL98 MIC/SUT86

NH3+O = NH2+OH 9.400E06 1.94 6465.11 ! GLA/MIL98 SUT/KLE90

NH3+OH = NH2+H2O 2.040E06 2.04 566.44 ! GLA/MIL98 SAL/HAN84

N2H+O2 = N2+HO2 2.000E14 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 MIL/GLA96

N2H(+M) = N2+H(+M) 6.500E07 0.00 0.00 ! MIL/GLA99 MIL/GLA99

LOW/5.000E13 0.00 0.00/

N2H+H = N2+H2 1.000E14 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 JAM est

N2H+O = N2O+H 1.000E14 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 JAM est

N2H+OH = N2+H2O 5.000E13 0.00 0.00 ! GLA/MIL98 JAM est

H+NO(+M) = HNO(+M) 1.500E15 -0.40 0.00

LOW / 4.300e+14 0.206 -1554.97 /

AR/0.50/ H2O/5.00/

HNO+H = NO+H2 4.400E11 0.72 650.10 ! (glarbOrg94)

HNO+OH = NO+H2O 3.600E13 0.00 0.00 ! (Mb89)

N2O(+M) = N2+O(+M) 8.000E11 0.00 62619.50

LOW / 2.000e+14 0.000 56644.36 /

N2O+H = N2+OH 3.310E10 0.00 5090.00 ! 64 BaulcH

DUP

```
N2O+H = N2+OH                7.830E14   0.00   19390.00
! 65 BaulcH

DUP

N2O+O = NO+NO                9.150E13   0.00   27693.00
! 61 MeagHer J. PHys. cHem. a, 2000, 104(25), p 6003.


N2O+OH = N2+HO2                              2.000E13
0.00   40000.00  ! Mueller00 IJCK

NO2+M = NO+O+M                     1.100E16   0.00
65965.58  ! (Mb89)

H2O/16.25/

NO+HO2 = NO2+OH                    2.100E12   0.00
-480.40  ! (glarbOrg94  )

NO2+H = NO+OH                              3.500E14   0.00
1500.96  ! kO/fONtijN

NO2+O = NO+O2                1.000E13   0.00     599.90  !
Konnov

H2NO+O = HNO+OH              3.000E07   2.00
2000.00  ! GLA/MIL98 JAM est

H2NO+O2 = HNO+HO2            3.000E12   0.00
25000.00  ! MIL/GLA99 JAM est

H2NO+HO2 = HNO+H2O2          2.900E04   2.69   -
1600.00

! ENd NOx
CHeMiStry*****************************************************

END
```

MEKANISMO TERMODINAMIKOAK

```
THERMO

   298.000  1000.000  5000.000

N2          121286N  2          G  0300.00  5000.00
1000.00     1

 0.02926640E+02 0.14879768E-02-0.05684760E-05
0.10097038E-09-0.06753351E-13    2

-0.09227977E+04 0.05980528E+02 0.03298677E+02
0.14082404E-02-0.03963222E-04    3

 0.05641515E-07-0.02444854E-10-0.10208999E+04
0.03950372E+02                   4

AR          120186AR 1          G  0300.00  5000.00
1000.00     1

 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00    2

-0.07453750E+04 0.04366000E+02 0.02500000E+02
0.00000000E+00 0.00000000E+00    3

 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.07453750E+04
0.04366000E+02                   4

HE          L10/90HE 1   0   0   0G  200.000 6000.000
1000.       1

 2.50000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00    2

-7.45375000E+02 9.28723974E-01 2.50000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00    3

 0.00000000E+00 0.00000000E+00-7.45375000E+02
9.28723974E-01 0.00000000E+00    4

NE          L10/92NE 1   0   0   0G  200.000 6000.000
1000.00     1

 0.25000000E+01 0.          0.          0.          0.          2

-0.74537500E+03 0.33553227E+01 0.25000000E+01 0.
0.          3

 0.          0.         -0.74537498E+03 0.33553227E+01
0.00000000E+00    4

C(S)        P 4/83C  1   0   0   0C  200.000 5000.000
12.01100 1

 0.14556924e+01 0.17170638e-02-0.69758410e-06
0.13528316e-09-0.96764905e-14    2

-0.69512804e+03-0.85256842e+01-0.31087207e+00
0.44035369e-02 0.19039412e-05    3

-0.63854697e-08 0.29896425e-11-0.10865079e+03
0.11138295e+01                   4

O           L 1/90O  1  00  00  00G  200.000 3500.000
1000.000    1

 2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-
1.00177799E-11 1.22833691E-15    2

 2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-
3.27931884E-03 6.64306396E-06    3

-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04
2.05193346E+00 6.72540300E+03    4

O2          TPIS89O  2  00  00  00G  200.000 3500.000
1000.000    1

 3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07
2.09470555E-10-2.16717794E-14    2

-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-
2.99673416E-03 9.84730201E-06    3

-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03
3.65767573E+00 8.68010400E+03    4

H           L 7/88H  1  00  00  00G  200.000 3500.000
1000.00     1

 2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-
4.73515235E-18 4.98197357E-22    2

 2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00
7.05332819E-13-1.99591964E-15    3

 2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-
4.46682853E-01 6.19742800E+03    4

H2          TPIS78H  2  00  00  00G  200.000 3500.000
1000.00     1

 3.33727920E+00-4.94024731E-05 4.99456778E-07-
1.79566394E-10 2.00255376E-14    2

-9.50158922E+02-3.20502331E+00 2.34433112E+00
7.98052075E-03-1.94781510E-05    3

 2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E+02
6.83010238E-01 8.46810200E+03    4

OH          S 9/01O  1H  1   0   0G  200.000 6000.000
1000.00     1

 2.86472886E+00 1.05650448E-03-2.59082758E-07
3.05218674E-11-1.33195876E-15    2

 3.71885774E+03 5.70164073E+00 4.12530561E+00-
3.22544939E-03 6.52764691E-06    3

-5.79853643E-09 2.06237379E-12 3.38153812E+03-
6.90432960E-01 4.51532273E+03    4

H2O         L 8/89H  2O  1  00  00G  200.000 3500.000
1000.000    1
```

3.03399249E+00 2.17691804E-03-1.64072518E-07-
9.70419870E-11 1.68200992E-14 2

-3.00042971E+04 4.96677010E+00 4.19864056E+00-
2.03643410E-03 6.52040211E-06 3

-5.48797062E-09 1.77197817E-12-3.02937267E+04-
8.49032208E-01 9.90409200E+03 4

HO2 L 5/89H 1O 2 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

4.01721090E+00 2.23982013E-03-6.33658150E-07
1.14246370E-10-1.07908535E-14 2

1.11856713E+02 3.78510215E+00 4.30179801E+00-
4.74912051E-03 2.11582891E-05 3

-2.42763894E-08 9.29225124E-12 2.94808040E+02
3.71666245E+00 1.00021620E+04 4

H2O2 L 7/88H 2O 2 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

4.16500285E+00 4.90831694E-03-1.90139225E-06
3.71185986E-10-2.87908305E-14 2

-1.78617877E+04 2.91615662E+00 4.27611269E+00-
5.42822417E-04 1.67335701E-05 3

-2.15770813E-08 8.62454363E-12-1.77025821E+04
3.43505074E+00 1.11588350E+04 4

C L11/88C 1 00 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.49266888E+00 4.79889284E-05-7.24335020E-08
3.74291029E-11-4.87277893E-15 2

8.54512953E+04 4.80150373E+00 2.55423955E+00-
3.21537724E-04 7.33792245E-07 3

-7.32234889E-10 2.66521446E-13 8.54438832E+04
4.53130848E+00 6.53589500E+03 4

CH TPIS79C 1H 1 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.87846473E+00 9.70913681E-04 1.44445655E-07-
1.30687849E-10 1.76079383E-14 2

7.10124364E+04 5.48497999E+00 3.48981665E+00
3.23835541E-04-1.68899065E-06 3

3.16217327E-09-1.40609067E-12 7.07972934E+04
2.08401108E+00 8.62500000E+03 4

CH2 L S/93C 1H 2 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.87410113E+00 3.65639292E-03-1.40894597E-06
2.60179549E-10-1.87727567E-14 2

4.62636040E+04 6.17119324E+00 3.76267867E+00
9.68872143E-04 2.79489841E-06 3

-3.85091153E-09 1.68741719E-12 4.60040401E+04
1.56253185E+00 1.00274170E+04 4

CH2* L S/93C 1H 2 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.29203842E+00 4.65588637E-03-2.01191947E-06
4.17906000E-10-3.39716365E-14 2

5.09259997E+04 8.62650169E+00 4.19860411E+00-
2.36661419E-03 8.23296220E-06 3

-6.68815981E-09 1.94314737E-12 5.04968163E+04-
7.69118967E-01 9.93967200E+03 4

CH3 L11/89C 1H 3 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.28571772E+00 7.23990037E-03-2.98714348E-06
5.95684644E-10-4.67154394E-14 2

1.67755843E+04 8.48007179E+00 3.67359040E+00
2.01095175E-03 5.73021856E-06 3

-6.87117425E-09 2.54385734E-12 1.64449988E+04
1.60456433E+00 1.03663400E+04 4

CH4 L 8/88C 1H 4 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

7.48514950E-02 1.33909467E-02-5.73285809E-06
1.22292535E-09-1.01815230E-13 2

-9.46834459E+03 1.84373180E+01 5.14987613E+00-
1.36709788E-02 4.91800599E-05 3

-4.84743026E-08 1.66693956E-11-1.02466476E+04-
4.64130376E+00 1.00161980E+04 4

CO TPIS79C 1O 1 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.71518561E+00 2.06252743E-03-9.98825771E-07
2.30053008E-10-2.03647716E-14 2

-1.41518724E+04 7.81868772E+00 3.57953347E+00-
6.10353680E-04 1.01681433E-06 3

9.07005884E-10-9.04424499E-13-1.43440860E+04
3.50840928E+00 8.67100000E+03 4

CO2 L 7/88C 1O 2 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

3.85746029E+00 4.41437026E-03-2.21481404E-06
5.23490188E-10-4.72084164E-14 2

-4.87591660E+04 2.27163806E+00 2.35677352E+00
8.98459677E-03-7.12356269E-06 3

2.45919022E-09-1.43699548E-13-4.83719697E+04
9.90105222E+00 9.36546900E+03 4

HCO L12/89H 1C 1O 1 00G 200.000
3500.000 1000.000 1

2.77217438E+00 4.95695526E-03-2.48445613E-06
5.89161778E-10-5.33508711E-14 2

4.01191815E+03 9.79834492E+00 4.22118584E+00-
3.24392532E-03 1.37799446E-05 3

-1.33144093E-08 4.33768865E-12 3.83956496E+03
3.39437243E+00 9.98945000E+03 4

CH2O L 8/88H 2C 1O 1 00G 200.000
3500.000 1000.000 1

1.76069008E+00 9.20000082E-03-4.42258813E-06
1.00641212E-09-8.83855640E-14 2

-1.39958323E+04 1.36563230E+01 4.79372315E+00-
9.90833369E-03 3.73220008E-05 3

-3.79285261E-08 1.31772652E-11-1.43089567E+04
6.02812900E-01 1.00197170E+04 4

CH2OH IU2/03C 1H 3O 1 00G 200.000
6000.00 1

5.09314370E+00 5.94761260E-03-2.06497460E-06
3.23008173E-10-1.88125902E-14 2

-4.03409640E+03-1.84691493E+00 4.47834367E+00-
1.35070310E-03 2.78484980E-05 3

-3.64869060E-08 1.47907450E-11-3.50072890E+03
3.30913500E+00-2.04462770E+03 4

CH3O IU1/03C 1H 3O 1 G 200.000 6000.00
1

4.75779238E+00 7.44142474E-03-2.69705176E-06
4.38090504E-10-2.63537098E-14 2

3.78111940E+02-1.96680028E+00 3.71180502E+00-
2.80463306E-03 3.76550971E-05 3

-4.73072089E-08 1.86588420E-11 1.29569760E+03
6.57240864E+00 2.52571660E+03 4

CH3OH L 8/88C 1H 4O 1 00G 200.000
3500.000 1000.000 1

1.78970791E+00 1.40938292E-02-6.36500835E-06
1.38171085E-09-1.17060220E-13 2

-2.53748747E+04 1.45023623E+01 5.71539582E+00-
1.52309129E-02 6.52441155E-05 3

-7.10806889E-08 2.61352698E-11-2.56427656E+04-
1.50409823E+00 1.14352770E+04 4

C2H L 1/91C 2H 1 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

3.16780652E+00 4.75221902E-03-1.83787077E-06
3.04190252E-10-1.77232770E-14 2

6.71210650E+04 6.63589475E+00 2.88965733E+00
1.34099611E-02-2.84769501E-05 3

2.94791045E-08-1.09331511E-11 6.68393932E+04
6.22296438E+00 1.04544720E+04 4

C2H2 L 1/91C 2H 2 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

4.14756964E+00 5.96166664E-03-2.37294852E-06
4.67412171E-10-3.61235213E-14 2

2.59359992E+04-1.23028121E+00 8.08681094E-01
2.33615629E-02-3.55171815E-05 3

2.80152437E-08-8.50072974E-12 2.64289807E+04
1.39397051E+01 1.00058390E+04 4

C2H3 L 2/92C 2H 3 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

3.01672400E+00 1.03302292E-02-4.68082349E-06
1.01763288E-09-8.62607041E-14 2

3.46128739E+04 7.78732378E+00 3.21246645E+00
1.51479162E-03 2.59209412E-05 3

-3.57657847E-08 1.47150873E-11 3.48598468E+04
8.51054025E+00 1.05750490E+04 4

C2H4 L 1/91C 2H 4 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.03611116E+00 1.46454151E-02-6.71077915E-06
1.47222923E-09-1.25706061E-13 2

4.93988614E+03 1.03053693E+01 3.95920148E+00-
7.57052247E-03 5.70990292E-05 3

-6.91588753E-08 2.69884373E-11 5.08977593E+03
4.09733096E+00 1.05186890E+04 4

C2H5 L12/92C 2H 5 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

1.95465642E+00 1.73972722E-02-7.98206668E-06
1.75217689E-09-1.49641576E-13 2

1.28575200E+04 1.34624343E+01 4.30646568E+00-
4.18658892E-03 4.97142807E-05 3

-5.99126606E-08 2.30509004E-11 1.28416265E+04
4.70720924E+00 1.21852440E+04 4

C2H6 L 8/88C 2H 6 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

1.07188150E+00 2.16852677E-02-1.00256067E-05
2.21412001E-09-1.90002890E-13 2

-1.14263932E+04 1.51156107E+01 4.29142492E+00-
5.50154270E-03 5.99438288E-05 3

-7.08466285E-08 2.68685771E-11-1.15222055E+04
2.66682316E+00 1.18915940E+04 4

CH2CO D05/90C 2H 2O 1 00G 200.000
3500.000 1000.000 1

4.51129732E+00 9.00359745E-03-4.16939635E-06
9.23345882E-10-7.94838201E-14 2

-7.77850000E+03 6.32247205E-01 2.13583630E+00
1.81188721E-02-1.73947474E-05 3

9.34397568E-09-2.01457615E-12-7.27000000E+03
1.22156480E+01 1.17977430E+04 4

CH2CHO"OLD" T04/83O 1H 3C 2 0G 300.000
5000.000 1

0.59756699E+01 0.81305914E-02-0.27436245E-05
0.40703041E-09-0.21760171E-13 2

0.49032178E+03-0.50320879E+01 0.34090624E+01
0.10738574E-01 0.18914925E-05 3

-0.71585831E-08 0.28673851E-11 0.15214766E+04
0.95714535E+01 0.30474436E+04 4

CH2CHO D05/83O 1H 3C 2 0G 300.000
5000.000 1

0.59756699E+01 0.81305914E-02-0.27436245E-05
0.40703041E-09-0.21760171E-13 2

-0.96950000E+03-0.50320879E+01 0.34090624E+01
0.10738574E-01 0.18914925E-05 3

-0.71585831E-08 0.28673851E-11 0.62000000E+02
0.95714535E+01 0.30474436E+04 4

CH3CO T 9/92C 2H 3O 1 0G 200.000 6000.0
1000.0 1

0.59447731E+01 0.78667205E-02-0.28865882E-05
0.47270875E-09-0.28599861E-13 2

-0.37873075E+04-0.50136751E+01 0.41634257E+01-
0.23261610E-03 0.34267820E-04 3

-0.44105227E-07 0.17275612E-10-0.26574529E+04
0.73468280E+01-0.12027167E+04 4

CH3CHO L 8/88C 2H 4O 1 0G 200.000 6000.0
1000.0 1

0.54041108E+01 0.11723059E-01-0.42263137E-05
0.68372451E-09-0.40984863E-13 2

-0.22593122E+05-0.34807917E+01 0.47294595E+01-
0.31932858E-02 0.47534921E-04 3

-0.57458611E-07 0.21931112E-10-0.21572878E+05
0.41030159E+01-0.19987949E+05 4

HCCO SRIC91H 1C 2O 1 G 0300.00 4000.00
1000.00 1

0.56282058E+01 0.40853401E-02-0.15934547E-05
0.28626052E-09-0.19407832E-13 2

0.19327215E+05-0.39302595E+01 0.22517214E+01
0.17655021E-01-0.23729101E-04 3

0.17275759E-07-0.50664811E-11 0.20059449E+05
0.12490417E+02 4

HCCOH SRI91C 2O 1H 20 0G 300.000
5000.000 1000.G 1

0.59238291E+01 0.67923600E-02-0.25658564E-05
0.44987841E-09-0.29940101E-13 2

0.72646260E+04-0.76017742E+01 0.12423733E+01
0.31072201E-01-0.50866864E-04 3

0.43137131E-07-0.14014594E-10 0.80316143E+04
0.13874319E+02 4

C2O RUS 79C 2O 1 0 0G 200.000 6000.000
1

0.51512722E+01 0.23726722E-02-0.76135971E-06
0.11706415E-09-0.70257804E-14 2

0.33241888E+05-0.22183135E+01 0.28648610E+01
0.11990216E-01-0.18362448E-04 3

0.15769739E-07-0.53897452E-11 0.33749932E+05
0.88867772E+01 0.35003406E+05 4

C3H2 T12/00C 3H 2 0 0G 200.000 6000.000
1

0.73481207E+01 0.44476404E-02-0.12610332E-05
0.78131814E-10 0.13216298E-13 2

0.62551656E+05-0.91040211E+01 0.45094776E+01
0.17438605E-01-0.24516321E-04 3

0.18993967E-07-0.57996520E-11 0.63080191E+05
0.42892461E+01 4

C3H2-2 S 4/01C 3H 2 0 0G 200.000 3000.000
1

7.47247827E+00 4.57765160E-03-1.56482125E-06
2.43991965E-10-1.42462924E-14 2

8.83321441E+04-1.27113314E+01 3.74356467E+00
2.51955211E-02-4.62608277E-05 3

4.34360520E-08-1.53992558E-11 8.89297787E+04
4.22612394E+00 9.08356403E+04 4

cC3H2 121686C 3H 2 G 0300.00 5000.00
1000.00 1

0.06530853E+02 0.05870316E-01-0.01720777E-04
0.02127498E-08-0.08291910E-13 2

0.05115214E+06-0.01122728E+03 0.02691077E+02
0.01480366E+00-0.03250551E-04 3

-0.08644363E-07 0.05284878E-10 0.05219072E+06
0.08757391E+02 4

C3H3 T 5/97C 3H 3 0 0G 200.000 6000.000
1

7.14221880E+00 7.61902005E-03-2.67459950E-06
4.24914801E-10-2.51475415E-14 2

3.89087427E+04-1.25848436E+01 1.35110927E+00
3.27411223E-02-4.73827135E-05 3

3.76309808E-08-1.18540923E-11 4.01057783E+04
1.52058924E+01 4.16139977E+04 4

aC3H4 L 8/89C 3H 4 0 0G 200.000 6000.000
1

0.63168722E+01 0.11133728E-01-0.39629378E-05
0.63564238E-09-0.37875540E-13 2

0.20117495E+05-0.10995766E+02 0.26130445E+01
0.12122575E-01 0.18539880E-04 3

-0.34525149E-07 0.15335079E-10 0.21541567E+05
0.10226139E+02 0.22962267E+05 4

pC3H4 T 2/90H 4C 3 0 0G 200.000 6000.000
1

0.60252400E+01 0.11336542E-01-0.40223391E-05
0.64376063E-09-0.38299635E-13 2

0.19620942E+05-0.86043785E+01 0.26803869E+01
0.15799651E-01 0.25070596E-05 3

-0.13657623E-07 0.66154285E-11 0.20802374E+05
0.98769351E+01 0.22302059E+05 4

cC3H4 T12/81C 3H 4 0 0G 300.000 5000.000
1

0.66999931E+01 0.10357372E-01-0.34551167E-05
0.50652949E-09-0.26682276E-13 2

0.30199051E+05-0.13378770E+02-0.24621047E-01
0.23197215E-01-0.18474357E-05 3

-0.15927593E-07 0.86846155E-11 0.32334137E+05
0.22729762E+02 0.3332728 E+05 4

C3H8 P11/94C 3H 8 0 0G 300.000 3000.000
1

0.75244152E+01 0.18898282E-01-0.62921041E-05
0.92161457E-09-0.48684478E-13 2

-0.16564394E+05-0.17838375E+02 0.92851093E+00
0.26460566E-01 0.60332446E-05 3

-0.21914953E-07 0.94961544E-11-0.14057907E+05
0.19225538E+02 4

nC3H7 P11/94C 3H 7 0 0G 300.000 3000.000
1

0.77097479E+01 0.16031485E-01-0.52720238E-05
0.75888352E-09-0.38862719E-13 2

0.79762236E+04-0.15515297E+02 0.10491173E+01
0.26008973E-01 0.23542516E-05 3

-0.19595132E-07 0.93720207E-11 0.10312346E+05
0.21136034E+02 4

iC3H7 P11/94C 3H 7 0 0G 300.000 3000.000
1

0.65192741E+01 0.17220104E-01-0.57364217E-05
0.84130732E-09-0.44565913E-13 2

0.73227193E+04-0.90830215E+01 0.14449199E+01
0.20999112E-01 0.77036222E-05 3

-0.18476253E-07 0.71282962E-11 0.94223724E+04
0.20116317E+02 4

C3H6 120186C 3H 6 G 0300.00 5000.00
1000.00 1

0.06732257E+02 0.01490834E+00-0.04949899E-04
0.07212022E-08-0.03766204E-12 2

-0.09235703E+04-0.01331335E+03 0.01493307E+02
0.02092518E+00 0.04486794E-04 3

-0.01668912E-06 0.07158146E-10 0.01074826E+05
0.01614534E+03 4

CH2CHCO T05/99C 3H 3O 1 0G 200.000
6000.0 1000.0 1

6.95842227E+00 1.07193211E-02-3.85218494E-06
6.22009064E-10-3.72401640E-14 2

5.64826498E+03-1.14745786E+01 3.21169467E+00
1.18422105E-02 1.67462582E-05 3

-3.06947176E-08 1.33048816E-11 7.12815750E+03
1.00881663E+01 8.70564832E+03 4

CH2CHCO USC/07C 3H 3O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.73338666E+01 0.11401899E-01-0.45696443E-05
0.79430967E-09-0.44163078E-13 2

0.83094941E+04-0.11019943E+02 0.23135836E+01
0.28253129E-01-0.25737754E-04 3

0.12222654E-07-0.21353429E-11 0.95213496E+04
0.14105129E+02 4

CH3CHOCH2 T 6/92C 3H 6O 1 0G 298.150
3000.0 1000.0 1

0.86900558E 01 0.16020987E-01-0.53971753E-05
0.79941542E-09-0.42656366E-13 2

-0.15420691E 05-0.22485016E 02 0.48733836E 00
0.28519690E-01 0.30096162E-05 3

-0.22652642E-07 0.10706728E-10-0.12556434E 05
0.22605270E 02-0.11156446E 05 4

CH3CH2CHO USC/07C 3H 6O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.62637410E+01 0.19976260E-01-0.76195147E-05
0.11687118E-08-0.41959993E-13 2

-0.25885953E+05-0.57786498E+01 0.27255676E+01
0.23236005E-01 0.29740656E-05 3

-0.16613415E-07 0.74250103E-11-0.24556711E+05
0.14166277E+02 4

CH3COCH3 T 5/92C 3H 6O 1 0G 200.000
6000.000 1000.0 1

0.72975991E+01 0.17566207E-01-0.63170456E-05
0.10203086E-08-0.61094016E-13 2

-0.29817680E+05-0.12756981E+02 0.55557943E+01-
0.28365428E-02 0.70568945E-04 3

-0.87810488E-07 0.34028266E-10-0.28113337E+05
0.23226600E+01-0.26116945E+05 4

C2H3CHO USC/07C 3H 4O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.58111868E+01 0.17114256E-01-0.74834161E-05
0.14252249E-08-0.91746841E-13 2

-0.10784054E+05-0.48588004E+01 0.12713498E+01
0.26231054E-01-0.92912305E-05 3

-0.47837272E-08 0.33480543E-11-0.93357344E+04
0.19498077E+02 4

aC3H5 PD5/98C 3H 5 0 0G 300.000 3000.000
1

0.65007877E+01 0.14324731E-01-0.56781632E-05
0.11080801E-08-0.90363887E-13 2

0.17482449E+05-0.11243050E+02 0.13631835E+01
0.19813821E-01 0.12497060E-04 3

-0.33355555E-07 0.15846571E-10 0.19245629E+05
0.17173214E+02 4

CH3CCH2 PD5/98C 3H 5 0 0G 300.000
3000.000 1

0.54255528E+01 0.15511072E-01-0.56678350E-05
0.79224388E-09-0.16878034E-13 2

0.27843027E+05-0.33527184E+01 0.17329209E+01
0.22394620E-01-0.51490611E-05 3

-0.67596466E-08 0.38253211E-11 0.29040498E+05
0.16568878E+02 4

CH3CHCH PD5/98C 3H 5 0 0G 300.000
3000.000 1

0.53725281E+01 0.15780509E-01-0.59922850E-05
0.93089664E-09-0.36550966E-13 2

0.29614760E+05-0.34186478E+01 0.91372931E+00
0.26432343E-01-0.11758950E-04 3

-0.23035678E-08 0.27715488E-11 0.30916867E+05
0.19989269E+02 4

C4H P 1/93C 4H 1 0 0G 300.000 3000.000
1

0.77697593E+01 0.49829976E-02-0.17628546E-05
0.28144284E-09-0.16689869E-13 2

0.94345900E+05-0.14165274E+02 0.13186295E+01
0.38582956E-01-0.71385623E-04 3

0.65356359E-07-0.22617666E-10 0.95456106E+05
0.15567583E+02 4

C4H2 D11/99C 4H 2 0 0G 300.000 3000.000
1

0.91576328E+01 0.55430518E-02-0.13591604E-05
0.18780075E-10 0.23189536E-13 2

0.52588039E+05-0.23711460E+02 0.10543978E+01
0.41626960E-01-0.65871784E-04 3

0.53257075E-07-0.16683162E-10 0.54185211E+05
0.14866591E+02 4

nC4H3 USC/07C 4H 3O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.78045716E+01 0.10712364E-01-0.41939124E-05
0.70446277E-09-0.36271326E-13 2

0.62987805E+05-0.14129741E+02 0.81667686E+00
0.38716201E-01-0.48045651E-04 3

0.32066808E-07-0.85628215E-11 0.64455754E+05
0.19740503E+02 4

iC4H3 USC/07C 4H 3O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.76538548E+01 0.11204055E-01-0.46401342E-05
0.86786639E-09-0.57430562E-13 2

0.57954363E+05-0.11756476E+02 0.37221482E+01
0.25957543E-01-0.26356343E-04 3

0.15508920E-07-0.38040565E-11 0.58837121E+05
0.75637245E+01 4

H2C4O USC/07C 4H 2O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.84292183E+01 0.10502701E-01-0.42066836E-05
0.71184902E-09-0.35796602E-13 2

0.22907807E+05-0.16511997E+02 0.31811900E+01
0.29840752E-01-0.32832409E-04 3

0.20631813E-07-0.54200598E-11 0.24125576E+05
0.94210100E+01 4

C4H4 USC/07C 4H 4O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.72539601E+01 0.13914094E-01-0.52932214E-05
0.83480450E-09-0.35197882E-13 2

0.31766016E+05-0.12629521E+02 0.58857048E+00
0.36546685E-01-0.34106968E-04 3

0.16652619E-07-0.30064623E-11 0.33359492E+05
0.20657881E+02 4

nC4H5 USC/07C 4H 5O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.74087291E+01 0.17752748E-01-0.75601506E-05
0.14203795E-08-0.91100182E-13 2

0.40438762E+05-0.13150027E+02 0.22611290E+00
0.36742371E-01-0.22120474E-04 3

0.14390138E-08 0.26435809E-11 0.42428410E+05
0.24066401E+02 4

iC4H5 USC/07C 4H 5O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.69646029E+01 0.18274333E-01-0.78133735E-05
0.15292154E-08-0.10920493E-12 2

0.34725098E+05-0.10649321E+02 0.11308105E+00
0.40950615E-01-0.35413581E-04 3

0.15530969E-07-0.23355122E-11 0.36383371E+05
0.23692457E+02 4

C4H5-2 H6W/94C 4H 5 0 0G 300.000
3000.000 1

1.45381710E+01-8.56770560E-03 2.35595240E-05-
1.36763790E-08 2.44369270E-12 2

3.32590950E+04-4.53694970E+01 2.96962800E+00
2.44422450E-02-9.12514240E-06 3

-4.24668710E-18 1.63047280E-21 3.55033160E+04
1.20360510E+01 3.73930550E+04 4

c-C4H5 PUPM3 C 4H 5 0 0G 300.000
3000.000 1

0.67467155E+01 0.17283000E-01-0.65168579E-05
0.98917574E-09-0.34604908E-13 2

0.32808359E+05-0.12912880E+02-0.26397593E+01
0.41549157E-01-0.21920954E-04 3

-0.46559014E-08 0.61348890E-11 0.35373828E+05
0.35701797E+02 4

C4H7 USC/07C 4H 7O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.70134835E+01 0.22634558E-01-0.92545470E-05
0.16807927E-08-0.10408617E-12 2

0.20955008E+05-0.88893080E+01 0.74449432E+00
0.39678857E-01-0.22898086E-04 3

0.21352973E-08 0.23096375E-11 0.22653328E+05
0.23437878E+02 4

C4H6 H6W/94C 4H 6 0 0G 300.000
3000.000 1

0.88673134E+01 0.14918670E-01-0.31548716E-05-
0.41841330E-09 0.15761258E-12 2

0.91338516E+04-0.23328171E+02 0.11284465E+00
0.34369022E-01-0.11107392E-04 3

-0.92106660E-08 0.62065179E-11 0.11802270E+05
0.23089996E+02 4

C4H612 A 8/83C 4H 6 0 0G 300. 3000.
1000.0 1

0.1781557E 02 -0.4257502E-02 0.1051185E-04 -
0.4473844E-08 0.5848138E-12 2

0.1267342E 05 -0.6982662E 02 0.1023467E 01
0.3495919E-01 -0.2200905E-04 3

0.6942272E-08 -0.7879187E-12 0.1811799E 05
0.1975066E 02 0.1950807E+05 4

C4H6-2 A 8/83C 4H 6 0 0G 300. 3000.
1000.0 1

9.0338133E+00 8.2124510E-03 7.1753952E-06 -
5.8834334E-09 1.0343915E-12 2

1.4335068E+04 -2.0985762E+01 2.1373338E+00
2.6486229E-02 -9.0568711E-06 3

-5.5386397E-19 2.1281884E-22 1.5710902E+04
1.3529426E+01 1.7488676E+04 4

C4H10 P11/94C 4H 10 0 0G 300.000
3000.000 1

0.10526774E+02 0.23590738E-01-0.78522480E-05
0.11448408E-08-0.59827703E-13 2

-0.20479223E+05-0.32198579E+02 0.15685419E+01
0.34652278E-01 0.68168129E-05 3

-0.27995097E-07 0.12307742E-10-0.17129977E+05
0.17908045E+02 4

iC4H10 P11/94C 4H 10 0 0G 300.000
3000.000 1

0.10846169E+02 0.23338389E-01-0.77833962E-05
0.11393807E-08-0.59918289E-13 2

-0.21669854E+05-0.35870573E+02 0.54109489E+00
0.37860301E-01 0.55459804E-05 3

-0.30500110E-07 0.14033357E-10-0.17977644E+05
0.21150935E+02 4

pC4H9 USC/07C 4H 9O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.86822395E+01 0.23691071E-01-0.75948865E-05
0.66427136E-09 0.54845136E-13 2

0.49644058E+04-0.17891747E+02 0.12087042E+01
0.38297497E-01-0.72660509E-05 3

-0.15428547E-07 0.86859435E-11 0.73221040E+04
0.22169268E+02 4

sC4H9 P11/94C 4H 9 0 0G 300.000 3000.000
1

0.94263839E+01 0.21918998E-01-0.72868375E-05
0.10630334E-08-0.55649464E-13 2

0.31965874E+04-0.22406051E+02 0.69428423E+00
0.33113346E-01 0.62942577E-05 3

-0.27025274E-07 0.11989315E-10 0.64175654E+04
0.26279789E+02 4

tC4H9 P11/94C 4H 9 0 0G 300.000 3000.000
1

0.76607261E+01 0.23879414E-01-0.80890353E-05
0.12057521E-08-0.65009814E-13 2

0.16207623E+04-0.14800281E+02 0.96167553E+00
0.25735856E-01 0.15609033E-04 3

-0.26656519E-07 0.89418010E-11 0.46564412E+04
0.24805366E+02 4

iC4H9 USC/07C 4H 9O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.84981728E+01 0.24689538E-01-0.86487589E-05
0.10779325E-08-0.64340570E-15 2

0.44288174E+04-0.18441397E+02 0.97527862E+00
0.41613799E-01-0.14467331E-04 3

-0.93852393E-08 0.68797377E-11 0.66688267E+04
0.21277582E+02 4

C4H81 T 6/83C 4H 8 0 0G 300.000 5000.000
1

0.20535841E+01 0.34350507E-01-0.15883197E-04
0.33089662E-08-0.25361045E-12 2

-0.21397231E+04 0.15543201E+02 0.11811380E+01
0.30853380E-01 0.50865247E-05 3

-0.24654888E-07 0.11110193E-10-0.17904004E+04
0.21062469E+02 4

C4H82 T 6/83C 4H 8 0 0G 300.000 5000.00
1

0.82797676E+00 0.35864539E-01-0.16634498E-04
0.34732759E-08-0.26657398E-12 2

-0.30521033E+04 0.21342545E+02 0.12594252E+01
0.27808424E-01 0.87013932E-05 3

-0.24402205E-07 0.98977710E-11-0.29647742E+04
0.20501129E+02 4

iC4H8 T 6/83H 8C 4 0 0G 300.000 5000.0
1

0.44609470E+01 0.29611487E-01-0.13077129E-04
0.26571934E-08-0.20134713E-12 2

-0.50066758E+04 0.10671549E+01 0.26471405E+01
0.25902957E-01 0.81985354E-05 3

-0.22193259E-07 0.88958580E-11-0.40373069E+04
0.12676388E+02 4

iC4H7 USC/07C 4H 7O 0 0G 300.000
5000.000 1

0.71485939E+01 0.22189671E-01-0.84400172E-05
0.13133353E-08-0.51617927E-13 2

0.12712294E+05-0.12131183E+02-0.10375890E+01
0.45566667E-01-0.30476231E-04 3

0.71102568E-08 0.99685722E-12 0.14896458E+05
0.29863663E+02 4

C2H3CHOCH2 A 8/83C 4H 6O 1 0G 300. 3000.
1000.0 1

-4.72093360E+00 3.91413780E-02-6.52872650E-06-
7.68209500E-09 2.51473310E-12 2

1.75352252E+03 5.17190420E+01 7.97985440E-01
3.44034320E-02-1.24598510E-05 3

-5.18062790E-18 1.99359540E-21-6.48927540E+02
2.18896980E+01 1.00654250E+03 4

CH3CHCHCHO T 5/92C 4H 6O 1 0G 298.150
3000.0 1000.0 1

1.98794540E+01-2.09130550E-02 4.45360508E-05-
2.60374870E-08 4.86836120E-12 2

-1.95278768E+04-6.87200320E+01-1.55577660E+00
4.09640630E-02-1.69868810E-05 3

-6.00928140E-18 2.31368530E-21-1.41394920E+04
3.74707580E+01-1.29340710E+04 4

CH2CHCOCH3 T 3/97C 4H 6O 1 0G 200.000
3000.0 1000.0 1

1.98794540E+01-2.09130550E-02 4.45360580E-05-
2.60374870E-08 4.86836120E-12 2

-1.90786168E+04-6.97265750E+01-1.55577660E+00
4.09640630E-02-1.69868810E-05 3

-6.00928140E-18 2.31368530E-21-1.49447258E+04
3.64642160E+01-1.66079520E+04 4

C4H4O T03/97C 4H 4O 1 0G 200.000 6000.0
1000.0 1

9.38935003E+00 1.40291241E-02-5.07755110E-06
8.24137332E-10-4.95319963E-14 2

-8.68241814E+03-2.79162920E+01 8.47469463E-01
1.31773796E-02 5.99735901E-05 3

-9.71562904E-08 4.22733796E-11-5.36785445E+03
2.14945172E+01-4.17166616E+03 4

CH3CHCHCO USC/07C 4H 5O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.77608204E+01 0.20031804E-01-0.80631016E-05
0.13361392E-08-0.62308408E-13 2

0.45708291E+04-0.11095638E+02 0.53053460E+01
0.15749373E-01 0.21623913E-04 3

-0.36607769E-07 0.14932489E-10 0.57588633E+04
0.42043533E+01 4

CH2CHCHCHO USC/07C 4H 5O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.83010607E+01 0.19945331E-01-0.82903771E-05
0.15100753E-08-0.91581155E-13 2

0.15788387E+03-0.16910566E+02 0.12108673E+01
0.35205878E-01-0.10939090E-04 3

-0.11720642E-07 0.76174908E-11 0.22665703E+04
0.20613544E+02 4

CH2CHCH2CHO T 5/92C 4H 6O 1 0G 298.150
3000.0 1000.0 1

1.98794540E+01-2.09130550E-02 4.45360508E-05-
2.60374870E-08 4.86836120E-12 2

-1.58539966E+04-6.71095639E+01-1.55577660E+00
4.09640630E-02-1.69868810E-05 3

-6.00928140E-18 2.31368530E-21-1.04656118E+04
3.90812260E+01-1.29340710E+04 4

C4H6O25 T 3/97C 4H 6O 1 0G 200.000
5000.000 1000.0 1

8.60658242E+00 2.08310051E-02-8.42229481E-06
1.56717640E-09-1.09391202E-13 2

-1.76177415E+04-2.32464750E+01 2.67053463E+00
4.92586420E-03 8.86967406E-05 3

-1.26219194E-07 5.23991321E-11-1.46572472E+04
1.45722395E+01-1.30831522E+04 4

C4H6O23 T 3/97C 4H 6O 1 0G 200.000
5000.000 1000.0 1

8.60658242E+00 2.08310051E-02-8.42229481E-06
1.56717640E-09-1.09391202E-13 2

-1.32392815E+04-2.32464750E+01 2.67053463E+00
4.92586420E-03 8.86967406E-05 3

-1.26219194E-07 5.23991321E-11-1.02787872E+04
1.45722395E+01-1.30831522E+04 4

sC4H9 T07/95C 4H 9 0 0G 200.000 6000.000
1000.0 1

0.88057265E+01 0.23630381E-01-0.84564737E-05
0.13612584E-08-0.81313232E-13 2

0.37941169E+04-0.19996770E+02 0.46457042E+01
0.79313214E-02 0.70027013E-04 3

-0.95973349E-07 0.38628890E-10 0.62341181E+04
0.79642808E+01 0.84190169E+04 4

C5H2 20587C 5H 2 G 0300.00 5000.00
1000.00 1

0.01132917E+03 0.07424057E-01-0.02628189E-04
0.04082541E-08-0.02301333E-12 2

0.07878706E+06-0.03617117E+03 0.03062322E+02
0.02709998E+00-0.01009170E-03 3

-0.01272745E-06 0.09167219E-10 0.08114969E+06
0.07071078E+02 4

C5H3 20387C 5H 3 G 0300.00 5000.00
1000.00 1

0.01078762E+03 0.09539619E-01-0.03206745E-04
0.04733323E-08-0.02512135E-12 2

0.06392904E+06-0.03005444E+03 0.04328720E+02
0.02352480E+00-0.05856723E-04 3

-0.01215449E-06 0.07726478E-10 0.06588531E+06
0.04173259E+02 4

C5H6 T 1/90C 5H 6 0 0G 200.000 6000.000
1

0.99757848E+01 0.18905543E-01-0.68411461E-05
0.11099340E-08-0.66680236E-13 2

0.11081693E+05-0.32209454E+02 0.86108957E+00
0.14804031E-01 0.72108895E-04 3

-0.11338055E-06 0.48689972E-10 0.14801755E+05
0.21353453E+02 0.16152485E+05 4

C5H5 T12/89C 5H 5 0 0G 300.00 2000.000
1000.00 1

0.74743938E+01 0.16012733E-01-0.64823148E-08-
0.35819703E-08 0.92365071E-12 2

2.80860000E+04-0.16133000E+02 0.98349822E+00
0.33651476E-01-0.11054181E-06 3

-0.36743394E-07 0.23141184E-10 2.96260000E+04
0.16585519E+02 4

cC5H8 T03/97C 5H 8O 0 0G 200.000
6000.000 1000.0 1

0.77244792E+01 0.28322316E-01-0.11545236E-04
0.21540815E-08-0.15054178E-12 2

-0.78261573E+03-0.19769698E+02 0.26898140E+01
0.20954550E-02 0.11303687E-03 3

-0.15408070E-06 0.62763658E-10 0.23139663E+04
0.15294056E+02 0.39328836E+04 4

lC5H9 T03/97C 5H 9O 0 0G 200.000 6000.000
1000.0 1

0.20313000E+02 0.10869880E-01-0.19063805E-05
0.00000000E+00 0.00000000E+00 2

0.94061603E+04-0.82533815E+02 0.11430827E+01
0.44350789E-01-0.17825470E-04 3

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.16967656E+05
0.24181940E+02 0.19122233E+05 4

cC5H9 T03/97C 5H 9O 0 0G 200.000
6000.000 1000.0 1

0.11406802E+02 0.22563988E-01-0.70235595E-05
0.11321968E-08-0.73438204E-13 2

0.75268769E+04-0.39636280E+02 0.29427128E+00
0.13823374E-01 0.90847653E-04 3

-0.13008694E-06 0.53051811E-10 0.12565712E+05
0.27389773E+02 0.13838458E+05 4

C5H4O T 8/99C 5H 4O 1 0G 200.000
6000.000 1

1.00806824E+01 1.61143465E-02-5.83314509E-06
9.46759320E-10-5.68972206E-14 2

1.94364771E+03-2.94521623E+01 2.64576497E-01
3.34873827E-02 1.67738470E-06 3

-2.96207455E-08 1.54431476E-11 5.11159287E+03
2.35409513E+01 6.64245999E+03 4

C5H4OH T 8/99C 5H 5O 1 0G 200.000
6000.000 1

1.33741248E+01 1.51996469E-02-5.45685046E-06
8.80944866E-10-5.27493258E-14 2

2.20358027E+03-4.59569069E+01-1.28398054E+00
4.90298511E-02-1.35844414E-05 3

-2.92983743E-08 1.90820619E-11 6.37364803E+03
3.08073591E+01 8.00114499E+03 4

C5H5O(2,4) D 9/97C 5H 5O 1 00G 300.000
3000.000 1

0.85405312E+01 0.22989510E-01-0.95437563E-05
0.17061612E-08-0.97459360E-13 2

0.22263699E+05-0.20818825E+02-0.30777600E+01
0.52581679E-01-0.28856513E-04 3

-0.33885479E-08 0.63361399E-11 0.25510455E+05
0.39591522E+02 0.26570048E+05 4

C5H5O(1,3) DU0997C 5H 5O 1 00G 300.000
3000.000 1000.00 1

0.92431440E+01 0.22201257E-01-0.93105946E-05
0.17155222E-08-0.10613969E-12 2

0.15908394E+04-0.24087738E+02-0.29566984E+01
0.55851892E-01-0.37241636E-04 3

0.41624357E-08 0.39272010E-11 0.48573193E+04
0.38676682E+02 4

C5H5O(1,2) T 4/91C 5H 5O 1 0G 200.000
6000.000 1

0.12711510E+02 0.16650171E-01-0.60741189E-05
0.99090150E-09-0.59758183E-13 2

0.66172961E+04-0.43161680E+02 0.45438248E-01
0.33871750E-01 0.25637288E-04 3

-0.67844135E-07 0.32508364E-10 0.10797244E+05
0.26058142E+02 0.12424063E+05 4

C5H5OH HWZD99C 5H 6O 1 0G 300.000
3000.000 1

0.34893970E+01 0.38052600E-01-0.21654527E-04
0.59238574E-08-0.62763461E-12 2

-0.82131025E+04 0.71248055E+01-0.50430169E+01
0.71253479E-01-0.70918177E-04 3

0.38680220E-07-0.87888264E-11-0.64167788E+04
0.48617100E+02 4

bi-C5H4O DU0997C 5H 4O 1 00G 300.000
3000.000 1000.00 1

0.10514051E+02 0.16667502E-01-0.61001861E-05
0.81804008E-09-0.88743752E-14 2

0.27501334E+05-0.30678673E+02-0.35879545E+01
0.59943721E-01-0.52969943E-04 3

0.19971461E-07-0.14667430E-11 0.31091709E+05
0.40873169E+02 4

lC5H6 HWZD99C 5H 6 0 0G 300. 3000.
1000. 1

0.86914568E+01 0.21268958E-01-0.79818547E-05
0.11795985E-08-0.35253359E-13 2

0.25763865E+05-0.19189083E+02 0.58391756E+00
0.42602919E-01-0.24962495E-04 3

0.25815752E-08 0.23169964E-11 0.28043699E+05
0.22916780E+02 4

lC5H7 HWZD99C 5H 7 0 0G 300.000
3000.000 1

0.22246480E+01 0.39601296E-01-0.22345617E-04
0.60649676E-08-0.63840047E-12 2

0.22303428E+05 0.14009951E+02-0.40974307E+01
0.61832044E-01-0.48770780E-04 3

0.16696418E-07-0.75334899E-12 0.23683646E+05
0.45148109E+02 4

C5H7 A 9/04C 5H 7 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

8.58774652E+00 2.23806578E-02-7.98587176E-06
1.28324922E-09-7.65681699E-14 2

2.23083592E+04-2.28844345E+01 2.84227879E+00
7.67441692E-03 8.13034074E-05 3

-1.15127705E-07 4.74968151E-11 2.52319161E+04
1.37757573E+01 2.69336656E+04 4

C6H2 D11/99C 6H 2 0 0G 300.000 3000.000
1

0.12893918E+02 0.79145068E-02-0.24027240E-05
0.24340149E-09 0.31383246E-14 2

0.79832406E+05-0.40771996E+02 0.45099974E+00
0.67475192E-01-0.11809925E-03 3

0.10367632E-06-0.34851039E-10 0.82173062E+05
0.17704124E+02 4

C6H P 1/93C 6H 1 0 0G 300.000 3000.000
1

0.12370055E+02 0.52177699E-02-0.16885009E-05
0.25807149E-09-0.15472851E-13 2

0.12158739E+06-0.34952797E+02-0.25630299E+00
0.63793827E-01-0.11440118E-03 3

0.10136744E-06-0.34361855E-10 0.12408855E+06
0.24930750E+02 4

l-C6H4 H6W/94C 6H 4 0 0G 300.000
3000.000 1

0.12715182E+02 0.13839662E-01-0.43765440E-05
0.31541636E-09 0.46619026E-13 2

0.57031148E+05-0.39464600E+02 0.29590225E+00
0.58053318E-01-0.67766756E-04 3

0.43376762E-07-0.11418864E-10 0.60001371E+05
0.22318970E+02 4

l-C6H6 H6W/94C 6H 6 0 0G 300.000
3000.000 1

0.17584442E+02 0.64486600E-02 0.48933980E-05-
0.34696221E-08 0.56150749E-12 2

0.34111988E+05-0.66017838E+02-0.10170622E+01
0.61794821E-01-0.59461061E-04 3

0.31873491E-07-0.71717693E-11 0.39202707E+05
0.29460373E+02 4

c-C6H7 H6W/94C 6H 7 0 0G 300.000
3000.000 1

0.19996841E+02 0.11189543E-02 0.11649756E-04-
0.62779471E-08 0.94939508E-12 2

0.16730059E+05-0.83746933E+02-0.30328493E+01
0.50804518E-01-0.69150292E-05 3

-0.29715974E-07 0.16296353E-10 0.23895383E+05
0.38909180E+02 4

n-C6H7 H6W/94C 6H 7 0 0G 300.000
3000.000 1

0.22577469E+02-0.30737517E-02 0.14225234E-04-
0.69880848E-08 0.10232874E-11 2

0.41228980E+05-0.91568619E+02 0.13248032E+00
0.57103366E-01-0.43712644E-04 3

0.15538603E-07-0.12976356E-11 0.47730512E+05
0.25339081E+02 4

C6H8 H6W/94C 6H 8 0 0G 300.000
3000.000 1

0.28481979E+02-0.15702948E-01 0.26771697E-04-
0.11780109E-07 0.16573427E-11 2

0.93346445E+04-0.12500226E+03 0.15850439E+01
0.40215142E-01 0.78439543E-05 3

-0.38761325E-07 0.18545207E-10 0.17949613E+05
0.19112625E+02 4

cC6H8 T03/97C 6H 8O 0 0G 200.000
6000.000 1000.0 1

0.11779870E+02 0.25519980E-01-0.92666947E-05
0.15068122E-08-0.90658701E-13 2

0.65486686E+04-0.41618805E+02 0.17265319E+01
0.14887612E-01 0.94809230E-04 3

-0.14083394E-06 0.58859873E-10 0.11021297E+05
0.19130886E+02 0.12784878E+05 4

lC6H9 T 2/92C 6H 9O 0 0G 200.000 3000.000
1000.0 1

0.23165919E+02 0.10813608E-01-0.17638168E-05
0.00000000E+00 0.00000000E+00 2

0.11162402E+05-0.98600332E+02 0.31671271E+00
0.52069818E-01-0.21965057E-04 3

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.19926824E+05
0.27879902E+02 0.22141533E+05 4

cC6H9 T 2/92C 6H 9O 0 0G 200.000 3000.000
1000.0 1

0.26295828E+02 0.86828857E-02-0.15770376E-05
0.00000000E+00 0.00000000E+00 2

0.20863563E+04-0.12573825E+03-0.35714300E+01
0.61696043E-01-0.26928803E-04 3

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.13657039E+05
0.39986250E+02 0.15096500E+05 4

cC6H10 THERGAC 6H 10O 0 G 0300.00
5000.00 1000.00 1

1.00457E+01 3.42604E-02 -1.28037E-05 2.17489E-
09 -1.39539E-13 2

-6.40885E+03 -3.26015E+01 -5.76213E+00 7.22665E-
02 -3.42070E-05 3

-6.55031E-09 7.77014E-12 -1.87035E+03
5.02213E+01 4

C6H3 H6W/94C 6H 3 0 0G 300.000
3000.000 1

0.58188343E+01 0.27933408E-01-0.17825427E-04
0.53702536E-08-0.61707627E-12 2

0.85188250E+05-0.92147827E+00 0.11790619E+01
0.55547360E-01-0.73076168E-04 3

0.52076736E-07-0.15046964E-10 0.85647312E+05
0.19179199E+02 4

i-C6H5 H6W/94C 6H 5 0 0G 300.000
3000.000 1

0.22501663E+02-0.81009977E-02 0.15955695E-04-
0.72310371E-08 0.10310424E-11 2

0.58473410E+05-0.91224777E+02-0.78585434E+00
0.60221825E-01-0.62890264E-04 3

0.36310730E-07-0.87000259E-11 0.64942270E+05
0.28658905E+02 4

i-C6H7 H6W/94C 6H 7 0 0G 300.000
3000.000 1

0.20481506E+02 0.79439697E-03 0.11450761E-04-
0.60991177E-08 0.91756724E-12 2

0.37728426E+05-0.81812073E+02-0.17099094E+01
0.62486034E-01-0.54290707E-04 3

0.26959682E-07-0.58999090E-11 0.44086621E+05
0.33344772E+02 4

o-C6H4 D11/99C 6H 4 0 0G 300.000
3000.000 1

0.88432961E+01 0.20301474E-01-0.88674269E-05
0.17264292E-08-0.11786047E-12 2

0.49317113E+05-0.24014301E+02-0.38454189E+01
0.58391564E-01-0.48644750E-04 3

0.16770320E-07-0.78580680E-12 0.52592500E+05
0.40587132E+02 4

m-C6H4 D11/99C 6H 4 0 0G 300.000
3000.000 1

0.95307283E+01 0.19178549E-01-0.80941481E-05
0.14811132E-08-0.88632260E-13 2

0.56865535E+05-0.27623203E+02-0.39450364E+01
0.59887171E-01-0.50811577E-04 3

0.17603140E-07-0.72608743E-12 0.60323117E+05
0.40899506E+02 4

p-C6H4 D11/99C 6H 4 0 0G 300.000
3000.000 1

0.98300371E+01 0.18499156E-01-0.75165058E-05
0.12727610E-08-0.61767120E-13 2

0.64446117E+05-0.29418266E+02-0.39744728E+01
0.58399867E-01-0.44950713E-04 3

0.10307744E-07 0.22412619E-11 0.68058992E+05
0.41168865E+02 4

l-C6H4Z D11/99C 6H 4 0 0G 300.000
3000.000 1

0.11186811E+02 0.17122138E-01-0.73898623E-05
0.14678845E-08-0.10733922E-12 2

0.60743207E+05-0.29537384E+02 0.20895090E+01
0.53276263E-01-0.63299172E-04 3

0.40811642E-07-0.10598600E-10 0.62662203E+05
0.14613283E+02 4

nC6H5 D11/99C 6H 5 0 0G 300.000 3000.000
1

0.11263281E+02 0.19379666E-01-0.76874276E-05
0.12866819E-08-0.63244650E-13 2

0.68052773E+05-0.30487534E+02-0.27013230E+00
0.59389681E-01-0.60963321E-04 3

0.33169378E-07-0.71466453E-11 0.70785828E+05
0.26953651E+02 4

C6H5 D11/99C 6H 5 0 0G 300.000 3000.000
1

0.85973110E+01 0.22241630E-01-0.87199978E-05
0.13788785E-08-0.53146056E-13 2

0.36261047E+05-0.22954643E+02-0.36931453E+01
0.52178968E-01-0.25558427E-04 3

-0.70661121E-08 0.75833975E-11 0.39779590E+05
0.41332535E+02 4

C6H6 D11/99C 6H 6 0 0G 300.000 3000.000
1

0.91381245E+01 0.23854433E-01-0.88127726E-05
0.12099021E-08-0.18221503E-13 2

0.52043462E+04-0.29115665E+02-0.48437734E+01
0.58427613E-01-0.29485855E-04 3

-0.69390440E-08 0.82125253E-11 0.91817773E+04
0.43889832E+02 4

C5H5CH3 P 1/93C 6H 8 0 0G 300.000
2500.000 1

0.14628364E+02 0.19849248E-01-0.50529134E-05
0.10556275E-10 0.11381723E-12 2

0.55674092E+04-0.56114021E+02-0.45763016E-01
0.29978730E-01 0.61898092E-04 3

-0.11171783E-06 0.49435803E-10 0.10927480E+05
0.26558569E+02 4

C5H4CH2 P 1/93C 6H 6 0 0G 300.000
2500.000 1

0.75731055E+04-0.18843678E+02 0.17058320E-01-
0.65980571E-05 0.93053393E-09 2

-0.22894220E+07-0.40003195E+05 0.78428810E+02-
0.43919629E+00 0.13370259E-02 3

-0.14196110E-05 0.56357985E-09 0.22226365E+05-
0.41005380E+03 4

C6H5C6H5 HW /94C 12H 10 0 0G 300.000
3000.000 1

0.50761871E+02-0.34501564E-01 0.50293413E-04-
0.21559579E-07 0.30097192E-11 2

0.21538867E+04-0.24670712E+03-0.10283234E+02
0.12428707E+00-0.95990268E-04 3

0.32294793E-07-0.23045229E-11 0.20165258E+05
0.72707947E+02 4

C6H5C2H H6W/94C 8H 6 0 0G 300.000
3000.000 1

0.24090759E+02 0.78232400E-03 0.11453964E-04-
0.61620504E-08 0.93346685E-12 2

0.27429445E+05-0.10499631E+03-0.52645016E+01
0.84511042E-01-0.76597848E-04 3

0.33216978E-07-0.47673063E-11 0.35566242E+05
0.46378815E+02 4

C6H5CH3 L 6/87C 7H 8 0 0G 200.000
6000.000 1

0.12940034E+02 0.26691287E-01-0.96838505E-05
0.15738629E-08-0.94663601E-13 2

-0.69764908E+03-0.46728785E+02 0.16152663E+01
0.21099438E-01 0.85366018E-04 3

-0.13261066E-06 0.55956604E-10 0.40756300E+04
0.20282210E+02 0.60135835E+04 4

C6H5CH2 T08/90C 7H 7 0 0G 200.000
6000.000 1

0.14043980E+02 0.23493873E-01-0.85375367E-05
0.13890841E-08-0.83614420E-13 2

0.18564203E+05-0.51665589E+02 0.48111540E+00
0.38512832E-01 0.32861492E-04 3

-0.76972721E-07 0.35423068E-10 0.23307027E+05
0.23548820E+02 0.25317186E+05 4

C6H5C2H3 T12/94C 8H 8 0 0G 298.150
5000.000 1

0.16139277E+02 0.24210847E-01-0.72678359E-05
0.11392276E-08-0.72984881E-13 2

0.10249251E+05-0.61169437E+02-0.10717708E+02
0.12666725E+00-0.17762493E-03 3

0.14344049E-06-0.47616577E-10 0.16597133E+05
0.71526331E+02 0.17723291E+05 4

C6H5CH2OH L 7/87C 7H 8O 1 0G 200.000
6000.000 1000.00 1

0.15281154E+02 0.27208501E-01-0.98584660E-05
0.16012183E-08-0.96278057E-13 2

-0.19700471E+05-0.59418673E+02 0.20642021E+01
0.22775140E-01 0.95972053E-04 3

-0.15085110E-06 0.64175832E-10-0.14285021E+05
0.18148312E+02-0.12077200E+05 4

C6H5CH2O T10/06C 7H 7O 1 0G 200.000
6000.000 1000. 1

1.53622870E+01 2.44734564E-02-8.88520657E-06
1.44086796E-09-8.64632894E-14 2

7.83668460E+03-5.60472783E+01 1.39523472E+00
3.46572164E-02 5.32061504E-05 3

-1.03005070E-07 4.60514101E-11 1.28986478E+04
2.24851068E+01 1.51432991E+04 4

C6H5CHO L 3/86C 7H 6O 1 0G 298.150
5000.000 1000.00 1

0.13650737E+02 0.25680419E-01-0.10466729E-04
0.19413430E-08-0.13483792E-12 2

-0.11019744E+05-0.47965796E+02-0.31627334E+01
0.66369245E-01-0.34816353E-04 3

-0.62999377E-08 0.85807101E-11-0.61169349E+04
0.40231735E+02-0.44259974E+04 4

C6H5CO EST/BUR P 1/93C 7H 5O 1 0G 300.000
2500.000 1

0.13374409E+02 0.23999289E-01-0.10465724E-04
0.21669131E-08-0.18007045E-12 2

0.69147837E+04-0.44659218E+02-0.20251155E+01
0.61512541E-01-0.31603653E-04 3

-0.69724599E-08 0.79835149E-11 0.11255803E+05
0.35778175E+02 4

C6H4O2 PUML96C 6H 4O 2 0G 300.000
5000.000 1000.000 1

0.11730840E+02 0.23614995E-01-0.10234576E-04
0.19532174E-08-0.12746022E-12 2

-0.21085770E+05-0.36300453E+02-0.95193005E+00
0.57842445E-01-0.38214439E-04 3

0.46312656E-08 0.36296651E-11-0.17611047E+05
0.29239513E+02 4

C6H5O T05/02C 6H 5O 1 0G 200.000
6000.000 1000.000 1

1.37221720E+01 1.74688771E-02-6.35504520E-06
1.03492308E-09-6.23410504E-14 2

2.87274751E+02-4.88181680E+01-4.66204455E-01
4.13443975E-02 1.32412991E-05 3

-5.72872769E-08 2.89763707E-11 4.77858391E+03
2.76990274E+01 6.49467016E+03 4

C6H5OH L 4/84C 6H 6O 1 0G 300.000
5000.000 1

0.14912073E 02 0.18378135E-01-0.61983128E-05
0.91983221E-09-0.49209565E-13 2

-0.18375199E 05-0.55924103E 02-0.16956539E 01
0.52271299E-01-0.72024050E-05 3

-0.35859603E-07 0.20449073E-10-0.13284121E 05
0.32542160E 02-0.11594207E 05 4

C6H5C2H5 A 6/83C 8H 10 0 0G 300. 3000.
1000.00 1

0.3878978E 01 0.5810059E-01 -0.3196380E-04
0.8448993E-08 -0.8694825E-12 2

-0.5024922E 03 0.3837099E 01 -0.7266845E 01
0.1003089E 00 -0.9651715E-04 3

0.5565908E-07 -0.1453370E-10 0.1987290E 04
0.5857746E 02 0.3529492E+04 4

HOC6H4CH3 AVG CRESOL6/87C 7H 8O 1 0G
200.000 6000.000 1000.00 1

0.15932987E+02 0.27011160E-01-0.99448722E-05
0.16296689E-08-0.98513298E-13 2

-0.23592065E+05-0.59732841E+02 0.42258267E+00
0.45551636E-01 0.32012513E-04 3

-0.81121959E-07 0.37665658E-10-0.18202621E+05
0.26032903E+02-0.15911701E+05 4

OC6H4CH3 EST/BUR P 1/93C 7H 7O 1 0G 300.000
2500.000 1

0.22609371E+02 0.75646150E-02 0.65960894E-05-
0.47150865E-08 0.80409063E-12 2

-0.82025244E+04-0.97292511E+02-0.28855777E+00
0.48003536E-01 0.18032993E-04 3

-0.61741488E-07 0.28852587E-10-0.68945581E+03
0.26720068E+02 4

bi-C6H5CH2 A 6/83C 14H 14 0 0G 300. 3000.
1000.00 1

0.7292035E 01 0.9250200E-01 -0.5168641E-04
0.1362709E-07 -0.1381148E-11 2

0.1031673E 05 -0.1132738E 02 -0.1388958E 02
0.1720984E 00 -0.1700660E-03 3

0.9601888E-07 -0.2373253E-10 0.1503234E 05
0.9270736E 02 0.1721641E+05 4

C10H8 H6W/94C 10H 8 0 0G 300.000
3000.000 1

0.36468643E+02-0.15419513E-01 0.30160038E-04-
0.13700120E-07 0.19582730E-11 2

0.35091445E+04-0.17329489E+03-0.94505043E+01
0.11137849E+00-0.10345667E-03 3

0.52800392E-07-0.11804439E-10 0.16695594E+05
0.65187668E+02 4

C6H4CH3 P 1/93C 7H 7 0 0G 300.000
2500.000 1

0.11615498E+02 0.27431838E-01-0.10899345E-04
0.18641830E-08-0.10191607E-12 2

0.31209334E+05-0.38994637E+02-0.31415942E+01
0.56723077E-01-0.86885111E-05 3

-0.34249616E-07 0.19266902E-10 0.35738547E+05
0.39742840E+02 4

NC5H12 1/ 2/ 7 THERMC 5H 12 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 41

1.57257603E+01 2.61086045E-02-8.90970996E-06
1.38102248E-09-8.00296536E-14 2

-2.60519543E+04-6.03365457E+01-7.36766122E-01
6.07200973E-02-3.57592761E-05 3

1.04907042E-08-1.21487315E-12-1.98934934E+04
2.95358287E+01 4

PXC5H11 1/ 2/ 7 THERMC 5H 11 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 41

1.52977446E+01 2.39735310E-02-8.18392948E-06
1.26883076E-09-7.35409055E-14 2

-9.80712307E+02-5.44829293E+01 5.24384081E-02
5.60796958E-02-3.31545803E-05 3

9.77533781E-09-1.14009660E-12 4.71611460E+03
2.87238666E+01 4

SXC5H11 1/ 2/ 7 THERGC 5H 11 0 0G 300.000
5000.000 1000.000 41

0.13641939E+02 0.18557966E-01-0.51122247E-05
0.70279593E-09-0.39154474E-13 2

0.14672391E+05-0.43577049E+02-0.47920683E+00
0.57435397E-01-0.48409318E-04 3

0.25387028E-07-0.61655381E-11 0.18841402E+05
0.30043011E+02 4

S2XC5H11 1/ 2/ 7 THERMC 5H 11 0 0G 300.000
5000.000 1377.000 41

1.50998007E+01 2.37225333E-02-8.01388900E-06
1.23431039E-09-7.12300125E-14 2

-2.33420039E+03-5.29613979E+01 4.98943592E-01
5.09850184E-02-2.40687488E-05 3

3.59465211E-09 3.01383099E-13 3.40702366E+03
2.78600953E+01 4

C5H10 1/ 2/ 7 THERGC 5H 10 0 0G 300.000
5000.000 1000.000 31

0.12256285E+02 0.24460349E-01-0.80484033E-05
0.12561479E-08-0.76320474E-13 2

-0.86215342E+04-0.38477562E+02-0.50028729E+00
0.53781059E-01-0.29450504E-04 3

0.56197726E-08 0.38702608E-12-0.45748574E+04
0.29451677E+02 4

PXC5H9 1/ 2/ 7 THERMC 5H 9 0 0G 300.000
5000.000 1386.000 31

1.45546753E+01 2.04331611E-02-7.07391431E-06
1.10720105E-09-6.46021493E-14 2

6.76813422E+03-5.37243740E+01-1.22720644E+00
5.49419289E-02-3.56284020E-05 3

1.18245127E-08-1.61716004E-12 1.25391664E+04
3.19626373E+01 4

NC6H14 1/ 2/ 7 THERMC 6H 14 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 51

1.89634117E+01 3.04480204E-02-1.03794829E-05
1.60775457E-09-9.31269728E-14 2

-3.01628739E+04-7.62839355E+01-9.69606184E-01
7.29085608E-02-4.38853919E-05 3

1.32312807E-08-1.58437423E-12-2.27803862E+04
3.23069798E+01 4

PXC6H13 1/ 2/ 7 THERMC 6H 13 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 51

1.85385470E+01 2.83107962E-02-9.65307246E-06
1.49547585E-09-8.66336064E-14 2

-5.09299041E+03-7.04490943E+01-2.04871465E-01
6.83801272E-02-4.14447912E-05 3

1.26155802E-08-1.53120058E-12 1.83280393E+03
3.16075093E+01 4

SXC6H13 1/ 2/ 7 THERMC 6H 13 0 0G 300.000
5000.000 1380.000 51

1.83687363E+01 2.80268110E-02-9.47032396E-06
1.45888527E-09-8.42002461E-14 2

-6.46093974E+03-6.90934018E+01 2.29560149E-01
6.33327323E-02-3.24135431E-05 3

6.46387687E-09-9.61420427E-14 5.25639156E+02
3.08006138E+01 4

S2XC6H13 1/ 2/ 7 THERMC 6H 13 0 0G 300.000
5000.000 1380.000 51

1.83687363E+01 2.80268110E-02-9.47032396E-06
1.45888527E-09-8.42002461E-14 2

-6.46093974E+03-6.90934018E+01 2.29560149E-01
6.33327323E-02-3.24135431E-05 3

6.46387687E-09-9.61420427E-14 5.25639156E+02
3.08006138E+01 4

C6H12 9/01/7THERGC 6H 12 0 0G 300.000
5000.000 1000.000 41

0.15091719E+02 0.29076910E-01-0.95016030E-05
0.14764964E-08-0.89480832E-13 2

-0.12462882E+05-0.51947624E+02-0.55547744E+00
0.64605728E-01-0.34200424E-04 3

0.50421813E-08 0.11477376E-11-0.74860210E+04
0.31462109E+02 4

PXC6H11 1/22/ 7 THERGC 6H 11O 0 G 0300.00
5000.00 1000.00 1

1.36624E+01 2.78801E-02 -8.49489E-06 1.24384E-
09 -7.17067E-14 2

1.31410E+04 -4.12369E+01 -8.10229E-01 6.88802E-
02 -4.93843E-05 3

1.71881E-08 -1.64486E-12 1.70719E+04
3.32599E+01 4

NC7H16 1/ 2/ 7 THERMC 7H 16 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 61

2.22148969E+01 3.47675750E-02-1.18407129E-05
1.83298478E-09-1.06130266E-13 2

-3.42760081E+04-9.23040196E+01-1.26836187E+00
8.54355820E-02-5.25346786E-05 3

1.62945721E-08-2.02394925E-12-2.56586565E+04
3.53732912E+01 4

PXC7H15 1/ 2/ 7 THERMC 7H 15 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 61

2.17940709E+01 3.26280243E-02-1.11138244E-05
1.72067148E-09-9.96366999E-14 2

-9.20938221E+03-8.64954311E+01-4.99570406E-01
8.08826467E-02-5.00532754E-05 3

1.56549308E-08-1.96616227E-12-1.04590223E+03
3.46564011E+01 4

SXC7H15 1/ 2/ 7 THERMC 7H 15 0 0G 300.000
5000.000 1382.000 61

2.16368842E+01 3.23324804E-02-1.09273807E-05
1.68357060E-09-9.71774091E-14 2

-1.05873616E+04-8.52209653E+01-3.79155767E-02
7.56726570E-02-4.07473634E-05 3

9.32678943E-09-4.92360745E-13-2.35605303E+03
3.37321506E+01 4

S2XC7H15 1/ 2/ 7 THERMC 7H 15 0 0G 300.000
5000.000 1382.000 61

2.16368842E+01 3.23324804E-02-1.09273807E-05
1.68357060E-09-9.71774091E-14 2

-1.05873616E+04-8.52209653E+01-3.79155767E-02
7.56726570E-02-4.07473634E-05 3

9.32678943E-09-4.92360745E-13-2.35605303E+03
3.37321506E+01 4

S3XC7H15 1/ 2/ 7 THERMC 7H 15 0 0G 300.000
5000.000 1382.000 61

2.16368842E+01 3.23324804E-02-1.09273807E-05
1.68357060E-09-9.71774091E-14 2

-1.05873616E+04-8.52209653E+01-3.79155767E-02
7.56726570E-02-4.07473634E-05 3

9.32678943E-09-4.92360745E-13-2.35605303E+03
3.37321506E+01 4

C7H14 1/ 2/ 7 THERMC 7H 14 0 0G 300.000
5000.000 1392.000 51

2.10898039E+01 3.10607878E-02-1.05644793E-05
1.63405780E-09-9.45598219E-14 2

-1.83260065E+04-8.44391108E+01-1.67720549E+00
8.24611601E-02-5.46504108E-05 3

1.87862303E-08-2.65737983E-12-1.02168601E+04
3.85068032E+01 4

PXC7H13 1/ 2/ 7 THERMC 7H 13 0 0G 300.000
5000.000 1389.000 51

2.09278134E+01 2.92841022E-02-1.00899640E-05
1.57425554E-09-9.16505991E-14 2

-1.41296217E+03-8.50447021E+01-1.66945935E+00
7.93202117E-02-5.20231516E-05 3

1.74804211E-08-2.40912996E-12 6.75927466E+03
3.73759517E+01 4

NC8H18 1/ 2/ 7 THERMC 8H 18 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 71

2.54710194E+01 3.90887037E-02-1.33038777E-05
2.05867527E-09-1.19167174E-13 2

-3.83962755E+04-1.08361094E+02-1.54218406E+00
9.78112063E-02-6.09318358E-05 3

1.92005591E-08-2.42996250E-12-2.85395641E+04
3.83327978E+01 4

PXC8H17 1/ 2/ 7 THERMC 8H 17 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 71

2.50510356E+01 3.69480162E-02-1.25765264E-05
1.94628409E-09-1.12668898E-13 2

-1.33300535E+04-1.02557384E+02-7.72759438E-01
9.32549705E-02-5.84447245E-05 3

1.85570214E-08-2.37127483E-12-3.92689511E+03
3.76130631E+01 4

SXC8H17 1/ 2/ 7 THERMC 8H 17 0 0G 300.000
5000.000 1383.000 71

2.49043504E+01 3.66393792E-02-1.23849888E-05
1.90835394E-09-1.10160725E-13 2

-1.47135299E+04-1.01344740E+02-3.04233324E-01
8.80077253E-02-4.90742611E-05 3

1.21857563E-08-8.87773198E-13-5.23792835E+03
3.66582632E+01 4

S2XC8H17 1/ 2/ 7 THERMC 8H 17 0 0G 300.000
5000.000 1383.000 71

2.49043504E+01 3.66393792E-02-1.23849888E-05
1.90835394E-09-1.10160725E-13 2

-1.47135299E+04-1.01344740E+02-3.04233324E-01
8.80077253E-02-4.90742611E-05 3

1.21857563E-08-8.87773198E-13-5.23792835E+03
3.66582632E+01 4

S3XC8H17 1/ 2/ 7 THERMC 8H 17 0 0G 300.000
5000.000 1383.000 71

2.49043504E+01 3.66393792E-02-1.23849888E-05
1.90835394E-09-1.10160725E-13 2

-1.47135299E+04-1.01344740E+02-3.04233324E-01
8.80077253E-02-4.90742611E-05 3

1.21857563E-08-8.87773198E-13-5.23792835E+03
3.66582632E+01 4

C8H16 1/ 2/ 7 THERMC 8H 16 0 0G 300.000
5000.000 1392.000 61

2.43540125E+01 3.53666462E-02-1.20208388E-05
1.85855053E-09-1.07522262E-13 2

-2.24485674E+04-1.00537716E+02-1.89226915E+00
9.46066357E-02-6.27385521E-05 3

2.15158309E-08-3.02718683E-12-1.31074559E+04
4.11878981E+01 4

PXC8H15 1/ 2/ 7 THERMC 8H 15 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 61

2.41485380E+01 3.36466429E-02-1.15692934E-05
1.80261649E-09-1.04847473E-13 2

-5.51631151E+03-1.00894875E+02-1.90098561E+00
9.15067740E-02-6.01588113E-05 3

2.02337556E-08-2.78235289E-12 3.87213558E+03
4.01405031E+01 4

NC9H20 1/ 2/ 7 THERMC 9H 20 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 81

2.87289600E+01 4.34074576E-02-1.47660985E-05
2.28420987E-09-1.32194796E-13 2

-4.25174479E+04-1.24428751E+02-1.81390458E+00
1.10176644E-01-6.93124463E-05 3

2.20957601E-08-2.83355715E-12-3.14207716E+04
4.12827220E+01 4

PXC9H19 1/ 2/ 7 THERMC 9H 19 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 81

2.83097514E+01 4.12657344E-02-1.40383289E-05
2.17174871E-09-1.25692307E-13 2

-1.74516030E+04-1.16837897E+02-1.04387292E+00
1.05617283E-01-6.68199971E-05 3

2.14486166E-08-2.77404275E-12-6.80818512E+03
4.23518992E+01 4

SXC9H19 1/ 2/ 7 THERMC 9H 19 0 0G 300.000
5000.000 1386.000 81

2.80393256E+01 4.11440297E-02-1.39260043E-05
2.14745952E-09-1.24022172E-13 2

-1.87727855E+04-1.16696832E+02-5.76046059E-01
1.00511821E-01-5.77755119E-05 3

1.53276702E-08-1.35056750E-12-8.12289806E+03
3.95795606E+01 4

S2XC9H19 1/ 2/ 7 THERMC 9H 19 0 0G 300.000
5000.000 1386.000 81

2.80393256E+01 4.11440297E-02-1.39260043E-05
2.14745952E-09-1.24022172E-13 2

-1.87727855E+04-1.16696832E+02-5.76046059E-01
1.00511821E-01-5.77755119E-05 3

1.53276702E-08-1.35056750E-12-8.12289806E+03
3.95795606E+01 4

S3XC9H19 1/ 2/ 7 THERMC 9H 19 0 0G 300.000
5000.000 1386.000 81

2.80393256E+01 4.11440297E-02-1.39260043E-05
2.14745952E-09-1.24022172E-13 2

-1.87727855E+04-1.16696832E+02-5.76046059E-01
1.00511821E-01-5.77755119E-05 3

1.53276702E-08-1.35056750E-12-8.12289806E+03
3.95795606E+01 4

S4XC9H19 1/ 2/ 7 THERMC 9H 19 0 0G 300.000
5000.000 1386.000 81

2.80393256E+01 4.11440297E-02-1.39260043E-05
2.14745952E-09-1.24022172E-13 2

-1.87727855E+04-1.16696832E+02-5.76046059E-01
1.00511821E-01-5.77755119E-05 3

1.53276702E-08-1.35056750E-12-8.12289806E+03
3.95795606E+01 4

C9H18 1/ 2/ 7 THERMC 9H 18 0 0G 300.000
5000.000 1392.000 71

2.76142176E+01 3.96825287E-02-1.34819446E-05
2.08390452E-09-1.20539294E-13 2

-2.65709061E+04-1.16618623E+02-2.16108263E+00
1.06958297E-01-7.10973244E-05 3

2.43971077E-08-3.42771547E-12-1.59890847E+04
4.41245128E+01 4

PXC9H17 1/ 3/ 7 THERMC 9H 17 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 71

2.73846125E+01 3.79931250E-02-1.30425564E-05
2.02998652E-09-1.17985203E-13 2

-9.62653063E+03-1.17685762E+02-2.20061475E+00
1.03997426E-01-6.87316813E-05 3

2.32482420E-08-3.21153346E-12 9.95158605E+02
4.23691203E+01 4

NC10H22 1/ 2/ 7 THERMC 10H 22 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 91

3.19882239E+01 4.77244922E-02-1.62276391E-05
2.50963259E-09-1.45215772E-13 2

-4.66392840E+04-1.40504121E+02-2.08416969E+00
1.22535012E-01-7.76815739E-05 3

2.49834877E-08-3.23548038E-12-3.43021863E+04
4.42260140E+01 4

PXC10H21 1/ 2/ 7 THERMC 10H 21 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 91

3.15697160E+01 4.55818403E-02-1.54994965E-05
2.39710933E-09-1.38709559E-13 2

-2.15737832E+04-1.34708986E+02-1.31358348E+00
1.17972813E-01-7.51843079E-05 3

2.43331106E-08-3.17522852E-12-9.68967550E+03
4.35010452E+01 4

SXC10H21 1/ 2/ 7 THERMC 10H 21 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 91

3.14447580E+01 4.52778532E-02-1.53145696E-05
2.36072411E-09-1.36311835E-13 2

-2.29702700E+04-1.33634423E+02-9.30536886E-01
1.13137924E-01-6.64034118E-05 3

1.83220872E-08-1.77128003E-12-1.09890165E+04
4.29335080E+01 4

S2XC10H21 1/ 2/ 7 THERMC 10H 21 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 91

3.14447580E+01 4.52778532E-02-1.53145696E-05
2.36072411E-09-1.36311835E-13 2

-2.29702700E+04-1.33634423E+02-9.30536886E-01
1.13137924E-01-6.64034118E-05 3

1.83220872E-08-1.77128003E-12-1.09890165E+04
4.29335080E+01 4

S3XC10H21 1/ 2/ 7 THERMC 10H 21 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 91

3.14447580E+01 4.52778532E-02-1.53145696E-05
2.36072411E-09-1.36311835E-13 2

-2.29702700E+04-1.33634423E+02-9.30536886E-01
1.13137924E-01-6.64034118E-05 3

1.83220872E-08-1.77128003E-12-1.09890165E+04
4.29335080E+01 4

S4XC10H21 1/ 2/ 7 THERMC 10H 21 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 91

3.14447580E+01 4.52778532E-02-1.53145696E-05
2.36072411E-09-1.36311835E-13 2

-2.29702700E+04-1.33634423E+02-9.30536886E-01
1.13137924E-01-6.64034118E-05 3

1.83220872E-08-1.77128003E-12-1.09890165E+04
4.29335080E+01 4

C10H20 1/22/ 7 THERMC 10H 20 0 0G 300.000
5000.000 1392.000 81

3.08753903E+01 4.39971526E-02-1.49425530E-05
2.30917678E-09-1.33551477E-13 2

-3.06937307E+04-1.32705172E+02-2.42901688E+00
1.19305598E-01-7.94489025E-05 3

2.72736596E-08-3.82718373E-12-1.88708365E+04
4.70571383E+01 4

PXC10H19 1/22/ 7 THERMC 10H 19 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 81

3.06442992E+01 4.23089356E-02-1.45032261E-05
2.25520722E-09-1.30991162E-13 2

-1.37453412E+04-1.32907157E+02-2.49340025E+00
1.16496175E-01-7.73332421E-05 3

2.62845301E-08-3.64630937E-12-1.88400568E+03
4.62584816E+01 4

NC11H24 1/22/ 7 THERMC 11H 24 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 11

3.52484813E+01 5.20402416E-02-1.76886732E-05
2.73497226E-09-1.58231832E-13 2

-5.07616214E+04-1.56585288E+02-2.35338447E+00
1.34888270E-01-8.60424000E-05 3

2.78658195E-08-3.63619953E-12-3.71837502E+04
4.71645217E+01 4

PXC11H23 1/22/ 7 THERMC 11H 23 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 11

3.48306023E+01 4.98967610E-02-1.69601993E-05
2.62239406E-09-1.51722334E-13 2

-2.56964317E+04-1.50793815E+02-1.58230042E+00
1.30323530E-01-8.35408417E-05 3

2.72125730E-08-3.57529580E-12-1.25713075E+04
4.64373071E+01 4

SXC11H23 1/22/ 7 THERMC 11H 23 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 11

3.47027943E+01 4.95633551E-02-1.67588574E-05
2.58285265E-09-1.49118584E-13 2

-2.70891758E+04-1.49690851E+02-1.10250355E+00
1.25021794E-01-7.40802024E-05 3

2.07818900E-08-2.07855904E-12-1.38839647E+04
4.54310281E+01 4

S2XC11H23 1/22/ 7 THERMC 11H 23 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 11

3.47027943E+01 4.95633551E-02-1.67588574E-05
2.58285265E-09-1.49118584E-13 2

-2.70891758E+04-1.49690851E+02-1.10250355E+00
1.25021794E-01-7.40802024E-05 3

2.07818900E-08-2.07855904E-12-1.38839647E+04
4.54310281E+01 4

S3XC11H23 1/22/ 7 THERMC 11H 23 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 11

3.47027943E+01 4.95633551E-02-1.67588574E-05
2.58285265E-09-1.49118584E-13 2

-2.70891758E+04-1.49690851E+02-1.10250355E+00
1.25021794E-01-7.40802024E-05 3

2.07818900E-08-2.07855904E-12-1.38839647E+04
4.54310281E+01 4

S4XC11H23 1/22/ 7 THERMC 11H 23 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 11

3.47027943E+01 4.95633551E-02-1.67588574E-05
2.58285265E-09-1.49118584E-13 2

-2.70891758E+04-1.49690851E+02-1.10250355E+00
1.25021794E-01-7.40802024E-05 3

2.07818900E-08-2.07855904E-12-1.38839647E+04
4.54310281E+01 4

S5XC11H23 1/22/ 7 THERMC 11H 23 0 0G 300.000
5000.000 1385.000 11

3.47027943E+01 4.95633551E-02-1.67588574E-05
2.58285265E-09-1.49118584E-13 2

-2.70891758E+04-1.49690851E+02-1.10250355E+00
1.25021794E-01-7.40802024E-05 3

2.07818900E-08-2.07855904E-12-1.38839647E+04
4.54310281E+01 4

C11H22 1/ 2/ 7 THERMC 11H 22 0 0G 300.000
5000.000 1392.000 91

3.41376800E+01 4.83102359E-02-1.64025319E-05
2.53434308E-09-1.46557255E-13 2

-3.48170932E+04-1.48798197E+02-2.69653994E+00
1.31650370E-01-8.77957172E-05 3

3.01467965E-08-4.22584486E-12-2.17526343E+04
4.99879917E+01 4

PXC11H21 1/ 2/ 7 THERMC 11H 21 0 0G 300.000
5000.000 1390.000 91

3.38968067E+01 4.66347047E-02-1.59682128E-05
2.48119562E-09-1.44045675E-13 2

-1.78637749E+04-1.48943146E+02-2.77277326E+00
1.28897937E-01-8.57717335E-05 3

2.92169310E-08-4.05817299E-12-4.76410432E+03
4.92434369E+01 4

NC12H26 1/ 2/ 7 THERMC 12H 26 0 0G 300.000
5000.000 1391.000 11

3.85095037E+01 5.63550048E-02-1.91493200E-05
2.96024862E-09-1.71244150E-13 2

-5.48843465E+04-1.72670922E+02-2.62181594E+00
1.47237711E-01-9.43970271E-05 3

3.07441268E-08-4.03602230E-12-4.00654253E+04

OH* ATcT AO 1H 1 0 0G 200.000 6000.000
1000.00 1

2.75582920E+00 1.39848756E-03-4.19428493E-07
6.33453282E-11-3.56042218E-15 2

5.09751756E+04 5.62581429E+00 3.46084428E+00
5.01872172E-04-2.00254474E-06 3

3.18901984E-09-1.35451838E-12 5.07349466E+04
1.73976415E+00 5.17770741E+04 4

CH* TPIS79C 1H 1 00 00G 200.000 3500.000
1000.000 1

2.78220752E+00 1.47246754E-03-4.63436227E-07
7.32736021E-11-4.19705404E-15 2

1.04547060E+05 5.17421018E+00 3.47250101E+00
4.26443626E-04-1.95181794E-06 3

3.51755043E-09-1.60436174E-12 1.04334869E+05
1.44799533E+00 1.05378099E+05 4

HCN L 7/88H 1C 1N 1 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.38022392E+01 0.31464227E-02-0.10632185E-05
0.16619757E-09-0.97997567E-14 2

0.14910512E+05 0.15754601E+01 0.22589885E+01
0.10051170E-01-0.13351763E-04 3

0.10092349E-07-0.30089029E-11 0.15215853E+05
0.89164418E+01 0.16236675E+05 4

N 120186N 1 G 0300.00 5000.00
1000.00 1

0.02450268E+02 0.10661458E-03-0.07465337E-06
0.01879652E-09-0.10259839E-14 2

0.05611604E+06 0.04448758E+02 0.02503071E+02-
0.02180018E-03 0.05420529E-06 3

-0.05647560E-09 0.02099904E-12 0.05609890E+06
0.04167566E+02 4

NCO EA 93 N 1C 1O 1 G 200.000 6000.000
1000.000 1

0.51521845E+01 0.23051761E-02-0.88033153E-06
0.14789098E-09-0.90977996E-14 2

0.14004123E+05-0.25442660E+01 0.28269308E+01
0.88051688E-02-0.83866134E-05 3

0.48016964E-08-0.13313595E-11 0.14682477E+05
0.95504646E+01 4

HNCO T 6/94H 1N 1C 1O 1G 200.000
6000.000 1000. 1

0.52936894E+01 0.40307770E-02-0.14130589E-05
0.22445562E-09-0.13287683E-13 2

-0.15973489E+05-0.30864710E+01 0.22432188E+01
0.14491349E-01-0.15236174E-04 3

0.83345851E-08-0.17104033E-11-0.15233708E+05
0.12157321E+02-0.14039745E+05 4

NH L11/89N 1H 1 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.27836929E+01 0.13298429E-02-0.42478047E-06
0.78348504E-10-0.55044470E-14 2

0.42134514E+05 0.57407798E+01 0.34929084E+01
0.31179197E-03-0.14890484E-05 3

0.24816442E-08-0.10356967E-11 0.41894294E+05
0.18483277E+01 0.42940822E+05 4

NH2 L12/89N 1H 2 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.28476611E+01 0.31428453E-02-0.89866557E-06
0.13032357E-09-0.74885356E-14 2

0.21823916E+05 0.64718133E+01 0.42055601E+01-
0.21355282E-02 0.72682021E-05 3

-0.59302799E-08 0.18067218E-11 0.21535223E+05-
0.14663231E+00 0.22747541E+05 4

CN T 6/94C 1N 1 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.37459804E+01 0.43450773E-04 0.29705984E-06-
0.68651804E-10 0.44134174E-14 2

0.52353188E+05 0.27867600E+01 0.36129350E+01-
0.95551327E-03 0.21442976E-05 3

-0.31516324E-09-0.46430356E-12 0.52525340E+05
0.39804995E+01 0.52571034E+05 4

HCN L 7/88H 1C 1N 1 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.38022392E+01 0.31464227E-02-0.10632185E-05
0.16619757E-09-0.97997567E-14 2

0.14910512E+05 0.15754601E+01 0.22589885E+01
0.10051170E-01-0.13351763E-04 3

0.10092349E-07-0.30089029E-11 0.15215853E+05
0.89164418E+01 0.16236675E+05 4

N2O L 7/88N 2O 1 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.48230729E+01 0.26270251E-02-0.95850872E-06
0.16000712E-09-0.97752302E-14 2

0.80734047E+04-0.22017208E+01 0.22571502E+01
0.11304728E-01-0.13671319E-04 3

0.96819803E-08-0.29307182E-11 0.87417746E+04
0.10757992E+02 0.98141682E+04 4

HNO L12/89H 1N 1O 1 0G 200.000 3500.000
1000. 1

0.31655229E+01 0.30000862E-02-0.39436619E-06-
0.38575815E-10 0.70807189E-14 2

0.11194426E+05 0.76477833E+01 0.45352475E+01-
0.56853972E-02 0.18519850E-04 3

-0.17188273E-07 0.55583207E-11 0.11039881E+05
0.17431919E+01 0.12271645E+05 4

NH3 AMONIA RUS 89N 1H 3 0 0G 200.000
6000.000 1000. 1

2.71709692E+00 5.56856338E-03-1.76886396E-06
2.67417260E-10-1.52731419E-14 2

-6.58451989E+03 6.09289837E+00 4.30177808E+00-
4.77127330E-03 2.19341619E-05 3

-2.29856489E-08 8.28992268E-12-6.74806394E+03-
6.90644393E-01-5.52528050E+03 4

NO2 L 7/88N 1O 2 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.48847540E+01 0.21723955E-02-0.82806909E-06
0.15747510E-09-0.10510895E-13 2

0.23164982E+04-0.11741695E+00 0.39440312E+01-
0.15854290E-02 0.16657812E-04 3

-0.20475426E-07 0.78350564E-11 0.28966180E+04
0.63119919E+01 0.41124701E+04 4

N2H T07/93N 2H 1 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

0.37667545E+01 0.28915081E-02-0.10416620E-05
0.16842594E-09-0.10091896E-13 2

0.28650697E+05 0.44705068E+01 0.43446927E+01-
0.48497072E-02 0.20059459E-04 3

-0.21726464E-07 0.79469538E-11 0.28791973E+05
0.29779411E+01 0.30009829E+05 4

NO RUS 89N 1O 1 0 0G 200.000 6000.000
1000. 1

3.26071234E+00 1.19101135E-03-4.29122646E-07 0.05673346E+02 0.02298837E-01-0.01774446E-05-
6.94481463E-11-4.03295681E-15 2 0.01103482E-08 0.01859762E-12 2

9.92143132E+03 6.36900518E+00 4.21859896E+00- 0.05569325E+05-0.06153540E+02 0.02530590E+02
4.63988124E-03 1.10443049E-05 3 0.08596035E-01-0.05471030E-04 3

-9.34055507E-09 2.80554874E-12 9.84509964E+03 0.02276249E-07-0.04648073E-11 0.06868030E+05
2.28061001E+00 1.09770882E+04 4 0.01126651E+03 4

H2NO 102290H 2N 1O 1 G 0300.00 4000.00 ENDOFDATA
1500.00 1

GARRAIO MEKANISMOAK

```
AR          0  136.500   3.330   0.000   0.000   0.000
C           0   71.400   3.298   0.000   0.000   0.000 ! *
CH          1   80.000   2.750   0.000   0.000   0.000
CH*         1   80.000   2.750   0.000   0.000   0.000
CH2         1  144.000   3.800   0.000   0.000   0.000
CH2*        1  144.000   3.800   0.000   0.000   0.000
CH3         1  144.000   3.800   0.000   0.000   0.000
CH4         2  141.400   3.746   0.000   2.600  13.000
CO          1   98.100   3.650   0.000   1.950   1.800
CO2         1  244.000   3.763   0.000   2.650   2.100
HCO         2  498.000   3.590   0.000   0.000   0.000
CH2O        2  498.000   3.590   0.000   0.000   2.000
CH2OH       2  417.000   3.690   1.700   0.000   2.000
CH3O        2  417.000   3.690   1.700   0.000   2.000
CH3OH       2  481.800   3.626   0.000   0.000   1.000
! SVE

C2          1   97.530   3.621   0.000   1.760   4.000
C2O         1  232.400   3.828   0.000   0.000   1.000 ! *
C2H         1  209.000   4.100   0.000   0.000   2.500
C2H2        1  209.000   4.100   0.000   0.000   2.500
H2CC        2  209.000   4.100   0.000   0.000   2.500
C2H3        2  209.000   4.100   0.000   0.000   1.000 !
*
C2H4        2  280.800   3.971   0.000   0.000   1.500
C2H5        2  252.300   4.302   0.000   0.000   1.500
C2H6        2  252.300   4.302   0.000   0.000   1.500
HCCO        2  150.000   2.500   0.000   0.000   1.000 !
*
HCCOH       2  436.000   3.970   0.000   0.000   2.000
CH2CO       2  436.000   3.970   0.000   0.000   2.000
CH2CHO      2  436.000   3.970   0.000   0.000   2.000
C2H2OH      2  224.700   4.162   0.000   0.000   1.000
! *

C3H2        2  209.000   4.100   0.000   0.000   1.000 !
*
C3H3        2  252.000   4.760   0.000   0.000   1.000 !
JAM
aC3H4       1  252.000   4.760   0.000   0.000   1.000
pC3H4       1  252.000   4.760   0.000   0.000   1.000
cC3H4       1  252.000   4.760   0.000   0.000   1.000
CH2OCH2     1  252.000   4.760   0.000   0.000   1.000
CH2OCH      1  252.000   4.760   0.000   0.000   1.000
CH3CH2CHO   1  252.000   4.760   0.000   0.000
1.000

C4H         1  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000
C4H2        1  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000
H2C4O       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000
! JAM
C4H2OH      2  224.700   4.162   0.000   0.000   1.000
! *
iC4H3       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
JAM
nC4H3       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
JAM
C4H4        2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
JAM
iC4H5       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
JAM
nC4H5       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
JAM
C4H5-2      2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
C4H6        2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000
C4H6-2      2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000
C4H612      2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000
CH3CHOCH2   2  357.000   5.180   0.000   0.000
1.000
```

C5H2 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C5H3 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C5H5 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C5H6 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

lC5H7 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C4H6O25 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C4H6O23 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C4H4O 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

CH2CHCO 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

CH3CHOCH2 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

CH2CHCHCHO 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

CH3CHCHCO 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C2H3CHOCH2 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

CH3CHCHCHO 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C6H 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C6H2 1 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000

C6H3 2 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000 !

l-C6H4 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(JAM)

nC6H5 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(JAM)

i-C6H5 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(JAM)

l-C6H6 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(SVE)

n-C6H7 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(JAM)

i-C6H7 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(JAM)

C6H8 2 412.300 5.349 0.000 0.000 1.000 !(JAM)

HE 0 10.200 2.576 0.000 0.000 0.000 ! *

H 0 145.000 2.050 0.000 0.000 0.000

H2 1 38.000 2.920 0.000 0.790 280.000

H2O 2 572.400 2.605 1.844 0.000 4.000

H2O2 2 107.400 3.458 0.000 0.000 3.800

HO2 2 107.400 3.458 0.000 0.000 1.000 ! *

N2 1 97.530 3.621 0.000 1.760 4.000

O 0 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000

O2 1 107.400 3.458 0.000 1.600 3.800

OH 1 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000

OH* 1 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000

NO 1 97.530 3.621 0.000 1.760 4.000

N2O 1 232.400 3.828 0.000 0.000 1.000 ! *

H2NO 2 116.700 3.492 0.000 0.000 1.000 ! JAM

NO2 2 200.000 3.500 0.000 0.000 1.000 ! *

NH 1 80.000 2.650 0.000 0.000 4.000

NH2 2 80.000 2.650 0.000 2.260 4.000

NH3 2 481.000 2.920 1.470 0.000 10.000

NO2 2 200.000 3.500 0.000 0.000 1.000 ! *

N 0 71.400 3.298 0.000 0.000 0.000 ! *

HNO 2 116.700 3.492 0.000 0.000 1.000 ! *

N2H 2 71.400 3.798 0.000 0.000 1.000 ! *

The Lennard-Jones parameters of polycyclic aromatic hydrocarbons were estimated

based on the critical temperature and pressure. See H. Wang and M. Frenklach,

"Transport Properties of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons for Flame Modeling."

Combustion and Flame, 96:163-170 (1994)

c-C6H4 2 464.8 5.29 0.00 10.32 0.000 ! benze

C6H6 2 464.8 5.29 0.00 10.32 0.000 ! benze

C6H5 2 464.8 5.29 0.00 10.32 0.000 ! benze

```
C6H5CH3      2  495.3    5.68    0.43    12.30    1.000  !
C6H5C2H3     2  546.2    6.00    0.13    15.00    1.000  !
C6H5CH2      2  495.3    5.68    0.43    12.30    1.000  !
C6H5C2H      2  535.6    5.72    0.77    12.00    1.000  !
A2           2  630.4    6.18    0.00    16.50    1.000  !
c-C6H7       2  464.8    5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze
C5H4O        2  464.8    5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze
C5H5O        2  464.8    5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze
C5H4OH       2  464.8    5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze
C6H5O        2  464.8    5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze
C6H5OH       2  464.8    5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze

aC3H5        2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
CH3CCH2      2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
CH3CHCH      2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
C3H6         2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
C3H7         2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
C4H6         2  357.000   5.180   0.000   0.000    1.000
iC3H7        2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
nC3H7        2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
C3H8         2  266.800   4.982   0.000   0.000    1.000
C4H          1  357.000   5.180   0.000   0.000    1.000
C4H2         1  357.000   5.180   0.000   0.000    1.000
C4H2OH       2  224.700   4.162   0.000   0.000    1.000
! *
iC4H5        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
C4H6         2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
C4H7         2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
iC4H7        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
C4H81        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
C4H82        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
iC4H8        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
tC4H9        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
iC4H9        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
pC4H9        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
sC4H9        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
C4H10        2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
iC4H10       2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
CH3COCH3     2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
C2H3CHO      2  357.000   5.176   0.000   0.000    1.000
iC4H7O       2  450.000   5.500   0.000   0.000    1.000
! JAM
CH3CHO       2  436.000   3.970   0.000   0.000    2.000
CH3CO        2  436.000   3.970   0.000   0.000    2.000

C5H7         1  357.000   5.180   0.000   0.000    1.000
C6H5CH2O     2  572       5.82    1.7     0.0      1.0
C5H5O(2,4)   2  494       5.2     1.6     0.0      1.0
C5H5O(1,2)   2  494       5.2     1.6     0.0      1.0
C5H5O(1,3)   2  494       5.2     1.6     0.0      1.0
C4H5         2  329       5.1     0.0     0.0      1.0
c-C4H5       2  329       5.1     0.0     0.0      1.0
C6H5CO       2  593       5.5     2.8     0.0      1.0
C6H5CHO      2  593       5.47    2.8     0.0      1.0
C6H5C2H5     2  485       5.425   0.4     0.0      1.0
C6H4O2       2  485       5.425   0.4     0.0      1.0
HOC6H4CH3    2  567       5.60    1.6     0.0      1.0
C6H5CH2OH    2  572       5.82    1.7     0.0      1.0
bi-C6H5CH2   2  620       7.24    0.0     0.0      1.0
C5H5OH       2  464.800   5.290   0.000   10.320   0.000
!  as C5H4OH, ZD99
C5H4OH       2  464.800   5.290   0.000   10.320   0.000
!  benze
o-C6H4       2  464.8     5.29    0.00    10.32    0.000  !
benze
C6H5C6H5     2  676.5     6.31    0.00    20.00    1.000  !
biphe
```

```
OC6H4CH3      2  567      5.6    1.6    0.0    1.000

C10H8         2  630.4    6.18   0.00   16.50  1.000 !
naphthalene

C6H4CH3       2  495.3    5.68   0.43   12.30  1.000 !


NC12H26       2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
! n-dodecane

PXC12H25      2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
!

SXC12H25      2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
!

S2XC12H25     2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
!

S3XC12H25     2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
!

S4XC12H25     2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
!

S5XC12H25     2  789.980  7.047  0.000  0.000  1.000
!

C12H24        2  775.294  7.090  0.000  0.000  1.000
! 1-dodecene

PXC12H23      2  775.294  7.090  0.000  0.000  1.000
!

NC11H24       2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
! n-undecane

PXC11H23      2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
!

SXC11H23      2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
!

S2XC11H23     2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
!

S3XC11H23     2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
!

S4XC11H23     2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
!

S5XC11H23     2  750.460  6.834  0.000  0.000  1.000
!

C11H22        2  763.817  6.688  0.000  0.000  1.000
! 1-undecene

PXC11H21      2  763.817  6.688  0.000  0.000  1.000
!

NC10H22       2  704.917  6.675  0.000  0.000  1.000
! n-decane

PXC10H21      2  704.917  6.675  0.000  0.000  1.000
!

SXC10H21      2  704.917  6.675  0.000  0.000  1.000
!

S2XC10H21     2  704.917  6.675  0.000  0.000  1.000
!

S3XC10H21     2  704.917  6.675  0.000  0.000  1.000
!

S4XC10H21     2  704.917  6.675  0.000  0.000  1.000
!

C10H20        2  698.122  6.578  0.000  0.000  1.000
! 1-decene

PXC10H19      2  698.122  6.578  0.000  0.000  1.000
!

NC9H20        2  660.032  6.467  0.000  0.000  1.000
! n-nonane

PXC9H19       2  660.032  6.467  0.000  0.000  1.000
!

SXC9H19       2  660.032  6.467  0.000  0.000  1.000
!

S2XC9H19      2  660.032  6.467  0.000  0.000  1.000
!

S3XC9H19      2  660.032  6.467  0.000  0.000  1.000
!

S4XC9H19      2  660.032  6.467  0.000  0.000  1.000
!

C9H18         2  655.390  6.331  0.000  0.000  1.000 !
1-nonene

PXC9H17       2  655.390  6.331  0.000  0.000  1.000
!

NC8H18        2  613.127  6.250  0.000  0.000  1.000
! n-octane

PXC8H17       2  613.127  6.250  0.000  0.000  1.000
!

SXC8H17       2  613.127  6.250  0.000  0.000  1.000
!

S2XC8H17      2  613.127  6.250  0.000  0.000  1.000
!

S3XC8H17      2  613.127  6.250  0.000  0.000  1.000
!

C8H16         2  608.488  6.100  0.000  0.000  1.000 !
1-octene

PXC8H15       2  608.488  6.100  0.000  0.000  1.000
!
```

```
NC7H16      2  564.030   6.004   0.000   0.000   1.000
!  n-heptane

PXC7H15     2  564.030   6.004   0.000   0.000   1.000
!

SXC7H15     2  564.030   6.004   0.000   0.000   1.000
!

S2XC7H15    2  564.030   6.004   0.000   0.000   1.000
!

S3XC7H15    2  564.030   6.004   0.000   0.000   1.000
!

C7H14       2  557.947   5.876   0.000   0.000   1.000 !
1-heptene

PXC7H13     2  557.947   5.876   0.000   0.000   1.000
!

NC6H14      2  512.225   5.742   0.000   0.000   1.000
!  n-hexane

PXC6H13     2  512.225   5.742   0.000   0.000   1.000
!

SXC6H13     2  512.225   5.742   0.000   0.000   1.000
!

S2XC6H13    2  512.225   5.742   0.000   0.000   1.000
!

C6H12       2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000 !
1-hexene

PXC6H11     2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000
!

NC5H12      2  458.182   5.445   0.000   0.000   1.000
!  n-pentane

PXC5H11     2  458.182   5.445   0.000   0.000   1.000
!

SXC5H11     2  458.182   5.445   0.000   0.000   1.000
!

S2XC5H11    2  458.182   5.445   0.000   0.000   1.000
!

C5H10       2  448.508   5.342   0.000   0.000   1.000 !
1-pentene

PXC5H9      2  448.508   5.342   0.000   0.000   1.000
!

PC12H25O2   2  805.031   7.102   0.000   0.000   1.000

P12OOHX2    2  805.031   7.102   0.000   0.000   1.000

SOO12OOH    2  877.052   7.457   0.000   0.000   1.000

OC12OOH     2  839.348   7.273   0.000   0.000   1.000

C6H11       2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000 !
1-hexene

SXC6H11     2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000
!

S2XC6H11    2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000
!

SAXC6H11    2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000
!

cC6H11      2  464.8     5.29    0.00    0.000   1.000 !
benze

cC6H10      2  464.8     5.29    0.00    0.000   1.000 !
benze

PXCH2cC5H9  2  464.8     5.29    0.00    0.000   1.000
!  benze

CH2cC5H8    2  464.8     5.29    0.00    0.000   1.000 !
benze

C6H10-13    2  504.629   5.628   0.000   0.000   1.000
!

SAX4-2C6H11     2  504.629   5.628   0.000   0.000
1.000 !

PXCH2-4-1C5H9   2  504.629   5.628   0.000   0.000
1.000 !

CH3cC5H83   2  464.8     5.29    0.00    0.000   1.000
!  benze

cC5H9       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
C5H6

cC5H8       2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000 !
C5H6

SXC5H9      2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000

C5H8-13     2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000

C5H8-12     2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000

C5H8-14     2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000

PXCH2-3-1C4H7   2  357.000   5.180   0.000   0.000
1.000

SAXC5H9     2  357.000   5.180   0.000   0.000   1.000

!

! Cycloalkanes model species

!

C4H9cC6H11  2  717.126   6.229   0.13    15.00   1.000
!  C6H5C2H3

C10H20-5    2  698.122   6.578   0.000   0.000   1.000
!  1-decene
```

C4H9-2-1C6H11 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-1C9H17 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

C3H7-3-1C7H13 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-4-1C8H15 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

PXC4H8cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 ! C6H5C2H3

SXC4H8cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

S2XC4H8cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

S3XC4H8cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C4H9TXcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C4H9S2XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C4H9S3XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C4H9S4XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

PX10-4C10H19 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 ! 1-decene

PXC4H8-2-1C6H11 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

PX10-5C10H19 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

PXC3H6-3-1C7H13 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

S4XC10H19 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4-4-1C8H15 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2-5-1C9H17 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

SAX6-4C10H19 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

SAX4-5C10H19 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

SAXC10H19 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

SAXC4H8-2-1C6H11 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

C3H7-3-TAX1C7H13 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-4-SAX1C8H14 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-SAX1C9H16 2 698.122 6.578 0.000 0.000 1.000 !

C3H7cC6H11 2 670.219 6.032 0.13 15.00 1.000 ! C6H5C2H3

C9H18-4 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 ! 1-nonene

C3H7-2-1C6H11 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C3H7-3-1C6H11 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

CH3-4-1C8H15 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-4-1C7H13 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

PXC3H6cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 ! C6H5C2H3

SXC3H6cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

S2XC3H6cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C3H7S2XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C3H7S3XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C3H7TXcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C3H7S4XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

PX9-3C9H17 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

PX9-4C9H17 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C3H7-2-PXC6H10 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

S3XC9H17 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

PXC3H6-3-1C6H11 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4-4-1C7H13 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2-5-1C8H15 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

SAX5-3C9H17 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C3H7-3-TAX1C6H10 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C3H7-2-SAXC6H10 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

SAX6-4C9H17 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

SAXC9H17 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-4-SAX1C7H12 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-SAX1C8H14 2 655.390 6.331 0.000 0.000 1.000 !

C3H5cC6H11 2 630.303 5.769 0.13 15.00 1.000 ! C6H5C2H3

C2H5cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C8H16-3 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 ! 1-octene

C2H5-2-1C6H11 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-1C7H13 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-4-1C6H11 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-3-1C6H11 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 ! C6H5C2H3

SXC2H4cC6H11 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C2H5TXcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C2H5S2XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C2H5S3XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

C2H5S4XcC6H10 2 546.2 6.00 0.13 15.00 1.000 !

PX8-2C8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 ! 1-octene

C2H5-2-PXC6H10 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PX8-3C8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-3-PXC6H10 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

S2XC8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4-4-1C6H11 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2-5-1C7H13 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

SAX4-2C8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-2-SAX1C6H10 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

SAX5-3C8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-3-TAX1C6H10 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

SAXC8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-4-SAX1C6H10 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-SAX1C7H12 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PX1-4C8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PX1-3C8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

S4XC8H15 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4-2-1C6H11 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2-3-1C7H13 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

C2H3cC6H11 2 568.428 5.642 0.13 15.00 1.000 ! C6H5C2H3

C8H14-13 2 608.488 6.100 0.000 0.000 1.000 !

CH3cC6H11 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 ! C6H5CH3

CH2-3-1C7H12 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 ! 1-heptene

PXCH2-2-C6H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-2-SXC6H12 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

C7H14-2 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-2-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-4-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-3-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2cC6H11 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 ! C6H5CH3

CH3TXcC6H10 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 !

CH3S2XcC6H10 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 !

CH3S4XcC6H10 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 !

CH3S3XcC6H10 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 ! 1-heptene

CH3-2-PXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PX7-2C7H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-3-PXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

SXC7H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

SAXC7H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-4-PXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2-5-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-5-SAXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

SAX4-2C7H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-4-SAXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-2-SAXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH3-3-TAXC6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PAXCH2-2-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PX1-3C7H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PXCH2-3-1C6H11 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

S3XC7H13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4-2-1C5H9 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-2-SAX1C5H9 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

C7H12-13 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

C7H12-16 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH2-3-1C6H10 2 557.947 5.876 0.000 0.000 1.000 !

CH2cC6H10 2 537.375 5.348 0.43 12.30 1.000 ! C6H5CH3

cC6H12 2 464.8 5.29 0.00 0.000 1.000 ! benze

CH3-2-1C5H9 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 ! 1-hexene

PXCH2-3-1C5H9 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

PX1-3C6H11 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

PAXCH2-2-1C5H9 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

PX6-2C6H11 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

PXC2H4-2-1C4H7 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

CH3S3XcC5H8 2 495.3 5.68 0.43 12.30 1.000 ! C6H5CH3

C6H10-15 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

C6H10-12 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

C2H5-2-C4H513 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

CH2-3-1C5H8 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

C2H3-2-1C4H7 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

SAXC6H9-13 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

SAXC6H9-15 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

SAXcC6H9 2 464.8 5.29 0.00 0.000 1.000 ! benze

CH2-3-SAXC5H7 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

cC6H8-13 2 464.8 5.29 0.00 0.000 1.000 !

C6H8-135 2 504.629 5.628 0.000 0.000 1.000 !

SAXcC6H7 2 464.8 5.29 0.00 0.000 1.000 !

PXCH2-2-C4H9 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 ! 1-pentene

CH3-2-1C4H7 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 !

C2H3cC3H5 2 357.000 5.180 0.000 0.000 1.000 ! C5H6

PAXCH2-2-1C4H7 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 !

CH3-2-PXC4H6 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 !

PX5-2C5H9 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 !

CH3-2-C4H5-13 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 !

PAXCH2-2-C4H5 2 448.508 5.342 0.000 0.000 1.000 !

SAXC4H7 2 357.000 5.176 0.000 0.000 1.000 ! C4H7

1-15: Species name

16-80: Molecular parameters

molecule index: 0 = atom, 1= linear molec.

2 = nonlinear molec.

L-J potential well depth, e/kb (K)

L-J collision diameter, s,

Dipole moment, f, Debye

Polarizability, `,

Rotational relaxation number, Zrot at 298K

Comments

!

! Delete the block below if you do not use the revised tranfit program (see http://ae-www.usc.edu/research/combustion/CombustionKinetics/Mechanisms/USC-Mech%20II/USC_Mech%20II.htm)

!

END

H HE -9.66994265100 2.10026266000 -0.07705964500 0.00546112600 ! Middha et al, Proc. Comb. Inst., Vol. 29

0.93003284006 0.08015000695 -0.00947327267 0.00063458775

0.87637862374 0.10238278295 -0.01480299828 0.00098803605

1.06001553391 -0.05992751365 0.01026504945 -0.00073450868

H H2 -11.74984983000 3.15068443400 -0.25747189600 0.01589155500 ! Middha et al, Proc. Comb. Inst., Vol. 29

0.68564849197 0.15339038119 -0.01367350360 0.00032210353

0.67794933764 0.13747070299 -0.01105868963 0.00016576525

0.65119387990 0.08215979427 -0.00438944167 -0.00027358319

H2 HE -12.75127347000 3.42444798700 -0.28472577300 0.01593170100 ! Middha et al, Proc. Comb. Inst., Vol. 29

0.59534394712 0.20780905298 -0.02484767627 0.00100127755

0.67714740207 0.13579177260 -0.01142533631 0.00018885880

0.65191818266 0.08365135783 -0.00445010155 -0.00025986744

H AR -9.05107284400 1.61614185700 -0.00287779500 0.00130541500 ! AIChE 2002

0.68819287418 0.15342306998 -0.01769949486 0.00088795976

0.69683113086 0.17157988788 -0.02435683182 0.00136547873

0.67026727852 0.11433417790 -0.01504070012 0.00051875848

N H2 -11.06296595000 2.35003553100 -0.10371499000 0.00580309100 ! Stallcop et al, Phys. Rev. A, 64, Art. 042722

1.31576376016 -0.13458345098 0.02492533153 -0.00119098283

6.99070003974 -2.59649971924 0.37720200602 -0.01788555212

1.28549476326 -0.20526851249 0.03796449261 -0.00230740895

N N2 -14.50976666000 3.27038987700 -0.22411274000 0.01070436600 ! Stallcop et al, Phys. Rev. A, 64, Art. 042722

1.28549476326 -0.20526851249 0.03796449261 -0.00230740895

1.31470940230 -0.12581573177 0.02093874922 -0.00091239288

1.18530004024 -0.00109904512 -0.00679031552 0.00082436382

H O2 -11.04103178000 2.40427694900 -0.10279690200 0.00532644300 ! Stallcop et al, Phys. Rev. A, 64, Art. 042722

1.29254489763 -0.18498887975 0.04271031056 -0.00260823132

1.99269990199 -0.27220069165 0.02059506743 0.00016444098

1.27566027457 -0.22786150854 0.04449949355 -0.00274619496

O O2 -14.60250025000 3.29049804400 -0.22351565500 0.01068641100 ! Stallcop et al, Phys. Rev. A, 64, Art. 042722

1.29827044958 -0.17304622424 0.03635310801 -0.00206726443

9.96160341198 -3.95288550918 0.58275322682 -0.02828930035

1.26594984746 -0.24767207966 0.04946972829 -0.00300929402

H N2 -13.27028844000 3.51865269300 -0.29664901800 0.01643138100 ! Stallcop et al, J. Chem. Phys., 97, 3431 (1992)

1.33864596568 -0.08545398502 0.00922905086 0.00004406488

-2.20299987672 1.59160087079 -0.25339378410 0.01364477086

1.27615648812 -0.22593374251 0.04641828877 -0.00310151225

H2 N2 -10.99943193000 2.20257995900 -0.08115516500 0.00440608700 ! Stallcop et al, Phys. Rev. A, 62, Art. 062709

1.31648435027 -0.13202102692 0.02416204045 -0.00120258929

1.94229781522 -0.41910587564 0.06711915359 -0.00336850295

1.29072759648 -0.19301215992 0.03398993578 -0.00196835629

N2 N2 -16.51750614000 4.05271572500 -0.34593622800 0.01671006600 ! Stallcop et al, Phys. Rev. A, 62, Art. 062709

1.35301607939 -0.05405097875 -0.00113356164 0.00059799157

3.61489786826 -1.08630677454 0.15481851859 -0.00723438967

1.25620046061 -0.26881554497 0.05577645068 -0.00340833729

H2 H2 -9.96095484000 2.05602189500 -0.06497689600 0.00413678100 ! Stallcop et al, J. Thermophys. Heat Tra., 12, 514 (1998)

1.32208755845 -0.12074925804 0.02204710917 -0.00105955055

3.63140155962 -1.13979323643 0.16942078618 -0.00812678015

1.29811062932 -0.17814060954 0.02956707397 -0.00170200851

ENDDIFF

10 Bibliography

[1] «RESUMEN DEL INFORME DE OTOÑO DE CLARKSONS,» *Asociación de Navieros Espanoles DNV,* p. https://www.anave.es/images/tribuna_profesional/2021/tribuna_bia1121, 2021.

[2] C. M. d. E. CAMAE, «Flota global de buques llega a 58.067 naves en mayo de 2022,» in *http://www.camae.org/buques/flota-global-de-buques-llega-a-58-067-naves-en-mayo-de-2022/*, 2022.

[3] IMO, «Fourth IMO GHG Study 2020 Executive Summary,» https://wwwcdn.imo.org/localresources/en/MediaCentre/Documents/Fourth%20IMO%20GHG%20Study%202020%20Executive%20Summary.pdf, 2021.

[4] I. M. O. t. t. U. T. Dialogue, «ADOPTION OF THE INITIAL IMO STRATEGY ON REDUCTION OF GHG EMISSIONS,» https://unfccc.int/sites/default/files/resource/250_IMO%20submission_Talanoa%20Dialogue_April%202018.pdf, 2018.

[5] C. Europea, «Acciones de la UE para reducir las emisiones de aviones y barcos,» https://www.europarl.europa.eu/topics/es/article/20220610STO32720/acciones-de-la-ue-para-reducir-las-emisiones-de-aviones-y-barcos, 2022.

[6] «OECD/EA,» 2009. [Online]. Available: https://www.oecd.org/.

[7] «Historia de los motores marinos sulzer,» *Tecnología Marítima Blosgpot,* %1 zk.https://tecnologia-maritima.blogspot.com/2012/08/historia-de-los-motores-marinos-sulzer.html, 2012.

[8] «Motores Diesel,» *FONDEAR Infonautic,* %1 zk.[http://www.fondear.org/infonautic/Barco/Motores_Helices/Motor_Diesel/Motor_Diesel.htm] .

[9] «Transporte marítimo: hacia nuevos combustibles más eficientes,» *Prosertek Harobour Equipments ,* %1 zk.https://prosertek.com/es/blog/transporte-maritimo-combustibles-eficientes/.

[10] «GNL para la descarbonización del transporte marítimo,» *Sedigas, Gasactual,* %1 zk.https://www.sedigas.es/new/gas-actual/articulo-reportaje/gnl-para-la-descarbonizacion-del-transporte-maritimo, 2022.

[11] «BBG, Bilbao Bizkaia Gas,» [Online]. Available: bbg.es/eu/bbgri-buruz/nortzuk-garen/.

[12] «ANAVE Asociación de Navieros Españoles, Bautizado en el puerto de Bilbao el nuevo remolcador dual de Ibaizabal,» [Online]. Available: https://anave.es/bautizado-en-el-puerto-de-bilbao-el-nuevo-remolcador-a-gnl-de-ibaizalbal/.

[13] «El puerto de Bilbao, escenario de las pruebas del nuevo remolcador propulsado a gas y gasóil,» *El Strecho Digital,* pp. https://www.elestrechodigital.com/2020/07/03/el-puerto-de-bilbao-escenario-de-las-pruebas-del-nuevo-remolcador-propulsado-a-gas-y-gasoil/.

[14] «EEE Energiaren Euskal Erakundea,» [Online]. Available: https://www.eve.eus/Noticias/El-buque-Oizmendi-realiza-en-el-puerto-de-Bilbao-l.aspx?lang=es-ES].

[15] «Maersk acuerda un proyecto con España para producir e-metanol para su flota,» *Euronews,* pp. https://es.euronews.com/next/2022/11/03/espana-energia-maersk, 2022.

[16] «CEPSA,» Biocombustibles y transportes marinos, [Online]. Available: https://www.cepsa.com/es/prensa/biocombustibles-transporte-maritimo.

[17] «Los primeros buques 100% eléctricos ya surcan los mares,» *Verde y Azul ,* %1 zk.https://verdeyazul.diarioinformacion.com/los-primeros-buques-100-electricos-ya-surcan-los-mares.html, 2021.

[18] «¿Qué baterías equipa el buque cisterna totalmente eléctrico de Kawasaki y Asahi?,» *Hibridos y Eléctricos,* %1 zk.https://www.hibridosyelectricos.com/coches/baterias-buque-cisterna-totalmente-electrico-kawasaki-heavy-asahi_42181_102.html, 2021.

[19] «PRTR Registro Estatal de Emisiones y Fuentes Contaminantes,» Gobierno de España, Ministeriopara la Transición Ecológica , [Online]. Available: https://prtr-es.es/NH3-amoniaco,15593,11,2007.html.

[20] C. Crownhart, «Amoníaco para navegar hacia un transporte marítimo menos contaminante,» *MIT Techonology Review ,* %1 zk.https://www.technologyreview.es/s/14547/amoniaco-para-navegar-hacia-un-transporte-maritimo-menos-contaminante, 2022.

[21] J. C. Franco, «Mitsubishi Heavy diseña un barco para transportar amoniaco y CO2 licuado,» *ForochesEléctricos,* %1 zk.https://forococheselectricos.com/2022/04/mitsubishi-heavy-disena-un-barco-para-transportar-amoniaco-y-co2-licuado.html, 2022.

[22] J. C. D. Lorenzo, «Los retos del amoniaco como combustible marino del futuro,» *Puente de Mando,* pp. https://www.puentedemando.com/los-retos-del-amoniaco-como-combustible-marino-del-futuro/.

[23] «Fraunhofer-Gesselchaft "The world’s first high-temperature ammonia-powered fuel cell for shipping",» March 2021. [Online]. Available: https://www.fraunhofer.de/en/press/research-news/2021/march-2021/worlds-first-hightemperature-ammonia-powered-fuel-cell-for-shipping.html.

[24] J. A. Oliveira, «El Kriti Future, el primer petrolero preparado para usar amoniaco (NH3) como combustible,» *Va de Barcos,* %1 zk.https://vadebarcos.net/2022/03/08/el-kriti-future-el-primer-petrolero-preparado-para-usar-amoniaco-nh3-como-combustible/#:~:text=El%2010%20de%20enero%20pasado,la%20descarbonizaci%C3%B3n%20del%20sector%20naval, 2022.

[25] «Wärtsilä lanza un nuevo motor de 4 tiempos que puede funcionar con amoníaco,» *Portal Lubes ,* %1 zk.https://portallubes.com.br/2022/09/wartsila-lanza-un-nuevo-motor-de-4-tiempos/, 2022.

[26] «International Container Insurance (ICI),» [Online]. Available: https://www.icicoverage.com/en/el-2023-zarpara-el-primer-barco-de-hidrogeno-gracias-al-amoniaco/.

[27] J. C. Franco, «Hacer barcos a hidrógeno es fácil, lo difícil es conseguir el hidrógeno verde que los alimente,» *Forocoches eléctricos,* %1 zk.https://forococheselectricos.com/2021/12/hacer-barcos-a-hidrogeno-es-facil-lo-dificil-es-conseguir-el-hidrogeno-verde-que-los-alimente.html, 2021.

[28] A. Pérez, «Energy Observer 2, el buque de carga de hidrógeno que puede autoabastecerse,» *Híbridos y Eléctricos,* %1 zk.https://www.hibridosyelectricos.com/barcos/energy-observer-2-buque-carga-hidrogeno-que-puede-autoabastecerse_54833_102.html, 2022.

[29] «Así es el Energy Observer 2, el buque impulsado por hidrógeno y aire que revolucionará el transporte marítimo,» *20 Minutos Ciencia,* %1 zk.https://www.20minutos.es/noticia/4954835/0/energy-observer-2-el-buque-impulsado-por-hidrogeno-y-aire-que-pretende-revolucionar-el-transporte-maritimo/, 2022.

[30] C. Noya, «MAN entrega sus primeros motores duales diésel o hidrógeno para barcos,» *Forococheseléctricos,* %1 zk.https://forococheselectricos.com/2022/06/man-primeros-motores-duales-hidrogeno-diesel-barcos.html, 2022.

[31] G. S. S. K. Q. N. C. E. R. H. Xinyu Liu, «Direct injection of hydrogen main fuel and diesel pilot fuel in a retrofitted single-cylinder compression ignition engine,» Xinyu Liu, Gabrielle Seberry, Sanghoon Kook, Qing Nian Chan, Evatt R. Hawkes,, 2022.

[32] M. e. M. T. S. (UPV/EHU), Motor eta instalazio termikoak, Bilbo, 2021.

[33] J. E. Dec, «A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging,» SAE International, 1997.

[34] R. R. Sung Park, «Modeling the Effect of Injector Nozzle-Hole Layout on Diesel Engine Fuel Consumption and Emissions,» Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2005.

[35] T. W. Sebastian Verhelst, «Hydrogen-fueled internal combustion engines,» Science Direct, 2009.

[36] D. Gilles, D. B. Bert, L. Tommaso eta D. Gianluca, «Cold Flow Simulation of a Dual-Fuel Engine for Diesel-Natural Gas and Diesel-Methanol Fuelling Conditions,» SAE International, 2021.

[37] M. Emad eta C. Alasdair, «Hydrogen Fumigation on HD Diesel Engine: An Experimental and Numerical Study,» in *Diesel and Gasoline Engines*, 2019.

[38] P. Dimitrou eta T. Tsujimura, «A review of hydrogen as a compression ignition engine fuel,» International Journal of Hydrogen Energy, 2017.

[39] S. Verheslt eta T. Wallner, «Hydrogen-fueled internal combustion engines,» in *Progress in Energy and Combustion Science*, 2009, pp. 490-527.

[40] A. G. Young, A. W. Costall, D. Coren eta J. W. G. Turner, «The Effect of Crankshaft Phasing and Port Timing Asymmetry on Opposed-Piston Engine Thermal Efficiency,» Recent Advances in internal Combustion Engines, 2021.

[41] M. M. Roy, E. Tomita, N. Kawahara, Y. Harada eta A. Sakane, «An experimental investigation on engine performance and emissions of a supercharged H2-diesel dual-fuel engine,» International Journal of Hydrogen Energy, 2010.

[42] W. W. Pulkrabek, «Air and Fuel induction,» in *Engineerign Fundamentals of the Internal Combustion Engine*, Prentice Hall, pp. 166-206.

[43] G. L. Ruiz, J. M. B. Ilzarbe, A. P. Bandres eta Z. Azkorra, «CFD study of flameless combustion in a real industrial reheating furnace considering different H2/NG blends as fuel,» 2023.

[44] H. Köse eta M. Ciniviz, «An experimental investigation of effect on diesel engine performance and exhaust emissions of addition at dual fuel mode of hydrogen,» 2013.

[45] V. Chintala eta K. Subramanian, «A comprehensive review on utilization of hydrogen in a compression ignition engine under dual fuel mode,» Renewable and Suistanable Energy Reviews, 2017.

[46] G. d. España, «INSST Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo,» [Online]. Available: https://www.insst.es/documents/94886/175731/N%C3%BAmero+73+%28versi%C3%B3n+pdf%29.pdf .

[47] D. Talbot, «Las ppm atmosféricas de CO2 han aumentado un 42% desde 1750,» *MIT Technology Review,* %1 zk.https://www.technologyreview.es/s/4464/las-ppm-atmosfericas-de-co2-han-aumentado-un-42-desde-1750, 2014.

[48] «NOAA Earth System Research Laboratories (ESRL),» [Online]. Available: esrl.noaa.gov.

[49] «EPA United States Environmental Protection Agency,» [Online]. Available: https://www.epa.gov/environmental-topics/air-topics.

[50] Y. Zeldovich, «The oxidation of nitrogen and explosions,» J. Acta Physicohimica, 1946.

[51] Y. Su eta B. Zhao, «NOx formation mechanism,» in *Hight-temperature air flameless combustion*, Elsevier, 2022, pp. 97-104.

[52] «NOx Formation form Intermediate N2O,» in *ANSYS FLUENT User guide*.

[53] «Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, Oxidos de Nitrógeno,» [Online]. Available: https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/calidad-del-aire/salud/oxidos-nitrogeno.html.

[54] A. y. M. A. Ministerio de Agricultura y Pesca, «Real Decreto 1042/2017,» BOE Boletín Oficial del Estado, 2017.

[55] «EPA Agencia de Protección Ambienta de Estados Unidos, Monóxido de Carbono,» [Online]. Available: https://espanol.epa.gov/cai/monoxido-de-carbono.

[56] E. d. e. d. u. u. d. c. c. f. c. f. d. d. Kalman, «Ariel Omar Cepero Díaz; Ana Isabel González Santos,» *Ingeniería Investigación y Tecnología UNAM,* 2018.

[57] M. Deb, G. Sastry, P. Bose eta R. Banerjee, «An experimental study on combustion, performance and emission analysis of a single cylinder, 4-stroke DI-diesel engine using hydrogen in dual fuel mode of operation,» International Journal of Hydrogen Energy, 2015.

[58] T. Tsujimura eta Y. Suzuki, «The utilization of hydrogen in hydrogen/diesel dual fuel engine,» International Journal of Hydrogen Energy, 2017.

[59] J. Castresana, L. Martín, A. Basterretxea eta G. Gabiña, «Marine diesel engine ANN modelling with multiple output for complete engine performance map,» 2022.

[60] SIEMENS, Simcenter STAR-CCM+ 2022.1 | User Guide.

[61] M. L.D eta V. L.E, «Estudio de diferentes modelos de turbulencia para obtener las curvas características de un perfil naca 2415 mediante la simulación tridimensional de flujos de fluidos,» Revistas Cientificas de la Universidad de Pamplona , 2019.

[62] R. J. Kee, F. M. Rupley eta J. A. Miller, «Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics,» Sandia Report, 1995.

[63] A. Miyoshi, «akrmys.com,» [Online]. Available: http://akrmys.com/public/chemkin/CKm_inp.html.en.

[64] R. J. Kee, F. M. Rupley eta J. A. Miller, «The Chemkin Thermodynamic Data Base,» Sandia Report, 1994.

[65] R. Design, «TRANSPORT: A SOFTWARE PACKAGE FOR THE EVALUATION OF GAS-PHASE, MULTICOMPONENT TRANSPORT PROPERTIES,» 2000. [Online]. Available: https://www3.nd.edu/~powers/ame.60636/transport.pdf.

[66] U. S. D. C. R. Group, «"The San Diego Mechanism",» [Online]. Available: https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html.

[67] Z. Solomenko, «Heat Transfer with Radiation in Participatin Media and the Discrete Ordinates Method (DOM),» *COMSOL Blog.*

[68] «Discrete Ordinates (DO) Radiation Model Theory,» in *ANSYS Fluent Manual Theory*, https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node115.htm.

[69] A. Hayurst eta E. Hutchinson, «Evidence for a New Way Way of Producing NO via NNH in Fuel-Rich Flames at Atmospheric Pressure.,» Elsevier, 1998.